

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

جامعة أبي بكر بلقايد - تلمسان -

Université Aboubakr Belkaïd – Tlemcen –
Faculté de TECHNOLOGIE



THESE

Présentée pour l'obtention du **grade de DOCTORAT en Sciences**

En : Génie Electrique et Electronique

Spécialité : Microélectronique

Par : EL OUCHDI Ahmed Amine

Sujet

Etude et simulation des performances de transport électronique dans les structures MESFET et HEMT à base de GaInSb/GaAs

Soutenue publiquement, le 19/09/2018, devant le jury composé de :

Mr CHABANE SARI Nasr Eddine	Prof. Univ. Tlemcen	Président
Mr BOUAZZA Benyounes	Prof. Univ. Tlemcen	Directeur de Thèse
Mr LASRI Boumediène	Prof. Univ. Saida	Examineur 1
Mr MERAD Lotfi	Prof. Ecole Supérieure des Sciences Appliquées Tlemcen	Examineur 2
Mme BOUAZZA née GUEN Ahlam	Prof. Univ. Tlemcen	Examineur 3

Remerciements

Avant tout, je remercie ALLAH le tout puissant de m'avoir donné la force, la volonté et le courage pour réussir un tel travail.

Ce travail a été effectué au sein du Laboratoire de Microélectronique à l'Université Abou Bakr Belkaid de Tlemcen.

Je tiens à remercier très vivement Monsieur B. BOUAZZA, Professeur à l'Université de Tlemcen pour la bienveillance avec laquelle il a guidé mes travaux, pour son soutien, ainsi que pour les précieux conseils qu'il m'a prodigués tout au long de cette thèse. C'était un honneur de travailler avec lui.

Mes plus vifs remerciements vont à Monsieur N. CHABANE SARI, Professeur à l'Université de Tlemcen qui nous a transmis ses connaissances, son savoir et pour l'honneur qu'il me fait en présidant le Jury de cette thèse.

Je tiens à remercier Madame A.GUEN-BOUAZZA, Professeur à l'Université de Tlemcen avec qui j'ai déjà eu le plaisir de travailler auparavant et qui m'a apporté son aide par ses conseils précieux et pour l'honneur qu'elle me fait en acceptant de faire partie du jury.

Je remercie également Monsieur L. MERAD Professeur à l'Ecole Supérieure des Sciences Appliquées de Tlemcen ainsi que Monsieur B. LASRI Professeur à l'université de Saida, pour avoir accepté d'être membre de jury.

Enfin, j'adresse mes remerciements à mes proches, mes amis, et tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce projet en particulier tous les membres de notre Laboratoire.

Merci

Dédicaces

A la mémoire de mes regrettés grands parents,

*A mes très chers parents pour leurs éducation exemplaire, leurs sacrifices et leur tendresse
qui m'ont toujours soutenu, aimé et encouragé,*

A ma chère femme et ma belle-famille,

*A mes chers frères, sœurs, beaux-frères et belles-sœurs qui ont toujours été à mes côtés
par leurs conseils et gentillesse,*

A mes adorables neveux et nièces,

A mes chers oncles, tantes, cousins et cousines,

A toute ma famille, amis et collègues,

A tous ceux qui me sont chers.

Table des Matières

Table des Matières	
Liste des Figures	
Liste des Tableaux	
Liste des Acronymes	
Introduction Générale.....	1
Chapitre I : Propriétés de matériaux III-V	
Introduction	5
1.1. Présentation des matériaux III-V	5
1.2. Structure cristalline.....	9
1.3. Réseau réciproque et zone de Brillouin.....	11
1.4. Structure de bande d'énergie	12
1.4.1. Influence de la température sur la structure de bande.....	14
1.4.2. Notion de la masse effective	14
1.4.3. Notion de coefficient de non parabolicité.....	16
1.4.4. Variation des paramètres d'alliage en fonction du coefficient stœchiométrique x. 17	
1.4.4.1. Variation linéaire des paramètres	17
1.4.4.2. Variation non linéaire des paramètres	17
1.5. Propriétés du GaInSb et ses applications.....	18
1.5.1. Propriétés générales du GaInSb et des antimoniures	18
1.5.2. Applications du GaInSb et des antimoniures.....	19
1.5.2.1. Les dispositifs microélectroniques et circuits intégrés.....	19
1.5.2.2. Les détecteurs infrarouges.....	21
1.5.2.3. Lasers infrarouges	22
1.5.2.4. Les cellules thermo-photovoltaïques.....	22
1.6. Principaux paramètres du GaSb, InSb et Ga _{0.5} In _{0.5} Sb	23
Conclusion.....	24
Chapitre II : Transport électronique et interactions	
Introduction	25
2.1. Propriétés physiques d'un électron.....	25
2.2. Origine du courant électrique	27
2.2.1 Courant de diffusion	27
2.2.2. Courant de conduction	28
2.2.2.1. Courant de conduction en absence du champ électrique.....	28

2.2.2.2. Courant de conduction en présence du champ électrique	28
2.3. La dynamique des électrons	30
2.4. Equation de Boltzmann	34
2.4.1. Fondation de l'équation de Boltzmann	34
2.4.2. Domaine de validité de l'équation de Boltzmann	40
2.5. Mécanisme d'interactions	40
2.5.1. Classification des interactions	40
2.5.1.1. Interactions avec le réseau cristallin	42
2.5.1.1.1. Interactions Acoustiques	43
2.5.1.1.2. Interactions piézoélectriques	44
2.5.1.1.3. Interactions optiques polaires	44
2.5.1.1.4. Interactions optiques non polaires	44
2.5.1.1.5. Interactions inter-vallées	44
2.5.1.2. Interactions avec les défauts	46
2.5.1.2.1. Interaction avec les impuretés ionisées	46
2.5.1.2.2. Interaction avec les impuretés neutres	46
2.5.1.2.3. Interaction des alliages	46
2.5.1.2.4. Interaction des surfaces	46
2.5.1.2.5. Interaction Génération-recombinaison	47
2.5.1.3. Interaction avec les porteurs	47
2.5.2. Interactions prépondérantes dans les semi-conducteurs	47
2.5.2.1. Champ électrique faible	47
2.5.2.2. Champ électrique moyen	48
2.5.2.3. Champ électrique fort	48
2.5.2.4. Ionisation par impact	48
2.5.3. Influence de la température sur les interactions	49
2.6. Différents régimes du transport électronique	50
2.6.1. Le régime stationnaire	50
2.6.2. Le régime non-stationnaire	50
2.7. Les approches de résolution de l'équation de Boltzmann	51
2.7.1. Modèles Déterministes	51
2.7.1.1. Modèle hydrodynamique	51
2.7.1.1.1. Equation de Poisson	51
2.7.1.1.2. Equation de conservation du courant	52
2.7.1.1.3. Equation de conservation du moment	52

2.7.1.1.4. Equation de conservation de l'énergie.....	53
2.7.1.1.5. Equation du bilan énergétique	53
2.7.1.2. Modèle de dérive diffusion	53
2.7.2. Modèles stochastiques.....	53
Conclusion	54
Chapitre III : Présentation de la Méthode Monte Carlo	
Introduction	55
3.1. La méthode Monte Carlo appliquée au transport de charges dans les matériaux massifs	55
3.1.1. Historique de la méthode	56
3.1.2. Principe général de la méthode	57
3.1.3. Equations de mouvement.....	58
3.1.4. Temps du vol libre	61
3.1.5. Choix de l'interaction	63
3.1.6. Etat de la particule après les collisions	64
3.1.7. Mise en œuvre de la simulation	66
3.2. La méthode Monte Carlo appliquée au transport de charges dans les dispositifs semi-conducteurs.....	68
3.2.1. Historique de la modélisation des dispositifs électroniques	70
3.2.2. Les transistors à effet de champ.....	70
3.2.2.1. Le transistor à effet de champ à grille métal-semi-conducteur MESFET	71
3.2.2.1.1. Principe de fonctionnement d'un transistor MESFET	72
3.2.3. Effet de la miniaturisation sur la simulation des dispositifs	74
3.2.4. Principe général de la méthode Monte Carlo appliquée aux dispositifs électroniques	75
3.2.5. Mise en œuvre de la simulation	79
Conclusion	80
Chapitre IV : Résultats de la Simulation et Discussions	
Introduction	81
4.1. Transport électronique dans les matériaux massifs	81
4.1.1. Modèle de simulation.....	81
4.1.2. Présentation de l'outil de la simulation.....	82
4.1.3. Caractéristiques du transport dans les différents régimes.....	84
4.1.3.1. Transport électronique dans le matériau $Ga_{0.5}In_{0.5}Sb$	84
4.1.3.1.1. Transport électronique dans le régime non stationnaire.....	84

4.1.3.1.1.1. Vitesse de dérive en fonction du temps pour différent champs électriques	85
4.1.3.1.1.2. Vitesse de dérive en fonction du temps pour différent températures..	86
4.1.3.1.2. Transport électronique dans le régime stationnaire	86
4.1.3.1.2.1. Vitesse de dérive en fonction du champ électrique pour différentes températures	86
4.1.3.1.2.2. Energie en fonction du champ électrique.....	88
4.1.3.1.2.3. Taux d'occupations des électrons	89
4.1.3.2. Transport électronique dans le GaSb, InSb et Ga _{0.5} In _{0.5} Sb	90
4.1.3.2.1. Transport électronique dans le régime non stationnaire	90
4.1.3.2.2. Transport électronique dans le régime stationnaire	90
4.2. Transport électronique dans les dispositifs électroniques	92
4.2.1. Présentation de l'outil de simulation Archimedes	92
4.2.2. Simulation de la vitesse de dérive des électrons dans le Ga _{0.5} In _{0.5} Sb.....	95
4.2.3. Simulation d'un transistor MESFET à base du Ga _{0.5} In _{0.5} Sb.....	96
4.2.3.1. Caractéristique Ids (Vds).....	102
Conclusion	103
Conclusion Générale	106
Références Bibliographiques.....	108
Production Scientifique	
Résumé	

Liste des Figures

Figure (1.1) : Longueur d'onde de quelque matériau III-V	7
Figure (1.2) : Mobilité de quelques matériaux III-V, les points représentent la mobilité des trous, alors que les carrés représentent la mobilité des électrons	7
Figure (1.3) : variation de la largeur de la bande interdite et du paramètre cristallin des alliages de composés III-V	9
Figure (1.4) : Mailles cristallographiques de la structure Zinc Blende	10
Figure (1.5) : Structure Zinc Blende en projection sur une des faces du cube.....	10
Figure (1.6) : Première zone de Brillouin d'un cristal Zinc-Blende	11
Figure (1.7) : Remplissage des bandes permises.....	12
Figure (1.8) : Différence entre une structure de bande à un gap direct et à gap indirect	13
Figure (1.9) : Relation entre la largeur de gap et l'application des matériaux aux différents dispositifs	20
Figure (1.10) : Position relative entre l'énergie de gap et le décalage de bande des semi-conducteurs III-V	20
Figure (2.1) : La chambre de Wilson	26
Figure (2.2) : Diffraction des rayons	26
Figure (2.3) : Trajectoire d'un électron en absence du champ électrique	28
Figure (2.4) : Trajectoire d'un électron en présence d'un champ électrique	29
Figure (2.5) : Statistique de Fermi-Dirac	32
Figure (2.6) : Trajectoire d'un électron et changement de la fonction de distribution.....	35
Figure (2.7) : Principaux mécanismes d'interactions dans les semi-conducteurs.....	42
Figure (2.8) : Le mode de vibration longitudinal et les deux modes transversaux	43
Figure (2.9) : Variation de la vitesse des électrons en fonction du champ électrique.....	45
Figure (2.10) : Etat d'avant et après ionisation	49
Figure (3.1) : Evolution d'une particule au cours du temps.....	58
Figure (3.2) : Trajectoire d'un électron dans l'espace réel et dans l'espace réciproque	61
Figure (3.3) : Probabilité totale d'interactions et Self Scattering.....	63
Figure (3.4) : Procédure de sélection d'une interaction	64
Figure (3.5) : Réorientation du vecteur d'onde	65
Figure (3.7) : Hiérarchie des modèles de simulations pour les composants semi-conducteurs.....	69
Figure (3.8) : Structure générale d'un transistor MESFET	72
Figure (3.9) : Evolution de la largeur du canal en fonction de la tension V_{gs}	72
Figure (3.10) : Evolution de la largeur du canal lorsque la tension V_{ds} est faible	73
Figure (3.11) : Variation du courant du drain I_d par rapport à la tension V_{ds}	73

Figure (3.12) : Schéma d'attribution de charges dans le cas d'un maillage 2D : (a) L'approche NGP, (b) L'approche CIC	78
Figure (3.13) : Algorithme général de la méthode Monte Carlo dans les dispositifs électroniques.....	79
Figure (4.1) : Modèle de simulation à trois vallées.....	82
Figure (4.2) : Vitesse de dérive des électrons en fonction du temps pour différents champs électriques.....	85
Figure (4.3) : Vitesse de dérive des électrons en fonction du temps pour différentes	86
Figure (4.4) : Vitesse de dérive des électrons en fonction du champ électrique pour différentes températures	87
Figure (4.5) : Comparaison avec des résultats expérimentaux.....	87
Figure (4.6) : Energie des électrons en fonction du champ électrique.....	88
Figure (4.7) : Taux d'occupation des électrons en fonction du champ électrique	89
Figure (4.8) : Vitesse de dérive des électrons en fonction du temps dans le GaSb, InSb et Ga _{0.5} In _{0.5} Sb	90
Figure (4.9) : Vitesse de dérive des électrons en fonction du champ électrique dans le GaSb, InSb et Ga _{0.5} In _{0.5} Sb.....	91
Figure (4.10) : Comparaison avec des résultats expérimentaux.....	91
Figure (4.11) : Vitesse de dérive en fonction de la distance	95
Figure (4.12) : Vitesse de dérive en fonction de la distance	95
Figure (4.13) : Structure du transistor MESFET simulé	96
Figure (4.14) : Densité des électrons en absence de polarisation.....	97
Figure (4.15) : Densité des électrons lorsque V _{gs} est négative et V _{ds} est nulle.....	97
Figure (4.16) : Densité des électrons lorsque V _{gs} est négative et V _{ds} est nulle.....	98
Figure (4.17) : Champ électrique des électrons dans la direction x	98
Figure (4.18) : Champ électrique des électrons dans la direction y	99
Figure (4.19) : Potentiel des électrons.....	99
Figure (4.20) : Vitesse de dérive des électrons dans la direction x	99
Figure (4.21) : Vitesse de dérive des électrons dans la direction x	100
Figure (4.22) : Vitesse de dérive des électrons dans la direction y	100
Figure (4.23) : Vitesse de dérive des électrons dans la direction y	100
Figure (4.24) : Energie des électrons.....	101
Figure (4.25) : Energie des électrons.....	101
Figure (4.26) : Champ magnétique 3D des électrons.....	102
Figure (4.27) Caractéristique Id (V _{ds})	102

Liste des Tableaux

Tableau (1.1) : Extrait du tableau périodique montrant les principaux matériaux III-V	5
Tableau (1.2) : Paramètres des principaux matériaux III-V	6
Tableau (I.3) : Variation de la bande interdite en fonction de la température	14
Tableau (I.4) : Paramètre du GaSb, InSb et $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$	24

Liste des Acronymes

2DEG : Gaz d'électron à 2 dimensions

CI : Circuits Intégrés

CMOS : Complementary Metal Oxide Semiconductor

CVD : Dépôt Chimique en Phase Vapeur

CC : Cubique Centrée

CFC : Cubique à Faces Centrées

CS : Cubique Simple

CZ : Croissance de type Czochralski

DARPA : Defense Advanced Research Projects Agency

DD : Dérive Diffusion

DOS : Densité d'états

e^- : Electron

E_c : Bande de Conduction

E_g : Largeur de la Bande Interdite

E_v : Bande de Valence

FET : Transistor à Effet de Champ

FIR : Far Infrared

HEMT : High Electron Mobility Transistor

HH : Heavy Hole

HD : Hydrodynamique

IR : Infrarouge

ITRS : International Technology Roadmap for Semiconductors

JFET : Transistor à Effet de Champ à Jonction

LA : Phonon Acoustique Longitudinal

LED : Diode Electroluminescente

LH : Trous Légers

LO : Phonon Optique Longitudinal

LPE : Épitaxie en Phase Liquide

LMP : Libre Parcours Moyen

MC : Monte Carlo

MBE : Epitaxie par Jet Moléculaire

MESFET : Transistor à Effet de Champ à Grille Métal Semi-conducteur

MIR : Mid Infrared

MOS : Métal Oxyde Semi-conducteur

MOSFET : Transistor à Effet de Champ à Grille Métal Oxyde Semi-conducteur

MS : Métal Semi-conducteur

NMOS : Transistor MOS à Canal N

PMOS : Transistor MOS à Canal P

SC : Semi-conducteur

TA : Transversal Acoustique

TCAD : Technology Computer Aided Design

TO : Transversal Optique

UV : Ultraviolet

VLSI : Very Large Scale Integration

Introduction Générale

De nos jours, les appareils électroniques sont devenus de plus en plus indispensables dans nos vies quotidiennes de telle sorte que nous ne pouvons plus s'en passer et vivre comme nos ancêtres. En effet, tous les appareils que nous utilisons font usage à l'électronique et ses dérivées. Les ordinateurs permettent des calculs très rapides avec une complexité qui étaient autrefois impraticables, les smartphones de dernière génération, les télévisions smartes ultra HD, la sophistication des moyens de transport, etc. Il est donc toujours nécessaire de développer des circuits plus rapides, efficaces et consommant moins d'énergie.

Ce développement a été rendu possible grâce à la miniaturisation des composants électroniques qui est due essentiellement à la réduction de la taille des transistors, et par conséquent, à l'intégration de plus de transistors et de circuits dans la même puce. Ceci a mené à la réduction de leur cout de fabrication.

Paradoxalement à la miniaturisation des composants vers l'échelle nanométrique, de nouveaux phénomènes physiques qui n'avaient pas une grande influence sur la grande échelle se produisent et ont un impact significatif sur ces composants. Donc, la fabrication des dispositifs devient de plus en plus compliquée, et par conséquent, les limites des propriétés des matériaux sont en voie d'atteinte. Cela signifie que la réalisation de dispositifs dans une nouvelle technologie deviendra quasiment impossible puisque le temps nécessaire ainsi que le processus de fabrication de tels composants est de plus en plus couteux.

Ceci a poussé à l'utilisation des processus de simulation comme une étape préliminaire afin d'obtenir des résultats qui serviront de référence dans la fabrication pratique d'une part, et pour réduire le temps et le cout exorbitant de fabrication des dispositifs électroniques d'autre part. La simulation est défini dans le cas général comme une technique permettant de reproduire de façon virtuelle le comportement réel d'un phénomène. En effet, elle permet de capturer le maximum des phénomènes physiques essentiels se produisant dans les circuits, tout en minimisant le temps de calcul afin que les résultats puissent être obtenus dans un délai raisonnable.

Malgré sa grande domination dans le marché de la microélectronique grâce à sa disponibilité naturelle, sa maîtrise de la technologie de fabrication et son cout de fabrication moins cher par rapport à d'autres matériaux, le silicium avec son gap indirect reste néanmoins peu efficace et rencontre rapidement ses limites dans les applications dans les milieux hostiles telles que les hautes températures, les hautes puissances et les hautes fréquences. Il n'y a donc pas une possibilité de réaliser des composants aussi performants avec ce matériau.

Pour cela, l'utilisation de nouveaux matériaux dans la fabrication des semi-conducteurs est devenue indispensable pour le développement dans ce domaine. Cette demande a poussé de nombreux chercheurs à travailler dans ce cadre, et vers la fin des années 50, une nouvelle gamme de matériaux semi-conducteurs est née, ce sont les composés III-V.

En considérant un composant électronique tel qu'un transistor ou une diode, le courant se compose de particules individuelles qui se déplacent à travers le composant due à une force extérieure. Le mouvement des électrons consiste en une séquence de vol libre suivie par des interactions.

La description théorique correcte de tout dispositif semi-conducteur ne peut être obtenue qu'en résolvant l'équation de transport de Boltzmann ainsi que les équations de champ de Maxwell. Or, la solution analytique de ces équations est une tâche quasi-impossible à réaliser, ce qui a poussé les chercheurs à trouver d'autres solutions alternatives.

Il y a deux tâches essentielles qui doivent être résolues indépendamment l'une de l'autre, les équations de transport régissant les porteurs de charges et les champs conduisant les porteurs de charges. Ces deux tâches sont fortement liées l'une à l'autre de telle sorte qu'elles doivent être résolues simultanément.

Après le vol libre des électrons, les interactions provoquent une modification de l'énergie des électrons et donc de la densité de charge, cette modification est prise en compte par l'équation de Poisson qui sert à redistribuer les charges. Cette intégration entre l'équation de transport de Boltzmann et l'équation de Poisson est la principale caractéristique de la simulation du transport électronique dans les dispositifs électroniques.

Plusieurs simplifications ont été introduites afin de trouver une solution approximative à cette équation, ce qui a entraîné le développement des modèles hydrodynamiques (HD) et dérives-diffusions (DD). La validité de ces modèles est malheureusement limitée et ne peut pas être appliquée aux dispositifs submicroniques à cause des phénomènes quantiques qui ne sont pas simplifiables.

Pour remédier à ce problème, il existe un moyen indirect pour résoudre l'équation de Boltzmann qui donne une solution exacte et qui ne nécessite aucune simplification, c'est la méthode microscopique de Monte Carlo.

Cette méthode consiste à faire un couplage entre la méthode Monte Carlo et l'équation de Poisson de telle sorte qu'il faut suivre au cours du temps le comportement des électrons durant

leurs mouvements en utilisant l'algorithme Monte Carlo, puis déterminer les grandeurs électriques tel que le champ électrique en utilisant l'équation de Poisson.

Cette méthode est de type stochastique i.e. utilise des nombres aléatoires pour calculer la durée du vol libre des électrons ainsi que le choix du type d'interaction. En effet, en choisissant des nombre aléatoires de la même distribution respective, il est possible de calculer l'historique du transport des particules individuelles et donc simuler les caractéristiques du transport électronique du dispositif.

C'est dans ce même contexte que se situe notre travail qui sert à étudier et à simuler le comportement des électrons par la méthode Monte Carlo dans les transistors MESFET à base des matériaux III-V ternaires et plus particulièrement à base du GaInSb et de tirer par la suite, les performances de ce matériau et obtenir les caractéristiques électriques des dispositifs.

Notre travail est scindé en quatre chapitres principaux entourés d'une brève introduction et conclusion générale.

Le premier chapitre est consacré à l'étude des propriétés générales des matériaux III-V et en particulier les propriétés du GaInSb. Nous abordons ce chapitre par une présentation générale de ces matériaux. Ensuite, on définit le réseau cristallin, le réseau réciproque ainsi que la structure de bande d'énergie de ces matériaux et l'influence de la température sur cette structure. On donne aussi les expressions permettant de calculer les masses effectives des électrons et les coefficients de non parabolicité dans les différentes vallées de la bande de conduction. On montre également comment se fait le calcul des paramètres des alliages ternaires en fonction du coefficient stœchiométrique x . Enfin, on donne un aperçu des applications potentielles des matériaux à base d'antimoniures et du GaInSb.

Le deuxième chapitre est destiné à l'étude du transport électronique dans les semi-conducteurs. On donne tout d'abord les origines et les directions du courant électrique sous l'effet du champ électrique. Par la suite, on présente l'équation de Boltzmann en définissant tous les termes de cette équation ainsi que son domaine de validité. Finalement, on présente les différents types de collisions que peuvent subir les électrons durant leur mouvement dans les semi-conducteurs.

Le troisième chapitre est d'abord dédié à la présentation des techniques de Monte Carlo appliquée dans l'étude microscopique de la dynamique électronique dans les semi-conducteurs. On présente au début l'historique et l'origine de cette méthode. Par la suite, on donne le principe général de cette méthode pour le transport électronique en décrivant les équations permettant

de calculer la durée de vol libre en utilisant la méthode Self Scattering. On expliquera aussi comment le choix des interactions et l'angle de déviation sont obtenus. On donne également les équations qui régissent le mouvement des électrons durant le vol libre. Dans la deuxième partie de ce chapitre, on présente le principe général de la méthode Monte Carlo dans les dispositifs électroniques en utilisant l'équation de Poisson et voir la notion du maillage et des conditions aux limites.

Le quatrième et dernier chapitre est destiné à la présentation des différents résultats obtenus par notre simulation. On présente dans la première partie les caractéristiques du transport électronique dans le matériau massif GaInSb dans le régime stationnaire et non stationnaire sous l'effet de la température et le champ électrique. Par la suite, on présente les résultats obtenus dans le cas de la simulation des transistors MESFET tel que le champ électrique, le potentiel électrostatique, l'énergie ainsi que la densité. On va également présenter l'influence de la tension de grille et du drain sur le courant électrique i.e. les caractéristiques courant-tension $I_d(V_{ds})$.

Chapitre I

Propriétés de matériaux III-V

Introduction

Depuis plus de 50 ans, l'augmentation de la densité et de la performance des transistors de la technologie CMOS a propulsé l'augmentation exponentielle de l'électronique au silicium. Cependant, cet avancement technologique est quasi proche de ses limites physiques. Pour prolonger la vie de la microélectronique, d'autres types de matériaux sont considérés qui ont d'excellentes propriétés de transport, notamment les semi-conducteurs à base de carbone tels que les nanotubes de carbone [BAC01] et le graphène [LIN10] ainsi que les semi-conducteurs à base des matériaux III–V [GU11]. Parmi les candidats pour compléter le silicium dans l'industrie de la microélectronique, les matériaux III-V offrent des avantages en termes de compatibilité avec le traitement CMOS traditionnel au silicium et des propriétés de transport supérieures, en particulier le transport d'électrons [YUA13]. Ces matériaux ont également des mobilités élevées par rapport à celle du silicium qui leur permet de fonctionner à des hautes fréquences. Les matériaux III-V ont donc reçu une attention accrue dans le développement de transistors à l'échelle nanométrique.

1.1. Présentation des matériaux III-V

Les matériaux III-V sont une association d'un ou plusieurs éléments de la colonne III (notamment, l'Aluminium, le Gallium, l'Indium) et d'un ou plusieurs éléments de la colonne V (notamment, l'Azote, l'Arsenic, l'Antimoine et le Phosphore) du tableau périodique de Mendeleïev. Le tableau (1.1) montre un extrait de cette classification et nous donne une idée sur les matériaux binaires qui peuvent être réalisés à partir des éléments de ces deux colonnes, les chiffres en bas représentent le nombre atomique de matériau.

III	IV	V
B ₅	C ₆	N ₇
Al ₁₃	Si ₁₄	P ₁₅
Ga ₃₁	Ge ₃₂	As ₃₃
In ₄₉	Sn ₅₀	Sb ₅₁
Ti ₈₁	Pb ₈₂	Bi ₈₃

Tableau (1.1) : Extrait du tableau périodique montrant les principaux matériaux III-V

[OUC12]

Comme on peut le constater à partir de ce tableau, il existe une multitude de combinaisons entre ces matériaux qui permettent d'obtenir des propriétés différentes qui se caractérisent par des paramètres cristallins, des largeurs de bande interdite et des mobilités différentes. Suivant la nature de la combinaison, ces matériaux peuvent être classés soit comme binaires (GaAs), soit comme ternaires ($\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$) ou soit comme quaternaires ($\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$), où les paramètres x et y représentent les coefficients stœchiométriques des matériaux de la colonne III et de la colonne V respectivement.

Le tableau (1.2) résume quelques paramètres des principaux semi-conducteurs binaires.

Matériau III-V	E_g (eV)	m^*/m_0	μ (cm^2/Vs)	a (Å°)
AlSb	1.58	0.12	200	6.1355
GaN	3.43	0.19	380	$a=3.189$ $c=5.185$
Gap	2.26	0.82	110	5.4512
GaAs	1.42	0.067	8500	5.6533
GaSb	0.72	0.042	5000	6.0959
InP	1.35	0.077	4600	5.8686
InAs	0.36	0.023	33000	6.0584
InSb	0.17	0.0145	80000	6.4794

Tableau (1.2) : Paramètres des principaux matériaux III-V [MAS14]

Les composés à partir des éléments les plus légers incluant le bore ou l'azote sont généralement des composés ayant une large bande interdite dans laquelle la masse effective des électrons est élevée, c'est le cas du GaN. Par contre, les éléments les plus lourds incluant l'antimoine et l'indium donnent un composé à très courte bande interdite direct et une très grande mobilité. Ces derniers ont des propriétés très intéressantes dans l'électronique rapide et l'optoélectronique [KIR75]. Par exemple, l'InSb a la plus petite largeur de bande interdite, la plus petite masse effective de porteurs, la plus grande vitesse de dérive de saturation électronique et la plus grande mobilité de tous les matériaux III-V.

La figure (1.1) montre un aperçu sur la longueur d'onde de quelque matériau III-V :

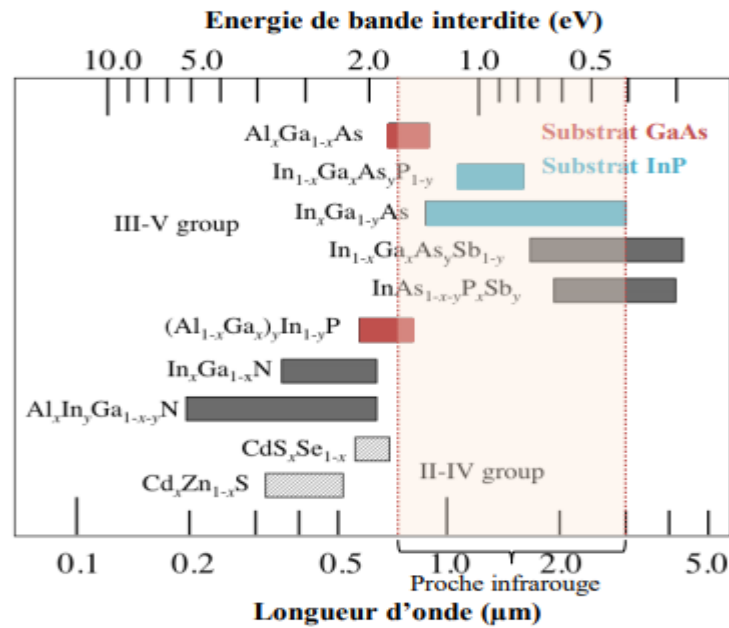


Figure (1.1) : Longueur d'onde de quelque matériau III-V [BIL17]

Parmi les avantages des matériaux III-V par rapport au silicium, c'est qu'ils possèdent des mobilités très élevées et des grandes vitesses de saturation. La figure (1.2) montre un aperçu de mobilité de quelques matériaux :

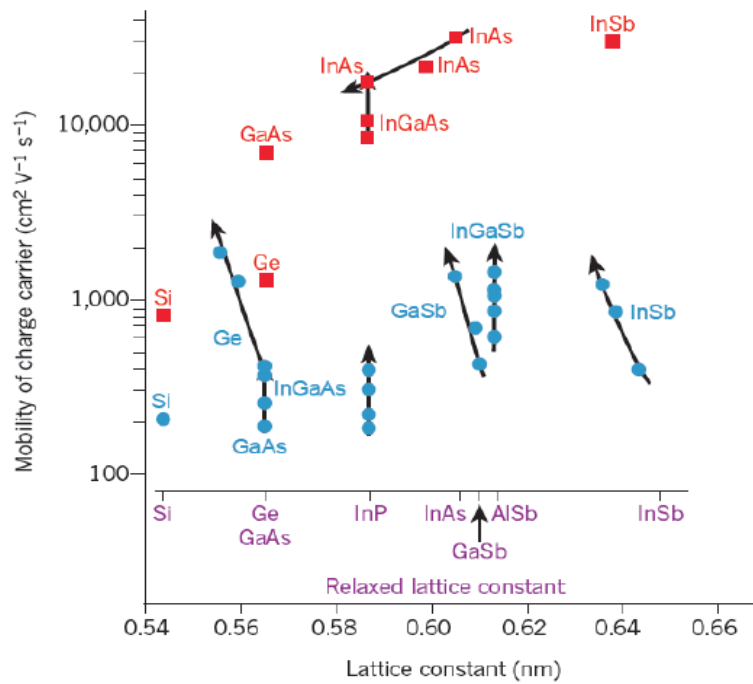


Figure (1.2) : Mobilité de quelques matériaux III-V, les points représentent la mobilité des trous, alors que les carrés représentent la mobilité des électrons [DEL11]

En raison de leurs propriétés optiques et électroniques uniques, les matériaux tel que le GaAs, AlAs, InAs, InP ainsi que leurs alliages ternaires et quaternaires, sont déjà largement utilisés dans l'électronique rapide à haute fréquence, les lasers, les LED et détecteurs pour les communications optiques, l'instrumentation et les capteurs. A cause de leurs champs de claquage élevé (10 fois supérieurs que celui du Si dans le cas du GaN), les matériaux à base de nitrure ont un grand avantage dans les applications de puissance. De plus, les transistors à haute mobilité électronique HEMT à base du GaAs, InAs et InGaAs, qui présentent des propriétés de transport d'électrons exceptionnelles, ont été fabriqués à grande échelle pendant plus d'une décennie. Récemment, la technologie CMOS III-V a pris de l'ampleur dans la communauté de la recherche sur les semi-conducteurs [YUA13]. L'importance de leur rôle a été reconnue dans (International Technology Roadmap for Semiconductors ITRS) [ITR15, DEL16]. Donc, le choix du matériau dépend de l'application dans laquelle il sera utilisé.

Par ailleurs, l'autre avantage de ces matériaux, c'est qu'on peut les utilisés pour fabriquer des alliages ternaires et quaternaires par substitution de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne. Les alliages ternaires apparaissent sous la forme $A_xB_{1-x}C$, dans ce cas, la modification se fait au niveau du matériau de la colonne III, et (x) est un coefficient stœchiométrique qui varie entre 0 et 1 et qui représente la concentration du composé AC, alors que (1-x) représente la concentration du composé BC. L'alliage ternaire peut également s'écrire sou la forme AB_xC_{1-x} quand il s'agit d'une modification dans le matériau de la colonne V. Par contre, les alliages quaternaires apparaissent sous la forme $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$. Dans ce cas, la modification se fait au niveau des matériaux de deux colonnes [MAD04].

La figure (1.3) représente la variation de la largeur de la bande interdite en fonction du paramètre cristallin dans le cas des alliages ternaires et quaternaires :

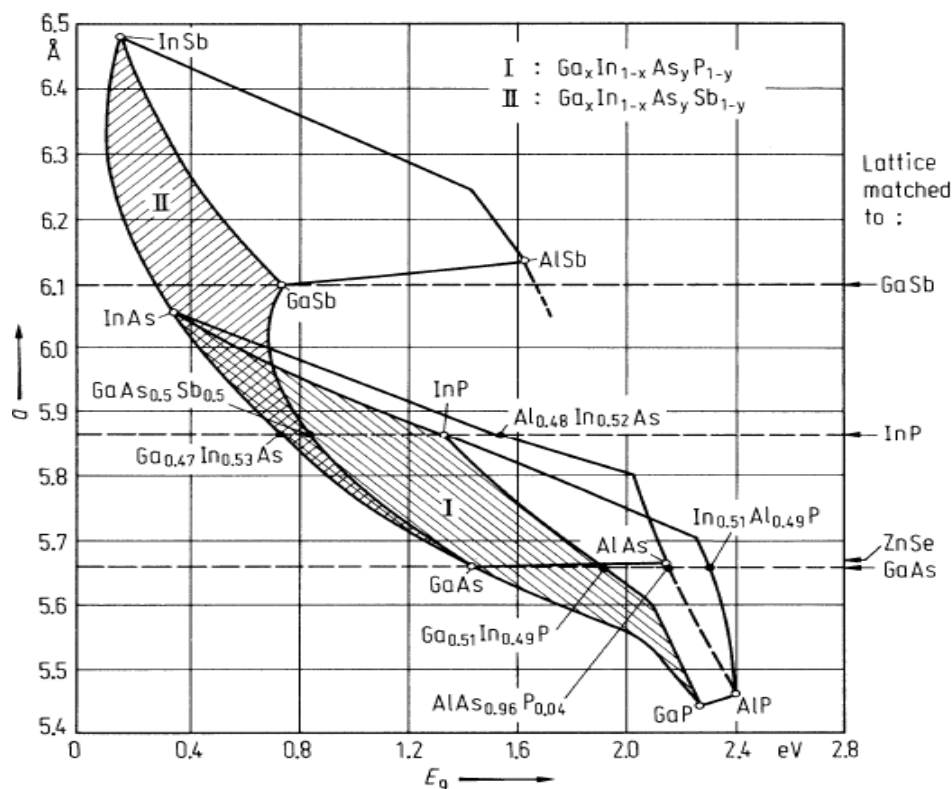


Figure (I.3) : variation de la largeur de la bande interdite et du paramètre cristallin des alliages de composés III-V [BOU07]

Les points du graphe indiquent la largeur de la bande interdite et du paramètre cristallin des matériaux binaires, tandis que les lignes entre 2 points représentent la variation de l'énergie de gap et du paramètre cristallin en fonction du coefficient stœchiométrique pour les alliages ternaires à partir de 2 matériaux binaires. Les lignes présentant un point anguleux montrent qu'il y a une transition d'un gap direct à un gap indirect et vice versa.

L'utilité de ce diagramme est très importante car elle permet de connaître la composition de tout alliage ternaire susceptible d'être déposé en couche mince par épitaxie sur un substrat binaire tel que le GaAs ou InP en tenant compte que le paramètre cristallin doit être très proche de celui du substrat.

1.2. Structure cristalline

Contrairement aux matériaux nitrurés tel que le GaN qui cristallise suivant la structure hexagonale Wurtzite, la structure cristalline de la majorité des matériaux III-V est de type Zinc Blende. Cette structure qui ressemble à la structure diamant est constituée de deux sous-réseaux cubique à face centrée CFC, l'un d'éléments III et l'autre d'éléments V, décalés l'un par rapport à l'autre de $(1/4, 1/4, 1/4)$ suivant la direction $[111]$. Les figures (1.4) et (1.5) représentent

respectivement la perspective et la projection sur une des faces du cube de la structure Zinc Blende :

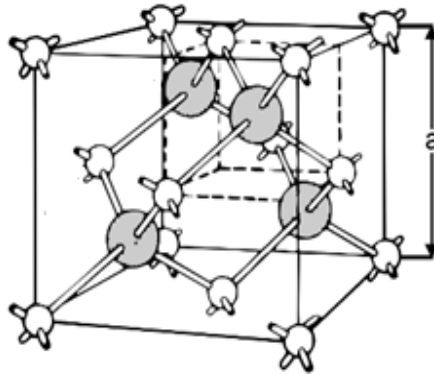


Figure (1.4) : Mailles cristallographiques de la structure Zinc Blende [DOU09]

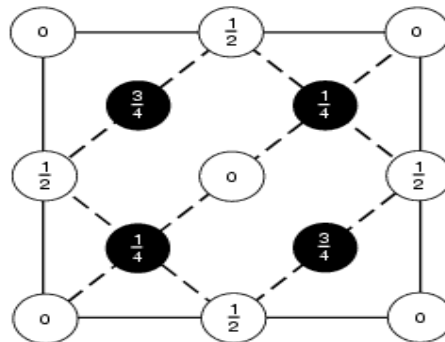


Figure (1.5) : Structure Zinc Blende en projection sur une des faces du cube [OUC12]

Dans la structure Zinc Blende, les atomes de chaque sous-réseau cubique à face centrée CFC interpénétrées sont différents et forment 4 paires d'atomes par cellule conventionnelle. De même, dans cette structure, il n'y a pas de symétrie d'inversion du réseau. Si on considère l'ordre des atomes le long de la diagonale de la structure cubique, la suite est ABABAB. Par contre, si l'on inverse le cristal, on obtient BABABA, qui n'est pas la même structure. L'absence de symétrie d'inversion pour la structure zinc-blende est très importante pour les applications optoélectroniques : en effet, l'effet électro-optique Pockels (variation de l'indice de réfraction sous application d'un champ électrique statique) n'est possible que dans un cristal ne possédant pas de symétrie d'inversion. Dans le cas de la structure diamant, la symétrie d'inversion du réseau est possible car l'inverse de la suite CCCCCC devient CCCCCC.

Comme les matériaux de la colonne V possèdent 5 électrons dans la couche périphérique et les matériaux de la colonne III possèdent 3 électrons, les liaisons atomiques entre ces matériaux ne sont pas covalentes comme dans le cas du silicium du fait qu'elles reposent sur le transfert

d'électrons des atomes du groupe V vers ceux du groupe III. Ainsi, dans le cas du l'arsenic de gallium par exemple, chaque atome d'arsenic est entouré de quatre atomes de gallium, et chaque atome de gallium est entouré de quatre atomes d'arsenic. Alors, un échange d'électrons va se produire, et le cristal se construit avec les ions As^+ et Ga^- , qui ont tous quatre électrons périphériques [GOU94]. Ceci est à l'origine du caractère partiellement ionique et partiellement covalent des liaisons dans les semi-conducteurs polaires.

1.3. Réseau réciproque et zone de Brillouin

Dans un cristal, les atomes forment un réseau périodique. Lorsqu'on envoie des rayons X sur ce cristal, les rayons sont diffractés par les atomes comme de la lumière. La figure diffractée visible sur l'écran est aussi un réseau périodique. C'est le réseau réciproque. Plus les atomes sont écartés, plus le réseau réciproque est serré et inversement. Si les atomes se rapprochent suivant une direction, le réseau réciproque se dilate dans cette direction seulement. En d'autres termes, l'image d'un réseau cristallin, donne aussi un réseau contenant des nœuds, mailles etc, mais qui sera de type différent de celui du réseau dit direct.

Dans le cas de la structure cristalline type zinc-blende, le réseau réciproque est cubique centré. Sa maille élémentaire, qui correspond à la première zone de Brillouin à la forme d'un octaèdre tronqué par les six faces d'un cube [LEE96]. En effet, la zone de Brillouin va correspondre au domaine d'influence d'un atome sur les autres atomes voisins, elle est représentée sur la figure (I.6) :

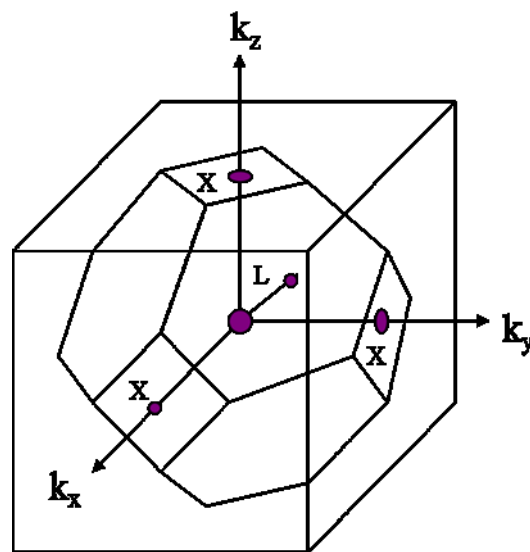


Figure (1.6) : Première zone de Brillouin d'un cristal Zinc-Blende [MAS14]

Elle présente un centre de symétrie Γ à l'origine et un certain nombre d'axes de symétrie :

- Trois axes équivalents dans la direction $\langle 100 \rangle$ coupant le bord de la zone de Brillouin aux points X qui est le centre d'une face carré de l'octaèdre.
- Quatre axes équivalents dans la direction $\langle 111 \rangle$, coupant le bord de la zone de Brillouin aux points L qui est le centre d'une face hexagonale de l'octaèdre [BEC06].

1.4. Structure de bande d'énergie

La connaissance de la structure de bande des matériaux est le paramètre le plus important dans l'étude du transport électronique. Elle permet de connaître la largeur de la bande interdite d'une part, ainsi que sa nature i.e. direct ou indirect d'autre part. Sa description s'effectue dans l'espace des vecteurs d'ondes k . On considère les variations de l'énergie ε en fonction de k que selon les directions de plus haute symétrie et en se limitant à la première zone de Brillouin.

La structure de bande est généralement constituée dans n'importe quel matériau en un ensemble de bandes permises séparées par des bandes interdites. La bande de valence (BV) est définie d'une façon générale comme la plus haute bande permise remplie à la température $T=0^\circ\text{K}$, la bande de conduction (BC) est définie comme étant la première bande permise vide à la température $T=0^\circ\text{K}$. L'espace qui sépare la bande de conduction de la bande de valence est appelé la largeur de bande interdite ou l'énergie de gap. Cette dernière est la quantité d'énergie qu'il faut donner à un électron pour transiter du haut de la bande de valence au bas de la bande de conduction sous l'effet d'une excitation quelconque. L'allure générale des bandes permises à la température du zéro absolu est montrée dans la figure (1.7) :

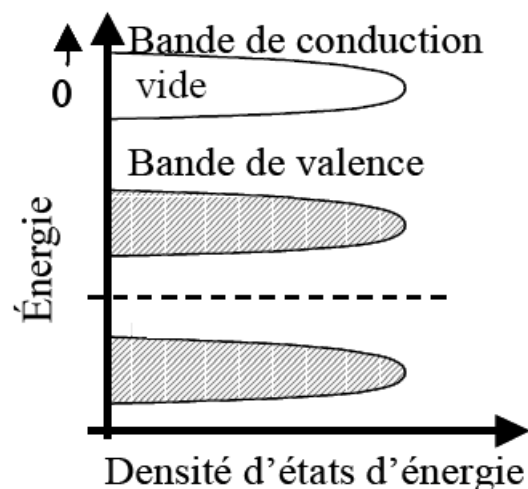


Figure (1.7) : Remplissage des bandes permises [BON03]

La figure (1.8) présente la forme de la structure de bande dans l'arsenic de gallium GaAs et dans le silicium Si et montre la différence entre une structure de bande à gap direct et gap indirect.

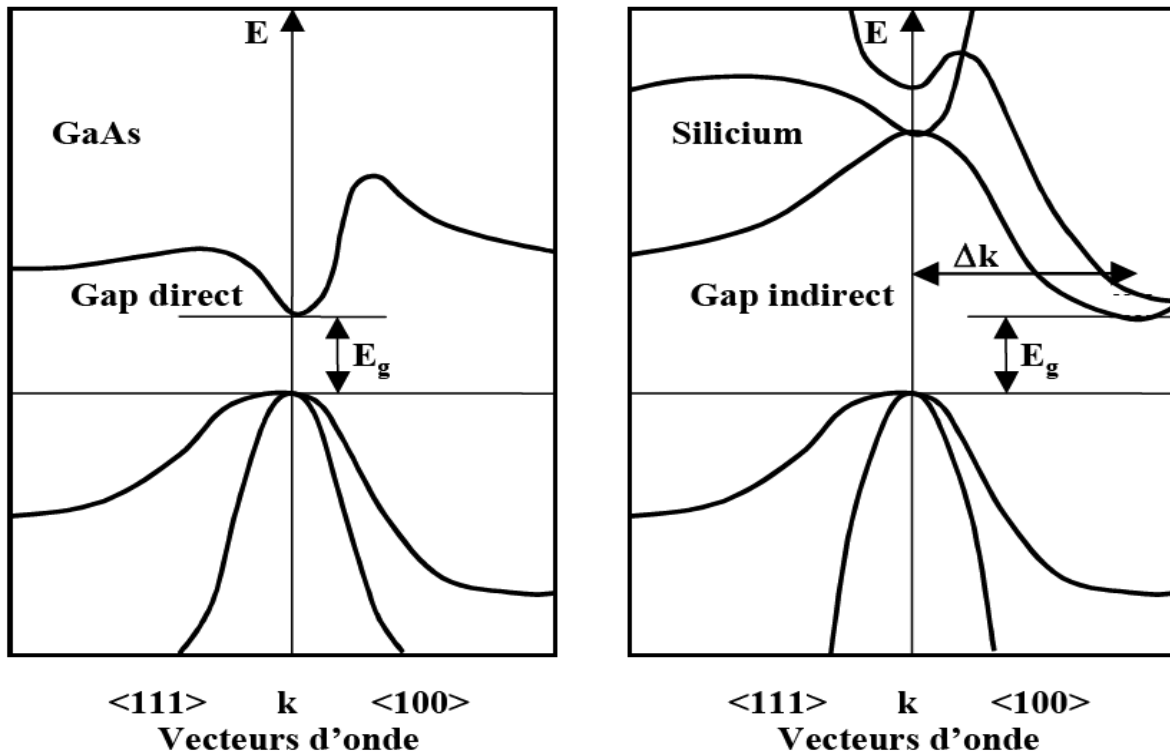


Figure (1.8) : Différence entre une structure de bande à un gap direct et à gap indirect

[BON03]

Les matériaux III-V sont dans le cas général des matériaux à structure de bande directe (cas du GaAs), c'est-à-dire que le maximum de la bande de valence (BV) et le minimum de la bande de conduction (BC) sont localisées au centre de la zone de Brillouin, ce qui les rend performant en optoélectronique. Dans ce cas, lorsqu'un électron reçoit une énergie qui est supérieure ou égale à l'énergie de gap, il quitte directement la bande de valence vers la bande de conduction. Par contre, dans le cas où la structure de bande est indirecte (Cas du Si), la transition d'un électron de la bande de valence à la bande de conduction nécessite une modification du vecteur d'onde k et donc de la quantité de mouvement avec le réseau sous forme de vibration et donc de phonons.

La bande de conduction est composée d'une vallée centrale appelée vallée Γ et des de deux vallées satellites situées à la limite de la zone de Brillouin nommées L et X.

La bande de valence comporte également trois vallées se situant à des niveaux proches. Deux sous-bandes au centre de la zone de Brillouin nommées bande de trous lourds et bande de trous

légers ayant des masses effectives différentes. La troisième bande qui correspond à des états d'énergie plus faible est dite split-off.

1.4.1. Influence de la température sur la structure de bande

La largeur de la bande interdite n'est pas constante. En effet, elle varie avec la température. Cette variation est donnée par l'équation pseudo-empirique de VARSHNI [ODO91] :

$$\varepsilon_g = \varepsilon_{g0} - \frac{\alpha T^2}{\beta + T} \quad (1.1)$$

Avec ε_g est l'énergie de gap à la température considérée, ε_{g0} est l'énergie de gap à la température nulle, α et β sont des constantes propres à chaque matériau.

A partir de l'équation (1.1), on remarque que la largeur de gap diminue lorsque la température augmente. Le tableau ci-dessous montre un exemple de la variation de la largeur de bande interdite en fonction de la température pour quelques semi-conducteurs en donnant les valeurs des coefficients α et β pour chaque matériau.

Matériaux	ε_{g0} [eV]	α [eV/k]	β [K]	ε_{g300} [eV]
Si	1.17	$4.73 \cdot 10^{-4}$	636	1.12
Ge	0.743	$4.77 \cdot 10^{-4}$	235	0.661
GaAs	1.521	$5.58 \cdot 10^{-4}$	220	1.424
AlAs	2.239	$8.78 \cdot 10^{-4}$	332	2.163
InAs	0.420	$2.5 \cdot 10^{-4}$	75	0.360
GaN	3.28	$7.32 \cdot 10^{-4}$	700	3.20
InN	2.01	$1.2 \cdot 10^{-3}$	627	1.970

Tableau (I.3) : Variation de la bande interdite en fonction de la température

1.4.2. Notion de la masse effective

La structure de bande est définie dans le cas général à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger, les variables relatives aux vecteurs d'onde s'expriment par la relation de dispersion qui relie l'énergie au vecteur d'onde [SAY10] :

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} \kappa^2 \quad (1.2)$$

Où ε représente l'énergie, \hbar représente la constante de Planck réduite, k représente le vecteur d'onde et m représente la masse de l'électron.

En développant en série de Taylor la relation de dispersion près d'un minima k_0 , on obtient la relation suivante :

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2}{2m} (\kappa - \kappa_0)^2 \quad (1.3)$$

A partir de l'équation (1.2), on peut exprimer la dérivée seconde de l'énergie par rapport au vecteur d'onde par :

$$\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k^2} = \frac{\hbar^2}{m} \quad (1.4)$$

La dérivée seconde d'une fonction permet en général de connaître l'ouverture de la courbe.

Etant donné que la constante de Planck \hbar est constante, et que $\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$ change suivant l'ouverture de chaque vallée, alors la masse ne peut pas être constante et donc change dans chaque vallée. Elle est nommée masse effective et est définie par :

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k^2}} \quad (1.5)$$

A partir de l'équation précédente, la masse effective est inversement proportionnelle à la dérivée seconde de la relation de dispersion. Donc, lorsque la bande de conduction présente une courbure très accentuée, la masse effective des électrons est très faible et par conséquent une mobilité des électrons très élevée. C'est le cas de la vallée Γ de la bande de conduction. Par contre, dans les vallées satellites L et X de la bande de conduction, la courbure est faible et par conséquent, des masses effective élevée par rapport à la vallée centrale et donc des faibles mobilités électroniques.

Le calcul de la masse effective des électrons par rapport à la masse de l'électron dans le vide se fait dans chaque vallée suivant les équations (1.6) [LEV96] :

$$m_n^* = \begin{cases} m_\Gamma^* \\ m_L^* = (m_{nl}^2 m_{nt})^{1/3} \\ m_X^* = (m_{nl}^2 m_{nt})^{1/3} \end{cases} \quad (1.6)$$

Ou m_{nl} et m_{nt} sont respectivement les masses longitudinales et transverses dans les vallées L et X. Puisque ces vallées ne sont pas à symétrie sphérique, la masse longitudinale m_{nl} est différente de la masse transverse m_{nt} .

Dans le cas des trous, la masse effective est donnée par :

$$m_p^* = (m_{pl}^{(3/2)} + m_{ph}^{(3/2)})^{2/3} \quad (1.7)$$

Ou m_{pl} et m_{ph} sont respectivement les masses des trous léger et lourd.

1.4.3. Notion de coefficient de non parabolicité

La forme de la bande de conduction près des minimas n'est pas complètement parabolique. Ce qui implique une modification de la relation de dispersion des électrons sous la forme suivante :

$$\varepsilon(1 + \alpha\varepsilon) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (1.8)$$

Avec α est le coefficient de non parabolicité, \hbar est la constante de Planck réduite et m^* est la masse effective des électrons.

Le coefficient de non parabolicité est calculé dans chaque vallée par les relations suivantes [SAY10] :

$$\alpha_n = \begin{cases} \alpha_\Gamma = \frac{1}{\varepsilon_\Gamma} \left(1 - \frac{m_\Gamma^*}{m_e}\right)^2 \\ \alpha_L = \frac{1}{\varepsilon_{L'_{3v}} - \varepsilon_{L1c}} \\ \alpha_X = \frac{1}{2(\varepsilon_{X'_{2c}} - \varepsilon_{X1c})} \left(1 - \frac{m_X^*}{m_e}\right) \end{cases} \quad (1.9)$$

Avec ε_T est l'énergie de gap du semi-conducteur et m_e la masse du porteur libre, $\varepsilon_{L'_{3v}}$ et $\varepsilon_{L'_{1c}}$ sont les états des bandes de valence et de conduction avec la symétrie donnée, $\varepsilon_{X'_{2c}}$ et $\varepsilon_{X'_{1c}}$ sont les états de la bande de conduction avec la symétrie donnée.

1.4.4. Variation des paramètres d'alliage en fonction du coefficient stœchiométrique x

Les paramètres physiques des alliages ternaires et leurs variations en fonction du coefficient stœchiométrique des deux matériaux binaires AB et BC sont très importants, car ils permettent de définir des propriétés différentes par rapport aux matériaux binaires considérés.

En effet, la variation du coefficient stœchiométrique conduit à une modification de la plupart des paramètres constituant l'alliage telle que la largeur de la bande interdite, le paramètre de la maille cristalline, les masses effectives, etc.

La variation des paramètres des alliages en fonction du coefficient stœchiométrique est définie par la loi de VEGARD et peut se faire de deux manières différentes suivant la nature des paramètres.

1.4.4.1. Variation linéaire des paramètres

La variation des paramètres est linéaire dans le cas du calcul de la variation de la maille cristalline, de l'affinité électronique, de l'énergie de séparation entre les différentes vallées, etc.

Dans ce cas, la variation est donnée par :

$$y_{A_xB_{1-x}C} = xy_{AC} + (1-x)y_{BC} \quad (1.10)$$

Avec y_{AC} et y_{BC} sont les paramètres des semi-conducteurs considérés.

x est le coefficient stœchiométrique du matériau.

1.4.4.2. Variation non linéaire des paramètres

Dans le cas où de la variation des paramètres n'est pas linéaire, un paramètre de courbure est introduit dans le calcul. Ce paramètre est propre à chaque matériau et permet de rendre la variation linéaire en une variation parabolique. Cette variation est donnée par :

$$Y_{A_xB_{1-x}C} = xY_{AC} + (1-x)Y_{BC} + x(1-x)C \quad (1.11)$$

Les paramètres de courbure pour chaque matériau sont des constantes existant dans la littérature. On trouve ce cas dans la variation de la masse effective, la variation de la permittivité électrique, la variation de la largeur de gap ...

Dans le cas de la variation de l'énergie de gap, il existe deux façons de la calculée :

- Soit d'une fonction prédéfini pour chaque alliage ternaire, dans le cas du $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$, elle est donnée par [LEV96] :

$$\varepsilon_{\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}} = 0.172 + 0.139x + 0.415x^2 \quad (1.12)$$

- Soit par la loi de Végard en comparant les énergies obtenues dans les différentes vallées et en prenant leurs minimums. Ceci est important lorsqu'on utilise un semi-conducteur à gap direct et un semi-conducteur à gap indirect comme dans le cas du GaInP. La relation est donnée par :

$$\begin{cases} \varepsilon_{A_xB_{1-x}C}^{\Gamma} = x\varepsilon_{AC}^{\Gamma} + (1-x)\varepsilon_{BC}^{\Gamma} + x(1-x)C_{\Gamma} \\ \varepsilon_{A_xB_{1-x}C}^L = x\varepsilon_{AC}^L + (1-x)\varepsilon_{BC}^L + x(1-x)C_L \\ \varepsilon_{A_xB_{1-x}C}^X = x\varepsilon_{AC}^X + (1-x)\varepsilon_{BC}^X + x(1-x)C_X \\ \varepsilon_{A_xB_{1-x}C} = \min(\varepsilon_{A_xB_{1-x}C}^{\Gamma}, \varepsilon_{A_xB_{1-x}C}^L, \varepsilon_{A_xB_{1-x}C}^X) \end{cases} \quad (1.13)$$

Les paramètres de courbures dans chaque vallée sont des constantes qui existent dans la littérature.

1.5. Propriétés du GaInSb et ses applications

1.5.1. Propriétés générales du GaInSb et des antimoniures

La recherche illimitée de nouveaux dispositifs électroniques permettant de fonctionner dans les champs électriques élevés, les hautes températures et les hautes fréquences a poussé les chercheurs vers la l'étude et la réalisation des dispositifs électroniques basés sur les matériaux ternaires et quaternaires, à savoir les matériaux III-V et II -VI groupes [ADA09].

En effet, les semi-conducteurs composés à base d'antimoniure à bande interdite étroite sont considérés comme de bons matériaux fonctionnant dans de telles circonstances. Parmi ces matériaux, l'antimoniure de gallium indium ou $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ a suscité un grand nombre d'intérêt. Ce dernier est un matériau ternaire constitué de l'antimoniure de gallium GaSb et de

l'antimoniure d'indium InSb. Ses propriétés dépendent principalement du GaSb et de l'InSb et varient en fonction du coefficient stœchiométrique x suivant les lois de Végard [ADA09]. Le $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ est un matériau à structure de bande directe qui cristallise suivant la structure Zinc-Blende. Les avantages de ce matériau sont essentiellement sa faible largeur de bande directe (de 0,17 eV à 0,72 eV ; 0,34 eV quand $x = 0,5$), sa grande mobilité (de 5 000 à 80000 cm^2/Vs) et ses faibles masses effectives (de $0,014 \cdot m_0$ à $0,042 \cdot m_0$; $0,0252 \cdot m_0$ lorsque $x = 0,5$) [LEV96]. Ceci lui a permis d'être un excellent candidat pour les applications à grande vitesse.

En raison de leurs structures de bandes et de leurs excellentes propriétés physiques, les semi-conducteurs composés à base d'antimoniure offrent une grande flexibilité pour l'ingénierie et créent un large espace pour le développement de la microélectronique à haute performance.

Les premiers intérêts accordés au $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ remontent aux années soixante-dix du dernier siècle, où ses propriétés fondamentales ont été introduites [KAW77, IKO74]. Au fil du temps, les études ont continué de croître de façon significative en passant de structures simples de GaInSb à des dispositifs électroniques à base d'hétéro-structures plus complexes telles que des diodes laser et des transistors, etc. [MIT06, KIP11, GHA12, HOS12, YUA13, MA14].

1.5.2. Applications du GaInSb et des antimonures

L'étude des matériaux semi-conducteurs à base d'antimoniure et de leurs applications potentielles a été rapidement développée au cours de ces dernières années. Ceci a été boosté notamment après le lancement du programme des composants semi-conducteurs à base d'antimoniure (ABCS) par l'Agence pour les projets de recherche avancée de la défense (Defense Advanced Research Projects DARPA) des Etats-Unis en 2001 [ROS03]. Ainsi, Une série importante de développements a été réalisée à partir de ces matériaux pour obtenir des dispositifs fonctionnant dans divers applications.

Les matériaux à base d'antimoniure à bande interdite étroite sont utilisés dans divers applications telle que la microélectronique, les lasers et détecteurs infrarouges. Ils sont même utilisés dans les cellules thermo-photovoltaïques.

1.5.2.1. Les dispositifs microélectroniques et circuits intégrés

La relation entre l'énergie de gap et la longueur d'onde spectrale et la constante de réseau est présentée sur la figure (1.9) qui montre également l'évolution des transistors HEMT et HBT pour les opérations en hautes fréquences et à faible consommation de puissance :

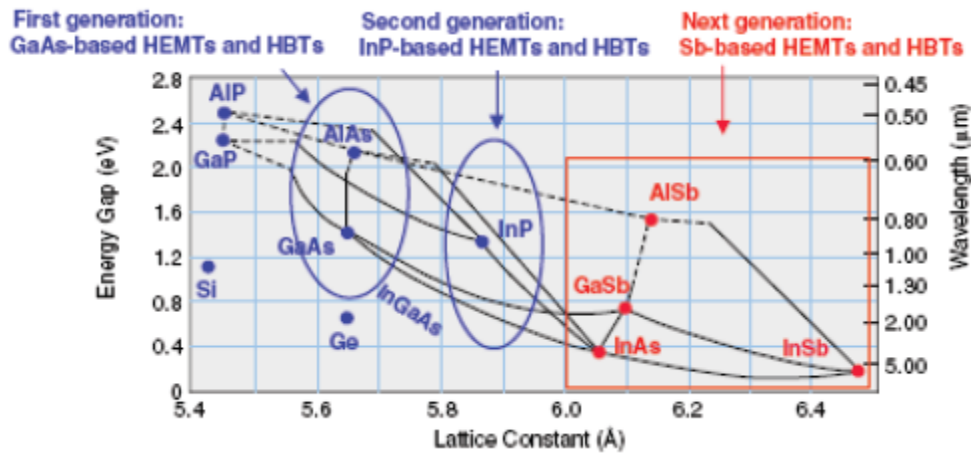


Figure (1.9) : Relation entre la largeur de gap et l'application des matériaux aux différents dispositifs [LIU10]

La position relative entre l'énergie de gap et le décalage de bande des semi-conducteurs III-V est montrée sur la figure (1.10) :

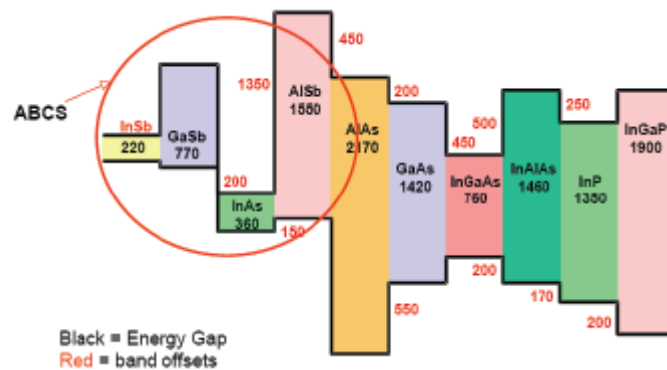


Figure (1.10) : Position relative entre l'énergie de gap et le décalage de bande des semi-conducteurs III-V [LIU10]

On peut donc voir qu'il y a un décalage de bande considérable et une structure riche à partir de l'alignement des bandes d'énergies dans les matériaux à base d'antimoniure.

En régulant le paramètre de composition des matériaux à base d'antimoniures, il est possible d'effectuer toute une ingénierie de nouveaux dispositifs à condition que les paramètres cristallins se correspondent.

Les circuits à base des dispositifs HEMT et HBT de première génération utilisés par les radars à ondes millimétriques et les communications numériques à haute fréquence ont jusqu'ici fait appel à des matériaux à base de GaAs. Les matériaux à base d'InP sont utilisés pour les dispositifs de deuxième génération. Par ailleurs, actuellement, les matériaux composés à base

d'antimoniure sont utilisés pour la fabrication des dispositifs HEMT et HBT de troisième génération avec une très haute vitesse, une consommation d'énergie et un facteur de bruit ultra faible.

Après le lancement du projet ABCS par la DARPA, Rockwell Scientific Company (RSC) a développé des circuits intégrés monolithiques micro-onde (MMIC) à faible bruit dans la bande Ka (34-36 GHz), la bande W (92-102 GHz) et la bande X (8-12 GHz) ainsi que des modules intégrés transmission/réception (T/R) à base de transistor mHEMT formés par l'InAs/AlSb à travers sa plateforme technologique mature pHEMT à GaAs. Actuellement, les circuits intégrés à base d'antimoniure ABCS sont considérés comme une technologie de base pour le développement par DARPA dont leur objectif à court terme est de développer des circuits intégrés avec intégration de plus de 5000 transistors et une tension de fonctionnement d'environ 0,5 V [LIU10].

D'autres types de transistor à effet de champs notamment des HEMT et des MOSFET à base de AlInSb/GaInSb pour les applications à basse consommation utilisés dans les systèmes autonomes ont été fabriqués [OLI10, LIA15, HAC05, YUA13].

La structure HEMT à base d'antimoniure est développée en utilisant l'épitaxie par jet moléculaire MBE sur des substrats de GaAs semi-isolants en utilisant une couche tampon en AlSb afin d'approcher paramètre cristallin et une couche en InAlAs pour fournir une couche de surface chimiquement stable et minimiser le courant de grille [HAC05].

La croissance des HEMT à base des antimoniures un sur substrat de silicium peut combiner à la fois, la mobilité élevée de ces matériaux ainsi que les excellentes caractéristiques du substrat Si avec de larges perspectives d'application. La croissance de la structure HEMT à base d'AlGaSb / InAs sur des substrats de Si a été réalisé par M.K. Kwang et al [KWA09].

1.5.2.2. Les détecteurs infrarouges

L'étude sur les détecteurs de photons infrarouges a commencé il y a plus de 60 ans. Le développement des détecteurs infrarouges de première génération a commencé à la fin des années quarante du siècle dernier, en utilisant des matériaux tel que le PbSe et le PbTe pour détecter l'infrarouge moyen (MWIR). Les détecteurs infrarouges de deuxième génération étaient principalement à base de l'InSb et le HgCdTe pour détecter la bande de l'infrarouge moyen et de la bande infrarouge lointain (LWIR) respectivement [ROG07, ROG08]. Ces dernières années, les détecteurs infrarouges de troisième génération ont été étudiés et développés dans de

nombreux pays. Leurs principales caractéristiques sont la détection infrarouge multi-bandes, la haute résolution, les températures de fonctionnement élevées, haute stabilité et faible coût [WAL08]. Pour cela, les matériaux à base d'antimoniures sont généralement considérés comme les matériaux préférés des détecteurs infrarouges de troisième génération [NES06, MAU03].

En principe, l'énergie de gap ainsi que le paramètre cristallin des antimoniures peuvent être adaptés pour couvrir toute la zone spectrale de la détection infrarouge en ajustant le coefficient de composition de ces matériaux [COR01].

1.5.2.3. Lasers infrarouges

Le laser à infrarouge a des applications importantes dans la surveillance de l'environnement gazeux, la détection chimique, le diagnostic biomédical, la technologie de télédétection par satellite, etc. Les semi-conducteurs composés à base d'antimoniure avec bande interdite correspondant à une longueur d'onde à infrarouge moyen de 2 à 5 μm est un matériau important des lasers à infrarouge moyen [ZHA06, BAU09, YAM05].

1.5.2.4. Les cellules thermo-photovoltaïques

Les cellules thermo-photovoltaïques TPV sont similaires aux cellules solaires qui utilisent le rayonnement infrarouge thermique d'une source chauffée pour générer directement de l'énergie électrique. La tendance actuelle du développement des cellules thermo-photovoltaïques est de développer des matériaux thermo-photovoltaïques à haut rendement et à faible coût ayant une bande d'énergie très petite (0,6 eV au maximum), et des composants fonctionnant à la source de rayonnement à moyenne et basse température (<1500). Les composés à base d'antimoniure sont l'un des principaux matériaux pour les applications de dispositifs thermo-photovoltaïques [MAU03].

1.6. Principaux paramètres du GaSb, InSb et Ga_{0.5}In_{0.5}Sb

Dans cette dernière partie de ce chapitre, on va présenter l'ensemble des paramètres du GaSb, InSb et Ga_{0.5}In_{0.5}Sb utilisés dans notre simulation :

Paramètres	GaSb	InSb	Ga _{0.5} In _{0.5} Sb
Constante du réseau (Å°)	6.0959	6.479	6.2859
Densité (g/Cm ³)	5.61	5.77	5.69
Affinité électronique (eV)	4.06	4.59	4.325
Energie du phonon LO (eV)	0.0297	0.025	0.027
Permittivité statique	15.7	16.8	16.25
Permittivité dynamique	14.4	15.7	15.05
Masse effective Γ (1/m ₀)	0.041	0.014	0.0252
Masse effective L (1/m ₀)	0.57	0.25	0.41
Masse effective X (1/m ₀)	0.75	0.55	0.66
Coefficient de non parabolicité Γ (J ⁻¹)	1.226	5.652	2.78
Coefficient de non parabolicité L (J ⁻¹)	0.240	1.102	0.79
Coefficient de non parabolicité X (J ⁻¹)	0.0545	0.25	0.14
Energie du Gap (eV)	0.726	0.172	0.34525
Energie de séparation Γ L (eV)	0.084	0.51	0.297
Energie de séparation Γ X (eV)	0.31	0.83	0.57
Potentiel de déformation Γ L (*10 ⁸ eV/cm)	3.04	1.56	2.3
Potentiel de déformation Γ X (*10 ⁸ eV/cm)	2.205	1.905	2.055
Potentiel de déformation L Γ (*10 ⁸ eV/cm)	3.04	1.56	2.3
Potentiel de déformation X Γ (*10 ⁸ eV/cm)	2.205	1.905	2.055

Potentiel de déformation LX ($*10^8$ eV/cm)	1.26	1.78	1.52
Potentiel de déformation XL ($*10^8$ eV/cm)	1.26	1.78	1.52
Potentiel de déformation LL ($*10^8$ eV/cm)	1.29	1.37	1.33
Potentiel de déformation XX ($*10^8$ eV/cm)	6.73	5.48	6.10

Tableau (I.4) : Paramètre du GaSb, InSb et Ga_{0.5}In_{0.5}Sb [LEV96], [NIK09], [ARA11], [BON71], [STO00]

Conclusion

Durant de ce chapitre, on a présenté les aspects essentiels des composés III-V nécessaires pour notre étude, notamment les propriétés électriques, physiques et cristallographiques. Par la suite, on a présenté les formes existantes de la structure de bande, tout en précisant son influence dans l'étude du transport électronique. Dans la fin, on a présenté les propriétés générales des antimoniures et du GaInSb en particulier. Le chapitre suivant sera consacré pour l'étude du transport électronique et les phénomènes de diffusions qui lui sont attachés.

Chapitre II

Transport électronique et interactions

Introduction

Avant toute utilisation d'un nouveau matériau dans la fabrication des dispositifs électroniques, il est indispensable de faire une étude des propriétés du transport électronique de ce matériau afin de déterminer son domaine d'application. En effet, l'étude du transport de charge dans les matériaux permet de décrire d'une manière assez précise suivant l'approche utilisée, le mouvement des électrons à l'intérieur du matériau. Ce dernier est décrit par l'équation de Boltzmann qui définit le mouvement des électrons sous l'effet des forces extérieures. Dans le cas général, le mouvement des électrons est divisé en deux séquences ; le vol libre et les interactions. Le résultat d'une telle étude permet de fixer les performances du semi-conducteur et de déterminer le domaine d'utilisation en température et en champ électrique. Dans ce qui va suivre, on va présenter le principe général du transport électronique. On va d'abord présenter les propriétés d'un électron en introduisant la notion particulaire et ondulatoire de ce dernier. Par la suite, on va définir les propriétés des mécanismes d'interactions que subissent les électrons dans les semi-conducteurs. A la fin, on va présenter l'équation phare du transport électronique, il s'agit de l'équation de Boltzmann, ainsi que les méthodes utilisées pour la résoudre.

2.1. Propriétés physiques d'un électron

Dans n'importe quelle étude sur les différents types de dispositifs à base de semi-conducteurs, l'entité de base est toujours un électron. Il est donc nécessaire de connaître qu'est-ce qu'un électron et quelle sont ses propriétés physiques avant de faire une telle étude.

Pour répondre à cette question, le physicien Werner Heisenberg a fait des expériences en 1929 qui ont donné une description claire de la manière dont un électron se comporte dans le monde réel. Ceci a aidé à comprendre les limites des deux formalismes qui se sont développées pour décrire l'entité de l'électron.

Pour cela, il a utilisé la chambre de Wilson pour détecter les particules et / ou les rayonnements. Cette chambre représente un environnement fermé contenant une vapeur très saturée (qui peut être de l'eau ou de l'alcool). Lorsqu'une particule entre dans cette chambre, elle laisse des pistes qui peuvent être observées et laisse un motif comme celui de la figure (2.1) :

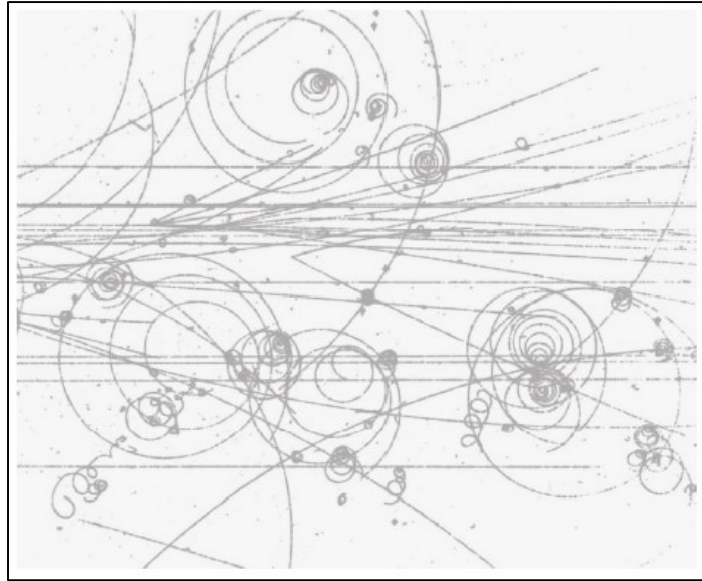


Figure (2.1) : La chambre de Wilson [PEI86]

D'après ces pistes, l'électron peut avoir la notion d'une particule ayant une masse et suit les lois de la mécanique classiques. Il est en effet possible d'appliquer des champs électriques et magnétiques à l'intérieur de la chambre afin de calculer la masse des particules en utilisant les lois de Newton.

Par, ailleurs, lorsqu'un faisceau d'électrons est projeté sur un écran à travers une fente d'une largeur suffisamment petite, on obtient les motifs observés dans la figure (2.2) :

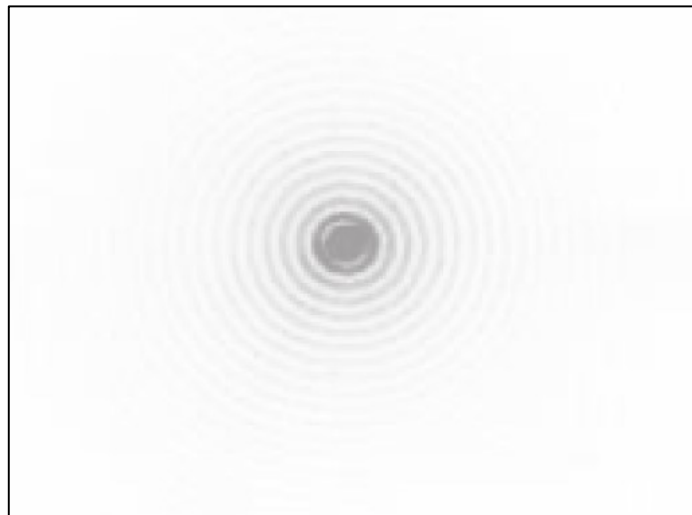


Figure (2.2) : Diffraction des rayons [PEI86]

Dans ce cas, les électrons montrent un comportement ondulatoire qui ne peut pas être expliqué par les lois de la mécanique classique. La seule façon d'expliquer cela est d'utiliser les lois de la mécanique quantique.

Donc, les expériences précédentes montrent clairement la double nature des particules ainsi que des rayonnements des électrons. C'est comme si les particules et les ondes étaient deux aspects différents de la même entité. Selon ces deux expériences, on peut dire qu'un électron est une entité qui dans certains cas, il se comporte comme une particule classique alors que dans d'autres cas, il se comporte comme une onde. D'une manière générale, la notion d'une onde ou de particule sont juste des façons de voir les choses et non les choses elles-mêmes. On ne peut pas dire que les électrons sont des particules ou des ondes et vice versa.

2.2. Origine du courant électrique

Dans les semi-conducteurs, le courant électrique résulte du déplacement des porteurs libres sous l'action d'une force extérieure. L'origine de cette force peut être soit une excitation par champ électrique, soit par un gradient de concentration à l'intérieur du semi-conducteur [BON03]. Dans le premier cas, le courant est dit de conduction ou d'entraînement, alors que dans le second cas, le courant est dit de diffusion.

2.2.1 Courant de diffusion

Le courant de diffusion apparaît lorsque la densité des porteurs libres est modifiée localement à l'intérieur du semi-conducteur. Ceci est dû soit par des variations de température ou de lumière, soit généralement par un dopage non uniforme ou graduel. Ce gradient de concentration va provoquer un déplacement des porteurs de la région la plus dopée à la région la moins dopée, ce phénomène est appelé processus de diffusion. Le courant de diffusion est donné par la première loi de FICK qui exprime la proportionnalité entre le flux et la variation de concentration :

$$F = -D \frac{dc}{dx} \quad (2.1)$$

Avec D représente le flux :

$$\vec{F} = \frac{j}{q} \quad (2.2)$$

Dans le cas des électrons :

$$F = -\frac{j}{q} \quad (2.3)$$

Alors la densité de courant devient :

$$j_n = qD_n \frac{d_n}{d_x} \quad (2.4)$$

Dans le cas des trous :

$$F = \frac{j}{q} \quad (2.5)$$

Alors la densité de courant devient :

$$j_p = -qD_p \frac{d_p}{d_x} \quad (2.6)$$

Le courant de diffusion total est égal à la somme des deux courants (2.4) et (2.6).

$$j_{diff} = qD_n \frac{d_n}{d_x} - qD_p \frac{d_p}{d_x} \quad (2.6)$$

2.2.2. Courant de conduction

2.2.2.1. Courant de conduction en absence du champ électrique

En absence du champ électrique, la trajectoire des électrons est due à l'agitation thermique. Cette trajectoire est perturbée par des collisions dont l'effet est de répartir aléatoirement le vecteur de vitesses des électrons. La figure (2.3) montre le mouvement d'un électron lorsqu'il se déplace suivi par les collisions en absence du champ électrique :

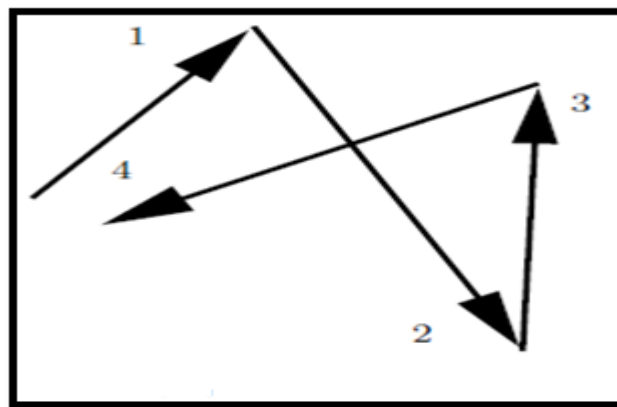


Figure (2.3) : Trajectoire d'un électron en absence du champ électrique [MAS14]

Le mouvement moyen des électrons en absence du champ électrique ainsi que le courant résultant est nul. Dans ce cas, la vitesse moyenne est nulle.

2.2.2.2. Courant de conduction en présence du champ électrique

Lorsqu'on applique un champ électrique, les porteurs de charges (électrons et trous) subissent une force électrique :

$$\vec{F} = e\vec{E} \quad (2.7)$$

Ce qui va entraîner un mouvement moyen de ces porteurs.

Dans ce cas, la conduction dans le matériau peut se faire à deux niveaux :

- Par les électrons de la bande de conduction qui se déplacent dans le sens opposé du champ électrique appliqué.
- Par les trous de la bande de valence qui se déplacent dans le même sens que le champ électrique.

La figure (2.4) montre la trajectoire d'un électron sous l'effet du champ électrique. L'électron est accéléré par la force de Coulomb quand il se déplace au sens opposé du champ électrique, et il est freiné quand il se déplace dans le même sens que le champ électrique. La courbe en pointillé est celle de la figure précédente.

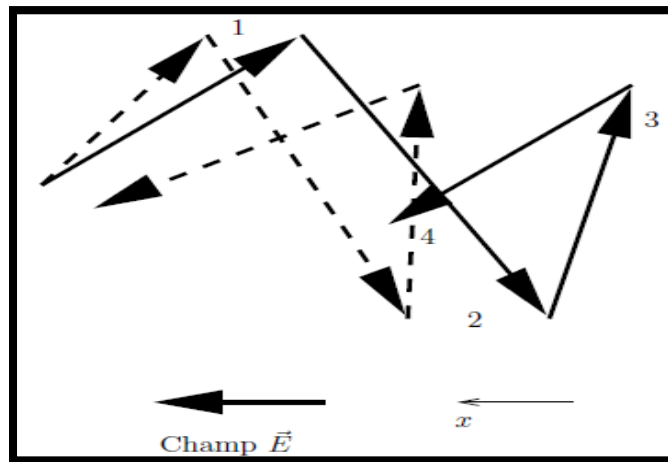


Figure (2.4) : Trajectoire d'un électron en présence d'un champ électrique [MAS14]

Donc, le mouvement moyen des électrons en présence du champ électrique ainsi que le courant résultant n'est pas nul. Dans ce cas, la vitesse moyenne est non nulle et dépend du champ électrique appliqué.

Pour les faibles champs électriques, la vitesse des électrons est donnée en fonction du champ électrique par la relation suivante :

$$\vec{v} = \mu_n \vec{E} \quad (2.8)$$

Où μ_n représente la mobilité des électrons.

Comme la direction des électrons est opposée à celle du champ électrique, la relation (2.8) devient :

$$v_n = -\mu_n E \quad (2.9)$$

Dans ce cas, la densité de courant j_n est exprimée par :

$$\vec{j}_n = (-q)n(-\mu_n \vec{E}) \quad (2.10)$$

Donc :

$$j_n = qn\mu_n E \quad (2.11)$$

Dans le cas des trous, le déplacement se fait dans le même sens que le champ électrique, l'expression de la densité de courant est alors donnée par :

$$j_p = qp\mu_p E \quad (2.12)$$

Le courant de conduction total est égal à la somme des deux courants (2.11) et (2.12).

$$j_{cond} = qn\mu_n E + qp\mu_p E \quad (2.13)$$

Dans le cas général, le courant résulte des deux phénomènes i.e. présence d'un champ électrique et d'un gradient de concentration, il est donné par :

$$j_{total} = qn\mu_n E + qp\mu_p E j_{diff} + qD_n \frac{d_n}{d_x} - qD_p \frac{d_p}{d_x} \quad (2.14)$$

2.3. La dynamique des électrons

Les électrons dans un cristal parfait peuvent être décrits en termes d'onde de Bloch dont les fonctions d'ondes peuvent être écrites comme suite [JAC89] :

$$\Psi_{nk}(r) = u_{n\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (2.15)$$

Avec n est l'index de la bande, $\hbar k$ est la quantité de mouvement des électrons, $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$ est une fonction de période x_0 avec $u_{n\vec{k}}(\vec{r} + x_0 \vec{e}_i) = u_{n\vec{k}}(\vec{r})$ et \vec{k} . Cette fonction permet de calculer les différents états propres correspondants à une énergie E_k . Pour chaque bande n , une valeur de l'énergie des électrons $\varepsilon_n(k)$ est associée à l'état des électrons k . L'ensemble des fonctions $\varepsilon_n(k)$ définit la relation de dispersion des électrons qui relie l'énergie et le vecteur d'onde du cristal qui a pour but de définir la structure de bande des matériaux.

La connaissance de la structure de la bande des matériaux est le point de départ pour l'étude de des propriétés électroniques. Néanmoins, sa détermination théorique est toujours l'un des principaux problèmes de la physique des solides.

En considérant une énergie croissante, les semi-conducteurs sont caractérisés par une bande interdite entre la dernière bande permise occupée par des électrons à $T=0^\circ\text{K}$ qui est dite bande de valence et la première bande permise vide qui est dite bande de conduction.

En effet, à $T=0^\circ\text{K}$, la bande de valence est entièrement occupée par des électrons alors que la bande de conduction est entièrement vide. De ce fait, à $T = 0$, un semi-conducteur se comporte comme un isolant. Lorsque la température augmente, certains électrons quittent la bande de valence et occupent certains états de la bande de conduction. Dans ce cas, les propriétés du transport des semi-conducteurs sont dues à un nombre égal d'électrons et de trous. Si à une température donnée, la conduction électrique est principalement due aux électrons, le semi-conducteur est appelé extrinsèque de type n. Si la conduction est principalement due à des trous, on dit que le semi-conducteur est extrinsèque de type p. Si, enfin, le nombre d'impuretés est négligeable par rapport au nombre d'électrons excités thermiquement de la bande de valence à la bande de conduction, alors le semi-conducteur est intrinsèque.

A l'équilibre thermodynamique, la densité des électrons et des trous est contrôlée par les statistiques de Fermi-Dirac :

$$f(e) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{KT}\right)} \quad (2.16)$$

Où E représente le niveau d'énergie considérée, E_F représente le niveau de Fermi, K représente la constante de Boltzmann et T représente la température.

La représentation de la fonction ci-dessus est donnée dans la figure (2.5) :

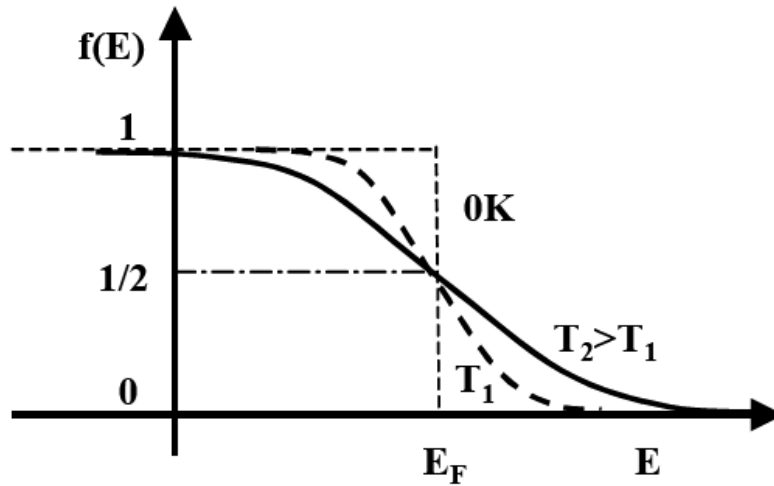


Figure (2.5) : Statistique de Fermi-Dirac [BON03]

Lorsque $E = E_F$ la fonction $f(e) = \frac{1}{2}$.

Lorsque $E \gg E_F$ la fonction $f(e) = 0$.

Lorsque $E \ll E_F$ la fonction $f(e) = 1$.

La variation de cette fonction se produit principalement autour du niveau de Fermi. Lorsque la température décroît, l'allure de la fonction devient de plus en plus abrupte.

L'agitation thermique fait passer sans cesse des électrons des niveaux inférieurs aux niveaux supérieurs, et réciproquement. Cet équilibre est perturbé dès qu'il y a une présence d'un champ électrique. Ce dernier a pour effet d'accélérer les électrons qui vont subir durant leur mouvement des collisions à l'intérieur du cristal. Les électrons sont donc soumis, à la fois, au champ électrique et aux forces de collisions dans le cristal.

Autour du maximum de la bande de valence et du minimum de la bande de conduction, la relation de dispersion $\varepsilon(k)$ peut être écrite comme suite :

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (2.17)$$

Où la seule différence avec un électron libre est la substitution de la masse d'électrons réelle m_0 avec une masse efficace m^* .

Pour des analyses simples des problèmes de transport, l'approximation de la structure de bande ci-dessus peut être suffisante. Mais pour la plupart des applications réelles, une meilleure approximation des structures de bande réelle doit être considérée.

Lorsqu'un champ électromagnétique externe est appliqué dans un cristal, les électrons changent continuellement les états de k suivant la loi suivante [JAC89] :

$$F = \hbar \dot{k} = -e \left(E + \frac{1}{c} v \times B \right) \quad (2.18)$$

Avec e est la charge de l'électron, E et B sont respectivement le champ électrique et magnétique, et v est la vitesse du groupe des électrons, elle est donnée par :

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{dk} \quad (2.19)$$

Dans le cas d'une structure de bande simple, la vitesse est donnée par :

$$v = \frac{\hbar}{m} \kappa \quad (2.20)$$

Dans le transport semi-classique, les électrons sont traités durant le vol libre entre les phénomènes de diffusion comme des particules. Pour que cette approximation soit valable, il est nécessaire de concevoir un paquet d'ondes avec une position et une quantité de mouvement bien définies en prenant en considération les incertitudes.

Si on considère que l'incertitude de la quantité du mouvement soit beaucoup plus petite de la quantité du mouvement des électrons $p = \hbar \kappa$, et qu'en même temps, l'incertitude de position est beaucoup plus petite que le chemin libre moyen $l = v\tau = (p/m)\tau$ (avec τ est le temps moyen entre deux collisions), nous avons $\Delta p \ll p$ et $\Delta x \ll l$.

Alors d'après le principe d'incertitude [JAC89] :

$$\hbar \ll p l = \frac{p^2}{m} \approx K_B T \tau \quad (2.21)$$

Avec, K_B est la constante de Boltzmann.

Donc la validité de l'approche semi-classique est assuré lorsque :

$$\tau \gg \frac{\hbar}{K_B T} \approx 10^{-14} \text{ Seconde.} \quad (2.22)$$

Lorsque l'énergie des électrons considérés est grande (de l'ordre de l'eV), les durées des interactions peuvent s'approcher de la valeur dans l'équation (2.22), alors un traitement quantique du transport est nécessaire [KOH57, KAD62, BAR82], où la nature ondulatoire de la dynamique électronique est entièrement prise en compte.

2.4. Equation de Boltzmann

2.4.1. Fondation de l'équation de Boltzmann

L'étude du transport électronique dans les dispositifs à base de semi-conducteurs est de nature semi-classique. En effet, durant le vol libre, les porteurs de charges sont considérés comme des particules qui se déplacent selon les lois de la mécanique classique. Par contre, lors des traitements de diffusion, les porteurs de charge sont traités par les lois de la mécanique quantique. L'objectif de l'étude du transport électronique consiste en la détermination de l'évolution temporelle de l'état des porteurs. Cette dernière est définie par la fonction de distribution des électrons dans la bande de conduction $f(k, r, t)$ qui représente la probabilité de trouver à un instant t , un porteur positionné dans l'espace aux coordonnées r et présentant un vecteur d'onde k . La modification de la fonction de distribution des électrons provoquée par différentes actions est décrite par l'équation de Boltzmann. Cette équation décrit l'évolution d'un ensemble de particules subissant des collisions durant leurs mouvements et qui se propage en ligne droite entre deux collisions successives [BOU07].

Lorsqu'on applique une force extérieure F sur un système, sa quantité de mouvement varie suivant la loi :

$$\frac{dp}{dt} = F_{ext} \quad (2.24)$$

Avec p est le vecteur de la quantité de mouvement qui est définit par :

$$p = mv = \hbar k \quad (2.25)$$

Où m et v représentent respectivement la masse et la vitesse des électrons, k est le vecteur d'onde et \hbar représente la constante de Planck réduite.

En supposant que l'électron n'est pas soumis aux diffusions et que son état est modifié par une force externe (champ électrique ou magnétique). Après un intervalle dt , l'électron change sa position et son vecteur d'onde initial r et k à une nouvelle position $r + \dot{r} dt$ et vecteur d'onde $k + \dot{k} dt$. Le changement dans la fonction de distribution des électrons dans l'intervalle de temps dt se calcule à l'aide de la figure (2.10). En effet, une particule occupant la position $r - \dot{r} dt$ et le vecteur d'onde $k - \dot{k} dt$ à l'instant $t - dt$, se déplace à l'état $f(k, r, t)$ après l'intervalle dt à l'instant t .

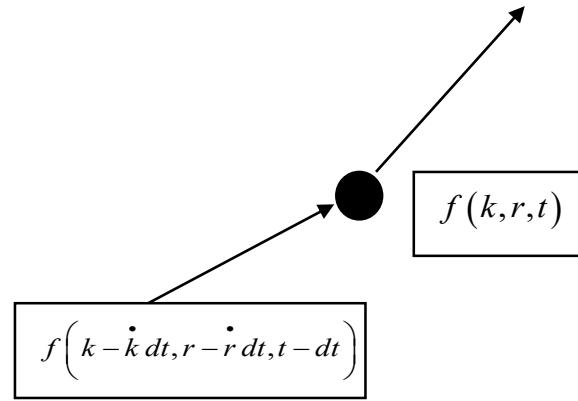


Figure (2.6) : Trajectoire d'un électron et changement de la fonction de distribution [HAM10]

Donc, le changement de la fonction de distribution est donné par :

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{\text{dérive}} = \frac{\left[f\left(k - \dot{k} dt, r - \dot{r} dt, t - dt\right) - f(k, r, t) \right]}{dt} \quad (2.26)$$

Le premier terme à du côté droit changera en $f(k, r, t)$ après un intervalle de temps dt , alors que le second terme $f(k, r, t)$ changera dans un autre état après un intervalle de temps dt . Comme l'interaction d'une particule n'est pas incluse dans cette étape, l'équation précédente représente la trajectoire continue d'une particule.

Le développement de Taylor du premier terme à droite de l'équation ci-dessus s'écrit donc :

$$\begin{aligned} f\left(k - \dot{k} dt, r - \dot{r} dt, t - dt\right) &= f(k, r, t) - \left[\dot{k} \cdot \frac{\partial f}{\partial k} + \dot{r} \cdot \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\partial f}{\partial t} \right] dt + \dots \\ f\left(k - \dot{k} dt, r - \dot{r} dt, t - dt\right) &= f(k, r, t) - \left[\dot{k} \cdot \nabla_k f + \dot{r} \cdot \nabla_r f + \frac{\partial f}{\partial t} \right] dt + \dots \end{aligned} \quad (2.27)$$

Où

$$\dot{k} \cdot \nabla_k f = \dot{k} \cdot \text{grad}_k f = \dot{k}_x \cdot \frac{\partial f}{\partial k_x} + \dot{k}_y \cdot \frac{\partial f}{\partial k_y} + \dot{k}_z \cdot \frac{\partial f}{\partial k_z} \quad (2.28)$$

Et

$$\dot{r} \cdot \nabla_r f = v \cdot \text{grad}_r f = v_x \cdot \frac{\partial f}{\partial x} + v_y \cdot \frac{\partial f}{\partial y} + v_z \cdot \frac{\partial f}{\partial z} \quad (2.29)$$

Avec \dot{k} et \dot{r} sont respectivement la dérivée en fonction du temps du vecteur d'onde et de la position de la particule. L'équation précédente devient donc :

$$\left(\frac{df}{dt} \right)_{\text{dérive}} = - \left[\dot{k} \cdot \nabla_k f + v \cdot \nabla_r f + \frac{\partial f}{\partial t} \right] \quad (2.30)$$

Etant donné que la variation du vecteur d'onde en fonction du temps sous l'influence des forces extérieures est donnée par (2.24), alors l'équation ci-dessus devient :

$$\left(\frac{df}{dt} \right)_{\text{dérive}} = - \left[\frac{1}{\hbar} \cdot F \cdot \nabla \cdot f + v \cdot \nabla_r f + \frac{\partial f}{\partial t} \right] \quad (2.31)$$

D'autre part, la particule subit des collisions qui modifient ses états, le taux de variation de la fonction de distribution en raison des collisions est défini par $\left(\frac{df}{dt} \right)_{\text{coll}}$. Puisque la fonction de distribution des électrons doit satisfaire la condition d'équilibre, alors on obtient :

$$\left(\frac{df}{dt} \right)_{\text{dérive}} + \left(\frac{df}{dt} \right)_{\text{coll}} = 0 \quad (2.32)$$

En remplaçant l'équation $\left(\frac{df}{dt} \right)_{\text{dérive}}$ de cette dernière équation par (2.32), on obtient alors :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_r f + \frac{1}{\hbar} \cdot F \cdot \nabla \cdot f = \left(\frac{df}{dt} \right)_{\text{coll}} \quad (2.33)$$

Cette dernière équation est appelée équation de transport de Boltzmann [HAM10]. Le premier terme correspond à la variation de la fonction de distribution en fonction du temps, le second terme prend en considération la variation de la fonction de distribution résultants des gradients de concentration, alors que le troisième terme représente l'effet des forces extérieures données par l'équation suivante :

$$F = -e \times (E + v.B) \quad (2.34)$$

Où E et B représentent respectivement le champ électrique et magnétique. La vitesse v est donnée par la relation :

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k} \quad (2.35)$$

Le deuxième membre de l'équation représente les effets de collisions dues aux imperfections du réseau qui perturbent le mouvement des électrons.

En considérant un cristal uniforme et en supposant que la fonction de distribution soit indépendamment de la position r , la fonction de distribution s'écrit alors sous la forme $f(k)$.

Le taux de variation de la fonction de distribution $f(k)$ comprend deux termes. En effet, les collisions induites par les imperfections du cristal provoquent la transition d'un électron d'un état k à un état k' avec la densité de probabilité $P(k, k')$ d'une part, et provoque également la transition d'un état k' à un état k avec la densité de probabilité $P(k', k)$ d'autre part. Le terme de collision est écrit alors :

$$\left(\frac{df}{dt} \right)_{coll} = \sum_{k'} \left\{ P(k', k) f(k') [1 - f(k)] - P(k, k') f(k) [1 - f(k')] \right\} \quad (2.36)$$

Où le terme $[1 - f(k)]$ représente la probabilité de non occupation d'un état, permettant de tenir en compte le principe d'exclusion de Pauli. Dans les matériaux non-dégénérés, le nombre d'états occupés dans l'espace des vecteur d'ondes est largement inférieur au nombre total d'états disponibles, l'état k' est alors pratiquement toujours libre. En remplaçant cette dernière équation dans l'équation de Boltzmann, on obtient une équation intégral-différentielle sous la forme suivante :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_r f + \frac{1}{\hbar} \cdot F \cdot \nabla_k f = \sum_{k'} \left\{ P(k', k) f(k') [1 - f(k)] - P(k, k') f(k) [1 - f(k')] \right\} \quad (2.37)$$

Comme on peut le constater à partir de l'équation de Boltzmann et des équations (2.34) et (2.35), les connaissances de base requises pour l'analyse de tout phénomène de transport électronique concernent la structure de bande du matériau considéré. Cependant, la complexité de cette équation dépend fortement des modèles utilisés de la structure de la bande et des mécanismes de collisions.

Le facteur $f(k')[1-f(k)]$ de $P(k',k)$ représente la probabilité d'occupation des électrons dans l'état initial k' et la probabilité des électrons vacant dans l'état final k .

En considérant le cas où le niveau de Fermi se situe au-dessous du bas de la bande de conduction, alors, les conditions $f(k) \ll 1$ et $f(k') \ll 1$ sont vérifiées. En définissant la fonction de distribution à l'équilibre thermodynamique par $f_0(k)$, on aura donc $\left(\frac{df}{dt}\right)_{coll} = 0$,

et on obtient la relation suivante :

$$P(k',k)f_0(k') = P(k,k')f_0(k) \quad (2.38)$$

Cette relation est appelée principe de l'équilibre détaillé qui est formulée pour les systèmes cinétiques qui se décomposent en processus élémentaires. A l'équilibre, chaque processus élémentaire doit être équilibré par son processus inverse [JAC89].

L'équation (2.36) devient donc :

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{coll} = -\sum_{k'} P(k,k') \left[f(k) - f(k') \frac{f_0(k)}{f_0(k')} \right] \quad (2.39)$$

En remplaçant la sommation de k' par un intégral on obtient :

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{coll} = -\frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k' P(k,k') \left[f(k) - f(k') \frac{f_0(k)}{f_0(k')} \right] \quad (2.40)$$

Ou V représente le volume du cristal. Lorsque les forces extérieures sont très faibles et que le déplacement de la fonction de distribution à partir de l'équilibre thermique est faible, nous pouvons écrire :

$$f(k) = f_0(k) + f_1(k) \quad (2.41)$$

Avec $f_1(k) \ll f_0(k)$.

En supposant que le changement de l'énergie dû aux collisions est très petit et que l'énergie de l'état initial est très proche de celle de l'état final, c'est-à-dire que c'est une interaction élastique, alors on peut dire que :

$$f_0(k) \cong f_0(k') \quad (2.42)$$

Dans ce cas, à partir de l'équation (2.40), on obtient la relation suivante :

$$\begin{aligned} \left(\frac{df}{dt}\right)_{coll} &= -f_1(k) \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k' P(k, k') \left[1 - \frac{f_1(k')}{f_1(k)}\right] \\ &\equiv -\frac{f_1(k)}{\tau(k)} \equiv -\frac{f(k) - f_0(k)}{\tau(k)} \end{aligned} \quad (2.43)$$

Où $\tau(k)$ est appelé temps de relaxation de la collision et est donné par :

$$\frac{1}{\tau(k)} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k' P(k, k') \left[1 - \frac{f_1(k')}{f_1(k)}\right] \quad (2.44)$$

Le temps de relaxation est le temps moyen ou l'électron perd sa quantité de mouvement originale due à une interaction. En d'autres termes, il caractérise l'ordre de grandeur du temps au bout duquel le nouvel équilibre est atteint. Le temps de relaxation dépend du vecteur d'onde électronique k et donc de l'énergie. Cette approximation est appelée l'approximation du temps de relaxation.

Une fois que les électrons atteignent l'état stationnaire sous un champ externe, le champ externe est éliminé à l'instant $t = 0$ et nous avons $\left(\frac{df}{dt}\right) = \left(\frac{df}{dt}\right)_{coll}$ à partir de l'équation de Boltzmann.

Lorsque nous supposons l'approximation du temps de relaxation et que nous utilisons l'équation (2.43), on peut écrire :

$$\left(\frac{df}{dt}\right) = \left(\frac{df}{dt}\right)_{coll} = -\frac{f - f_0}{\tau} \quad (2.45)$$

En supposant que le temps de relaxation τ est constant, et lorsque l'approximation du temps de relaxation est valide, l'équation de transport de Boltzmann s'écrit donc sous la forme :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \cdot F \cdot \nabla_r f + v \cdot \nabla_r f = -\frac{f - f_0}{\tau} \quad (2.46)$$

Dans les conditions linéaires, une telle hypothèse est justifiée pour de nombreux matériaux d'intérêt. L'équation (2.45) décrit un phénomène de relaxation : si la distribution d'électrons est initialement perturbée et, à $t = 0$, la perturbation est éliminée, la relaxation exponentielle à l'équilibre est contrôlée par le temps caractéristique τ suivant la relation :

$$f_1(t) = f_1(t)_{t=0} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (2.47)$$

L'intégrale de collision peut s'exprimer de manière rigoureuse sous forme de temps de relaxation uniquement dans deux cas : des collisions aléatoires de vitesse et des collisions élastiques.

Dans le cas du régime linéaire, la fonction de distribution du porteur en énergie n'est pas modifiée par rapport à l'équilibre, et τ ne représente que le temps de relaxation. Dans le cas du régime non linéaire, il est nécessaire d'introduire, si possible, un temps supplémentaire de relaxation de l'énergie [CON67].

2.4.2. Domaine de validité de l'équation de Boltzmann

Pour que l'équation de Boltzmann soit valide, il est nécessaire de prendre en considération quelques conditions parmi lesquelles :

- Les collisions sont supposées instantanées, c'est-à-dire que la durée d'une collision doit être négligeable devant le temps du vol libre séparant deux collisions successives, sinon une même particule peut se retrouver sous l'influence de deux diffusions simultanément.
- Il faut aussi que la distance parcourue par les électrons durant le vol libre doit être négligeable devant la longueur totale pour qu'un nombre important d'interactions soit considéré.

2.5. Mécanisme d'interactions

Lors de l'étude du transport semi-classique, l'analyse des mécanismes d'interactions est indispensable, car ce sont elles qui contrôlent les phénomènes se produisant dans le semi-conducteur et qui fixent leurs performances, notamment les taux de remplissage des différentes vallées des bandes de conduction, la vitesse moyenne, l'énergie moyenne, etc [SAY10]. Ces interactions sont supposées indépendantes du champ appliqué, et sont présumées de se produire instantanément. Pour décrire d'une manière efficace le transport électronique, un nombre important d'interaction doit être considéré.

2.5.1. Classification des interactions

Dans l'étude de transport de charges dans les semi-conducteurs, les interactions que subissent les électrons durant leurs trajectoires peuvent être classées en deux catégories :

- Lorsque les électrons après l'interaction se situent dans la même vallée, on dit que c'est une interaction intra-vallée.
- Lorsque les électrons après l'interaction se situent dans deux vallées différentes, on dit que c'est une interaction inter-vallée.

Les interactions peuvent être aussi classées d'une autre manière suivant la nature de l'interaction :

- Lorsque l'énergie finale des électrons reste inchangée, on dit que c'est une interaction élastique. Dans ce cas, les propriétés ondulatoires de l'électron restent inchangées le long de la distance parcourue. Ce type d'interaction n'a pas généralement une grande influence sur le comportement des électrons car ils ne sont pas déviés de leur trajectoire.
- Par contre, lorsque l'énergie finale des électrons change, on dit que c'est une interaction inélastique. Ces interactions sont caractérisées par un échange d'énergie dont la valeur dépend soit de l'énergie des phonons, soit au transfert des porteurs de la vallée centrale aux vallées latérales et réciproquement.

Dans le cas des trous, les transitions sont appelées intra-bande ou inter-bande.

Les sources de diffusion les plus importantes déterminant ces transitions sont les interactions avec le réseau cristallin, les défauts et les autres porteurs comme on le voit dans la figure (2.6).

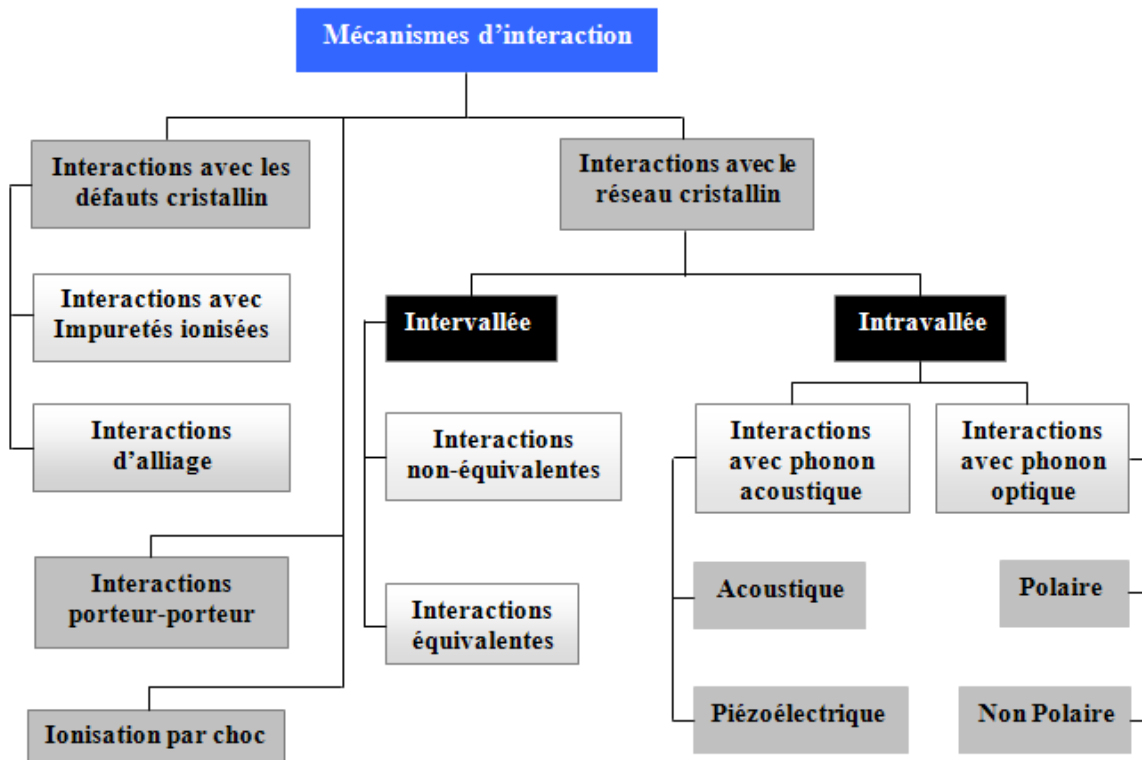


Figure (2.7) : Principaux mécanismes d'interactions dans les semi-conducteurs [SAY10]

2.5.1.1. Interactions avec le réseau cristallin

Dans les matériaux semi-conducteurs, les atomes sont organisés et forment des structures cristallines bien définies. Lorsque la température est nulle $T = 0^\circ \text{K}$, les atomes sont fixés dans leurs positions d'équilibre. Lorsque la température augmente, l'agitation thermique fait vibrer les atomes autour de leurs positions d'équilibre avec une pulsation ω . Plus la température est élevée, plus les vibrations du réseau cristallin sont importantes. Cependant, l'énergie des vibrations est quantifiée $\hbar \omega$, et le quantum d'énergie est appelé phonon par analogie avec les photons. De ce fait, les collisions avec les phonons sont alors plus fréquentes.

Il est important de noter que les phonons ne sont pas des vraies particules et n'ont pas d'existence propre. Néanmoins, ils existent que parce que le réseau existe et que les atomes vibrent. Toutefois, ils se comportent à l'intérieur du cristal comme des vraies particules et sont traités ainsi.

Dans un cristal 3D, l'espace réciproque devient également 3D, ils s'ajoutent aux modes longitudinaux acoustiques et optiques deux modes transversaux polarisés à 90° l'un de l'autre. Ceci est illustré sur la figure (2.7) :

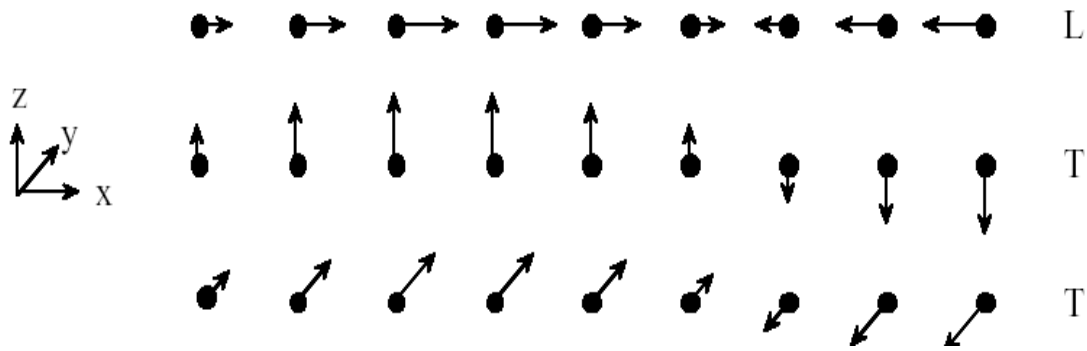


Figure (2.8) : Le mode de vibration longitudinal et les deux modes transversaux

Les phonons acoustiques sont associés aux modes de vibration correspondant à des atomes voisins vibrant en phase.

Les phonons optiques sont associés aux modes de vibration correspondant à des atomes voisins vibrant en opposition de phase.

L'interaction des porteurs de charges avec les phonons est due soit à la déformation du cristal autrement parfait produite par les phonons à travers le mécanisme de potentiel de déformation, soit à travers les forces électrostatiques produites par les ondes de polarisation qui accompagnent les phonons.

Comme il existe deux types de phonons (acoustiques et optiques), alors il existe quatre types d'interactions avec le réseau cristallin dans le cas des interactions intra-vallées.

2.5.1.1.1. Interactions Acoustiques

Le mode de vibration acoustique introduit un changement de la structure et déforme le cristal, le potentiel résultant de cette variation est le potentiel de déformation, ce qui engendre une interaction acoustique dite de déformation. Le transfert d'énergie maximum pour ce type d'interaction est en général beaucoup plus petit que l'énergie de l'électron de telle sorte qu'on ne distingue souvent pas les cas d'absorption et d'émission des phonons. De ce fait, la diffusion acoustique est traitée comme un processus élastique. Durant cette interaction, le porteur reste dans la même vallée car le phonon acoustique a une faible valeur d'énergie. Ce type d'interaction est dominant dans les semi-conducteurs intrinsèques à la température ambiante [FAD83].

2.5.1.1.2. Interactions piézoélectriques

L'interaction électrostatique, typique des matériaux polaires, est appelée interaction piézoélectrique pour les phonons acoustiques. La présence du champ de polarisation par les vibrations thermiques à des longueurs d'ondes acoustiques ce traduit par un effet piézoélectrique pour modifier le parcours du porteur et causer une diffusion [BOU07]. Ce mécanisme conduit à une interaction qui diminue avec l'augmentation de l'énergie des électrons. Cette interaction devient importante dans les cristaux piézoélectriques aux faibles températures et champs électriques, en particulier dans les matériaux à haute pureté. C'est une interaction élastique qui ne provoque aucune déviation de la trajectoire de l'électron.

2.5.1.1.3. Interactions optiques polaires

L'interaction électrostatique est appelée interaction polaire quand il s'agit des phonons optiques. Les interactions optiques polaires sont importantes dans toutes les vallées et sont caractérisées par une absorption ou émission d'un phonon optique.

$$\varepsilon' = \varepsilon \pm \hbar \quad (2.48)$$

Ces interactions deviennent prépondérante dès l'énergie des électrons est supérieure à l'énergie des phonons optiques. Cette interaction est inélastique, l'électron qui est entraîné par le champ électrique est donc dévié de sa trajectoire sous l'effet de cette interaction.

2.5.1.1.4. Interactions optiques non polaires

L'interaction des porteurs de charge avec les phonons optiques due au potentiel de déformation est dite interaction optique non polaires. Les interactions des électrons avec les phonons optiques non polaires sont inélastiques et intra-vallées, au cours de cette interaction, un phonon est échangé [BIR74].

2.5.1.1.5. Interactions inter-vallées

Toutes les interactions précédentes sont des interactions intra-vallées, c'est-à-dire que la vallée de départ et d'arrivée est la même. La diffusion inter-vallée provoque un transfert des porteurs de la vallée centrale aux vallées satellites. Il existe deux types de transferts ; vers les vallées équivalentes et vers les vallées non équivalentes.

- Les interactions vers les vallées équivalentes se font entre les vallées équivalentes $L \Leftrightarrow L$ et entre les vallées équivalentes $X \Leftrightarrow X$.

- Par contre, les interactions vers les vallées non équivalentes se fait entre les vallées $\Gamma \Leftrightarrow L$, $\Gamma \Leftrightarrow X$ et $L \Leftrightarrow X$.

Ces interactions sont accompagnées par une absorption ou par une émission d'un phonon dont la valeur dépend de l'écart d'énergie entre la vallée de départ et d'arrivée [HAM07]. 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. Ces interactions sont le processus le plus important parmi toutes les autres interactions. Ceci est dû à leur forte probabilité et à leur conséquence sur le comportement de l'électron.

Quand un électron est transféré de la vallée centrale aux vallées satellites, sa vitesse moyenne diminue car, d'une part, dans ces vallées, la mobilité des électrons est plus faible que celle de la vallée centrale, et d'autre part, les directions de vecteurs de vitesses sont aléatoires après une telle interaction.

Ces interactions sont responsables de la mobilité différentielle négative à l'origine de l'effet Gunn dans Ge [FAW71, JAC81] et dans la plupart des semi-conducteurs composés [QUA71]. La figure (III.3) montre la variation de la vitesse des électrons en fonction du champ électrique :

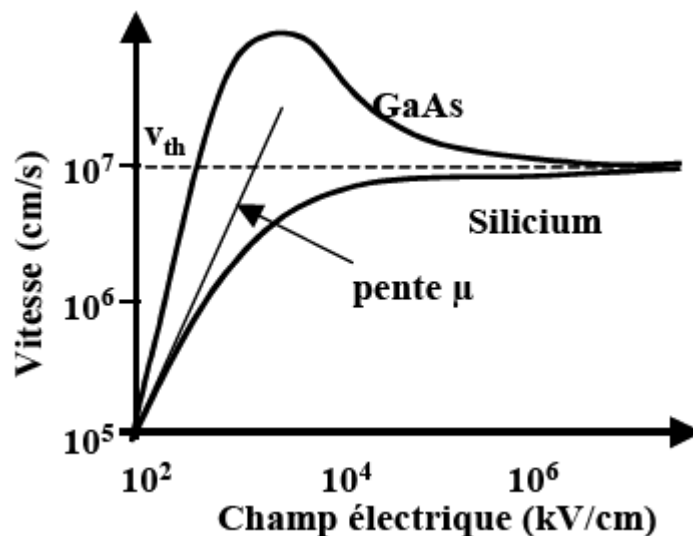


Figure (2.9) : Variation de la vitesse des électrons en fonction du champ électrique [BON03]

Cette variation de la vitesse montre que si on conserve la définition habituelle de la mobilité comme étant le rapport entre la vitesse électronique et le champ électrique appliqué $\vec{v} = \mu_n \vec{E}$. Alors, on conclue que la mobilité n'est pas constante et varie fortement avec l'énergie des électrons.

2.5.1.2. Interactions avec les défauts

Les interactions avec les défauts sont généralement élastiques et n'ont pas généralement une grande influence sur le parcours des électrons. Il existe 3 principaux types de diffusions avec les défauts.

2.5.1.2.1. Interaction avec les impuretés ionisées

Cette interaction est du type Coulombienne. En raison de la nature électrostatique de l'interaction, l'efficacité de la diffusion des impuretés ionisées diminue à mesure que la température du cristal augmente. Du coup, lorsque le champ électrique augmente, l'effet de la diffusion de Coulomb diminue.

2.5.1.2.2. Interaction avec les impuretés neutres

Les impuretés neutres ont des sections transversales très faibles à des concentrations normales (autour de 10^{16} cm^{-3}). Ils influencent sur le processus de transport uniquement à des températures très basses du fait qu'à la température ambiante, les électrons sont généralement tous ionisés [NOR72].

2.5.1.2.3. Interaction des alliages

Dans les alliages ternaires et quaternaires, la stœchiométrie du réseau n'est pas respectée, les fluctuations de la composition créent un changement de potentiel à l'échelle atomique. Cette différence de potentiel influe sur le mouvement du porteur et l'oblige à changer sa direction durant son parcours. Ce mécanisme est généralement appelé interactions d'alliages [HAU76].

2.5.1.2.4. Interaction des surfaces

Comme un porteur se déplace à la surface d'une région définie ou à l'interface entre deux régions différentes, les ondulations du profil de potentiel à l'interface peuvent provoquer une interaction supplémentaire appelée interaction de surface [HAR76]. L'effet d'un tel mécanisme est plus prononcé lorsque le phénomène de transport se produit dans un canal étroit proche de l'interface. De plus, cet effet est comparativement plus fort à basse température lorsque la contribution du phonon est plus petite. Ces interactions sont généralement considérées comme élastiques.

2.5.1.2.5. Interaction Génération-recombinaison

Ces deux processus sont très importants dans les dispositifs électroniques car ils modifient le nombre de particules actives. La génération-recombinaison se produit habituellement sous l'effet d'une excitation thermique ou électromagnétique. Dans le processus de génération, en absorbant un quantum d'énergie, un électron entre dans la bande de conduction, laissant un état inférieur, tandis que dans la recombinaison, le processus inverse se produit. Si le rayonnement est suffisamment énergétique, la transition des électrons peut se produire de la bande de valence à la bande de conduction, et dans ce cas, une paire électron-trou est créée simultanément.

2.5.1.3. Interaction avec les porteurs

Parmi les mécanismes de diffusion des électrons dans le transport électronique qui existent, l'interaction entre les porteurs est la plus difficile à traiter car, dans ce cas, la probabilité de diffusion dépend de la fonction de distribution, qui est-elle même la fonction inconnue à déterminer. Du coup, l'interaction entre les porteurs rend l'intégrale de collision dans l'équation de Boltzmann non linéaire. Nous pouvons nous concentrer brièvement sur les deux types les plus importants de diffusion des porteurs-porteurs, impliquant respectivement les interactions électron-électron et les interactions électron-trou. Ce type d'interaction apparaît lorsque la densité des porteurs intrinsèques n_i est très grande.

2.5.2. Interactions prépondérantes dans les semi-conducteurs

Lorsque les électrons subissent des interactions durant leurs trajectoires, il y a ceux qui ont une influence beaucoup plus importante que les autres. Ceci est dû suivant la nature du champ électrique appliqué ainsi que la position des électrons dans la bande de conduction. Dans cette partie, on va résumer les interactions prépondérantes dans les semi-conducteurs en fonction du champ électrique.

2.5.2.1. Champ électrique faible

Lorsqu'un électron dérive dans un matériau sous l'effet d'un champ électrique, il gagne de l'énergie sous forme cinétique et la transmet progressivement au cristal par le biais des nombreuses collisions qu'il effectue avec les phonons du réseau. Dans la vallée centrale et à faible champ électrique, les électrons ont une énergie équivalente avec celle des phonons acoustiques. Les interactions se font principalement avec les interactions acoustiques. Ces

dernières sont des interactions élastiques et isotropes, dans ce cas, on ne distingue pas les cas d'absorption et d'émission de phonons.

2.5.2.2. Champ électrique moyen

Lorsque le champ électrique est moyen, les électrons possèdent une énergie supérieure à celle des phonons optiques polaires et peuvent émettre des phonons optiques. L'énergie des électrons varie alors d'une quantité égale à l'énergie du phonon optique. Dans ce cas, les interactions prépondérantes sont les interactions optiques polaires. Ces interactions sont inélastiques et donnent une déviation du vecteur de vitesse de l'électron, qui décroît quand l'énergie augmente. La probabilité d'émission est supérieure à la probabilité d'absorption.

2.5.2.3. Champ électrique fort

Lorsque le champ électrique devient fort, l'énergie des électrons augmente jusqu'à avoir une énergie supérieure à l'énergie de séparation entre la vallée centrale et les vallées satellites où les électrons peuvent transiter. Ces interactions sont isotropes, ont une probabilité élevée et influent beaucoup sur le déplacement de l'électron dans les forts champs électriques. Ce processus devient le plus important parmi toutes interactions possibles. Les phonons qui entrent en jeu dans les transferts inter-vallées sont ce qui se situe au bord de la zone de Brillouin, car leur vecteur d'onde k_0 est grand devant celui de l'électron dans la vallée centrale. Dans les vallées satellites, les masses effectives des électrons sont très grandes par rapport aux masses effectives de la vallée centrale. Ceci va leur permettre d'avoir des mobilités beaucoup plus faible que dans la vallée centrale.

Lorsque le champ électrique devient plus fort et dans le cas des matériaux de petite largeur de bande interdite, certains électrons peuvent au cours d'un vol libre acquérir une énergie de telle sorte que leur impact sur un atome du réseau cristallin aboutit à la rupture d'une liaison et à la création d'une paire électron-trou, c'est le cas de l'ionisation par impact.

2.5.2.4. Ionisation par impact

Dans les champs électriques intenses, un électron ayant une énergie suffisante au cours du vol libre peut céder de l'énergie à un autre électron lié à la bande de valence. Grâce à cette énergie, l'électron lié devient libre et crée une paire électron-trou. Si la particule nouvellement créée, sous l'effet d'un champ externe, gagne assez d'énergie pour générer d'autres porteurs, un processus d'avalanche peut se produire et dans certains cas, entraîner la destruction du cristal. Étant donné que les mécanismes d'ionisation par impact et de génération-recombinaison

modifient le nombre de porteurs conducteurs, ils sont des sources de bruit importantes. Cet effet étant d'autant plus important que le gap du matériau est petit ; l'énergie de seuil de l'ionisation par impact est approximativement de $3/2 E_g$. La figure ci-dessous montre l'état des électrons avant et après l'ionisation par impact.

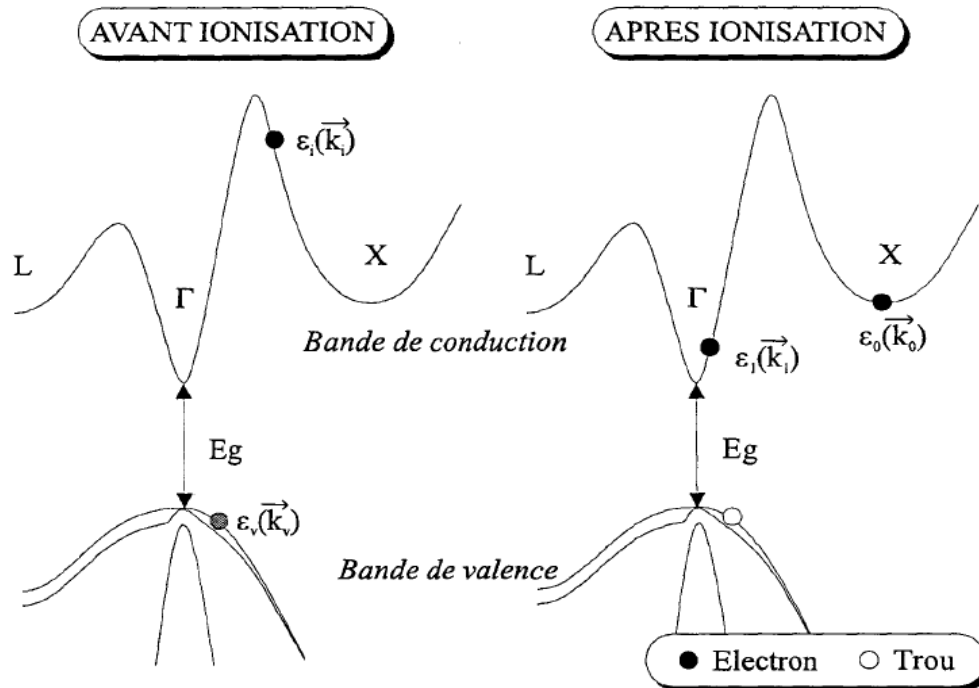


Figure (2.10) : Etat d'avant et après ionisation [DES98]

2.5.3. Influence de la température sur les interactions

Dans un semi-conducteur, Les probabilités de collisions des électrons sont très sensibles aux variations de la température. Cette dernière a pour effet d'augmenter les vibrations du réseau cristallin et de l'énergie thermique, donc des probabilités d'interactions.

Les principales interactions qui augmentent avec la température sont les interactions optiques polaires du fait que les vibrations des phonons deviennent importantes lorsque la température augmente. L'augmentation de température provoque également une augmentation de la probabilité des interactions inter-vallées d'absorptions. La probabilité des interactions inter-vallées d'émissions n'est par contre pas très influencée par la température puisqu'à n'importe quelle température, l'électron peut revenir à des positions inférieures.

Ces augmentations provoquent une diminution de la vitesse maximale des électrons dans le régime stationnaire.

2.6. Différents régimes du transport électronique

Dans l'étude du transport électronique sous l'effet du champ électrique, il existe différents régimes auxquels les électrons sont soumis durant leurs parcours.

2.6.1. Le régime stationnaire

Le régime stationnaire est défini dans le cas général comme un processus physique indépendant du temps. Dans le cas d'un semi-conducteur soumis à un champ électrique, les électrons sont accélérés et leur énergie va augmenter considérablement avec le champ électrique d'une part, et sont freinées par la suite sous l'effet des collisions d'autre part, ce qui va globalement ralentir leur mouvement. Dans le cas général, le régime stationnaire est défini comme étant le régime où il y a un équilibre entre l'accélération des électrons diffusés vers les vallées supérieures due au champ électrique et le freinage sous l'effet des différents types d'interactions, c'est-à-dire que lorsque les électrons ont subi un nombre suffisant d'interactions. Pour cela il faut que la distance parcourue soit plus grande que le libre parcours moyen. En présence du champ électrique, la vitesse moyenne est non nulle dans la direction de ce champ et est appelée vitesse de dérive. Par contre, dans le cas de l'équilibre thermodynamique, les électrons sont animés d'un mouvement brownien et la vitesse moyenne qui en résulte est nulle.

2.6.2. Le régime non-stationnaire

Avant d'atteindre le régime stationnaire, c'est-à-dire qu'aux tous premiers instants sous l'effet d'un champ électrique fixe, l'accélération des électrons est très rapide car peu d'interactions ont eu lieu. Dans ce cas, les vitesses électroniques sont supérieures aux vitesses dans le régime stationnaire, il apparaît donc des pics de vitesse qu'on les nomme les pics de survitesse. Il est donc important de prendre en compte dans cette partie les effets des différents champs électriques sur les vitesses électroniques. Les pics de survitesse commencent à apparaître lorsque le champ électrique atteint le champ critique.

Dans le cas où les électrons n'ont pas encore effectué des interactions, le régime est nommé le régime balistique. Il est souvent observé dans les dispositifs ultracourts surtout dans les transistors MOSFET où la longueur de grille est fortement submicronique, c'est-à-dire que la longueur du canal est de l'ordre du libre parcours moyen que parcourt l'électron. Pendant la traversée de ce type de canal, le nombre d'interactions subies par les électrons est très faible et parfois nul, le porteur est alors qualifié de balistique [SAI05].

2.7. Les approches de résolution de l'équation de Boltzmann

Trouver une solution à l'équation de Boltzmann a toujours été un domaine de recherche important dans la physique des semi-conducteurs. Cette équation de type intégral-différentielle s'étend sur trois dimensions et a des variables dans l'espace réel et celui des vecteurs d'ondes y compris le temps. Vu cette complexité, il est donc très difficile de trouver des solutions analytiques exactes à cette équation. Néanmoins, il est possible d'obtenir des solutions analytiques dans certains cas, ceci est dû lorsque des hypothèses doivent être faites afin de rendre le problème plus léger. Cependant, même dans le cas d'une réponse linéaire, avec des mécanismes de diffusion très simples, des approximations sont nécessaires. Ceci réduit considérablement la qualité des résultats obtenus.

Afin d'obtenir des solutions plus précises, il est préférable d'utiliser des techniques numériques pour la résolution directe de l'équation de Boltzmann. En effet, grâce au développement de l'informatique et au développement des techniques numériques très efficaces, un grand pas vers la solution de l'équation de Boltzmann a été réalisé qui est en mesure de fournir une description exacte et précise des propriétés de transport électronique d'un matériau donné une fois qu'un modèle théorique adéquat de ses propriétés microscopiques est donné.

Lorsqu'on fait varier des hypothèses sur des valeurs déterminées, on est dans le cas d'un modèle déterministe. Par contre, lorsqu'on fait varier des hypothèses d'une manière aléatoire, on est dans le cas d'un modèle stochastique. Ce dernier nécessite l'utilisation des variables aléatoires [POU88].

2.7.1. Modèles Déterministes

2.7.1.1. Modèle hydrodynamique

Les modèles déterministes sont des modèles permettant de résoudre d'une façon simplifiée l'équation de Boltzmann en supposant que la fonction de distribution ne dépend que de l'énergie moyenne des porteurs [MAR90, POU88]. De plus, les interactions sont prises en considération en utilisant l'approximation des temps de relaxation. Dans le cas des dispositifs électroniques, les équations prises en compte dans ce modèle sont les suivantes [LEP96] :

2.7.1.1.1. Equation de Poisson

Cette équation établit la relation entre la variation du potentiel (champ) électrostatique et la densité de charge locale, elle est donnée par l'équation (2.49) :

$$\nabla V(x, y) = -\frac{\rho(x, y)}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \quad (2.49)$$

Où ε_0 et ε_r sont respectivement la permittivité du vide et la permittivité propre à chaque matériau, $\rho(x, y)$ représente la densité des charges et est égale à :

$$\rho = q(p + N_D^+ - n - N_A^-) \quad (2.50)$$

Où N_D^+ et N_A^- sont la densité des impuretés ionisées des donneurs et des accepteurs, n et p représentent la densité des électrons et des trous libres. Le champ électrique est défini dans le cas général comme une dérivée de potentiel, il s'écrit sous la forme suivante :

$$E(x, y) = -\nabla V(x, y) \quad (2.51)$$

2.7.1.1.2. Equation de conservation du courant

Cette équation décrit la variation de la concentration des électrons (trous) en fonction de tous les processus agissant sur le transport électronique, telle que la dérive, la diffusion, la génération et la recombinaison des porteurs, elle s'écrit par la relation suivante [HAD99] :

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \frac{1}{q} \nabla J = -(R - G) \quad (2.52)$$

Où J représente la densité de courant qui est la somme du courant dérive et du courant de diffusion, R et G représentent respectivement le taux de recombinaison et de génération des électrons.

2.7.1.1.3. Equation de conservation du moment

L'équation de conservation du moment est donnée par la relation suivante :

$$\frac{\partial (nm^* v)}{\partial t} + \nabla (nm^* v^2) = -qnE - \nabla (nk_B T_e) - \frac{nm^* v}{\tau_m} \quad (2.53)$$

Où m^* représente la masse effective des électrons, τ_m est le temps de relaxation des électrons.

Le terme de gauche représente la différentielle totale de la quantité de mouvement des électrons, alors que le terme de droite représente la somme des forces exercées sur les électrons.

2.7.1.1.4. Equation de conservation de l'énergie

L'équation de conservation de l'énergie est donnée par la relation suivante :

$$\frac{\partial(nw)}{\partial t} + \nabla_r S - EJ = -n \frac{w - w_0}{\tau_w} - (R - G)w \quad (2.54)$$

Avec

$$S = Q - (w + k_B T_e) \frac{J}{q} \quad (2.55)$$

Où τ_w est le temps de relaxation de l'énergie des porteurs de charges, w_0 représente l'énergie moyenne à l'équilibre thermodynamique.

2.7.1.1.5. Equation du bilan énergétique

Le terme de l'énergie moyenne des porteurs de charges s'écrit dans le cas général comme la somme de l'énergie cinétique relative au mouvement des électrons sous l'effet du champ électrique, ainsi que l'énergie thermique qui traduit le caractère aléatoire du mouvement. Elle s'exprime par la relation suivante :

$$w = \frac{1}{2} m^* v^2 + \frac{1}{2} k_B T_e \quad (2.56)$$

2.7.1.2. Modèle de dérive diffusion

Le modèle de dérive diffusion est également un modèle déterministe, il part du modèle hydrodynamique suivi de quelques hypothèses simplificatrices faites sur ces équations. Il se compose également de l'équation de Poisson (2.49), l'équation de conservation de charge (2.51).

2.7.2. Modèles stochastiques

L'application des méthodes stochastiques de Monte Carlo à l'étude de transport de charges dans les semi-conducteurs a été introduite par Kurosawa à la conférence des semi-conducteurs de Kyoto en 1966 [KUR66].

La méthode de Monte Carlo est de loin la méthode la plus utilisée des deux techniques numériques. Cette méthode, consiste à suivre au cours du temps la trajectoire des électrons durant leurs mouvements dans l'espace réel et dans l'espace réciproque des vecteurs d'onde [FAW70, FAW71, PRI79].

Etant une simulation directe de la dynamique des porteurs de charges, cette technique permet d'extraire toute information physique requise dans l'étude du transport électronique. De plus, elle permet de simuler des situations physiques particulièrement inaccessibles par l'expérience et même d'étudier le comportement des matériaux ou des alliages non existants afin d'extraire les caractéristiques physiques du phénomène étudié. Cette méthode sera présentée et détaillée dans le chapitre suivant.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons fait une étude sur les principaux phénomènes intervenant dans le transport électronique ainsi que la des différents types de collisions. La connaissance de l'équation de Boltzmann et des modèles utilisés pour la résoudre sont le point de départ de chaque étude du transport électronique. Dans le chapitre suivant, nous allons présenter le simulateur utilisé dans notre étude qui n'est d'autre que le simulateur Monte Carlo appliqué au transport électronique.

Chapitre III

Présentation de la Méthode Monte Carlo

Introduction

Lors de la conception des composants électroniques, plusieurs étapes de réalisation technologique doivent être considérées de telle sorte qu'il est possible de faire des erreurs à chaque procédé technologique. Ces erreurs vont se traduire à la fin du processus à un mal fonctionnement de ces composants et par conséquent des circuits électroniques. Ces erreurs vont également conduire à une perte de temps et du cout de fabrication. Pour remédier à ce problème, l'utilisation des outils de simulation est inévitable et permet de définir la structure idéale avant toute fabrication de dispositifs électroniques. Ces structures serviront par la suite de référence pour la réalisation pratique d'une part, et pour minimiser le temps et les couts engendrés par les multiples étapes de réalisation d'autre part.

Par ailleurs, bien souvent, les problèmes scientifiques conduisent à une évaluation d'intégrales ou à une résolution d'équations différentielles traduisant des couplages entre des phénomènes physiques se produisant dans la réalité. Ces types d'équations sont malheureusement très difficiles, voire impossible à résoudre analytiquement. Il est donc nécessaire d'utiliser des solutions alternatives pour résoudre un tel processus. Dans le cas de l'étude des phénomènes physiques décrivant le comportement des porteurs de charges dans les matériaux ainsi que dans les dispositifs à base semi-conducteurs, la connaissance de la fonction de distribution des électrons obtenue par la résolution de l'équation de Boltzmann couplée avec l'équation de Poisson est primordiale. Cependant, résoudre une telle équation analytiquement est quasi impossible à reproduire. D'où, l'utilisation des méthodes numériques pour la résoudre est inévitable [HOC88].

L'une des techniques numériques les plus efficaces et qui donne une solution directe à l'équation de transport de Boltzmann couplée avec l'équation de Poisson à travers une simulation microscopique des trajectoires des porteurs est la méthode particulière de Monte Carlo [BOU05]. Le terme méthode de Monte-Carlo désigne toute méthode visant à calculer une valeur numérique en utilisant des procédés aléatoires, c'est-à-dire des techniques probabilistes.

3.1. La méthode Monte Carlo appliquée au transport de charges dans les matériaux massifs

Dans cette partie, nous allons présenter le principe général de la méthode Monte Carlo appliquée à l'étude du transport électronique dans les semi-conducteurs. Nous montrons principalement les éléments de base nécessaires à la simulation, notamment la notion du temps

du vol libre et les équations de mouvement d'une part, et le choix du type d'interaction ainsi que les états finaux des électrons d'autre part.

3.1.1. Historique de la méthode

Les techniques de Monte Carlo sont utilisées depuis très longtemps, mais ce n'est qu'à la seconde guerre mondiale qu'elles ont eu l'évolution majeure. En effet, durant cette guerre, elle a été utilisée dans le projet Manhattan par Ulam, Metropolis et Von Neumann pour résoudre l'équation de transport des neutrons dans le matériau fissile dans la bombe atomique au laboratoire de Los Alamos au Nouveau Mexique en 1942 [MET49]. Etant une méthode stochastique, le nom Monte Carlo fait référence aux jeux de hasard de casino de Monte Carlo situé à la principauté de Monaco dont Ulam était un admirateur [FIS16]. Par la suite, l'utilisation de cette méthode a grandi au fur et à mesure avec le développement croissant des moyens de calcul plus rapides et moins chers. Elle fut utilisée pour la première fois à l'étude du transport électronique par Kurosawa en 1966 [KUR66] après que Luthi l'a utilisé pour étudier le problème de la conductivité électrique dans les fils métalliques minces en 1960 [LUT60, LUG89]. Ensuite, le groupe de Malvern a fourni la première grande application de la méthode au problème de l'effet Gunn dans le GaAs par Fawcett au Royaume Uni en 1970 [FAW70]. Après cela, de nombreux travaux ont contribué à l'amélioration de cette méthode comme ceux Jacoboni [JAC10] et Price [PRI79] qui ont étudié le modèle à plusieurs bandes. Les applications sur le Si et le Ge ont également été faites grâce au travail réalisé par les chercheurs de l'université de Modène en Italie [CAN75]. Peu après, Littlejohn et Ferry ont analysé le transport dans les alliages ternaires et quaternaires [LIT78]. Depuis le début des années 80, cette technique est très utilisée dans les simulations de transport électroniques dans les semi-conducteurs [REG85].

La simulation par les méthodes de Monte Carlo est aujourd'hui l'un des outils les plus utilisés pour l'étude du fonctionnement physique des composants électroniques en offrant la possibilité de reproduire les divers phénomènes qui se produisent dans semi-conducteurs. Elle est utilisée dans presque toutes les universités travaillant dans la physique des semi-conducteurs dans le monde.

La méthode Monte Carlo est également omniprésente dans divers domaines, c'est une méthode statistique qui fait appel à des suites de nombres aléatoires pour résoudre des problèmes variés. Elle est utilisée en physique nucléaire, en mathématique statistique, en sciences économiques, prévisions électorales, etc.

3.1.2. Principe général de la méthode

Il existe deux démarches possibles pour étudier le transport des électrons en mouvement dans les semi-conducteurs sous l'effet des forces extérieures [BOU07] :

- Déterminer la fonction de distribution des électrons en résolvant l'équation de Boltzmann.
- Suivre au cours du temps le comportement de chaque électron en utilisant la méthode Monte Carlo.

Puisque la résolution de l'équation de Boltzmann est quasi impossible à reproduire analytiquement, alors la méthode numérique Monte Carlo est utilisée pour la résoudre. Cette dernière donne une solution exacte et précise. Pour cela, on a recours à suivre au cours du temps la trajectoire des électrons durant leurs mouvements dans l'espace réel et dans l'espace des vecteurs d'ondes.

Contrairement aux modèles déterministes tels que les modèles hydrodynamiques et dérives diffusions qui traitent les électrons comme un fluide, la méthode de Monte-Carlo considère les électrons comme des particules ayant une masse et se déplaçant à l'intérieur du matériau sous l'action des forces extérieures suivant les lois de la mécanique classique en subissant des interactions [HAD99].

En effet, sous l'effet des forces extérieures, les électrons à l'intérieur d'un semi-conducteur acquièrent de l'énergie et sont accélérés durant le vol libre au fur et à mesure que le champ augmente. Cette séquence est également appelée le libre parcours moyen dont sa durée est déterminée par l'intermédiaire d'un nombre aléatoire r choisi uniformément entre 0 et 1.

A la fin de ce vol libre, les électrons subissent des collisions. Ces dernières sont des phénomènes aléatoires, instantanés, liés à la nature des matériaux, et qui ont comme but de perturber la trajectoire des électrons. Suivant la nature de l'interaction i.e. élastique ou inélastique, cette perturbation se traduit souvent par une variation de l'énergie cinétique et une variation de la direction du vecteur d'onde des électrons, ce qui résulte une variation de vecteur de vitesse des électrons.

La trajectoire d'un électron est représentée sous l'effet des forces extérieures dans la figure (3.1) :

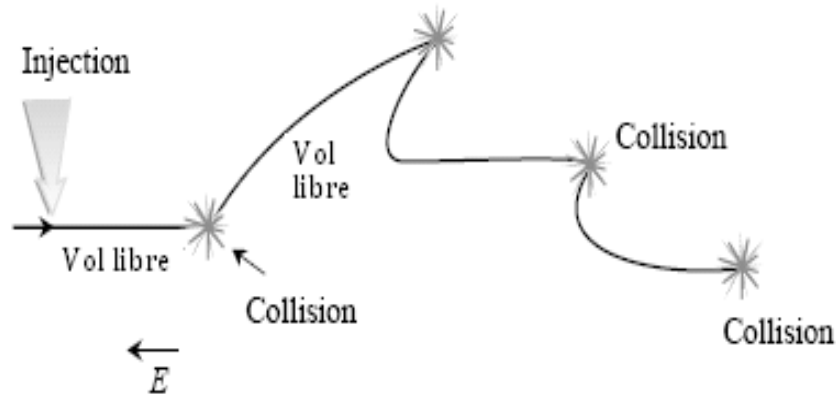


Figure (3.1) : Evolution d'une particule au cours du temps [SAY10]

L'objectif général de la méthode est donc de suivre le parcours de tous les électrons et de recréer l'histoire des particules telles qu'elles évoluent dans le temps et dans l'espace. Dans le cas du vol libre, la structure de bandes d'énergie dans lesquelles la particule se déplace est nécessaire à connaître, alors que dans le cas des collisions, les lois de la mécanique quantique sont considérées.

L'avantage de cette méthode par rapport à d'autres réside dans le fait que l'effet des mécanismes d'interactions est inclus dans le calcul, c'est-à-dire que c'est comme résoudre l'équation de Boltzmann en tenant compte du deuxième membre et sans l'utilisation des hypothèses qui facilitent le calcul. La simulation par les méthodes de Monte Carlo dans les matériaux semi-conducteurs donne typiquement la fonction de distribution des électrons trouvée par la résolution de l'équation de Boltzmann. A partir de cette dernière, n'importe quelle entité peut être calculée telle que l'énergie moyenne et la vitesse de dérive.

3.1.3. Equations de mouvement

Durant leurs mouvements à l'intérieur du matériau, l'évolution des porteurs de charges est décrite par la forme de la structure de bande qui détermine leurs états énergétiques. Ces derniers sont déterminés par la résolution de l'équation de Schrödinger et sont exprimés par la relation de dispersion $\varepsilon(k)$ qui relie l'énergie ε et le vecteur d'onde du cristal k . Cette relation est donnée par [HES91] :

$$\gamma(\varepsilon) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \quad (3.1)$$

Dans le cas de l'utilisation des bandes de conduction non paraboliques, cette relation est modifiée et est donnée par la relation suivante :

$$\gamma(\varepsilon) = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \quad (3.2)$$

Où m^* , α et \hbar représentent respectivement la masse effective des électrons, le coefficient de non parabolicité et la constante de Planck réduite.

Le coefficient de non parabolicité est donné par la relation suivante :

$$\alpha = \frac{1}{E_g} \left(1 - \frac{m^*}{m_0} \right)^2 \quad (3.3)$$

Pour suivre les porteurs de charges dans l'espace réel et l'espace réciproque, on a besoin de savoir la variation des trois composantes de la position $r(x, y, z)$ et la variation des trois composantes du vecteur d'onde $k(k_x, k_y, k_z)$ dans les trois directions (x, y, z) en fonction du temps. Il faut savoir également la relation entre l'état final des électrons en fonction de l'état initial. Pour cela, il est nécessaire de décomposer l'échelle des temps en des pas réguliers de durée δt choisis de façon convenable.

A partir de la relation de Planck, on peut écrire :

$$\varepsilon = \hbar\omega \quad (3.4)$$

On peut déduire que :

$$\varepsilon = \hbar \frac{v}{\lambda} = \hbar \frac{v}{2\pi} k = \frac{\hbar^2 k v}{2\pi} \quad (3.5)$$

Donc :

$$\frac{d\varepsilon}{dk} = \hbar v \quad (3.6)$$

Le vecteur de vitesse est alors égale à :

$$v = \frac{dr}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{dk} = \frac{k\hbar}{m^*} \quad (3.7)$$

Alors :

$$\frac{dr}{dt} = \frac{k\hbar}{m^*} \quad (3.8)$$

D'autres part, sous l'effet un champ électrique, les électrons changent continuellement leurs états du vecteur d'ondes suivant la loi suivante [SAY08] :

$$\frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar} eE \quad (3.9)$$

L'évolution de la position et du vecteur d'onde en fonction du temps est alors donnée par les deux équations suivantes [FAR02], [BOU05] :

$$\begin{cases} \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar} eE \\ \frac{dr}{dt} = \frac{\hbar}{m^*} \kappa \end{cases} \quad (3.10)$$

En appliquant un champ électrique durant un intervalle de temps extrêmement petit δt , les porteurs passent de l'état initial (r_i, k_i) à l'instant t_i , à un l'état final (r_f, k_f) à l'instant t_f . Cela revient à faire l'intégral de ces deux équations durant l'intervalle de temps δt comme le montre les équations suivantes :

$$\begin{cases} \int_{k_i}^{k_f} dk = \frac{eE}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \\ \int_{r_i}^{r_f} dr = \frac{\hbar}{m^*} \left(\frac{v}{2} \right) \int_{t_i}^{t_f} dt \end{cases} \quad (3.11)$$

Les équations de mouvement sont alors décrites par :

$$\begin{cases} k_f = k_i + \frac{\delta t}{\hbar} eE \\ r_f = r_i + \frac{\hbar}{m^*} \left(\frac{v}{2} \right) \delta t \end{cases} \quad (3.12)$$

Ces dernières équations régissent le mouvement des électrons durant le vol libre en absence d'interaction. Elles relient l'état énergétique final à l'état initial pour une durée et un champ électrique bien déterminés. En connaissant l'état initial d'une particule donnée, on peut déterminer son état toute au long du parcours jusqu'à la fin du libre parcours.

La figure ci-dessous montre le déplacement des électrons durant le vol libre dans l'espace réel et l'espace des vecteurs des vecteurs. Les électrons effectuent un vol libre à chaque pas de temps et subissent des interactions comme dans le cas des étapes 3, 5 et 6.

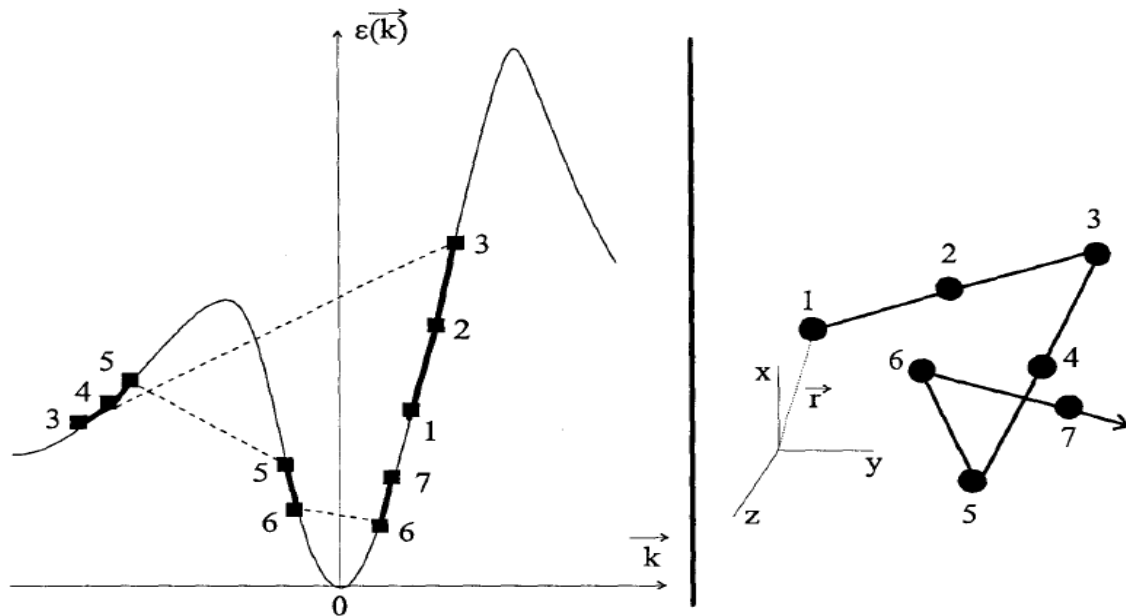


Figure (3.2) : Trajectoire d'un électron dans l'espace réel et dans l'espace réciproque [DES98]

3.1.4. Temps du vol libre

A la fin du vol libre, les électrons subissent différents types d'interactions à l'intérieur du réseau cristallin. Ces collisions sont statistiquement indépendantes les unes des autres et leurs probabilités d'interactions ne dépendent que de l'énergie cinétique de la particule. Le temps séparant deux interactions successives est dit temps du vol libre dont sa détermination est l'un des points le plus important et dépend d'un nombre aléatoire tiré au hasard par l'algorithme Monte Carlo [VAS10].

La probabilité pour qu'un électron se trouvant dans l'état k ait une interaction par unité de temps, est donnée par :

$$\lambda(k(t))\delta t \quad (3.13)$$

Puisque ces interactions sont supposées instantanées, la probabilité pour qu'une interaction ne se produise pas par unité de temps est donnée par :

$$p_f(t) = \exp\left[-\int_0^t \lambda(k(t')\delta t')\right] \quad (3.14)$$

Donc la probabilité pour qu'un électron suive un vol libre de durée Δt suivi d'une interaction est donnée par l'équation suivante :

$$p(\Delta t) = \int_0^{\Delta t} \lambda(k(t)) \cdot \exp \left[- \int_0^t \lambda(k(t')) \delta t' \right] \delta t \quad (3.15)$$

Pour chaque électron simulé, il est nécessaire de générer un temps de libre parcours. A la fin de ce dernier, un nouveau temps sera choisi pour les électrons qui ont subis des collisions.

Pour déterminer le temps du vol libre, on suit la procédure adoptée par Kurosawa qui consiste à tirer au sort des nombres aléatoire r à distribution uniforme entre 0 et 1 et de résoudre l'équation intégrale suivante :

$$\int_0^{\Delta t} \lambda(k(t)) \delta t = -Lnr \quad (3.16)$$

En raison de la complexité de la dernière équation qui nécessite de calculer cette intégrale à chaque fois qu'on veut générer un temps du libre parcours, il est préférable d'utiliser une procédure simplifiée appelée «Self Scattering» suggéré par Rees en 1969 [REE69]. Cette méthode a pour but d'introduire une interaction supplémentaire fictive qui est sans effet sur le mouvement des électrons rendant ainsi la probabilité totale d'interaction Γ une constante telle que :

$$\Gamma = \lambda_{sc} + \sum_i \lambda_i \quad (3.17)$$

L'avantage de cette procédure est qu'elle permet de choisir la valeur de la probabilité totale d'interaction Γ à l'avance. Etant donné que les interactions fictives peuvent figurer parmi les interactions susceptibles de se produire à la fin du vol libre, il est préférable de les minimiser en choisissant la probabilité totale Γ égales à au moins la plus grande somme des probabilités réelles $\sum \lambda_i$ afin d'éviter des interactions fictives négative λ_{sc} .

L'équation précédente devient alors :

$$p(\Delta t) = \Gamma e^{-\Gamma \Delta t} \quad (3.18)$$

Le temps du vol libre est alors calculé à partir d'une distribution uniforme du nombre aléatoire r entre 0 et 1 par la relation (3.19) :

$$\Delta t = -\frac{1}{\Gamma} \text{Ln}r \quad (3.19)$$

La figure (3.3) montre un exemple des interactions fictives et la méthode de Self scattering :

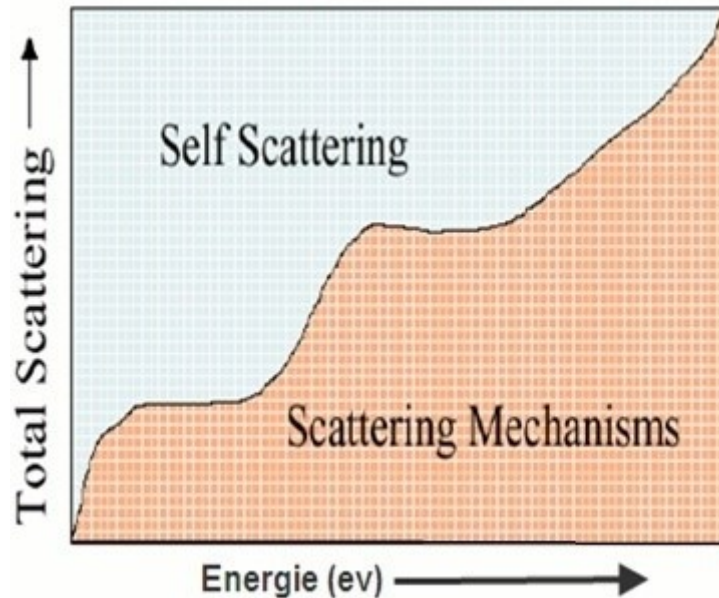


Figure (3.3) : Probabilité totale d'interactions et Self Scattering [BOU07]

3.1.5. Choix de l'interaction

La deuxième phase de l'algorithme de Monte Carlo consiste d'abord à savoir si la particule a subi une collision à la fin du vol libre. Ensuite, il faut déterminer sa nature si c'est le cas. A la fin, il faut définir le nouvel état de la particule après la collision. Pour cela, il est nécessaire de connaître les probabilités des différents types collisions subies par les électrons.

Le type d'interaction est sélectionné à la fin du libre parcours à partir d'un tirage d'un nombre aléatoire r compris entre 0 et 1 par la méthode de rejection. En effet, les probabilités d'interactions correspondant à chaque type de diffusions sont d'abord calculées en fonction de l'énergie et sont classées en fonction de la probabilité totale Γ dans un tableau dont Chaque interaction i est représentée par un intervalle d'amplitude P . La figure (3.4) montre la procédure de sélection d'une interaction :

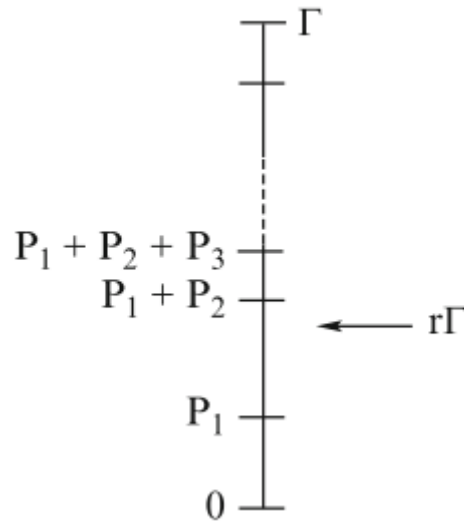


Figure (3.4) : Procédure de sélection d'une interaction [JAC10]

Pour sélectionner le type d'interaction, on fixe d'abord la valeur de l'énergie finale de l'électron et on tire un nombre aléatoire r uniformément choisi entre 0 et 1. Par la suite, on calcule le nombre R qui est égale au nombre aléatoire r multiplié par la somme totale des taux d'interactions :

$$R = r\Gamma \quad (3.20)$$

Ce résultat est comparé avec la somme des taux calculés, et doit vérifier la relation suivante :

$$R \leq \sum_{i=1}^q \lambda_i \quad (3.21)$$

Si $R \leq \lambda_1$, alors le processus λ_1 est choisi. Ou, d'une façon générale, si $R \leq \lambda_q$, alors le processus λ_q est choisi. Par contre, si l'interaction sélectionnée est fictive, la particule garde son énergie et son vecteur d'onde reste inchangé, le mouvement des électrons se poursuivra alors jusqu'à la fin du vol libre. Dans le cas contraire, Il est nécessaire de connaître la réorientation du vecteur d'onde après les collisions. De plus, de nouveaux nombres aléatoires définissant la position du vecteur d'onde après interaction doivent être introduits.

3.1.6. Etat de la particule après les collisions

Les interactions effectuées par les électrons sont supposées instantanées, leur principal effet est de provoquer une discontinuité de la trajectoire de ces électrons. Lorsque la collision est élastique comme dans le cas des interactions avec les impuretés ionisées, l'énergie des électrons est conservée. Par contre, lorsque la collision est inélastique, la collision provoque un

échange d'énergie et un brusque changement d'orientation de la vitesse de l'électron. Ce changement se traduit par une réorientation du vecteur d'onde de la particule avec une éventuelle perte d'énergie (émission d'un phonon) ou gain d'énergie (absorption d'un phonon).

$$\varepsilon(k') = \varepsilon(k) \pm \hbar \quad (3.22)$$

Pour déterminer le vecteur d'onde final k' par rapport au vecteur d'onde initial k , il faut déterminer dans un repère à coordonnées sphériques, l'écart angulaire β entre les directions de k et k' , et la position azimutale θ du support du vecteur k' autour du support du vecteur k .

Ces deux angles sont déterminés par le tirage au sort de deux nouveaux nombres aléatoires r_1 et r_2 à distribution uniforme entre 0 et 1.

$$\begin{cases} \phi = 2\pi r_1 \\ \cos \beta = 1 - 2r_2 \end{cases} \quad (3.23)$$

L'orientation du vecteur d'onde est représentée dans la figure (3.5) :

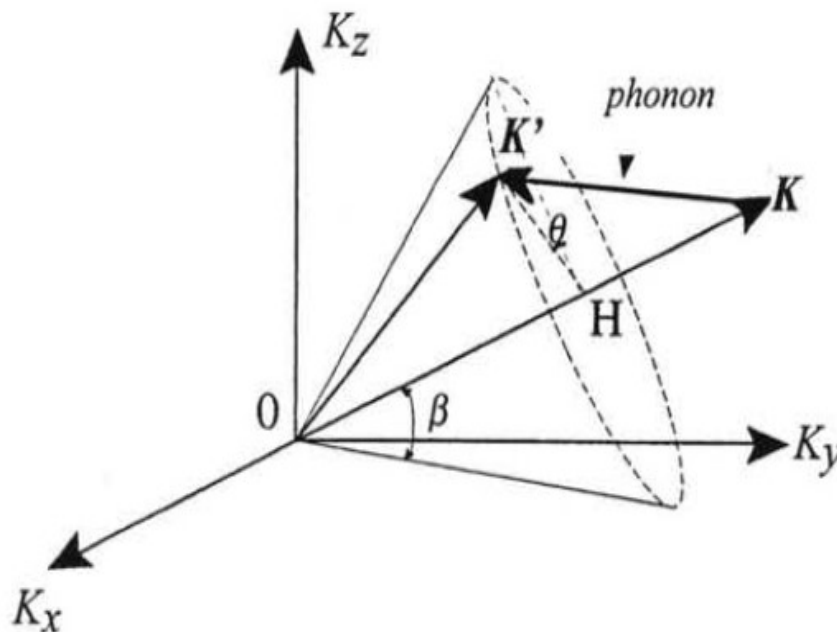


Figure (3.5) : Réorientation du vecteur d'onde [HAD99]

Les vecteurs k' sont définis par rapport au vecteur d'onde initial k dans chaque direction suivant les relations suivantes :

$$\begin{cases} k'_x = |k'| \sin \beta \cos \theta \\ k'_y = |k'| \sin \beta \sin \theta \\ k'_z = |k'| \cos \beta \end{cases} \quad (3.24)$$

3.1.7. Mise en œuvre de la simulation

Les étapes les plus importantes de la méthode Monte Carlo utilisée pour l'étude du transport électronique dans les matériaux massifs sont représentées par l'organigramme de la figure (3.6).

Dans l'étape de l'initialisation, le programme commence à lire les paramètres introduits dans la simulation qui permettent de décrire l'environnement où évoluent les électrons, telle que la largeur de gap du matériau utilisé, le modèle utilisé de la structure de bande, l'énergie de séparation des différentes vallées, les masses effectives, le dopage ... On définit également la valeur de la température et du champ électrique où évoluent les porteurs de charges. Ensuite, on calcul les probabilités des différentes interactions que subissent les électrons durant leurs parcours en fonction de l'énergie et de les stockés en mémoire.

Le cœur du programme est constitué de deux boucles : la première itération sur le temps dans laquelle est imbriquée une deuxième sur le nombre d'électrons. Durant chaque intervalle du temps, on fait évoluer toutes les particules suivant les équations de mouvement sous l'effet des forces extérieures, et de savoir s'il y a eu des collisions à la fin des vols libres. Si c'est le cas, il est nécessaire de sélectionner par tirage au sort le processus responsable des collisions. Ces collisions sont instantanées et dans le cas des interactions inélastiques, elles font changer l'énergie des électrons et font passer le vecteur d'onde initial d'une valeur k à une autre valeur k' . Le changement de l'énergie est alors calculé, tandis que le changement du vecteur d'onde doit aussi être calculé à l'aide d'un tirage au sort de deux nombres aléatoires. Par la suite, on sélectionne l'état final et on génère un nouveau temps du vol libre pour la suite de simulation. Une fois la boucle temporelle exécutée, le programme calcule les moyennes de grandeurs physiques telles que l'énergie moyenne, la vitesse de dérive et enregistre les résultats dans la mémoire.

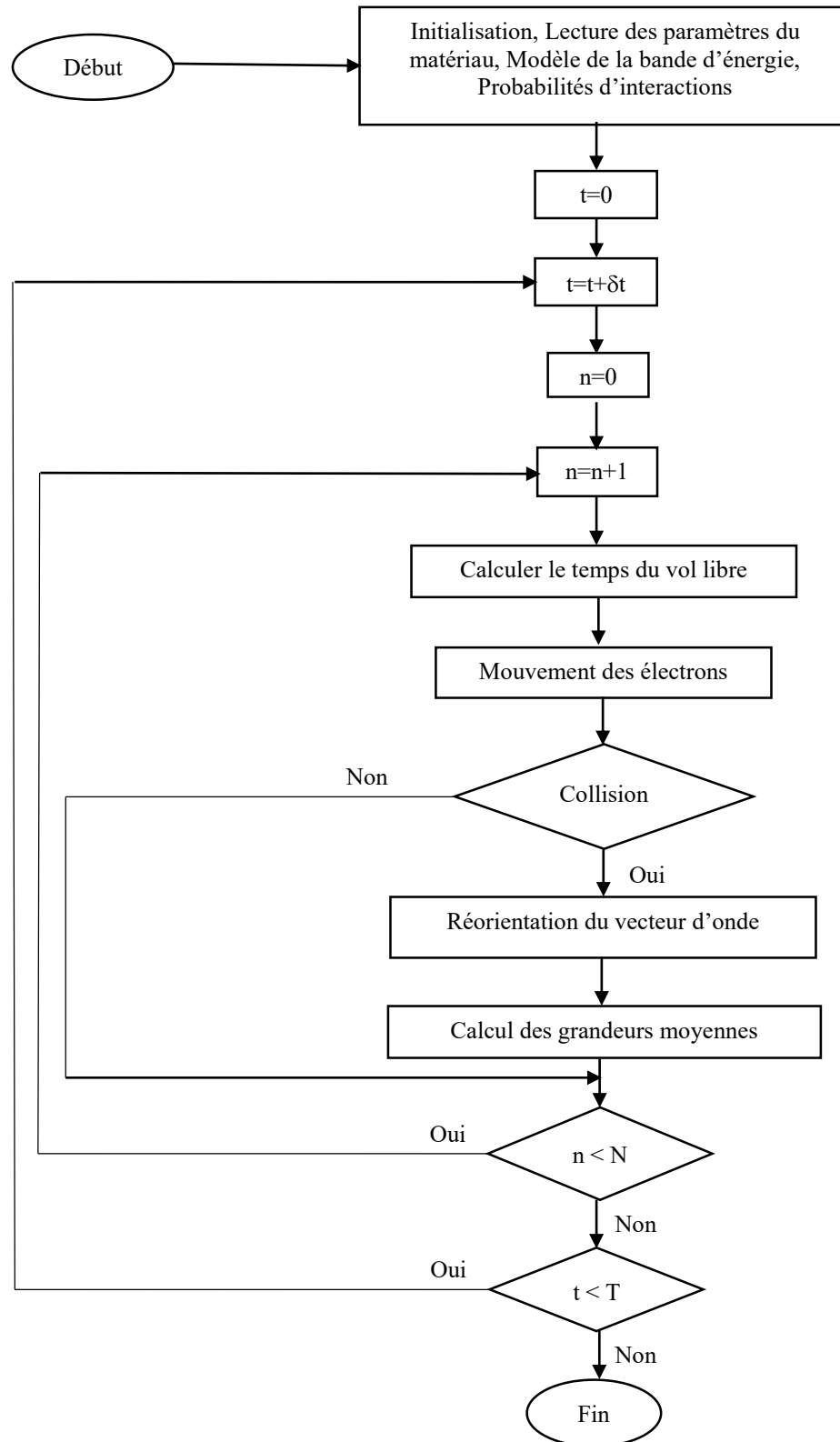


Figure (3.6) : Algorithme général de la méthode Monte Carlo dans les matériaux massifs

3.2. La méthode Monte Carlo appliquée au transport de charges dans les dispositifs semi-conducteurs

La première partie dédiée à l'étude du transport électronique dans les matériaux massifs étant maintenant connue, nous allons dans cette partie introduire le concept du transport électronique dans les dispositifs semi-conducteurs.

D'une manière générale, la façon la plus correcte pour étudier le comportement des électrons par rapport au potentiel électrostatique dans les dispositifs est de résoudre le système Schrödinger-Poisson. Même si plusieurs travaux ont été faits sur ce sujet, cela est un problème très difficile et reste en quelque sorte très ouvert [SEL16]. Des problèmes importants persistent toujours dans l'application des conditions aux limites de l'équation de Schrödinger, de telle sorte qu'il est très difficile de prendre en compte tous les événements appropriés aux mécanismes de diffusion. De plus, la résolution du système de Schrödinger-Poisson est également une tâche difficile du point de vue numérique du fait que la fonction d'onde de Schrödinger à résoudre est une fonction dans un espace à trois dimensions du nombre d'électrons simulés dans le dispositif. Du coup, lors de la simulation des dispositifs réels, cette tâche est décourageante du point de vue de la mémoire de l'ordinateur c'est-à-dire que, plus la description est exacte, plus l'espace mémoire nécessaire pour stocker les informations est important.

De plus, le temps de simulation est également un facteur important dont sa durée dépend principalement du nombre de particules simulées et de la taille du dispositif considéré. Il est également lié par le choix de la méthode de résolution.

Dans le cas général, le transport de charges dans les dispositifs semi-conducteurs est fortement dépendant du champ appliqué et nécessite la résolution de l'équation de transport de Boltzmann couplée à l'équation de Poisson. Lors de l'étude d'un tel couplage, il est nécessaire de résoudre correctement à la fois la dynamique des particules et le calcul du champ électrique provenant de la distribution des électrons et éventuellement des potentiels électrostatiques. Dans le cas où le champ électrique n'est pas correctement calculé et couplé à la dynamique de charge, les résultats de la simulation seraient défectueux.

La fiabilité et l'exactitude d'une telle simulation sont déterminées d'une façon générale par l'approche adoptée pour l'étude du transport d'électrons d'une part, et le type et de la taille du dispositif à étudier d'autre part. Il est alors nécessaire de choisir l'approche utilisée en fonction des dimensions du dispositif à étudier.

Les approches de résolutions les plus utilisées peuvent être divisée en deux parties :

- Les méthodes déterministes et le plus souvent connues sous les modèles hydrodynamiques ou de dérive-diffusions. Ces méthodes basées sur le calcul de la concentration des particules.
- Les méthodes stochastiques telles que la méthode Monte Carlo. Ces méthodes basées sur le suivi et des trajectoires des particules en utilisant des lois de la probabilité.

La figure ci-dessous montre la hiérarchie des modèles de simulations pour les composants semi-conducteurs :

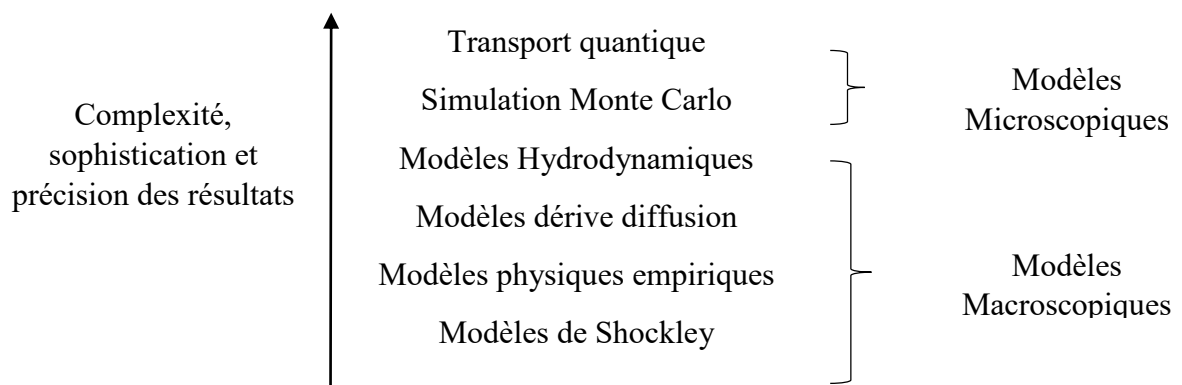


Figure (3.7) : Hiérarchie des modèles de simulations pour les composants semi-conducteurs [MAS14]

Les modèles déterministes résolvent directement les équations générales qui découlent de l'équation de transport de Boltzmann (équations de continuités, densité de courants...). Ces modèles dites parfois macroscopiques sont intéressantes lors de l'étude des dispositifs électroniques à large échelle du fait de leur vitesse d'exécution satisfaisante. Cependant, lors de l'étude des dispositifs submicroniques, ces modèles présentent un inconvénient majeur par rapport aux modèles stochastiques et ne sont plus précis du fait que les effets quantiques deviennent importants. En effet, il apparait une variation de champs électriques sur des courtes distances, ce qui influence beaucoup sur les porteurs. Ces effets ne sont malheureusement pas pris en compte dans les modèles macroscopiques et ont des conséquences importantes dans les résultats [FER92, MAH87].

Cependant, les modèles les plus précis sont ceux basés sur les méthodes stochastiques de Monte Carlo. Néanmoins, l'exactitude de cette méthode repose sur le nombre de particules simulées. Dans ce qui suit, nous allons expliquer comment se fait le couplage entre les simulations de

Monte Carlo et l'équation de Poisson dans le cas de l'étude du transport électronique dans les dispositifs à base de semi-conducteurs.

3.2.1. Historique de la modélisation des dispositifs électroniques

La modélisation des dispositifs électroniques basée sur des équations aux dérivées partielles qui décrivent les différentes régions d'un dispositif d'une manière unifiée est un sujet à intérêt considérable qui a été suggéré par Gummel [GUM64] en 1964 pour le transistor bipolaire unidimensionnel. Cette approche a été développée et appliquée à la théorie des jonctions pn par De Mari [DEM68]. Une solution bidimensionnelle de l'équation de Poisson appliquée à la structure MOS a d'abord été publiée par Loeb [LOE68] et Schroeder et Muller [SCH68] en 1968. Kennedy et O'Brien [KEN69] ont étudié en 1969 le transistor à effet de champ à jonction au moyen d'une solution numérique bidimensionnelle de l'équation de Poisson et d'une équation de continuité. Dans la même période, Slotboom [SLO69] a présenté une analyse bidimensionnelle du transistor bipolaire résolvant l'équation de Poisson et des deux équations de continuité. Et depuis, la modélisation bidimensionnelle a été appliquée à presque tous les dispositifs importants [SEL84].

3.2.2. Les transistors à effet de champ

Considérés comme l'une des plus grandes inventions du 20^{ème} siècle, les transistors constituent l'élément de base de tous les dispositifs électroniques existant de nos jours. Le développement et l'amélioration de ces transistors restent toujours l'une des principales activités de la microélectronique. Dans ce secteur, un très grand effort est consacré aux transistors à effet de champs (Field Effect Transistors FET). Ces derniers sont des composants unipolaires, c'est-à-dire que la conduction électrique repose sur un seul type de porteurs de charges. Le principe physique des transistors à effet de champ FET a été étudié la première fois en 1952 par W. Shockley [SHO52].

Il existe plusieurs structures de transistors à effet de champ, la différence entre eux se fait généralement au niveau du contact entre la grille et le substrat tel que [DUB03] :

- Dans le transistor à effet de champ à jonction JFET, le contact entre la grille et le semi-conducteur est de type jonction PN.
- Dans le transistor à effet de champ à jonction à grille isolée MOSFET, le contact entre la grille et le semi-conducteur est de type métal-oxyde-semi-conducteur.

- Dans le transistor à effet de champ à grille métal-semi-conducteur MESFET, le contact entre la grille et le semi-conducteur est de type Schottky.
- Dans le transistor à effet de champ à haute mobilité HEMT, l'existence d'une hétéro-structure a pour but de créer un puits de potentiel qui sert à accumuler les électrons dans le matériau intrinsèque où la mobilité et les vitesses électroniques sont plus élevées.

Dans notre travail, on va se baser sur l'étude des transistors à effet de champs à grille métal-semi-conducteur MESFET à partir des matériaux III-V à base d'antimoniures tel que le $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ et ses dérivés en fonction du coefficient stœchiométrique x . Dans cette partie, on va donner une brève introduction du principe du fonctionnement d'un transistor MESFET ainsi que son mode de fonctionnement.

3.2.2.1. Le transistor à effet de champ à grille métal-semi-conducteur MESFET

Le transistor à effet de champ à grille métal-semi-conducteur MESFET est un transistor qui a le même principe qu'un transistor JFET sauf que la jonction PN est remplacée par un contact métal-semi-conducteur de type Schottky. Pour avoir ce type de contact, il faut que le travail de sortie du métal soit supérieur à celui du semi-conducteur [BON03]. Cette structure est la plus simple parmi les différentes structures des dispositifs à effet de champ.

Le transistor MESFET est le premier dispositif à être fabriquer à partir des matériaux III-V. En effet, l'arséniure de gallium (GaAs) a été proposé pour remplacer le silicium (Si) [MEA66]. Ce changement de matériau a permis de réaliser des transistors fonctionnant aux fréquences micro-ondes.

Le transistor MESFET est constitué d'un substrat semi-conducteur qui doit être le plus isolant possible dans lequel est déposée une couche active dopée N (transistor à canal N). L'électrode de la grille est réalisée à travers un contact métal-semi-conducteur. Les électrodes de la source et du drain sont déposées sur deux diffusions N^+ aux extrémités du canal à travers deux contacts ohmiques.

La structure générale d'un transistor MESFET est montrée dans la figure (3.8) :

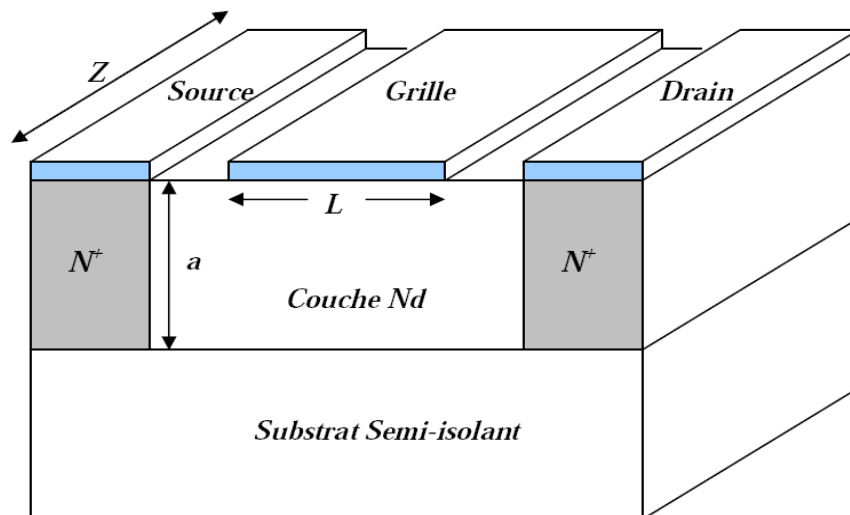
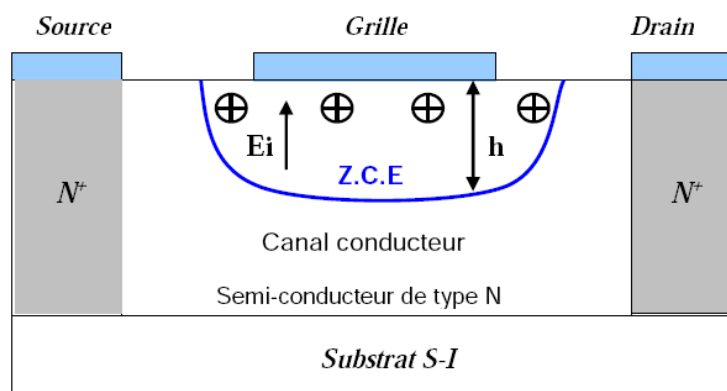


Figure (3.8) : Structure générale d'un transistor MESFET [MAS14]

3.2.2.1.1. Principe de fonctionnement d'un transistor MESFET

Dans un transistor MESFET, la largeur de la zone de charge d'espace ZCE de la barrière Schottky est contrôlée par la variation de la tension appliquée sur la grille V_{gs} . En effet, comme dans le cas transistor JFET, la variation de la tension appliquée sur la grille module la section conductrice du canal du transistor de telle sorte que, lorsque la tension de grille V_{gs} est nulle, la largeur de la ZCE est à son maximum ce qui signifie que la section du canal est au maximum. Par contre, lorsque la tension V_{gs} est négative, et étant donné que la ZCE s'étend principalement du côté semi-conducteur, la longueur du canal diminue. Plus la tension V_{gs} est grande, plus la largeur de la ZCE augmente jusqu'au blocage de passage des électrons. La tension correspondant au blocage est également dite tension de pincement V_p . Ceci est présenté dans la figure suivante :

Figure (3.9) : Evolution de la largeur du canal en fonction de la tension V_{gs} [KHE09]

Lorsque la tension appliquée au drain V_{ds} est suffisamment petite, il se crée un courant I_d permettant le passage des électrons de la source vers le drain. Dans ce cas, la variation du courant du drain I_d augmente linéairement avec la tension V_{ds} .

Lorsque V_{ds} devient de plus en plus grande, la différence de potentiel entre la grille et le substrat dans le canal coté drain diminue. Ceci signifie que le champ électrique dans le canal coté drain augmente, ce qui permet à la section du canal du côté drain de diminuer. Le courant du drain n'augmente plus linéairement par rapport à la tension V_{ds} . La réduction du canal du coté drain est montrée dans la figure suivante :

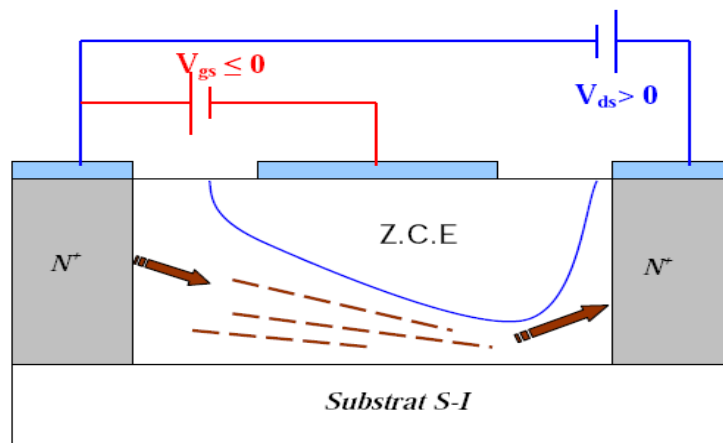


Figure (3.10) : Evolution de la largeur du canal lorsque la tension V_{ds} est faible [KHE09]

Lorsque la tension V_{ds} atteint la valeur de saturation, c'est-à-dire que $V_{ds} - V_{gs} = V_p$, la section du canal du côté drain n'existe plus, ce qui signifie que le courant du drain n'augmente plus par rapport à la tension V_{ds} . La figure (3.11) montre la variation du courant du drain I_d par rapport à la tension V_{ds} :

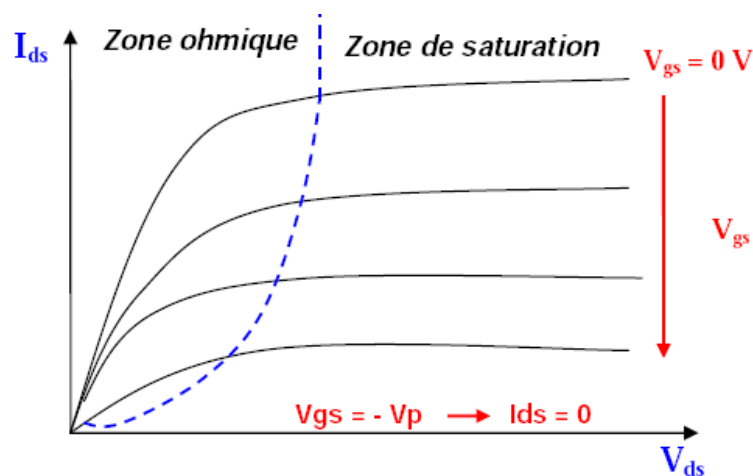


Figure (3.11) : Variation du courant du drain I_d par rapport à la tension V_{ds}

3.2.3. Effet de la miniaturisation sur la simulation des dispositifs

La miniaturisation des composants semi-conducteurs a révolutionné le monde de l'électronique et de l'informatique de telle sorte que les dispositifs ne cessent d'être plus petits, plus rapides, plus performants et consommant moins d'énergie. Néanmoins, cette miniaturisation a des limites dues à plusieurs paramètres dont leurs effets deviennent de plus en plus importants à un point où il est impossible de les négliger.

Parmi les effets les plus importants de la miniaturisation, c'est les limites dues aux procédés de fabrication. En effet, à l'échelle nanométrique, les techniques des dépôts s'effectuent avec précision dans l'ordre des couches atomiques, un tel ordre de précision correspond à la limite des performances de photolithographie et de gravure utilisées pour fabriquer les circuits intégrés. Pour prolonger les limites dues aux procédés de fabrication, il faut alors diminuer la longueur d'onde de la lumière utilisée dans la lithographie vers les longueurs d'ondes inférieures. L'obstacle principal lié à l'avancement technologique est d'ordre économique. D'ailleurs, même si le bénéfice lié à la miniaturisation des composants est très important, le coût de fabrication des nouvelles technologies est exorbitant et que parfois, il est le paramètre qui frêne cet avancement.

Parmi les effets les plus importants qui ont aussi une influence négative sur la miniaturisation, c'est les limites dues aux effets quantiques. Ces effets n'avaient pas une grande influence dans les grandes échelles. Toutefois, ils se produisent lors de l'étude des dispositifs submicroniques (<100 nm) et jouent un rôle primordial dans les dispositifs nécessitant ainsi des traitements sophistiqués afin de les minimiser. Ceci a fait que la microélectronique n'est plus soumise uniquement aux lois de la physique classique, mais également aux lois de la physique quantique. L'une des principales contraintes liées à la physique quantique est l'effet tunnel. Ce dernier est un phénomène permettant aux électrons de se transporter à travers des barrières de potentiels beaucoup plus importantes que l'énergie des électrons considérés i.e. le passage d'électrons de la grille vers le canal par effet tunnel. La diminution de la longueur de la grille est également un facteur important qui diminue les performances lorsque la miniaturisation est au-dessous de 50 nm, d'où la nécessité de trouver d'autres architectures telles que les transistors doubles grilles, etc.

Afin d'obtenir des résultats satisfaisant dans la simulation de ce type de dispositifs, il est nécessaire de prendre en considération quelques corrections quantiques au niveau du potentiel utilisé pour le calcul du champ électrique. En effet, différents modèles de potentiels efficaces

ont été créés pour simuler ces effets importants. La correction la plus importante et la plus utilisée dans les outils de simulation est l'approche du potentiel effectif. Il existe également d'autres méthodes de correction quantique telle que l'approche du potentiel effectif dérivé du formalisme de Wigner [VAS10].

Aujourd'hui, les dispositifs à semi-conducteurs sont si petits que leur longueur caractéristique commence à être comparable à la taille d'un paquet d'ondes électroniques. Des modèles de potentiels efficaces ont été créés pour simuler certains effets quantiques découlant de la taille non nulle des paquets d'ondes électroniques.

Les effets quantiques dans les dispositifs miniaturisés doivent être simulés avec précision en ne faisant aucune hypothèse afin d'obtenir des résultats aussi proches possible du réel. Ceci reste très difficile en utilisant les modèles déterministes hydrodynamiques ou de dérive-diffusion qui sont basés sur des hypothèses. De ce fait, il est préférable d'utiliser la méthode Monte Carlo dont la force réside dans son niveau d'abstraction est le plus élevé et peu d'approximations sont effectuées.

3.2.4. Principe général de la méthode Monte Carlo appliquée aux dispositifs électroniques

Dans le cas des matériaux massifs, le champ électrique est uniforme dans tout le matériau. Par contre, dans le cas des dispositifs électroniques, le champ doit être établi en tous points du dispositif. De ce fait, l'étude du transport de charges dans les dispositifs à base de semi-conducteurs nécessite la résolution simultanée du système d'équations Poisson-Boltzmann.

En effet, l'équation de Boltzmann est une approche semi-classique utilisée pour l'étude du transport de charges sous l'effet des forces extérieures. Comme on l'a montré dans la première partie de ce chapitre, le mouvement des électrons est régi par les équations du mouvement classique durant le vol libre, alors que le traitement des mécanismes d'interactions est pris en charge par les lois de la mécanique quantique.

Dans le cas des dispositifs électroniques, l'effet combiné du vol libre et des interactions provoque une modification de la densité de charge et par la suite, du champ électrique dans chaque point du dispositif. Cette modification est prise en compte par l'équation de Poisson. Cette dernière est résolue à des intervalles réguliers pour mettre à jour le champ interne. Cette mise à jour a pour but de refléter la redistribution de la charge due au mouvement des porteurs.

Par la suite, ceci va servir à nouveau pour le calcul du mouvement par la procédure Monte Carlo d'un nouveau pas du temps et ainsi de suite.

D'un point de vue général, la simulation des dispositifs électroniques s'effectue en deux parties : la partie Monte Carlo et l'équation de Poisson qui a pour but de calculer la densité de charge et la mettre à jour les champs électriques, elle est donnée par l'équation suivante :

$$\nabla V(x, y) = -\frac{\rho(x, y)}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \quad (3.25)$$

Où ε_0 et ε_r représentent respectivement la permittivité du vide et la permittivité relative propre à chaque matériau, $V(x, y)$ représente le potentiel électrostatique alors que $\rho(x, y)$ représente la densité des charge totale. Cette dernière est défini comme la somme de toute les contributions de charges fixes et mobiles, elle est donnée par :

$$\rho = q(p + N_D^+ - n - N_A^-) \quad (3.26)$$

Où N_D^+ et N_A^- représentent respectivement la densité d'ions donneurs et accepteurs, alors que n et p représentent respectivement la densité des d'électrons et trous libres.

La densité de charge va représenter la charge mobile dans tout le dispositif et ainsi va être associée au mouvement des porteurs durant la simulation.

Le champ électrique est donné en fonction du potentiel électrostatique par la relation :

$$E(x, y) = -\nabla V(x, y) \quad (3.27)$$

Lors de la résolution de l'équation de Poisson, les dimensions du dispositif électronique sont divisées en M points suivant l'axe des X et N points suivant l'axe des Y . Les dimensions de chaque case élémentaire sont données par les pas spatiaux Δx et Δy . Les dimensions de ces derniers sont définies par l'utilisateur.

Cependant, afin d'obtenir des résultats aussi proche du réel, les choix des pas du maillage spatial et temporel doivent être inférieurs à la longueur de Debye L_D et au temps de relaxation diélectrique τ_D respectivement.

On rappelle que la longueur de Debye est donnée par l'équation suivante :

$$L_D = \sqrt{\frac{\varepsilon K_B T}{q^2 N_D}} \quad (3.28)$$

Où N_D représente la concentration des donneurs, K_B est la constante de Boltzmann, q est la charge élémentaire des électrons, T représente la température et ϵ représente la permittivité du matériau.

Le temps de relaxation diélectrique est donné par [BEL16] :

$$\tau_D = \frac{\epsilon}{qN_D\mu} \quad (3.29)$$

Où μ représente la mobilité des électrons.

Ceci est fait afin d'assurer la cohérence entre le mouvement des électrons et le potentiel électrostatique.

Il est également important de prendre en considération les conditions aux limites sur le potentiel :

- Les conditions aux limites de Dirichlet.
- Les conditions aux limites de Neumann.

Une fois toutes ces conditions rassemblées, l'équation de Poisson peut être résolue en utilisant la méthode de différence finis. Dans le cas d'une résolution à deux dimensions, elle est donnée par la relation suivante :

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} = \frac{V_{i+1,j} - 2V_{i,j} + V_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{V_{i+1,j} - 2V_{i,j} + V_{i-1,j}}{(\Delta y)^2} = -q \frac{N_i - n_i}{\epsilon_0 \epsilon_r} \quad (3.30)$$

Où N_i et n_i représentent respectivement la concentration des dopants et des électrons projetés dans le nœud i .

Etant donné que l'équation de Poisson est résolue sur un maillage, alors, la charge associée aux particules individuelles doit être relié au maillage de champ d'une certaine manière. Alors, un système algébrique d'équation est formé [LAU96].

Les schémas d'attribution de charge et d'interpolation de force généralement utilisés dans les simulations de Monte-Carlo sont les approches NGP (Nearest Grid Point) [Hoc66] et CIC (Cloud In Cell) [BIR69].

Dans l'approche NGP, toute la charge d'une particule donnée est assignée au point de grille le plus proche. Par la suite, la charge de la particule sera concentrée au centre de la cellule considérée. La force sur la particule est également prise comme celle calculée sur le point de

grille le plus proche. Ceci a l'avantage de la simplicité, mais conduit à une distribution de charge bruyante, ce qui peut exacerber l'instabilité numérique de calcul.

Par ailleurs, dans l'approche CIC, une meilleure approximation peut être obtenue en assignant la charge d'une super-particule aux points de cellule les plus proches. Dans le cas d'un maillage à 2 dimensions, la charge est attribuée aux quatre points les plus proches. Cette méthode présente l'avantage de lisser la distribution de charge due aux charges discrètes de la méthode basée sur les particules.

L'approche CIC est regardée comme une amélioration du schéma NGP, il est largement utilisé dans les outils de simulations. Étant donné que le nombre de particules dans une simulation est très limité en comparaison au nombre de particules réelles dans un dispositif, les bruits seront toujours présents dans les solutions générées par les outils de simulation. C'est pourquoi il est préférable d'utiliser un algorithme avancé afin d'éviter le mieux possible ces bruits. Pour cela, au lieu d'utiliser simplement le nombre de particules dans la simulation, chaque particule simulée est représentée par un nuage d'électrons [LAU96]. De ce fait, l'outil de notre simulation utilise l'algorithme cloud-in-cell CIC. La figure (3.12) illustre les méthodes CIC et NGP dans le cas d'un maillage 2D :

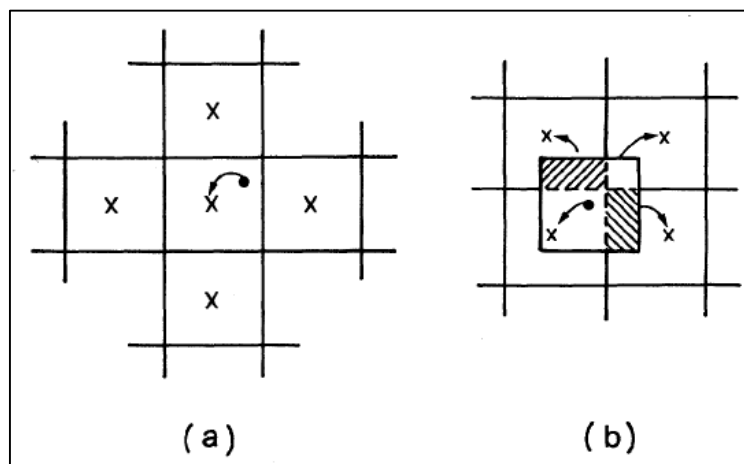


Figure (3.12) : Schéma d'attribution de charges dans le cas d'un maillage 2D :

(a) L'approche NGP, (b) L'approche CIC [JAC89]

Le champ électrique, à travers le dispositif, est défini comme suite [SEL16] :

$$\begin{cases} E_{x_{i,j}} = -\frac{V_{i+1,j} - V_{i-1,j}}{2\Delta x} \\ E_{y_{i,j}} = -\frac{V_{i,j+1} - V_{i,j-1}}{2\Delta y} \end{cases} \quad (3.31)$$

3.2.5. Mise en œuvre de la simulation

Les détails de l'algorithme Monte Carlo adopté pour la modélisation du transport électronique dans les dispositifs électroniques sont représentés par l'organigramme de la figure (3.13) :

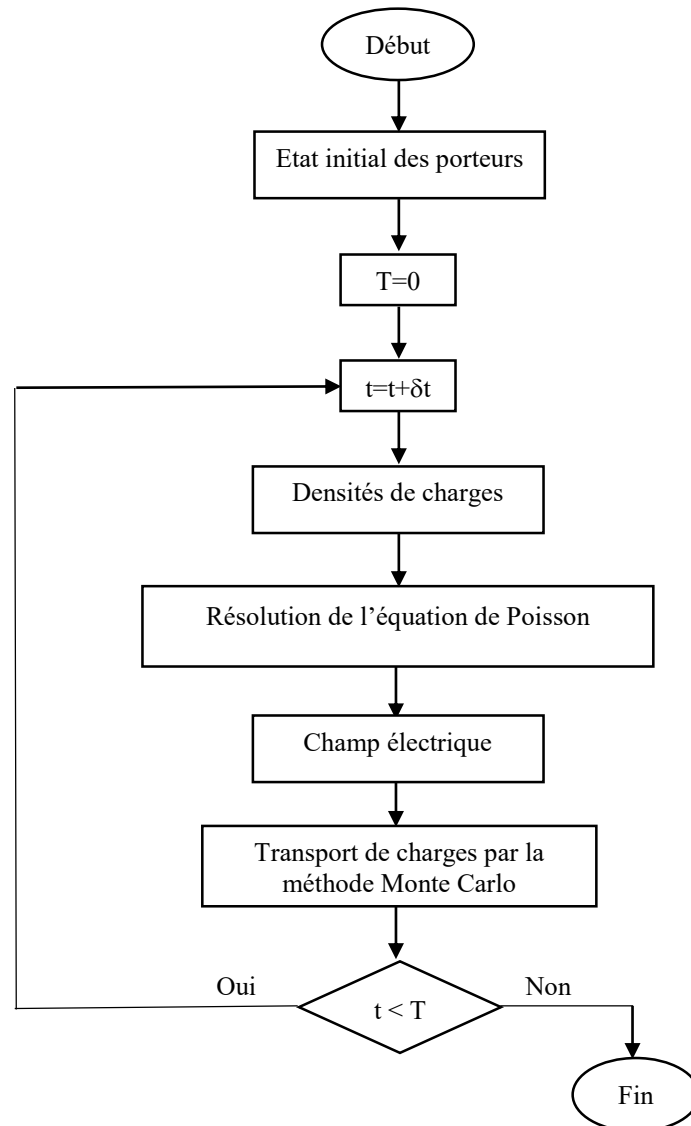


Figure (3.13) : Algorithme général de la méthode Monte Carlo dans les dispositifs électroniques

Pour commencer, le simulateur lit les paramètres initiaux nécessaires à la simulation, tels que les matériaux des différentes couches du dispositif, le temps de la simulation ainsi que le pas du temps, les constantes liées au maillage et à la résolution de l'équation de Poisson, les valeurs des de la décomposition Δx , Δy ...

A chaque pas de temps, tous les porteurs de charges sont animés en utilisant la procédure de Monte Carlo. Après cela, la modification de la densité de charge dans toute la structure est prise en charge par la résolution de l'équation de Poisson qui permet de mettre à jour le champ électrique. Ce couplage est valide en tenant compte des conditions aux limites géométriques. Enfin, la dernière étape de la simulation effectue le calcul des grandeurs moyennes telles que les propriétés microscopiques (la vitesse de dérive et l'énergie des électrons) ainsi que les propriétés microscopiques (caractéristiques courant-tension) et sauvegarde les résultats en mémoire.

Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre le principe général de la simulation par les méthodes de Monte Carlo appliquée au transport électronique dans le cas des matériaux massifs et dans le cas de dispositifs électroniques. Nous avons également présenté les principaux résultats pouvant être fournis par ces simulations. Il est clair de préciser que lors de la simulation des dispositifs nanométriques, il est nécessaire de prendre en considération les effets quantiques dans la simulation qui permettent de d'influencer sur les résultats finaux. Dans le chapitre suivant, nous allons exploiter les résultats obtenus dans notre simulation dans le cas des matériaux massifs et dans le cas des dispositifs électroniques.

Chapitre IV

Résultats de la Simulation et Discussions

Introduction

Dans les chapitres précédents, on a fait une étude sur les propriétés générales des semi-conducteurs III-V, ainsi qu'une étude sur les applications potentielles des matériaux à base d'antimoniures.

Par la suite, on a fait une étude sur les propriétés du transport électronique sur de tels matériaux et voir le comportement des électrons durant leurs mouvements dans les semi-conducteurs sous l'effet des forces extérieures. On a également montré les différents types d'interactions et leurs influences sur le transport électronique.

Dans la troisième partie de notre travail, on a présenté le principe général de la méthode Monte Carlo dans les matériaux massifs et dans les dispositifs semi-conducteurs. Cette méthode a pour but de résoudre numériquement l'équation de transport de Boltzmann qui n'a pas de solutions analytiques exactes. Dans le cas des dispositifs électroniques, à cause de la modification des densités des charges locales ainsi que du champ électrique après les collisions des électrons, l'équation de Boltzmann est couplée avec l'équation de Poisson afin de recalculer les densités de charges et les champs électriques modifiés.

Dans ce dernier chapitre, on va présenter les résultats obtenus dans notre simulation et les comparer avec d'autres résultats existant dans la littérature. Ces résultats sont classés en deux catégories. On va d'abord présenter le comportement des électrons durant leur mouvement sous l'effet du champ électrique dans les matériaux GaSb, l'InSb et le $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ dans le régime stationnaire et dans le régime transitoire et de faire une comparaison de la vitesse de dérive de ces matériaux.

Par la suite, on va présenter les résultats obtenus concernant le transport des électrons dans le transistor MESFET à base du $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ et de voir l'influence du champ électrique et magnétique de tirer les paramètres du courant du drain I_D en fonction de la tension drain-source V_{DS} .

4.1. Transport électronique dans les matériaux massifs

4.1.1. Modèle de simulation

Les propriétés du transport électronique dans les champs électriques élevés sont contrôlées par la forme et les effets de la structure de bande, c'est-à-dire, la largeur de la bande interdite ainsi que le transfert d'électrons vers les vallées satellites.

Pour minimiser les temps des simulations, certaines approximations ont été apportées dans la forme de la structure de bande. En effet, dans le cas de la bande de conduction, on a utilisé le modèle utilisé de Littlejohn qui considère le modèle à trois vallées (Γ , L, X) isotropes et non paraboliques.

La figure ci-dessous montre un aperçu sur le modèle utilisé :

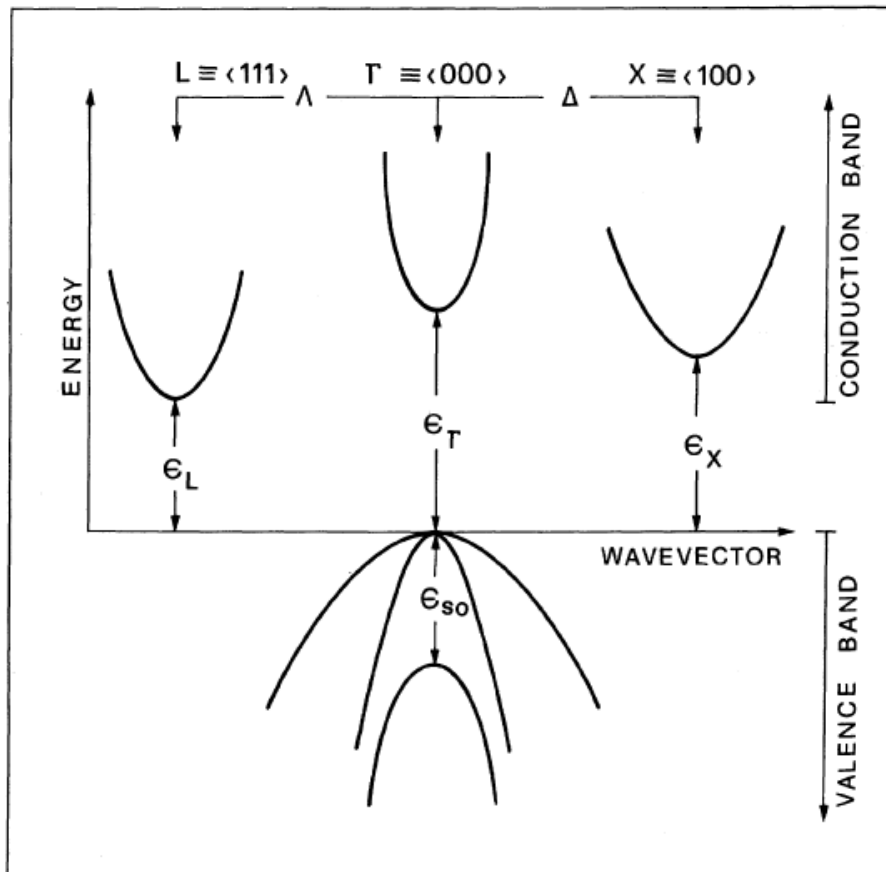


Figure (4.1) : Modèle de simulation à trois vallées [JAC89]

Avec $E_{\Gamma L}$ et $E_{\Gamma X}$ sont les énergies de séparation entre les minimum des vallées Γ -L et Γ -X respectivement.

4.1.2. Présentation de l'outil de la simulation

L'outil de la simulation qu'on a utilisé est décrit en langage de programmation Fortran. La stabilité et la puissance de cet outil lui permet d'être toujours présent lorsqu'il s'agit de la simulation du transport électronique dans les matériaux massifs bien que les langages de programmation sont de plus en plus sophistiqués. Ceci est dû grâce à la simplicité de son utilisation, et surtout grâce à la qualité des résultats obtenus en l'utilisant.

Le programme utilisé simule la trajectoire de Vingt mille (20000) particules. Les particules se déplacent dans le matériau sous l'influence des forces externes et d'événements aléatoires de collisions. Cet outil utilise un modèle à trois vallées, il commence par l'exécution du programme principal. Ce dernier fait d'abord l'initialisation de tous les paramètres utilisés dans la simulation en appelant le sous-programme contenant tous ces paramètres. L'étape suivante consiste à construire des tables de diffusion pour les vallées Γ , L et X. Par la suite, le programme consiste à initialiser l'énergie des porteurs de charges et les vecteurs d'ondes. Une fois les porteurs de charges initialisés selon la distribution de Maxwell-Boltzmann, une vérification est effectuée en appelant le sous-programme qui calcule les histogrammes de l'énergie des porteurs de charges et des vecteurs d'ondes.

Lorsque le processus d'initialisation est terminé, une boucle faisant la procédure vol libre-interactions est exécutée jusqu'à la fin du temps de simulation. Au cours de chaque pas de temps, le sous-programme qui fait l'initialisation est appelé en premier. Il y a deux composants dans cette routine, les porteurs de charges sont accélérés par l'application du champ électrique, alors que les vols libres sont interrompus par les collisions. Chaque tâche dans cette routine est accomplie par un sous-programme approprié.

Le sous-programme qui accomplit le traitement des collisions commence d'abord par choisir le mécanisme d'interaction auquel sont associées certaines propriétés tel que le changement d'énergie (élastique ou inélastique). Dans le cas des collisions inélastiques, le changement d'énergie est dû à l'émission ou à l'absorption de phonons. La nature du processus de diffusion est également identifiée : (isotrope ou anisotrope). Les interactions acoustiques et inter-vallées sont des processus de diffusion isotrope, aucune transformation du système de coordonnées n'est nécessaire pour déterminer le vecteur d'onde final après la diffusion. Par contre, du fait que les interactions optiques polaires sont anisotropes, il est nécessaire de faire une rotation du système de coordonnées, interagir les porteurs de charges dans les nouvelles coordonnées, et ensuite d'effectuer une transformation de coordonnées inverse.

Le sous-programme qui fait les histogrammes est appelé pour vérifier le changement dans la fonction de distribution des électrons sous l'application d'un champ électrique uniforme. Par la suite, un autre sous-programme est appelé pour enregistrer les valeurs des vecteurs d'ondes des porteurs de charges, l'énergie et d'autres paramètres pertinents qui peuvent nous donner une idée si l'évolution temporelle des variables est correcte ou non.

Le fichier d'entrée de simulation est défini sous la forme suivante :

- Le temps de simulation et le pas du temps.
- La température du réseau.
- Le dopage du matériau.
- Le champ électrique dans les trois directions.
- La constante de permittivité du matériau.
- Les masses effectives dans les différentes vallées.
- Les coefficients de non parabolicités dans les différentes vallées.
- L'énergie de séparation entre la vallée centrale et les vallées satellites.
- Les vallées équivalentes des différentes vallées.
- La densité du matériau.
- Les interactions prises en compte dans la simulation.
- Paramètre cristallin du matériau.
- Coefficient stœchiométrique dans le cas des matériaux ternaires.
- Potentiel d'alliage.

Les étapes utilisées sont classées comme suite :

- Lecture du fichier de données contenant les paramètres du matériau ainsi que le nombre des particules simulés et le pas du temps ...
- L'exécution du logiciel.
- L'obtention des résultats des différentes valeurs des taux d'interactions en fonction de l'énergie ainsi que les résultats de la vitesse en régime stationnaire et du régime non stationnaire.

4.1.3. Caractéristiques du transport dans les différents régimes

4.1.3.1. Transport électronique dans le matériau $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$

4.1.3.1.1. Transport électronique dans le régime non stationnaire

Le régime transitoire est étudié pour voir le comportement des électrons en fonction du temps lorsqu'ils sont brusquement soumis à l'effet d'un champ électrique c'est-à-dire lorsque peu d'interactions ont eu lieu.

4.1.3.1.1.1. Vitesse de dérive en fonction du temps pour différents champs électriques

La variation de la vitesse de dérive des électrons en fonction du temps pour différents champs électriques à la température $T=300^{\circ}\text{K}$ est représentée sur la figure (4.2) :

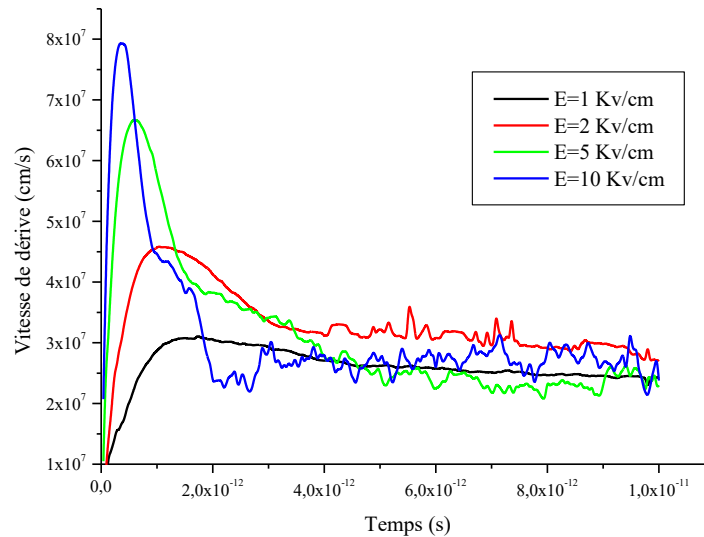


Figure (4.2) : Vitesse de dérive des électrons en fonction du temps pour différents champs électriques

Dans le cas où le champ électrique $E=10$ kV/cm, la vitesse de dérive augmente très rapidement et varie proportionnellement avec le temps aux tout premiers instants de la simulation. Ensuite, l'augmentation devient moins rapide jusqu'à atteindre son maximum. Par la suite, la vitesse décroît rapidement pour atteindre le régime stationnaire et rester pratiquement constante.

On remarque que les électrons effectuent une partie de leurs parcours en régime de survitesse. Ces survitesses apparaissent du fait que dès que les électrons acquièrent de l'énergie sous l'effet d'un champ électrique, il est possible de les transférer vers les vallées satellites. Cependant, étant donné que le nombre des électrons transférés est limité par la valeur de la probabilité de transfert, il reste dans la vallée centrale une partie importante d'électrons légers rapidement portés à des vitesses de plus en plus élevées surtout dans les forts champs électriques.

Lorsque le champ électrique augmente, les pics de survitesse deviennent plus importants et apparaissent plus rapidement. Le régime stationnaire est alors atteint plus rapidement mais avec des vitesses de dérives nettement inférieures à celles des faibles champs électriques. Dans notre cas, les pics de survitesse apparaissent à partir d'un champ de 2 kV/cm.

4.1.3.1.1.2. Vitesse de dérive en fonction du temps pour différentes températures

La variation de la vitesse de dérive des électrons en fonction du temps pour différentes températures au champ électrique $E=10\text{Kv/cm}$ est représentée sur la figure (4.3) :

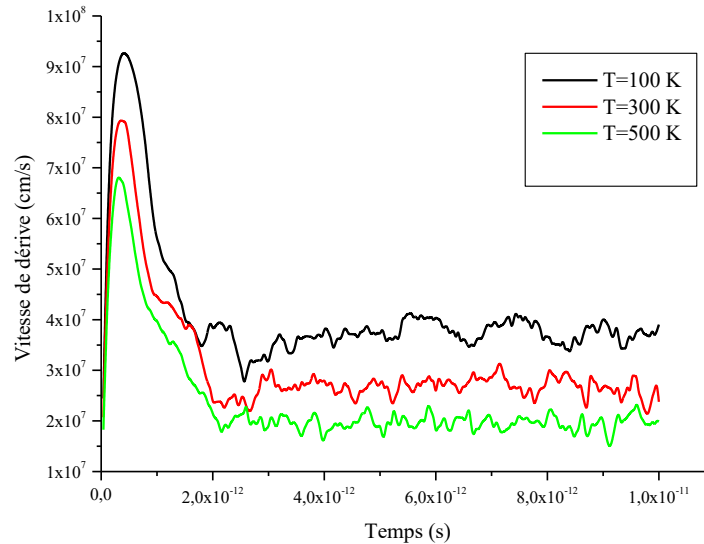


Figure (4.3) : Vitesse de dérive des électrons en fonction du temps pour différentes

Lorsque la température augmente, la vitesse de dérive critique diminue. Cette diminution est due à cause de l'augmentation totale des interactions en fonction de la température qui influe inversement sur la vitesse de dérive.

4.1.3.1.2. Transport électronique dans le régime stationnaire

Le régime stationnaire est atteint lorsqu'il y a un équilibre entre l'accélération des électrons due au gain de l'énergie à travers l'application du champ électrique et le freinage dû aux collisions, c'est-à-dire que lorsque les électrons ont subi plusieurs interactions. La distance parcourue par les électrons est alors plus grande que leurs libre parcours moyen. Les principales grandeurs moyennes accessibles par cette simulation sont la vitesse de dérive, l'énergie et la répartition des populations dans chaque vallée.

4.1.3.1.2.1. Vitesse de dérive en fonction du champ électrique pour différentes températures

La variation de la vitesse de dérive moyenne en fonction du champ électrique pour différentes températures est représentée sur la figure (4.4) alors qu'un résultat existant dans la littérature est représenté dans la figure (4.5) :

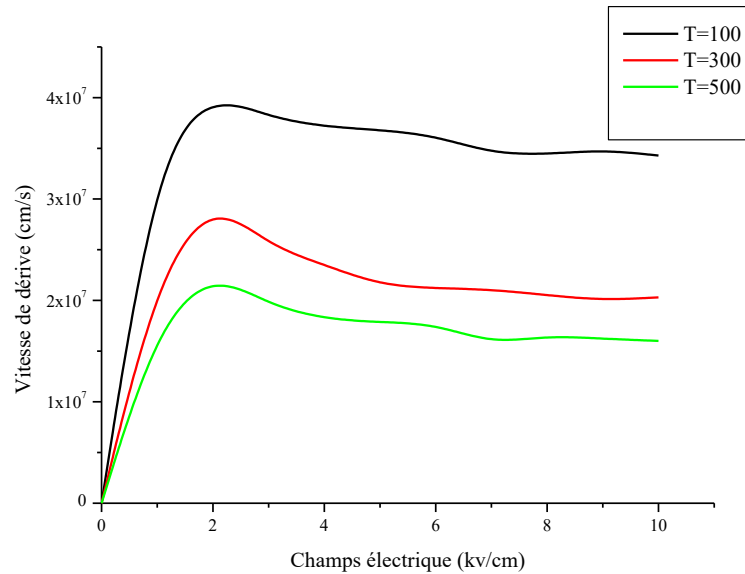


Figure (4.4) : Vitesse de dérive des électrons en fonction du champ électrique pour différentes températures

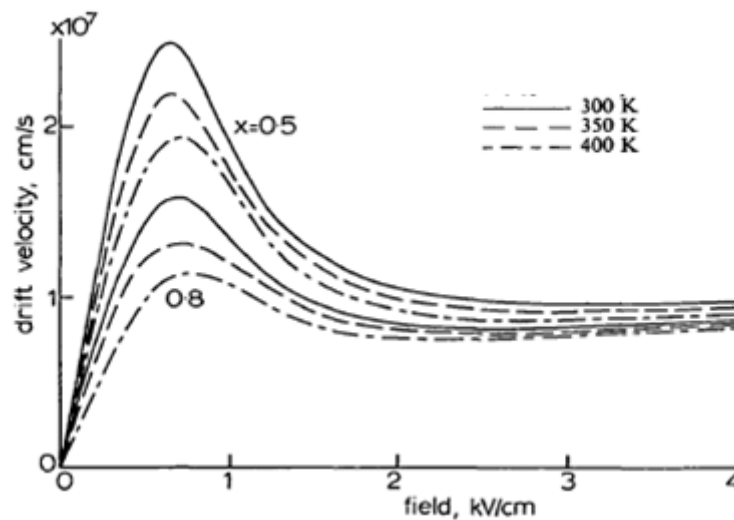


Figure (4.5) : Comparaison avec des résultats expérimentaux [IKO74]

Dans le cas de la température $T=300$ °K, la vitesse de dérive augmente linéairement avec le champ électrique lorsque ce dernier est très faible. Dans ce cas, les électrons se trouvent dans la vallée centrale qui est définie par sa très faible masse effective et sa forte mobilité. Etant donné que l'énergie des électrons est très faible, les interactions se font principalement avec les phonons acoustiques qui sont considérées comme élastiques et n'influent pas généralement sur la vitesse des électrons.

Lorsque le champ électrique augmente, la vitesse augmente mais moins rapidement jusqu'à atteindre son maximum. Dans ce cas, les électrons se trouvent toujours dans la vallée centrale mais l'énergie des électrons est supérieure à $\hbar \omega$. Les interactions se font alors avec les phonons optiques.

Par la suite, l'énergie des électrons devient supérieure à l'énergie de séparation entre la vallée centrale et les vallées satellites. Ceci pousse les électrons d'abord vers la vallée L, puis vers la vallée X de la bande de conduction. Cependant, puisque la mobilité dans ces vallées est plus faible que celle de la vallée centrale, alors, la vitesse diminue considérablement dans cette partie et reste pratiquement constante.

La diminution de la vitesse de dérive dans le régime stationnaire peut être remarquée à partir du transport dans le régime transitoire lorsque le champ électrique augmente. Les valeurs des pics de survitesse dans le régime transitoire sont très supérieures aux valeurs correspondant au régime stationnaire. On peut également noter que les pics de survitesse apparaissent à partir du champ correspondant au champ critique.

4.1.3.1.2.2. Energie en fonction du champ électrique

L'énergie des électrons en fonction du champ électrique à la température $T=300^{\circ}\text{k}$ est représentée dans la figure (4.6) :

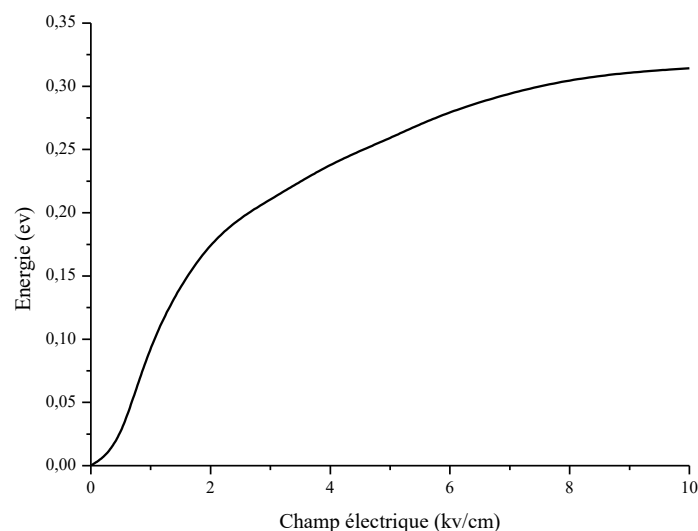


Figure (4.6) : Energie des électrons en fonction du champ électrique

Lorsque le champ électrique est faible, l'énergie des électrons augmente rapidement. Dans ce cas, les interactions se font principalement avec les phonons acoustiques qui sont des interactions élastiques, du coup, il n'y a pas une perte d'énergie après les collisions. Au fur et à mesure que le champ électrique augmente, l'énergie augmente moins rapidement. Ceci est dû à cause des interactions avec les phonons optiques d'une part et les interactions inter-vallées d'autre part qui sont des interactions inélastiques qui modifient l'énergie des électrons.

4.1.3.1.2.3. Taux d'occupations des électrons

Les taux de transfert inter-vallées des électrons en fonction du champ électrique est illustré dans la figure (4.7) :

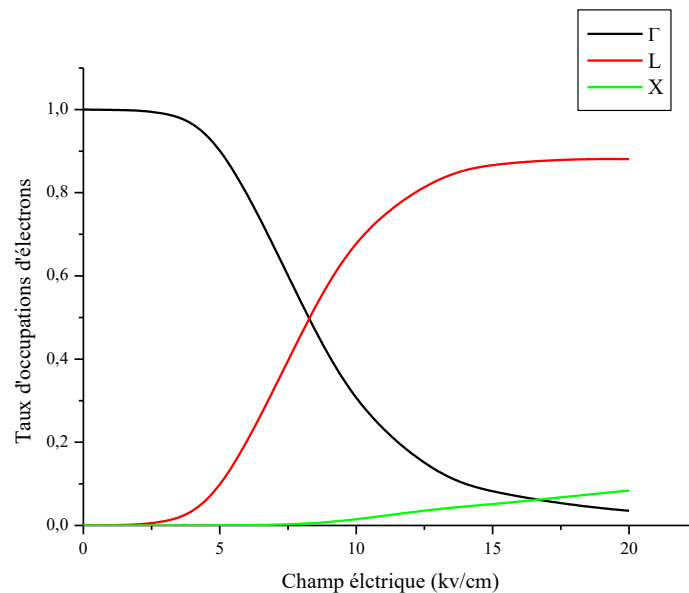


Figure (4.7) : Taux d'occupation des électrons en fonction du champ électrique

A partir des deux figures précédentes, on peut déduire le taux d'occupation des électrons en fonction du champ électrique. En effet, à faible champ électrique, les électrons sont majoritaires dans la vallée centrale. Lorsque le champ électrique augmente, les électrons ont une énergie supérieure à l'énergie de séparation $\Delta E_{\Gamma L}$ et commencent à diffuser vers la vallée L. D'où, la population commence à s'inverser. Par la suite, dès que les électrons gagnent plus d'énergie, le transfert vers la vallée X commence.

4.1.3.2. Transport électronique dans le GaSb, InSb et Ga_{0.5}In_{0.5}Sb

4.1.3.2.1. Transport électronique dans le régime non stationnaire

La variation de la vitesse de dérive moyenne en fonction du temps à T=300°K pour les matériaux GaSb, InSb et Ga_{0.5}In_{0.5}Sb est représentée sur la figure (4.8) :

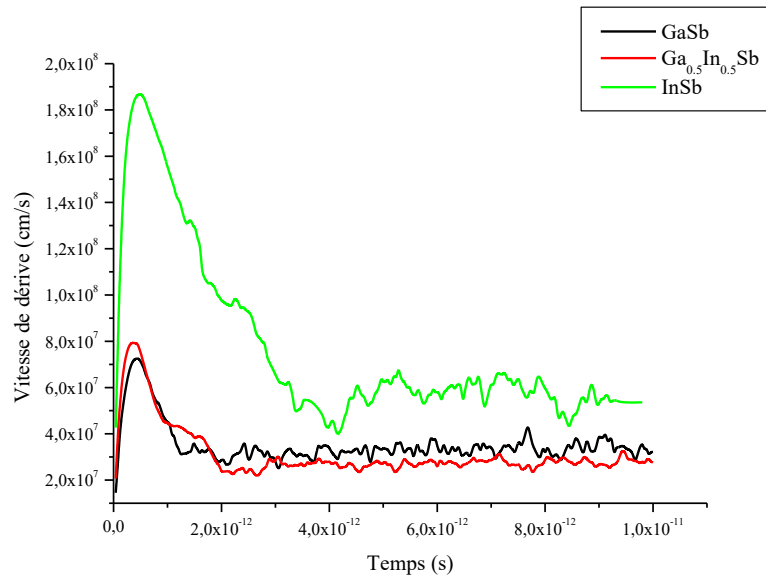


Figure (4.8) : Vitesse de dérive des électrons en fonction du temps dans le GaSb, InSb et Ga_{0.5}In_{0.5}Sb

Ces courbes ont la même allure sauf que les valeurs maximales ainsi que les pentes sont différentes. La variation de la mobilité en fonction du coefficient stœchiométrique est à l'origine de cette différence. Du fait de sa très grande mobilité, la valeur du pic de vitesse dans l'InSb est largement plus importante que celle du Ga_{0.5}In_{0.5}Sb et du GaSb respectivement. Néanmoins, le champ de claquage le plus faible est celui de l'InSb.

4.1.3.2.2. Transport électronique dans le régime stationnaire

La variation de la vitesse de dérive moyenne en fonction du champ électrique à T=300°K pour les matériaux GaSb, InSb et Ga_{0.5}In_{0.5}Sb est représentée sur la figure (4.9) :

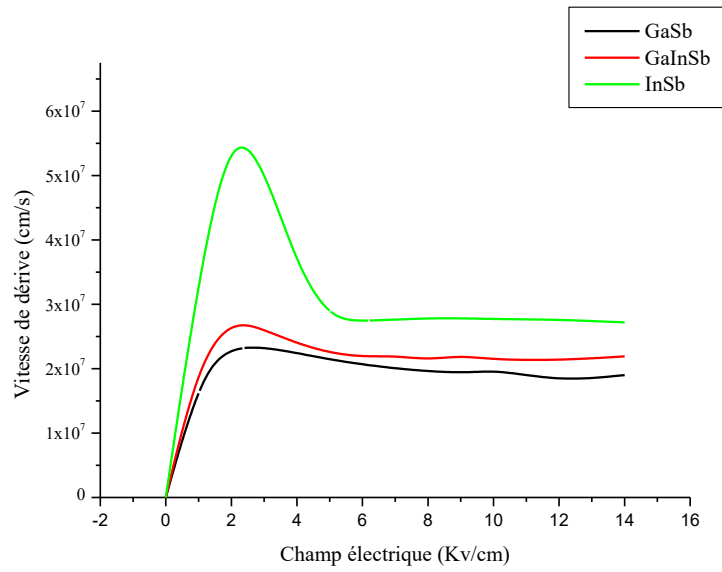


Figure (4.9) : Vitesse de dérive des électrons en fonction du champ électrique dans le GaSb, InSb et Ga_{0.5}In_{0.5}Sb

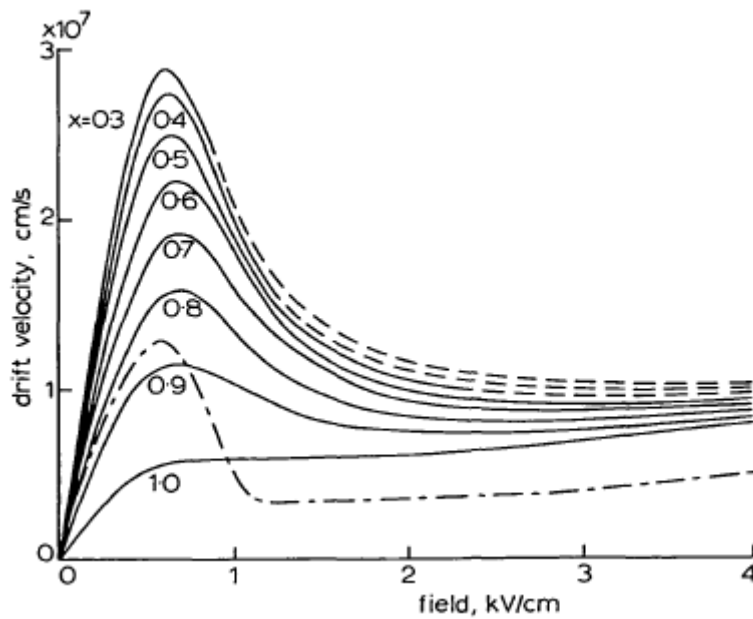


Figure (4.10) : Comparaison avec des résultats expérimentaux [IKO74]

Comme celui du régime non stationnaire, la vitesse de dérive maximale est observée sur l'InSb par rapport au Ga_{0.5}In_{0.5}Sb et au GaSb respectivement.

4.2. Transport électronique dans les dispositifs électroniques

4.2.1. Présentation de l'outil de simulation Archimedes

Le domaine de la simulation des dispositifs à base de semi-conducteurs a connu un développement considérable au point où des échelles extrêmement petites qui ne pouvaient pas être pensées il y a quelques années sont atteintes permettant ainsi de fabriquer avec succès des dispositifs de l'ordre de quelques nanomètres et présentant des effets très intéressants.

La technologie de conception assistée par ordinateur (TCAD) est une branche bien développée qui s'est révélée très importante tant en physique qu'en Ingénierie. Cela a aidé à comprendre les phénomènes physiques extrêmement riches derrière le transport d'électrons dans les dispositifs électroniques d'une part, et a été extrêmement utile pour prédire le comportement de nouveaux dispositifs avant leurs fabrications de manière fiable et précise en permettant de gagner en termes de temps et d'argent d'autre part.

Le transport d'électrons dans les dispositifs semi-conducteurs nanométrique est aujourd'hui décrit sur deux formalismes bien développés et compris, à savoir les théories semi-classiques et quantiques. Ces deux formalismes sont bien représentés respectivement par la méthode Monte Carlo pour le transport semi-classique et le formalisme de l'équation de Wigner pour les dispositifs à l'échelle nanométrique.

Ces deux méthodes semblent être très différentes, mais, leurs points communs est de décrire la dynamique des électrons dans un dispositif semi-conducteur à partir de deux points de vue différents. En effet, la première méthode décrit les électrons comme des particules alors que la deuxième décrit les électrons comme des ondes [SEL16].

L'outil Archimedes est un outil qui appartient à la famille des logiciels TCAD, dans lequel les modèles développés sont basés sur la méthode semi-classique de Monte-Carlo appliquée aux dispositifs électroniques. Ces modèles représentent aujourd'hui l'état de l'art des simulations de dispositifs semi-conducteurs respectivement pour les régimes semi-classiques et quantiques.

L'outil Archimedes appartient au groupe de projet GNU. Il a été créé par Jean Michel Sellier qui est le leader du projet et le principal développeur, il a été publié pour la première fois en 2005. L'outil Archimedes est publié sous GNU General Public License (bien connue sous le nom de GPL) qui donne à l'utilisateur la liberté de télécharger, d'utiliser, de modifier et de redistribuer les sources [SEL12].

Après avoir constaté que dans chaque université dans le monde travaillant sur le transport électronique ait son propre simulateur de Monte-Carlo, l'outil Archimedes a été créé pour éviter de dupliquer les efforts effectués par chaque groupe de recherche et d'unifier leur force pour améliorer les outils de simulation en particulier à base de la méthode de Monte Carlo suivant le développement de la technologie et le rendre dans la plateforme mondiale de logiciels libres GPL.

L'outil Archimedes est utilisé aujourd'hui par de nombreuses universités et entreprises de semi-partout dans le monde, car sa facilité d'utilisation lui a permis d'être un point de départ idéal pour développer de nouveaux codes intéressants pour simuler des dispositifs à base de semi-conducteurs.

Etant donné que la méthode de Monte Carlo est très stable et fiable, l'outil Archimedes permet de simuler et de prédire le comportement d'un dispositif de manière précise, et de fournir ces caractéristiques de sorties avant même qu'il soit fabriqué.

L'outil Archimedes est capable de simuler une multitude d'effets physiques et de transport des électrons et des trous dans le silicium, le germanium, les matériaux III-V binaires tel que le GaAs et AlP, et les alliages ternaires tel que AlInSb, et du GaInSb ainsi que l'oxyde de silicium. Il est basé sur la résolution de l'équation de Boltzmann sous l'effet des champs électriques et magnétiques appliqués au moyen de l'équation de Poisson et de Faraday. Il est également capable de faire face aux hétéro-structures.

L'outil Archimedes est facile à utiliser, il est possible de configurer et d'exécuter une simulation en décrivant la physique et la géométrie d'un dispositif dans un script et de spécifier le modèle de transport utilisé. Du fait que le code est développé en langage C et ne dépendant d'aucune bibliothèque externe, l'outil Archimedes peut être compilé sur n'importe quelle version du système d'exploitation Linux. Il peut également être compilé sous Windows.

Le script de simulation est défini sous la forme suivante :

- D'abord, il faut préciser le mode de transport et le type de porteurs de charges utilisés.
- Le temps de simulation et le pas du temps.
- La longueur et la largeur du dispositif.
- Le maillage suivant la longueur et la largeur du dispositif.
- Les interactions introduites dans la simulation.
- Le modèle de simulation de la bande de conduction.

- Le matériau utilisé dans le dispositif.
- Le dopage dans tout le dispositif.
- Les différents contacts dans le dispositif.
- La polarisation des différents contacts.
- La définition des éventuelles corrections au niveau du potentiel efficace quantique de Bohr dans la simulation.
- Les détails de calcul au cours de la simulation.
- La température du réseau.
- Définition des rapports de sortie.

Dans chaque étape citée ci-dessus, il existe plusieurs choix des paramètres suivant le type de simulation que l'utilisateur doit choisir.

Le code source de l'outil Archimedes est constitué de plusieurs fichiers dont le nombre exact dépend de la version utilisée. Ces fichiers sont écrits en langage C et ont des extensions « .c » et « .h » et doivent être situés dans le même répertoire « src » du simulateur Archimedes. Le code principal est nommé (archimedes.c). Ce code fera appel aux autres fichiers au fur et à mesure dans la simulation.

Les premières lignes du programme sont définies comme des commentaires et présentent les droits d'auteurs et la licence du code. Par la suite, le programme définit les en-têtes standards nécessaires ainsi que les définitions de préprocesseur. Parmi les définitions les plus importantes, le nombre maximum des cellules du maillage spatial dans la direction x et y . On définit également le nombre d'itérations que le code doit faire pour la résolution de l'équation de Poisson. L'une des déclarations les plus importantes, c'est le nombre maximum de particules pouvant être prises en compte lors d'une simulation. En effet, lors de la simulation Monte Carlo, le nombre de particules dans le dispositif varie, ceci est dû au fait que certaines particules entrent dans les contacts ohmiques et d'autres partent. Ce nombre est donc le nombre maximum de particules pouvant être simulées temporairement. L'augmentation de la valeur de ce nombre influe directement sur la quantité de mémoire nécessaire pour faire la simulation. Une fois que le code est modifié, il faut qu'il soit recompilé. Une fois les déclarations du préprocesseur terminées, certaines définitions des variables globales sont effectuées et l'inclusion de toutes les fonctions / routines sont implémentées. Dans ce cas, la partie principale du programme commence par lire les paramètres des matériaux pris en charge par le simulateur et par analyser le fichier d'entrée. Par la suite, d'autres calculs sont effectués sur les paramètres du matériau (en particulier ceux qui dépendent des valeurs fournies par l'utilisateur, telles que la concentration

stœchiométrique, la température du réseau, etc.). A ce stade, la simulation commence. Les conditions aux limites spécifiées par l'utilisateur dans le fichier script d'entrée sont ensuite définies pour les équations de Poisson et de Faraday (respectivement les équations pour les champs électriques et magnétiques).

4.2.2. Simulation de la vitesse de dérive des électrons dans le $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$

Dans cette section, on a fait la simulation du transport électronique dans le matériau $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ par l'outil Archimedes. La variation de la vitesse de dérive des électrons en fonction de la distance est représentée dans les figures suivantes :

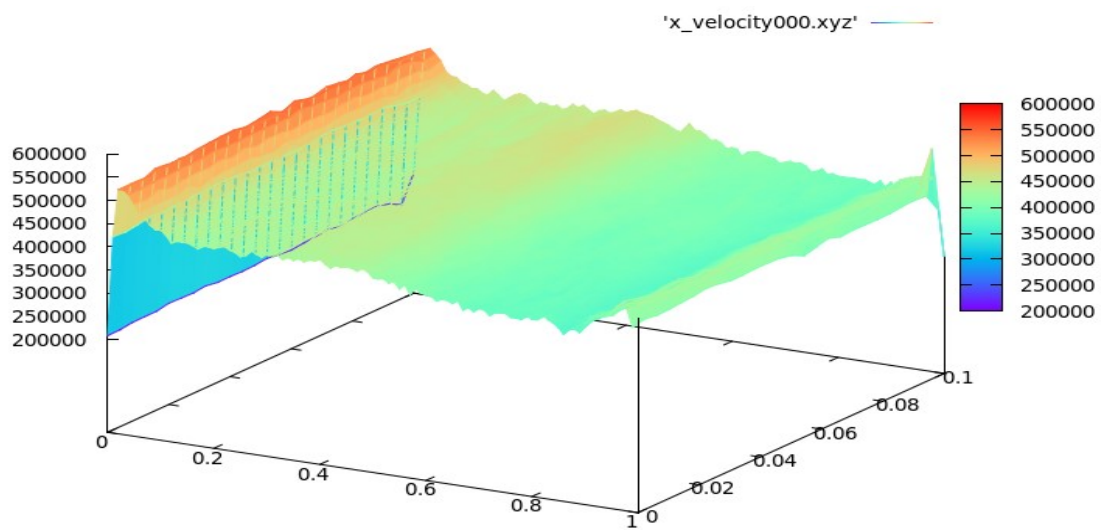


Figure (4.11) : Vitesse de dérive en fonction de la distance

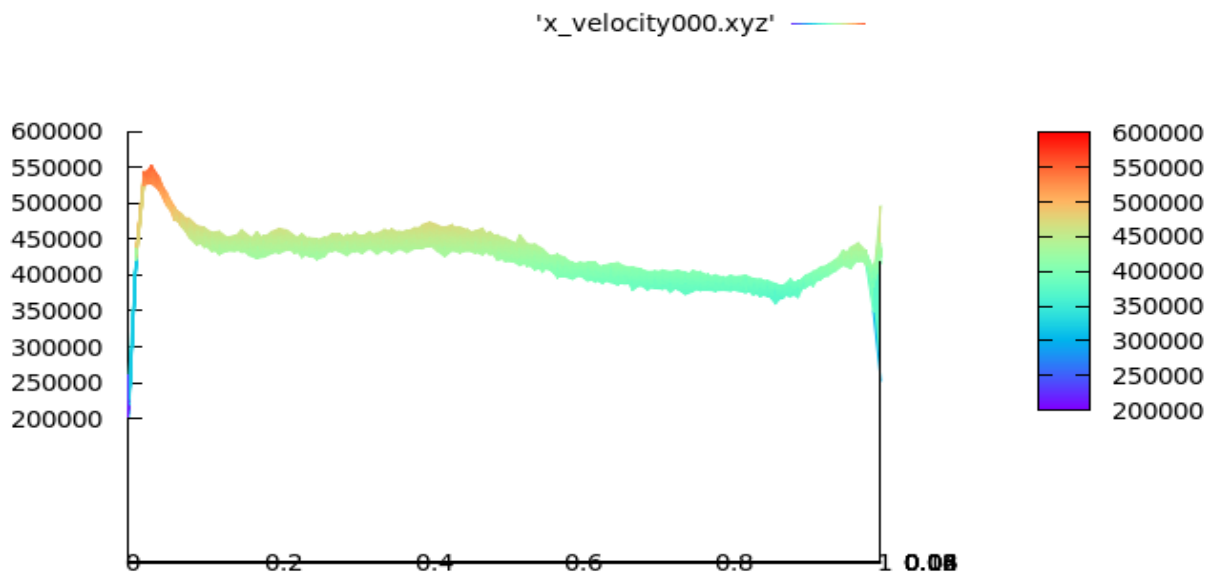


Figure (4.12) : Vitesse de dérive en fonction de la distance

Comme dans le cas de la vitesse de dérive en fonction du temps (figure (4.2) et figure (4.3)), le régime de survitesse apparaît également dans le cas de la vitesse en fonction de la distance. En effet, les électrons se déplacent avec une vitesse qui atteint une valeur de l'ordre de $5.5 \cdot 10^7$ cm/s dans une distance de quelques nanomètres. Par la suite, la vitesse va diminuer jusqu'à atteindre le régime stationnaire.

4.2.3. Simulation d'un transistor MESFET à base du $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$

Dans cette section, on a fait la simulation d'un transistor à effet de champ à grille métal-semi-conducteur MESFET à base du $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ d'une longueur de 600 nanomètres et d'une largeur de 200 nanomètres. Les zones de la source et le drain sont dopés $n=3 \cdot 10^{21}$ /cm³ alors que les autres régions sont dopés $n=10^{21}$ /cm³. Le transistor est divisé dans les directions x et y avec un maillage rectangulaire de 120x40. La température dans laquelle on fait évoluer la simulation est la température ambiante. La structure du transistor simulé est représentée dans la figure ci-dessous :

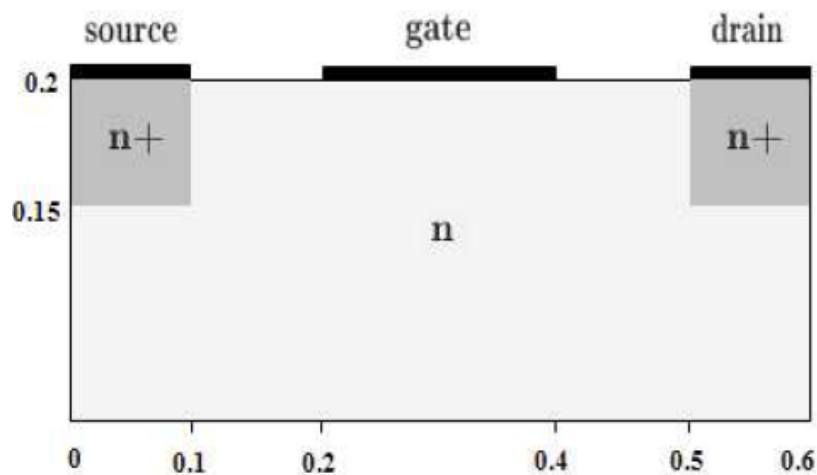


Figure (4.13) : Structure du transistor MESFET simulé

La densité des électrons dans l'ensemble du dispositif en absence de polarisation est représentée dans la figure (4.14) :

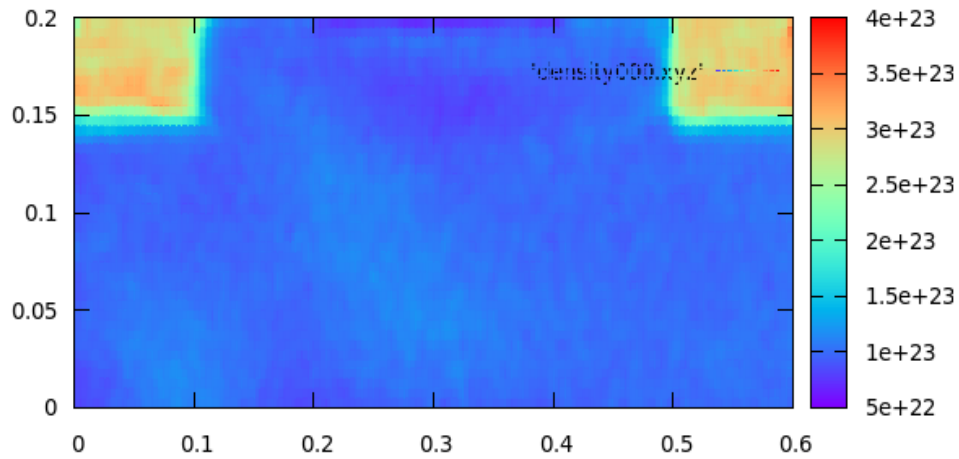


Figure (4.14) : Densité des électrons en absence de polarisation

En absence de la polarisation, la densité des électrons est uniforme dans tout le dispositif et reste constante.

Lorsque la grille est polarisée en inverse et le drain est non polarisé ($V_{gs} = -0.2\text{v}$ et $V_{ds} = 0\text{v}$), la densité des électrons dans l'ensemble du dispositif est représentée dans les figures (4.15) (4.16) :

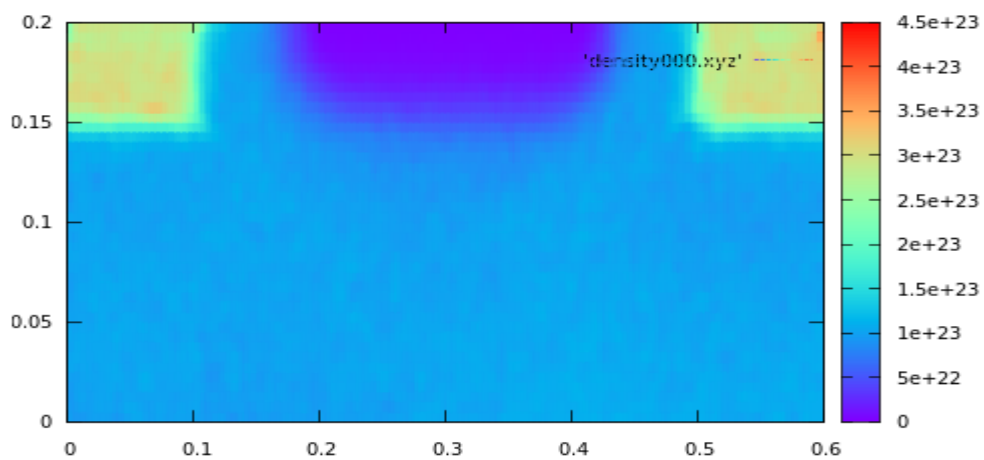


Figure (4.15) : Densité des électrons lorsque V_{gs} est négative et V_{ds} est nulle

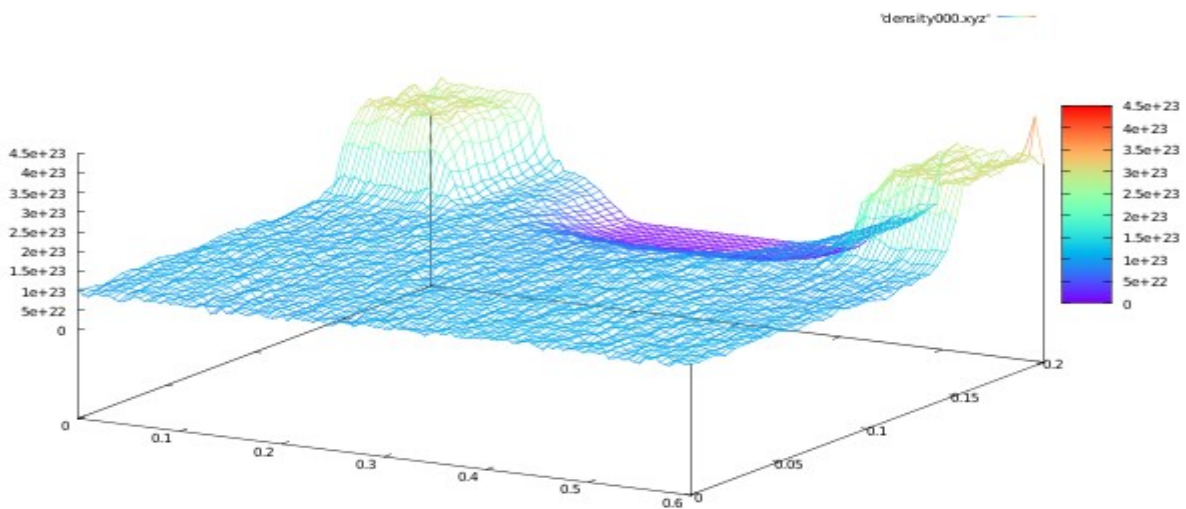


Figure (4.16) : Densité des électrons lorsque V_{gs} est négative et V_{ds} est nulle

Lorsque la tension appliquée sur la grille est négative, une zone de charge d'espace ZCE se crée entre le contact Schottky et le semi-conducteur. Puisque cette ZCE s'étend du côté le moins dopé .i.e. le coté semi-conducteur, elle devient de plus en plus importante lorsque la tension de la grille augmente.

Dans le cas d'un canal conducteur, c'est-à-dire lorsque la grille est polarisé en inverse et le drain est polarisé en direct (par exemple, $V_{gs}=-0.2v$ et $V_{ds}=0.2v$), les électrons commencent à circuler entre la source et le drain, les entités principales obtenues par la simulation tel que le champ électrique, le potentiel électrostatique, l'énergie et la vitesse de dérive des électrons sont représentés dans cette partie.

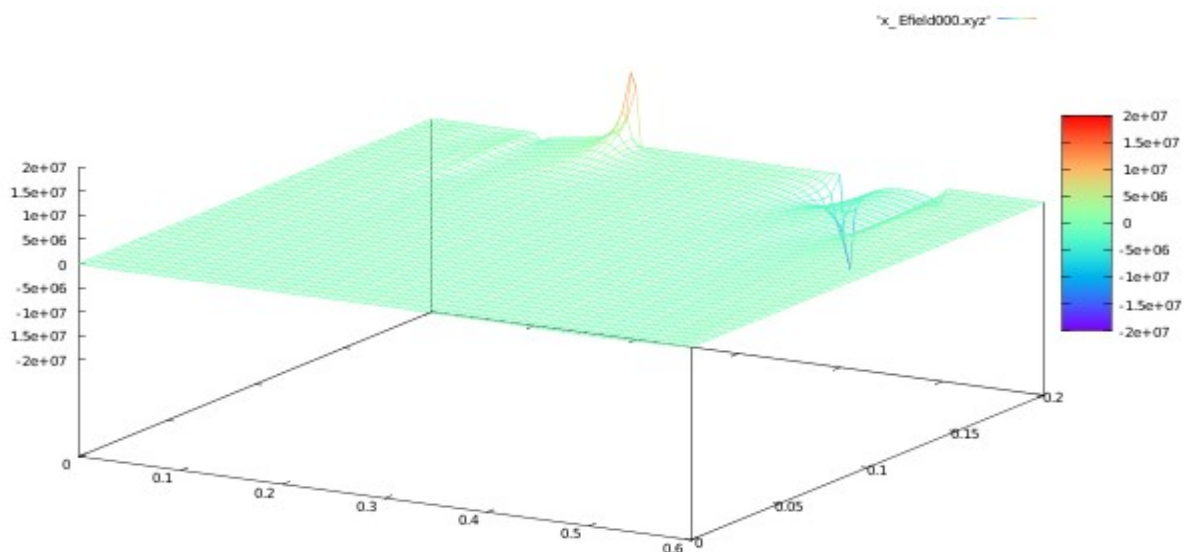


Figure (4.17) : Champ électrique des électrons dans la direction x

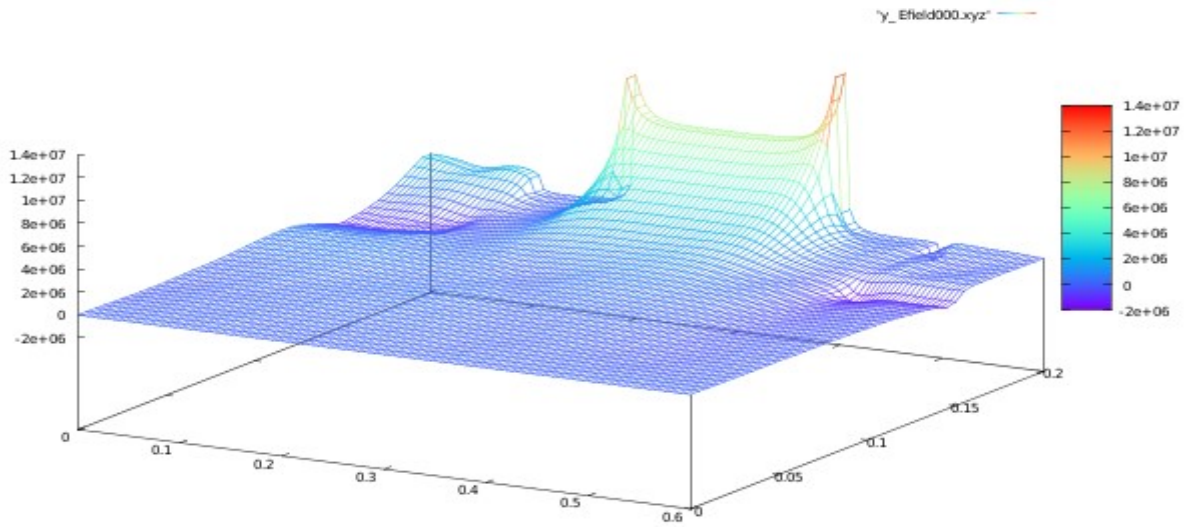


Figure (4.18) : Champ électrique des électrons dans la direction y

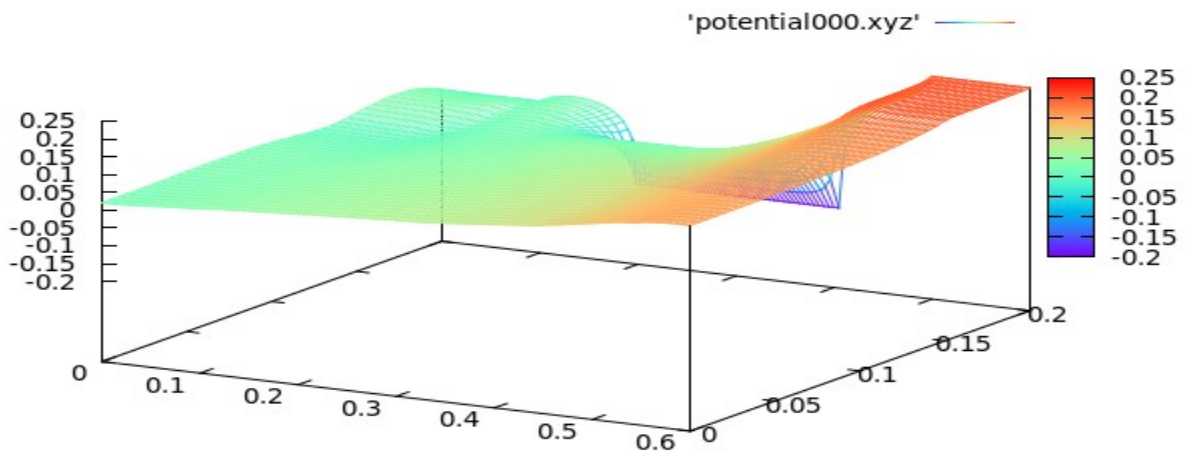


Figure (4.19) : Potentiel des électrons

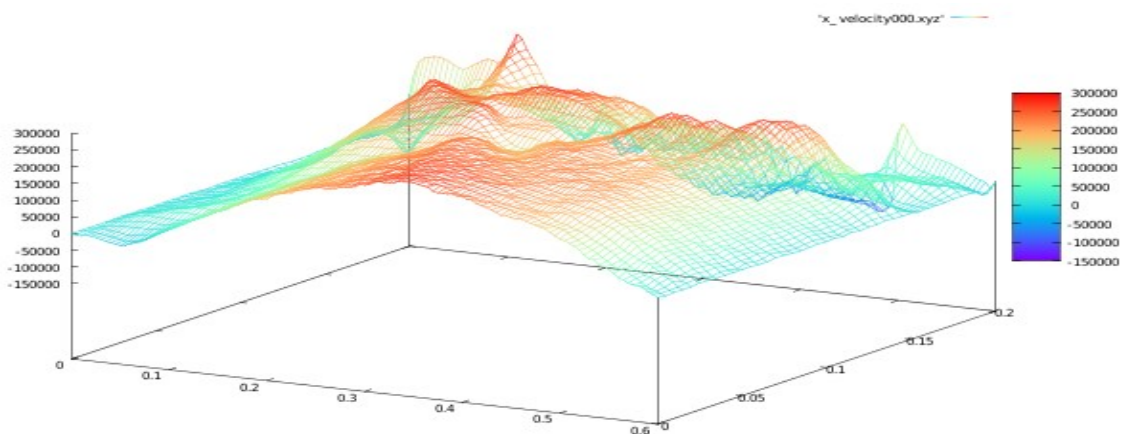


Figure (4.20) : Vitesse de dérive des électrons dans la direction x

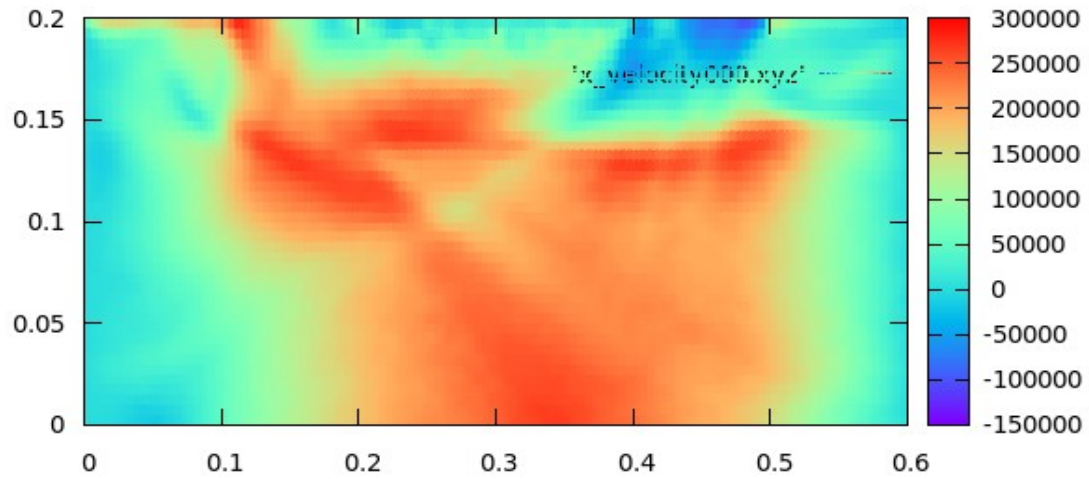


Figure (4.21) : Vitesse de dérive des électrons dans la direction x

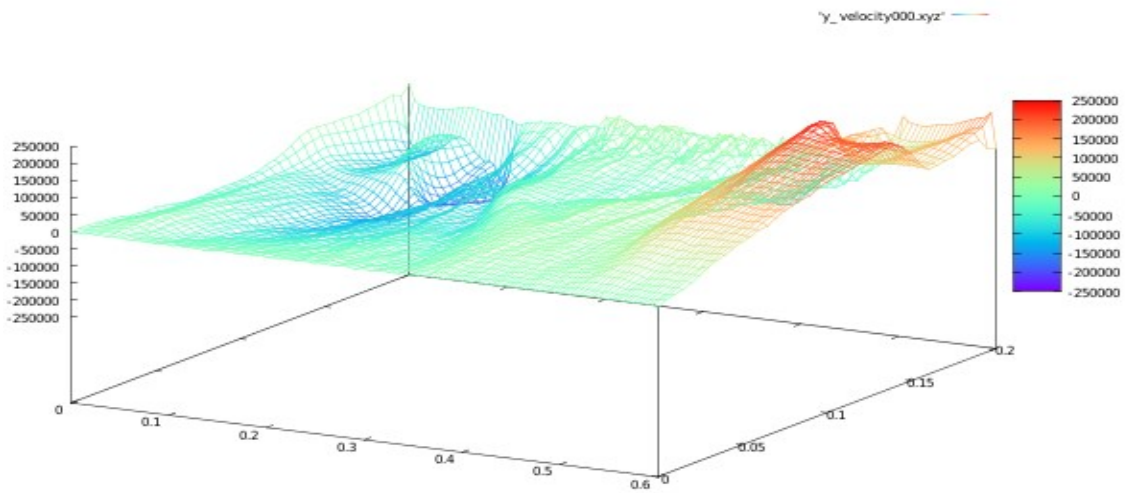


Figure (4.22) : Vitesse de dérive des électrons dans la direction y

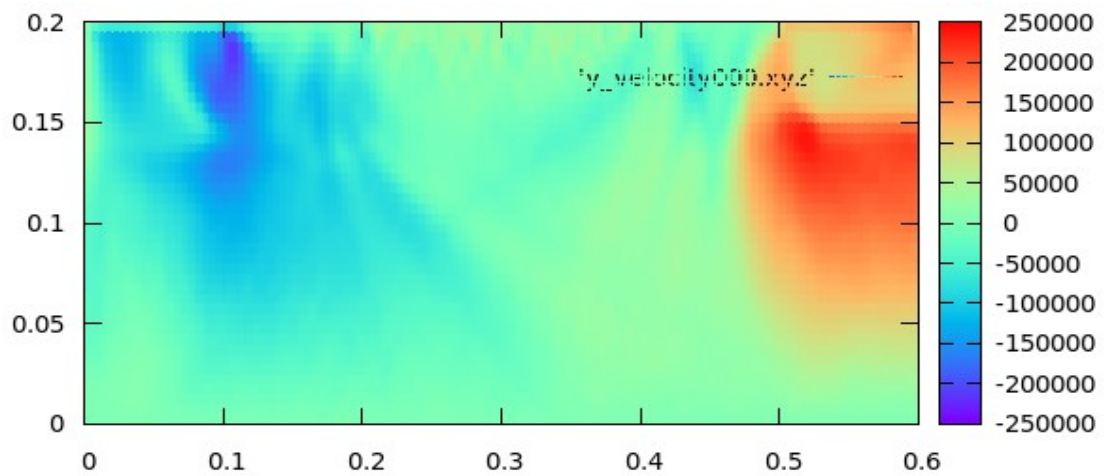


Figure (4.23) : Vitesse de dérive des électrons dans la direction y

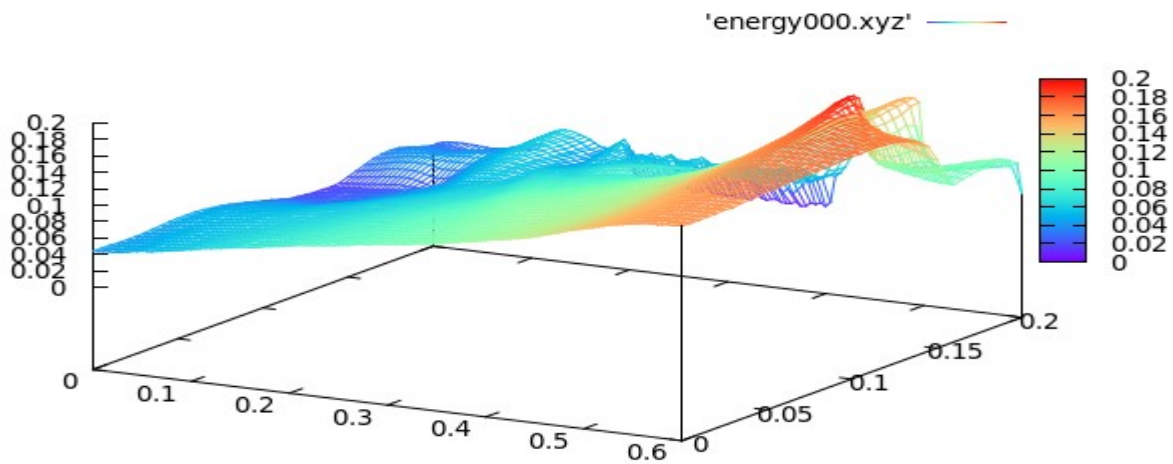


Figure (4.24) : Energie des électrons

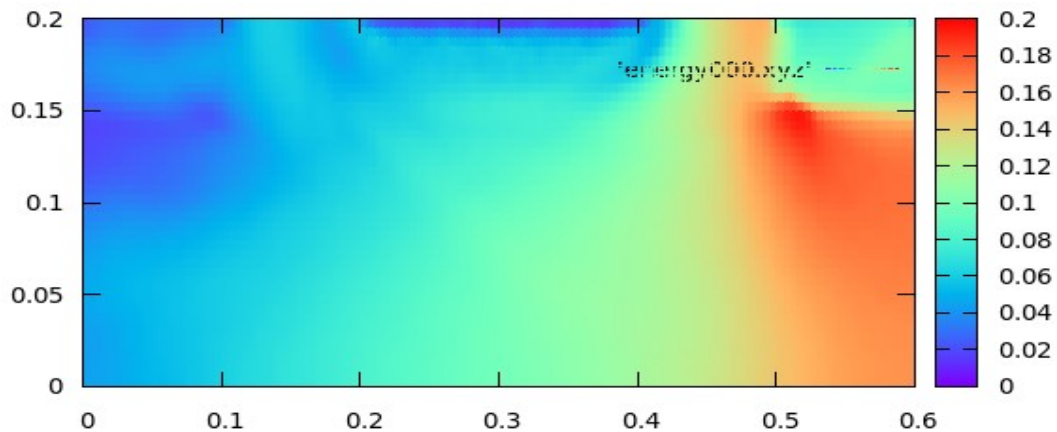


Figure (4.25) : Energie des électrons

Lorsque la tension V_{ds} est positive, le canal est conducteur, les électrons se déplacent de la source vers le drain à travers le canal. Etant donné que la source et le drain sont fortement dopés, donc un surplus d'électrons présents dans le canal donnant naissance à un fort champ électrique et potentiel électrostatique. Le champ électrique provoque une augmentation considérable de la vitesse de dérive des électrons dans le canal qui est de l'ordre de 3.10^7 cm/s. Cette vitesse est supérieure à celle du reste du transistor, il apparait donc le régime de survitesse. D'autre part, ce fort champ électrique permet aux électrons d'atteindre l'interface du drain avec une énergie maximale. Au contact du drain, l'énergie commence à diminuer. Cette diminution est due à cause des effets de collisions qui ont pour conséquence de diminuer l'énergie moyenne des électrons.

L'autre avantage du simulateur que nous avons utilisé est la résolution de l'équation du transport électronique sous l'effet du champ magnétique en utilisant l'équation de Faraday. Les résultats obtenus sont représentés dans la figure (4.26) :

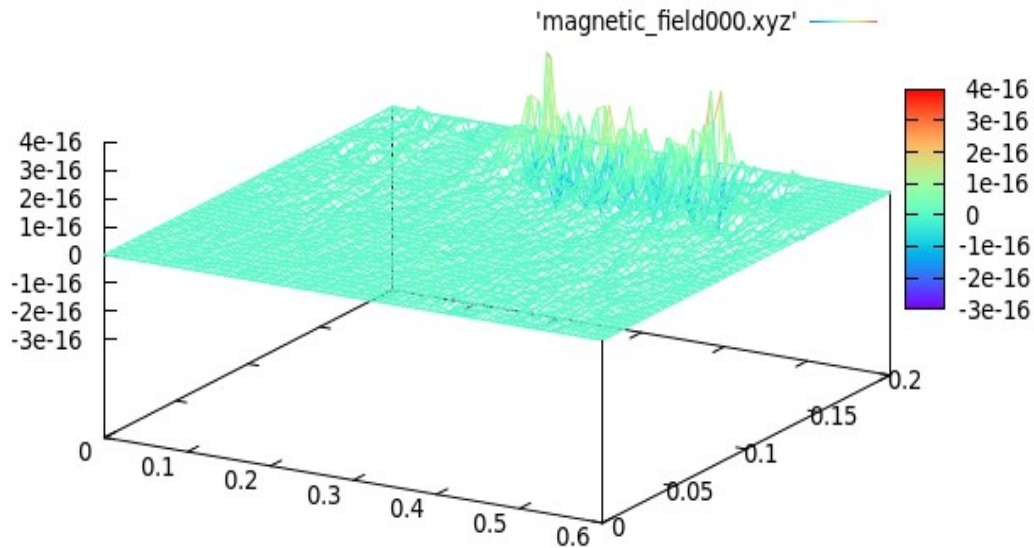
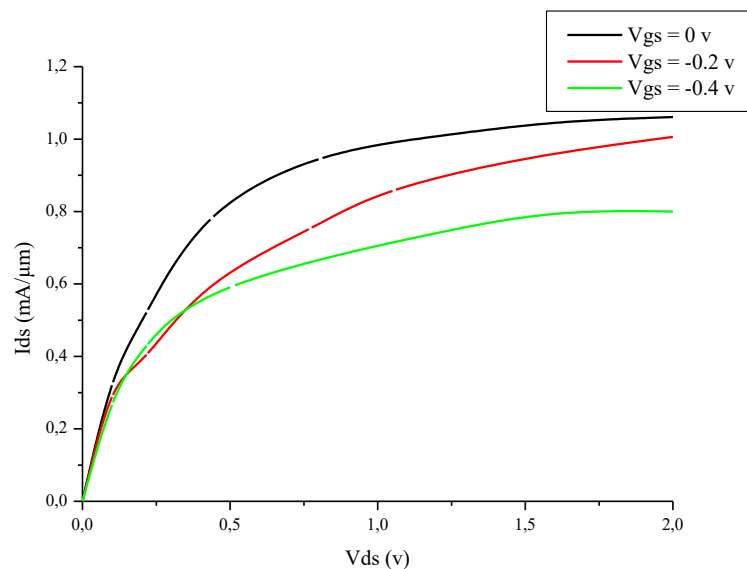


Figure (4.26) : Champ magnétique 3D des électrons

4.2.3.1. Caractéristique I_{ds} (V_{ds})

L'une des principales caractéristiques qui peuvent être obtenues dans l'étude des dispositifs électroniques est la caractéristique courant-tension. En effet, cette caractéristique nous renseigne sur les différents régimes de fonctionnement du dispositif ainsi que sur les propriétés du dispositif.

Les caractéristiques $I_d(V_{ds})$ du transistor simulé sont représentées dans la figure (4.27) dans le cas où $V_{gs}=0\text{v}$, $V_{gs}=-0.2\text{v}$ et $V_{gs}=-0.4\text{v}$:

Figure (4.27) : Caractéristique I_d (V_{ds})

Il est clair que la tension de grille contrôle la zone de déplétion. On note alors que le régime de saturation est atteint à des tensions du drain de l'ordre de 1.5 v. En absence de la tension de grille, le courant de saturation est de l'ordre de 1 mA/ μm . Lorsque la tension de la grille augmente, le courant de saturation diminue et est égal 0.8 mA/ μm dans le cas ou $V_{gs}=-0.4\text{v}$.

Conclusion

Les résultats obtenus dans cette simulation nous montrent clairement que la méthode Monte Carlo est un outil puissant et fiable lorsqu'il s'agit de la simulation du transport des électrons dans les semi-conducteurs massifs et dans les dispositifs électroniques. Les résultats obtenus par les simulations de Monte Carlo peuvent servir d'un repère lors de la réalisation technologique des matériaux et dispositifs déjà simulés.

Conclusion Générale

Dans le but d'étudier le transport électronique dans les dispositifs à partir des matériaux III-V ternaires et en particulier à partir du matériau $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$, on a utilisé le modèle basé sur la simulation par les méthodes de Monte Carlo.

On a d'abord fait l'étude du transport électronique dans matériau massif $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ dans le régime stationnaire et transitoire sous l'effet de la température et du champ électrique. Par la suite, on a fait une comparaison de la vitesse de dérive entre le GaSb, l'InSb et le $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ dans le régime stationnaire et transitoire. L'étude du transport électronique dans les matériaux dépend fortement de la structure de bande ainsi que sur le calcul des paramètres constituant l'alliage. Pour cela, on a adopté le modèle qui prend en considération trois vallées Γ , L et X de la bande de conduction isotopes et non paraboliques.

Dans le régime stationnaire, on a présenté l'évolution de la vitesse de dérive en fonction du champ électrique pour différentes températures. On a également présenté l'énergie et le taux d'occupation des électrons en fonction du champ électrique.

Lorsque le champ électrique est faible, la vitesse des électrons augmente très rapidement avec le champ électrique. Dans ce cas, les électrons sont peuplés dans la vallée centrale qui est caractérisée par sa haute mobilité et les interactions se font principalement avec les phonons acoustiques. Lorsque le champ électrique augmente, la vitesse de dérive atteint la saturation et diminue jusqu'à atteindre le régime stationnaire. Dans ce cas, les interactions se font avec les phonons optiques et les électrons quittent la vallée centrale pour aller aux vallées satellites qui sont caractérisées par des faibles mobilités et des grandes masses effectives.

Dans le régime transitoire, on a présenté l'évolution de la vitesse en fonction du temps pour différentes températures et différents champs électriques. On a vu que les électrons effectuent une partie de leurs parcours en régime de survitesse dans les premiers instants de la simulation.

Les résultats obtenus sont satisfaisants après les avoir comparés avec d'autres résultats existant dans la littérature. Du fait de sa très grande mobilité, l'InSb présente la plus grande vitesse de saturation. Néanmoins, sa faible largeur de bande lui permet d'avoir un champ de claquage très faible par rapport aux autres matériaux.

La deuxième partie des résultats est consacrée à l'étude du transport électronique dans les dispositifs à base de semi-conducteur III-V notamment les transistors MESFET à base du $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$. Pour avoir le champ électrique réparti dans tous les points du dispositif, l'équation

de Poisson est intégré dans le simulateur Monte Carlo afin de mettre à jour le champ électrique à chaque itération temporelle.

Dans cette partie, on a fait la simulation d'un transistor MESFET de 600 nm de longueur et 200 nm de largeur avec un dopage de la source et du drain de $n=3 \cdot 10^{21} / \text{cm}^3$ alors que le reste du dispositif est dopé $n=3 \cdot 10^{21} / \text{cm}^3$.

Les résultats obtenus dans cette partie telle que le champ électrique, le potentiel électrostatique, la vitesse de dérive et l'énergie sont tracés en tout point du dispositif. Parmi les avantages du simulateur que nous avons utilisé, est sa capacité de simuler le transport électronique sous l'effet d'un champ magnétique en utilisant les lois de Faraday.

Les caractéristiques du courant de drain I_d ont également été tracées en fonction de tension du drain V_{ds} pour différentes valeurs de la tension de grille. Le régime de saturation est atteint à des tensions du drain de l'ordre de 1.5 v. En absence de la tension de grille, le courant de saturation est de l'ordre de 1 mA/ μm . Lorsque la tension de la grille augmente, le courant de saturation diminue et est égal 0.8 mA/ μm dans le cas ou $V_{gs}=-0.4\text{v}$.

Les recherches sur les matériaux à base d'antimoniures et plus précisément à base du matériau $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ reste très vastes et leur domaine d'application est multiple, allant de la microélectronique jusqu'aux lasers et détecteurs infrarouges. En ce qui nous concerne, notre objectif dans le futur proche, est de faire une étude sur les transistors HEMT à base de ce matériau et de vérifier à la fois son fonctionnement dans les très hautes vitesses ainsi que sa faible consommation de puissance, et que par la suite, on passe à la réalisation technologique.

Références Bibliographiques

[BAC01] : A. BACHTOLD, P. HADLEY, T. NAKANISHI, and C. DEKKER, «Logic circuits with carbon nanotube transistors», *Science*, Vol. 294, No. 5545, 2001.

[LIN10] : Y. M. LIN, C. DIMITRAKOPOULOS, K. A. JENKINS, D. B. FARMER, H. Y. CHIUM, A. GRILL , P. AVOURIS, «100 GHz Transistors From Wafer Scale Epitaxial Grapheme», *Science*, Vol. 327, No. 5966, 2010.

[GU11] : J. J. GU, Y. Q. LIU, Y. Q. WU, R. COLBY, R. G. GORDON, P. D. YE, «First Experimental Demonstration of Gate All Around III-V MOSFETs by Top-down Approach», *International Electron Devices Meeting*, 2011.

[YUA13] : Z. YUAN, «Antimonide Based III-V CMOS Technology», Thèse de Doctorat, Université de Stanford.

[OUC12] : A. A. EL OUCHDI, «Caractérisation du phénomène de transport électronique dans les matériaux composés ternaires : Application au matériau $GaxIn1-xSb$ », Thèse de Magister, Université de Tlemcen, 2012.

[MAS14] : N. MASSOUM, «Modélisation du transport des porteurs de charge dans les dispositifs actifs MESFET, MOSFET à base de GaInP par la méthode de Monte Carlo», Thèse de Doctorat, université de Tlemcen, 2014.

[KIR75] : P. KIREEV, «Physique des semi-conducteurs», 1ère édition, Moscou, 1975.

[BIL17] : M. BILLAUD, «Intégration de semi-conducteurs III-V sur substrat silicium pour les transistors n-MOSFET à haute mobilité», Thèse de Doctorat, Université de - Grenoble, 2017.

[DEL11] : A. DEL ALAMO, «Nanometer-scale electronics with III-V compound semiconductors», *Nature*, Vol. 487, No. 7373, 2011.

[ITR15] : International Technology Roadmap for Semiconductors, Executive Report, 2015 Edition.

[DEL16] : J. A. DEL ALAMO, D. A. ANTONIADIS, J. LIN, W. LU, A. VARDI AND X. ZHAO, «Nanometer-Scale III-V MOSFETs», *IEEE Journal of the Electron Devices Society*, Vol. 4, No. 5, 2016.

[MAD04] : O. MADELUNG, «Semiconductors data handbook» 3rd edition, 2004.

[BOU07] : B. BOUAZZA, «Simulation Monte Carlo des Composants Microélectroniques à base de Matériaux III-V, II-VI ternaires. Intégration monolithique en électronique de puissance», Thèse de Doctorat, université de Tlemcen, 2007.

[DOU09] : G.DOUADI, «Analyse des transistors à effet de champs MESFET», Thèse de Magister, Université de Constantine, 2009.

[GOU94] : G. GOUREAUX, «Physique des composants à semi-conducteurs», Edition Masson, Paris, 1994.

[LEE96] : J. L. LEE, J. K. MUN, H. KIM, J. J. LEE and H. M. PARK, «A 68% PAE, GaAs power MESFET operating at 2.3 V drain bias for low distortion power applications», *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 43, No. 4, 1996.

[BEC06] : A. BECHRI, «Effets de désordre et du substrat sur la structure électronique dans les alliages semi-conducteurs III-V», Thèse de Doctorat, Université de Constantine, 2006.

[BON03] : O. BONNAUD, «Physique des Solides, des Semi-conducteurs et Dispositifs», 2003.

[ODO91] : K. P. O'DONNELL and X. CHEN, «Temperature dependence of semiconductor band gaps», *Applied Physics Letter*, Vol. 58, No. 25, 1991.

[SAY10] : C. SAYAH, «Etudes des effets du champ électromagnétique sur les propriétés des composés III-V par la méthode de Monte Carlo et l'équation de Poisson couplées», Thèse de Doctorat, Université de Tlemcen, 2010.

[LEV96] : M. LEVINSHTEIN, S. RUMYANSEV and M. SHUR, «Handbook series on semiconductor parameters : Ternary and quaternary III-V compounds», Vol.2, 1996.

[ADA09] : S. ADACHI, P. CAPPER, S. KASAP and A. WILLOUGHBY, «Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors», Wiley, 1st Edition, 2009.

[KAW77] : M. KAWASHIMA, K. OHTA and S. KATAOKA, «Ga_xIn_{1-x}Sb for high speed transferred electron devices», International Electron Devices Meeting, 1977.

[IKO74] : T. IKOMA, K. SAKAI, Y. ADACHI and H. YANAI, «Velocity/field characteristic of Ga_xIn_{1-x}Sb calculated by Monte Carlo method», Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 16, No. 8, 1977.

[MIT06] : A. MITRIC, T. DUFFAR, C. DIAZ-GUERRA, V. CORREGIDOR, L.C. ALVES, C. GARNIER and G. VIAN, «Growth of Ga_{1-x}In_xSb alloys by Vertical Bridgman technique under alternating magnetic field», Journal of Crystal Growth, Vol. 287, No. 2, 2006.

[KIP11] : G. KIPSHIDZE, T. HOSODA, W. L. SARNEY, L. SHTERENGAS and G. BELENKY, «High-Power 2.2- μ m Diode Lasers With Metamorphic Arsenic-Free Heterostructures», IEEE Photonics Technology Letters, Vol. 23, No. 5, 2011.

[GHA12] : S. G. GHALAMESTANI, M. EK, B. GANJIPOUR, C. THELANDER, J. JOHANSSON, P. CAROFF and K. A. DICK, «Demonstration of Defect-Free and Composition Tunable Ga_xIn_{1-x}Sb Nanowires», Nano Letters, Vol. 12, No. 9, 2012.

[HOS12] : T. HOSODA, D. WANG, G. KIPSHIDZE, W. L. SARNEY, L. SHTERENGAS and G. BELENKY, «3 μ m diode lasers grown on (Al)GaInSb compositionally graded metamorphic buffer layers», Semiconductor Science and Technology, Vol. 27, No. 5, 2012.

[YUA13] : Z. YUAN, «Antimonide-based iii-v CMOS technology», PHD thesis, Stanford University, 2013.

[MA14] : L. MA, W. HU, Q. ZHANG, P. REN, X. ZHUANG, H. ZHOU, J. XU, et al, «Room-Temperature Near-Infrared Photodetectors Based on Single Heterojunction Nanowires», Nano Letters, Vol. 14, No. 2, 2014.

[ROS03] : M. ROSKER and J. SHAH, «DARPA's program on Antimonide Based Compound Semiconductors (ABCS)», 25th Annual Technical Digest 2003. IEEE Gallium Arsenide Integrated Circuit (GaAs IC) Symposium, San Diego, USA, 2003.

[LIU10] : C. LIU, Y. LI and Y. ZENG, «Progress in Antimonide Based III-V Compound Semiconductors and Devices», Engineering, Vol. 2, No. 8, 2010.

- [OLII10] : A. OLIVIER, «Fabrication et caractérisation de transistors à effet de champ de la filière III-V pour applications basse consommation», Thèse de Doctorat, Université de Lille, 2010.
- [LIA15] : Z. L. FENG, T. ZHEN, W. JING and X. JUN, «GaSb p-channel metal-oxide-semiconductor field-effect transistor and its temperature dependent characteristics», Chinese Physics B, Vol. 24, No. 1, 2015.
- [HAC05] : J. B. HACKER, J. BERGMAN, G. NAGY, G. SULLIVAN, C. KADOW, H. K. LIN, A. C. GOSSARD, M. RODWELL and B. BRAR, «An ultra-low power InAs/AlSb HEMT W-band low-noise amplifier», IEEE MTT-S International Microwave Symposium Digest, 2005.
- [KWA09] : M. M. KO, j. H. S. SEO, D. E. KIM, S.T. LEE, Y. K. NOH, M.D. KIM and J.E. OH, « The Growth of a Low Defect InAs HEMT Structure on Si by Using an AlGaSb Buffer Layer Containing InSb Quantum Dots for Dislocation Termination,» Nanotechnology, Vol. 20, No. 22, 2009.
- [ROG07] : A. ROGALSKI, « Material Considerations for Third Generation Infrared Photon Detectors », Infrared Physics & Technology, Vol. 50, No. 2-3, 2007.
- [ROG08] : A. ROGALSKI, « New Material Systems for Third Generation Infrared Photo Detectors », Optoelectronics Review, Vol. 16, No. 4, 2008.
- [WAL08] : M. WALTHER, R. REHM, J. SCHMITZ, F. RUTZ, J. FLEISSNER and J. ZIEGLER, «Antimony-Based Superlattices for High-Performance Infrared Imagers», Proceedings of SPIE 6940, 2008.
- [NES06] : O. NESHER and P. C. KLIPSTEIN, « High-Performance IR Detectors at SCD Present and Future », Opto-Electronics Review, Vol. 14, No. 1, 2006.
- [MAU03] : M. G. MAUK and V. M. ANDREEV, « Gasb-Related Materials for TPV Cells », Semiconductor Science and Technology, Vol. 18, No. 5, 2003.
- [COR01] : E. CORBIN, M. J. SHAW, M. R. KITCHIN, J. P. HAGON and M. JAROS, «Systematic study of type II Ga_{1-x}In_xSb/InAs superlattices for infrared detection in the 10-12 μm wavelength range», Semiconductor Science and Technology, Vol. 16, No. 4, 2001.

[ZHA06] : Y. G. ZHANG, Y. L. ZHENG, C. LIN, Z. LI and S. LIU, «Continuous Wave Performance and Tunability of MBE Grown 2.1 μM InGaAsSb/AlGaAsSb MQW Lasers», Chinese Physics Letters, Vol. 23, No. 8, 2006.

[BAU09] : A. BAUER, F. LANGER, M. DALLNER, M. KAMP, M. MOTYKA, G. SEK, K. RYCZKO, J. MISIEWICZ, S. HÖFLING and A. FORCHEL, «Emission Wavelength Tuning of Interband Cascade Lasers in the 3-4 μM Spectral Range», Applied Physics Letters, Vol. 95, No. 25, 2009.

[YAM05] : N. YAMAMOTO, «Next Generation Optical Communications through Nanotechnology», NICT News, Vol. 353, 2005.

[NIK09] : L. N. NIKITINA, S. V. OBUKHOV and V. G. TYUTEREV, «AB INITIO calculations of the deformation potentials for inter-valley phonon-assisted transitions in $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ crystals with sphalerite structure», Russian Physics Journal, Vol. 52, No.7, 2009.

[ARA11] : H. ARABSHAHI, «Three valley model for the study of electron transport properties at very high electric field in bulk GaSb, GaSb_{0.5}As_{0.5} and GaAs materials», International Journal of Science and Advanced Technology, Vol. 1, No. 3, 2011.

[BON71] : E. BONEK, «Deformation potential constant for Γ -L transitions in GaSb», Electronics letters, Vol. 7, No. 21, 1971.

[STO00] : G. STOLLWERCK, O. V. SULIMA and A. W. BETT, «Characterization and simulation of GaSb device-related properties», IEEE transactions on electron devices, VOL. 47, No. 2, 2000.

[PEI86] : S. R. PEIRELS, «Nuclear Physics 1929-1952», Niels Bohr Collected Works, Vol. 9, 1986.

[JAC89] : C. JACOBONI and P. LUGLI, «The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation», Springer- Verlag Wien, 1989.

[KOH57] : W. KOHN and J. M. LUTTINGER, «Quantum Theory of Electrical Transport Phenomena», Physical Review Journals Archive, Vol. 103, No. 3, 1957.

[KAD62] : L. P. KADANOFF and G. BAYM, «Quantum Statistical Mechanics», Benjamin, New York, 1962.

[BAR79] : J. R. BARKER and D. K. FERRY, «Self-Scattering Path-Variable Formulation of High-Field, Time-Dependent, Quantum Kinetic Equations for Semiconductor Transport in the Finite-Collision-Duration Regime», Physical Review Letters, Vol. 42, No. 56, 1979.

[BAR82] : J. R. PARKER, «Fundamental Aspects of Quantum Transport. In: Handbook on Semiconductors», Vol. 1, 1982.

[HAM10] : C. HAMAGUCHI, «Basic Semiconductor Physics», Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2nd Edition, 2010.

[CON67] : E. N. CONWELL, «High Field Transport in Semiconductors (Solid State Physics Supplements)», Academic Press Inc, 1967.

[FAD83] : M. FADEL, «Contribution à l'étude du bruit et du transport en régime d'électrons chauds dans l'InP», Thèse de Docteur de 3^{ème} cycle électronique, Université des Sciences et Techniques du Languedoc 1983.

[BIR74] : G. L. BIR and G. E. PIKUS, «Symmetry and strain-induced effects in semiconductors», Translated from Russian by P. SHELNITZ, Translation edited by D. LOUVISH, 1974.

[HAM07] : A. K. HAMDOUNE, B. BOUAZZA, A. GUEN-BOUAZZA, A. E. LALLAM, N. E. CHABANE-SARI, «Développement de la méthode de Monte Carlo pour le calcul des interactions et du transport électrique dans les semi-conducteurs ternaires», Afrique Science, Vol. 3, No. 2, 2007.

[FAW71] : W. FAWCETT and E. G. S. PAIGE, «Negative differential mobility of electrons in germanium: A Monte Carlo calculation of the distribution function, drift velocity and carrier population in the (111) and (100) minima», Journal of Physics C: Solid State Physics, Vol. 4, No. 13, 1971.

[JAC81] : C. JACOBONI, F. NAVA, C. CANALI and G. OTTAVIANI, «Electron drift velocity and diffusivity in germanium», Physical Review B, Vol. 24, No. 2, 1981.

[QUA71] : A. A. QUARANTA, C. JACOBONI and G. OTTAVIANI, «Negative differential mobility in III–V and II–VI semiconducting compounds», *La Rivista Del Nuovo Cimento*, Vol. 1, No. 4, 1971.

[NOR72] : P. NORTON and H. LEVINSTEIN, «Determination of Compensation Density by Hall and Mobility Analysis in Copper-Doped Germanium», *Physical Review B*, Vol. 6, No. 22, 1972.

[HAU76] : J. R. HAUSER, M. A. LITTLEJOHN and T. H. GLISSON, «Velocity-field relationship of InAs-InP alloys including the effects of alloy scattering», *Applied Physics Letter*, Vol. 28, No. 8, 1976.

[HAR76] : A. HARTSTEIN, T. H. NING and A. B. FOWLER, «Electron scattering in silicon inversion layers by oxide and surface roughness», *Surface Science*, Vol. 58, No. 1, 1976.

[DES98] : F. DESSENE, «Etude Theorique et Optimisation de Transistors à Effet de Champ de la Filiere InP et de la Filiere GaN», Thèse de Doctorat, Université de Lille, 1998.

[SAI05] : J.SAINT-MARTINY, «Etude par simulation Monte Carlo d'architectures de MOSFET ultracourts a grille multiple sur SOI», thèse de Doctorat, Université De Paris-Sud, 2005.

[POU88] : F. POUPAUD : «Etude mathématique et simulations numériques de quelques équations de Boltzmann», Thèse de Doctorat, Université Paris 6, 1988.

[MAR90] : P. A. MARKOWICH, C. A. RINGHOFER and C. SCHMEISER, «Semiconductor equations», Springer-Verlag, Wien-New York, 1990.

[LEP96] : S. LEPAUL, «Contribution à la modélisation numérique des composants électroniques aux dimensions nanométriques», Thèse de Doctorat, Université Paris 6, 1996.

[HAD99] : D. HADJI : «Modélisation Et Simulation Tridimensionnelle Des Composants à Semi-conducteur De Taille Submicronique», Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 1999.

[KUR66] : T. KUROSAWA, «Monte Carlo Calculation of Hot Electron Problems», Proceeding of International Conference on the Physics of Semiconductors, Kyoto, Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 21, 1966.

[FAW70] : W. FAWCETT, A. D. BOARDMANN, and S. SWAIN, «Monte-Carlo determination of electron transport properties in gallium arsenide», Journal of the Physics and Chemistry of Solids, vol. 31, No. 9, 1970.

[PRI79]: P. J. PRICE : «Semiconductors and semimetals», Academic Press, Chap. 4, Vol. 14, 1979.

[HOC88] : R.W.HOCKNEY and EASTWOOD, «Computer simulation using particles», Higler, Bristol and New York, 1988.

[BOU05] : B. BOUAZZA, A. GUEN BOUAZZA, L. AMER, C. SAYEH, N. E. CHABANE SARI et C. GONTRAND, «Etude du transport électronique dans le substrat InAs de type N par la simulation de Monte Carlo», Afrique science, Vol. 1, No. 1, 2005.

[MET49] : N. METROPOLIS and S. ULAM, «The Monte Carlo Method», Journal of the American Statistical Association, Vol. 44, No. 247, 1949.

[FIS16] : M. V. FISCHETTI and W. G. VANDENBERGHE, «Advanced Physics of Electron Transport in Semiconductors and Nanostructures», Springer International Publishing, 2016.

[LUT60] : B. LUTCHI and P. WYDER, « A Monte Carlo calculation for a size effect problem», Helvetica Physica Acta, 1960.

[JAC10] : C. JACOBONI, «Theory of Electron Transport : A Pathway from Elementary Physics to Nonequilibrium Green Functions in Semiconductors», Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2010.

[CAN75] : C. CANALI, C. JACOBONI, F. NAVA, G. OTTAVIANI, and A. A. QUARANTA, «Electron drift velocity in silicon», Physical Review B, Vol. 12, No. 4, 1978.

[LIT78] : M. A. LITTLEJOHN, J. R. HAUSER, T. H. GLISSON, D. K. FERRY and J. W. HARRISON, «Alloy Scattering And High Field Transport In Ternary And Quaternary III-V Semiconductors», Solide State Electronics, Vol. 21, No. 1, 1978.

[REG85] : L. REGGIANI, «Recent results on hot-electron quantum transport», *Physica B+C*, Vol. 134, No.1-3, 1985.

[HES91] : K. HESS, «Monte Carlo Device Simulation : Full Band And Beyond», Springer US, 1991.

[SAY08] : C. SAYEH, B. BOUAZZA, A. GUEN BOUAZZA et N. E. CHABANE SARI, «Etude théorique du transport électronique par la simulation Monte Carlo dans le quaternaire $\text{In}_{0.863}\text{Ga}_{0.137}\text{As}_{0.3}\text{P}_{0.7}$ », *Afrique Science*, Vol. 4, No. 2, 2008.

[FAR02] : A.FARIBAULT, «Simulation Monte Carlo du transport et de la relaxation des porteurs dans les structures à boites quantiques auto-assemblées», *Mémoire de maitre des sciences*, Université de Sherbrooke, Québec, Canada, 2002.

[BOU05] : B. BOUAZZA, A. GUEN BOUAZZA, C. SAYEH, L AMER, N. E. CHABANE SARI et C. GONTRAND, «Étude du transport électronique dans le substrat InAs de type N par la simulation de Monte Carlo», *Afrique Science*, Vol. 1, No. 1, 2005.

[VAS10] : D. VASILESKA, S. M. GOODNICK et G. KLIMECK, «Computational Electronics Semiclassical and Quantum Device Modeling and Simulation», CRC Press, 2010.

[REE69] : H. D. REES, «Calculation of distribution functions by exploiting the stability of the steady state», *Journal of physics and Chemistry of solids*, Vol. 30, No. 3, 1969.

[SEL16] : J. M. SELLIER, «GNU Archimedes Manual: The GNU Package for the Simulation of Semiconductor Devices», Create Space Independent Publishing Platform, 2016.

[VAS06] : D. VASILESKA and S. M. GOODNICK, «Computational Electronics», Morgan and Claypool Publishers, 2006.

[FER92] : D. FERRY, C. JACOBONI, «Quantum Transport in Semiconductors», Springer US, 1992.

[MAH87] : J. R. PARKER, «Quantum transport equation for electric and magnetic fields», *Physics Reports*, Vol. 145, No.5, 1987.

[GUM64] : H. K. GUMMEL, «A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady state transistor calculations», IEEE Transactions on Electron Devices, Vol. 11, No. 10, 1964.

[DEM68] : A. DE MARI, «An accurate numerical steady-state one-dimensional solution of the P-N junction», Solid State Electronics, Vol. 11, No. 1, 1968.

[LOE68] : H. W. LOEB, R. ANDREW and W. LOVE, «Application of 2-dimensional solutions of the Shockley-Poisson equation to inversion-layer m.o.s.t. devices», Electronics Letters, Vol. 4, No. 17, 1968.

[SCH68] : J. E. SCHROEDER and R. S. MULLER, «IGFET Analysis through numerical solution of Poisson's equation», IEEE Transactions on Electron Devices, Vol. 15, No. 12, 1968.

[KEN69] : D. P. KENNEDY and R. R. O'BRIEN, «Two-dimensional Mathematical Analysis of a Planar Type Junction Field-effect Transistor», IBM Journal of Research and Development, Vol. 13, No. 6, 1969.

[SLO69] : J. W. SLOTBOOM, «Iterative scheme for 1- and 2- dimensional d.c.-transistor simulation», Electronics Letters, Vol. 5, No. 26, 1969.

[SEL84] : S. SELBERHERR, «Analysis and Simulation of Semiconductor Devices», Springer-Verlag Wien New York, 1984.

[SCH52] : W. SHOCKLEY, «A Unipolar Field Effect Transistor», Proceedings of the IRE, Vol. 40, No. 11, 1952.

[DUB03] : N. DUBUC, «Modélisation électrothermique de transistors MESFET Sic et optimisation d'une architecture Doherty pour l'amplification de puissance à haute rendement», Thèse de Doctorat, Université de Limoges, 2003.

[MEA66] : C. A. MEAD, «Schottky barrier gate field effect transistor», Proceedings of the IEEE, Vol. 54, No. 2, 1966.

[KHE09] : S. KHEMISSI, «Modélisation Non Linéaire Des Composants à Effet De Champ», Thèse de Doctorat, Université de Constantine, 2009.

[BEL16] : Y. BELHADJI, «Analyse et modélisation des mécanismes de transport électronique dans les dispositifs à effet de champ à l'aide des techniques Monte Carlo : Application au MESFET à base de carbure de silicium, GaSb, et ternaires», Thèse de Doctorat, Université de Tlemcen, 2016.

[LAU96] : S. KHEMISSI, «On Particle Mesh Coupling in Monte Carlo Semiconductor Device Simulation», IEEE Transactions on Computer Aided Design of Integrated Circuits and Systems, Vol. 15, No. 10, 1996.

[HOC66] : R. W. HOCHNEY, «Computer Experiment of Anomalous Diffusion», Physics of Fluids, Vol. 9, No. 9, 1966.

[BIR69] : C. K. BIRDSALL and D. FUSS, «Clouds-in-clouds, clouds-in-cells physics for many-body plasma simulation», Journal of Computational Physics, Vol. 3, 1969.

[SEL12] : J. M. SELLIER, J. E. FONSECA and G. KLIMECK, «Archimedes, the free Monte Carlo simulator: A GNU package for submicron semiconductor devices on nanoHUB», 15th International Workshop on Computational Electronics, USA, 2012.

Production Scientifique

Publications Internationales

A. A. EL OUCHDI, B. BOUAZZA, Y. BELHADJI and N. MASSOUM, « Study and Simulation of Electronic Transport in Ga_{0.5}In_{0.5}Sb Based on the Monte Carlo Method », Semiconductors, Vol 51, Issue 12, December 2017.

<https://link.springer.com/article/10.1134/S1063782617120053>

[DOI: 10.1134/S1063782617120053](https://doi.org/10.1134/S1063782617120053)

Semiconductors

ISSN: 1063-7826 (Print) 1090-6479 (Online)

Indexation

Science Citation Index, Science Citation Index Expanded (SciSearch), Journal Citation Reports/Science Edition, SCOPUS, INSPEC, Chemical Abstracts Service (CAS), Google Scholar, Academic OneFile, CNKI, Current Abstracts, Current Contents Collections / Electronics & Telecommunications Collection, Current Contents/Physical, Chemical and Earth Sciences, EBSCO Academic Search, EBSCO Advanced Placement Source, EBSCO Energy & Power Source, EBSCO Engineering Source, EBSCO Science & Technology Collection, EBSCO STM Source, EBSCO TOC Premier, Gale, INIS Atomindex, International Bibliography of Book Reviews (IBR), International Bibliography of Periodical Literature (IBZ), OCLC, ProQuest Advanced Technologies & Aerospace Database, ProQuest SciTech Premium Collection, ProQuest Technology Collection, SCImago, Summon by ProQuest

Impact factor: 0.602

N. MASSOUM, A. GUEN BOUAZZA, B. BOUAZZA and **A. A. EL OUCHDI**, « Modeling the transport of charge carriers in the active devices diode submicron n⁺-n-n⁺, based upon Ga_{0.49}In_{0.51}P by the Monte Carlo method», International Journal of Engineering Research and Applications, Vol. 5, Issue 1, 2015

N.MASSOUM, A.GUEN BOUAZZA, B.BOUAZZA and **A. A. EL OUCHDI**, « Modeling the transport of charge carriers in the active devices MESFET, based of GaInP by the Monte Carlo method», International Journal of Mechanical, Aerospace, Industrial, Mechatronic and Manufacturing, Vol. 9, No. 1, , 2015

Communications Internationales

Y. BELHADJI, B. BOUAZZA and **A. A. EL OUCHDI**, « Electronic Transport Characteristics In 4H-SiC Polytype Under High Electric Field », The 5th International Conference on Electrical Engineering, October 29-31 2017, Boumerdes, Algeria

A. A. EL OUCHDI, B. BOUAZZA, Y. BELHADJI and N. MASSOUM, « Effect of the Temperature on the Electronic Transport in Ga_{0.5}In_{0.5}Sb Material Using the Monte Carlo Method », 2nd International Conference on Technological Advances in Electrical Engineering, October 24-26 2016, Skikda, Algeria

A. A. EL OUCHDI, B. BOUAZZA, Y. BELHADJI and N. MASSOUM, « Comparative study of Electronic Transport between GaSb, InSb and Ga_{0.5}In_{0.5}Sb », 2nd International Conference on Technological Advances in Electrical Engineering , October 24-26 2016, Skikda, Algeria

Autres Communications Internationales

A. A. EL OUCHDI, N. TAHIR and A. BOUOUDEN, « Design and Physical Implementation of a Data Transfer Interface Used in Network on Chip», 9th International Conference on Electrical and Electronics Engineering, November 26-28 2015, Bursa, Turkey

N. TAHIR, M. BOUDRAA and **A. A. EL OUCHDI**, « Implementation of cosine function used in Discrete Cosine Transform for computing MFCC Coefficient », 2nd International Conference on Technological Advances in Electrical Engineering , October 24-26 2016, Skikda, Algeria

N. TAHIR, S. TAGZOUT and **A. A. EL OUCHDI**, « CAMs and High Precision Data for Trigonometric Functions», 9th International Conference on Electrical and Electronics Engineering, November 26-28 2015, Bursa, Turkey

Communications Nationales

A. A. EL OUCHDI, N. TAHIR and A. BOUOUDEN, « Data Transfer Interface Implementation for Using in Network on Chip», 3rd Workshop of the Speech Communication and Signal Processing Lab, December 05 2016, Algiers, Algeria

**ELECTRONIC PROPERTIES
OF SEMICONDUCTORS**

Study and Simulation of Electron Transport in $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ Based on Monte Carlo Method¹

A. A. El Ouchdi^{a, b*}, B. Bouazza^a, Y. Belhadji^{a, c}, and N. Massoum^a

^a Research Unit of Materials and Renewable Energies, Abou Bakr Belkaid University, Tlemcen, Algeria

^b Division of Microelectronics and Nanotechnologies, Centre de Développement des Technologies Avancées, Algiers, Algeria

^c Electrical and Engineering Department, Faculty of Applied Sciences, University of Tiaret, Tiaret, Algeria

*e-mail: elouchdi.amine@gmail.com

Submitted September 10, 2015; accepted for publication January 31, 2017

Abstract—This work addresses the issue related to the electronic transport in the III–V ternary material $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ using Monte Carlo method. We investigated the electronic motion in the three valleys Γ , L , and X of the conduction band. These three valleys are isotropic, non-parabolic and centred on the first Brillouin zone. In our study, we included scatterings with ionised impurities, acoustic and polar optical phonons, as well as, intervalley and intravalley interactions. We discussed the electronic transport characteristics at the stationary and the transient regimes in function of temperature and electric field.

DOI: 10.1134/S1063782617120053

1. INTRODUCTION

The need of electronic devices operating under strength constraint environments, such as high electric field, high temperature and high frequency, has pushed the research toward the fabrication of electronic devices based on ternary and quaternary materials with two variants, namely, III–V or II–VI groups [1]. Indeed, the narrow bandgap antimonide based compound semiconductors are regarded as good materials operating on such circumstances. Among antimonies, the gallium indium antimonide ($\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$) owning a stoichiometric coefficient x crystallising and following zinc-blende structure have gain high attention of researchers. The first interests granted to the $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ goes back to the seventies of the last century, where its fundamental properties were introduced [2, 3]. Through time, investigations continued to growth up significantly going from simple GaInSb structures to more complexes heterostructure based electronic devices such as, laser diodes and transistors, etc. [4–9]. In fact, the features of this material include those of GaSb and InSb materials such as low direct band-gap (from 0.17 to 0.72 eV), high mobility (from 5000 to 80000 $\text{cm}^2/(\text{V s})$) and low effective masses (from 0.014 m_e to 0.042 m_e) [10]. Moreover, $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ properties can be adjusted following Vegard's laws only by controlling the stoichiometric coefficient x .

GaInSb is an important material for the microelectronics, since it is used for the fabrication of the third

generation of high-electron mobility transistors (HEMT), heterojunction bipolar transistor (HBT) devices, as well as, ultra-high speed, ultra-lower power consumption and good noise performance integrated circuits [11]. Furthermore, antimonies based materials are the most suitable for the design of third-generation Infrared detectors [11]. Also, in infrared lasers, it can be used in chemical detection, biomedical diagnostics, satellite remote sensing technology and thermo-photovoltaics cells [12].

This paper goes through three main steps; the first part gives an overview of the Monte Carlo method, the second part show results of different interactions in function of the energy, while the final part aims at highlighting the drift velocity in both stationary and transient regimes.

2. DESCRIPTION OF THE METHOD

The Monte Carlo method gives a precise solution of studying the non-equilibrium carrier transport in semiconductor based electronic devices at high electric field and high temperature. This method is used for the resolution of Boltzmann equation which considers the distribution function variation of electrons in movement.

In this method, the dynamics of electrons passes through two steps, free flights and scatterings with the network. During the free flight, the evolution of posi-

¹The article is published in the original.

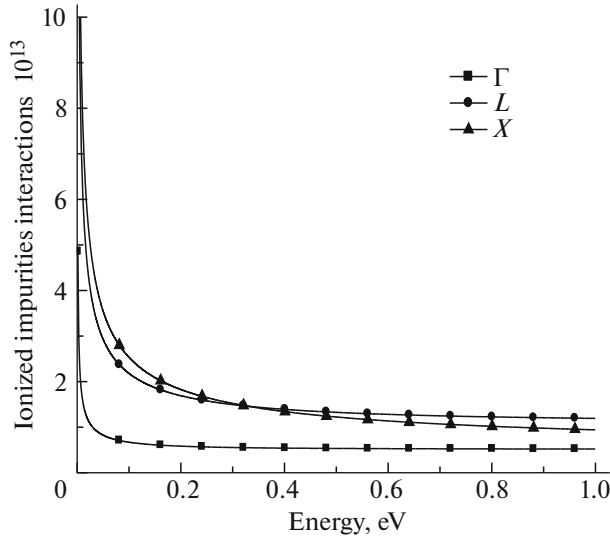


Fig. 1. Ionized impurities interactions.

tion and wave vector as function of time in the absence of the external field is given by the following equations:

$$\begin{cases} \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar} eE, \\ \frac{dr}{dt} = \frac{\hbar}{m^*} k, \end{cases} \quad (1)$$

where E represents the electric field, k stands for the electron wave vector, r refers to the position vector and e is the electron charge.

Time of flight is calculated by self scattering approach which aims to introduce an additional interaction. This interaction does not affect the electron motion and makes the total interaction probability Γ constant. Time of flight can be calculated using a random number r which varies between 0 and 1 as expressed in Eq. (2):

$$\Delta t = -\frac{1}{\Gamma} \ln(r). \quad (2)$$

Under an electric field, electrons change from their initial state (r_i, k_i) at time t_i to the final state (r_f, k_f) at time t_f , during a short time δt . Therefore, the electron movement in absence of interactions can be described by the following equations [13]:

$$\begin{cases} k_f = k_i - \frac{\delta t}{\hbar} eE, \\ r_f = r_i - \frac{\hbar}{m^*} \frac{(k_i + k_f)}{2} \delta t. \end{cases} \quad (3)$$

Besides the time of flight, scattering mechanisms are also selected stochastically using probabilities related to the microscopic behaviour description. If the interaction is Active, the state of the electron is kept unchanged. However, after interaction, the new position and the wave vector are redefined.

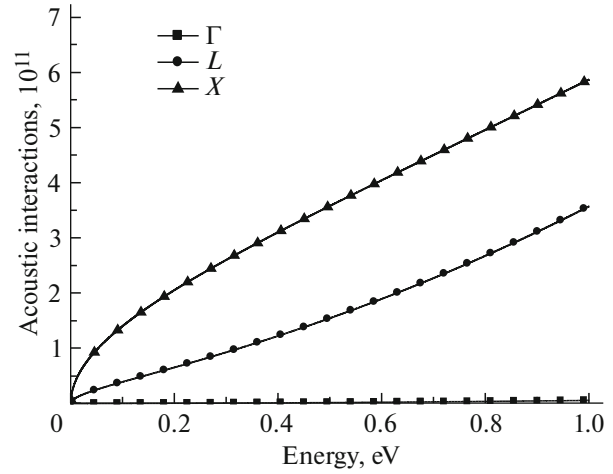


Fig. 2. Acoustic interactions.

3. SIMULATION RESULTS

The simulation is carried out using the Ensemble Monte Carlo simulator described in FORTRAN language. This simulator identifies the electron motion in the three valleys of the conduction band Γ , L , and X which are isotropic and non-parabolic [14]. The definition of the band structure is an inescapable step to perform the simulation, because it enables to introduce the required parameters, such as, bandgap, effective masses, non-parabolic coefficients, etc. In order to approach the actual conditions, the simulator takes in account scatterings with ionised impurities, acoustic and polar optical phonons, as well as, intervalley and intravalley interactions.

3.1. Electronic Interactions

A. Ionised impurities interactions. Figure 1 sketches the evolution of ionised impurities interactions as function of energy for each valley. These interactions are described through the screened Coulomb potential of the Brooks Herring [15]. As seen, the values of these interactions are high at low energy, whereas they get weak sharply when energy increases.

B. Acoustic interactions. Figure 2 depicts the evolution of acoustic interactions as function of the energy for each valley. The acoustic interactions are neglected for Γ valley while they increase monotonically with energy for the valleys L and X . These interactions are elastic with insignificant influence on the electrons since their final energy remains constant.

C. Polar optical interactions. The evolution of polar optical interactions versus energy for the mentioned valleys in the case of emission and absorption is represented in Fig. 3. These interactions are important in all valleys and they own the ability of absorption or emission of optical phonons. The emission of phonons occurs only when electrons energy is higher than the polar optical phonon, namely, 27 meV. Note that,

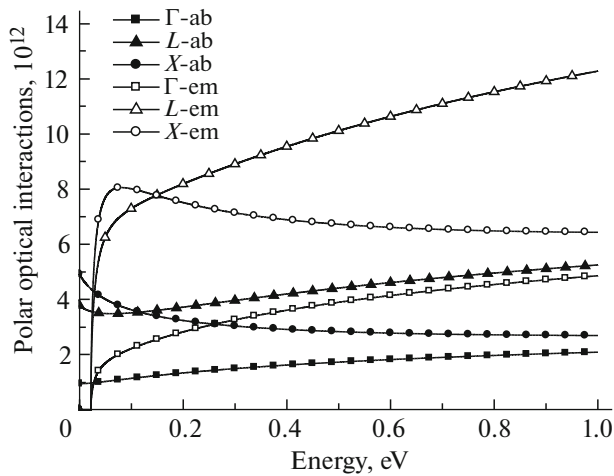


Fig. 3. Polar optical interactions.

emission interactions are more important than those of absorptions.

D. Intervalley interactions. The possible transitions between the three valleys Γ , L and X in case of absorption and emission are shown in Fig. 4. These transitions are accomplished by absorbing or emitting phonons which depends on the difference of energy between outgoing and incoming valleys. The transition to upper valleys occurs only when carrier's energy is higher than the separation energy between different valleys, i. e. 0.297 for $\Delta E_{\Gamma L}$, 0.57 for $\Delta E_{\Gamma X}$ and 0.28 for ΔE_{LX} .

E. Intravalley interactions. Figure 5 illustrates the evolution of L and X intravalley interactions versus energy for both emission and absorption. These transitions occur between equivalent valleys existing only in L and X . From the figure, it can be concluded that these interactions increase with the carrier's energy, and reach higher values for X valley.

3.2. Electron Drift Velocity

A. Effect of temperature of the drift velocity in stationary regime. The electronic drift velocity as function of the electric field at different values of temperature is represented in Fig. 6. As see, for low values of electric field, the mentioned characteristics are linear; in this case, electrons are situated in Γ valley where they have high mobility and low effective mass. The predominant acoustic phonon scatterings is the main factor behind the occurrence of such linear behaviour. The electronic drift velocity showed peaks at electric field of 2 kV/cm when $T = 300$ K. At this condition, electrons are still located in Γ valley but the main interactions are performed with optical phonons. Thereafter, by increasing the electric field to high values, electrons acquired sufficient energy enabling them to move to satellite valleys, thus, the velocity decreases until establishing the stationary regime, therefore the electronic drift velocity remains constant. As we can see in the same figure, when the tem-

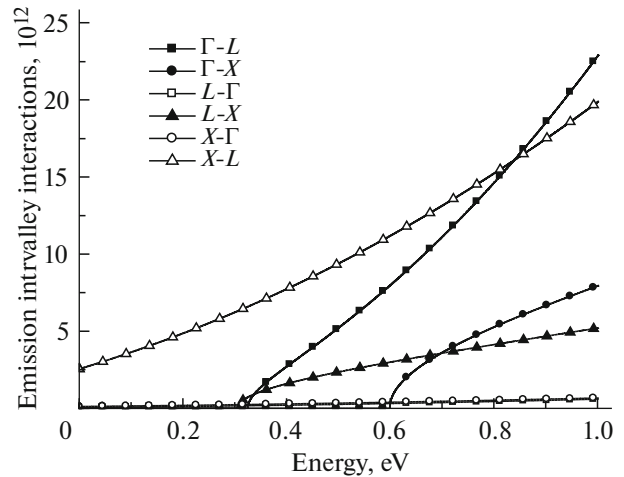
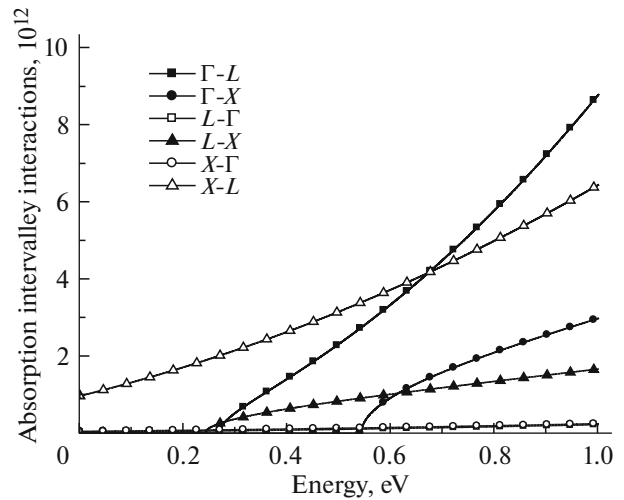


Fig. 4. Absorption and emission intervalley interactions.

perature increases the peak velocity diminishes due to the augmentation of the global scattering.

B. Effect of the temperature and the electric field of the drift velocity in transient regime. The evolution of electronic drift velocity at different values of tempera-

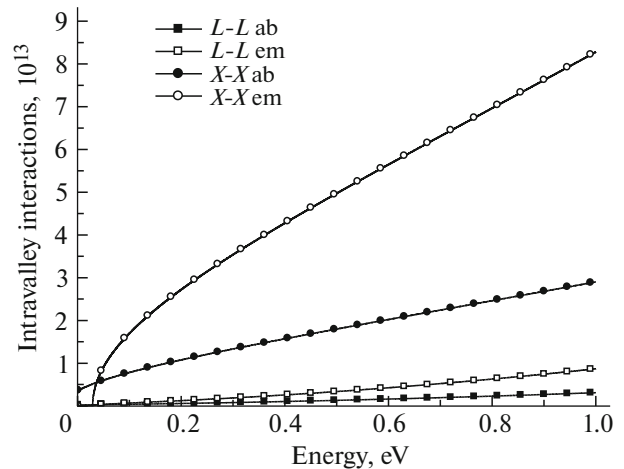


Fig. 5. Intravalley interactions.

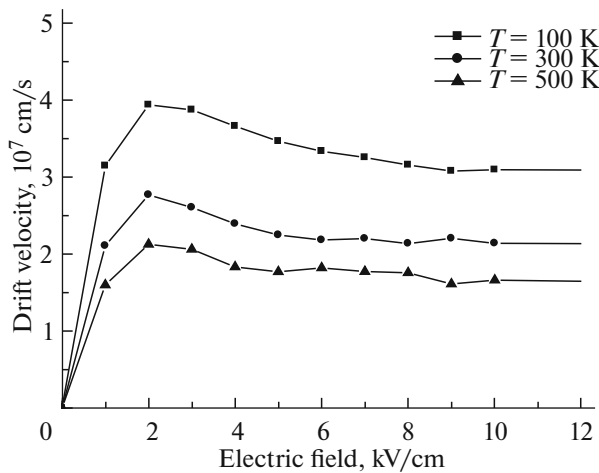


Fig. 6. Drift velocity vs electric field at different temperature.

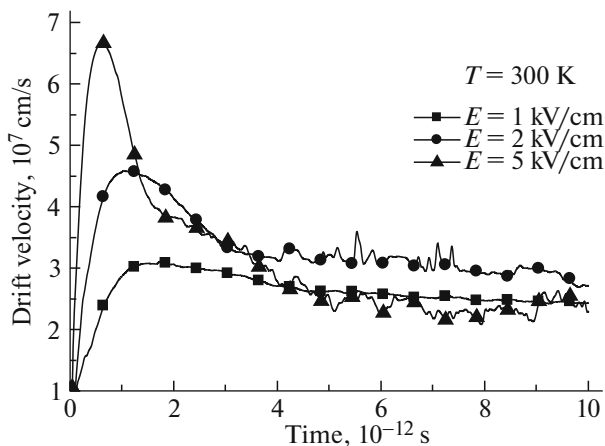
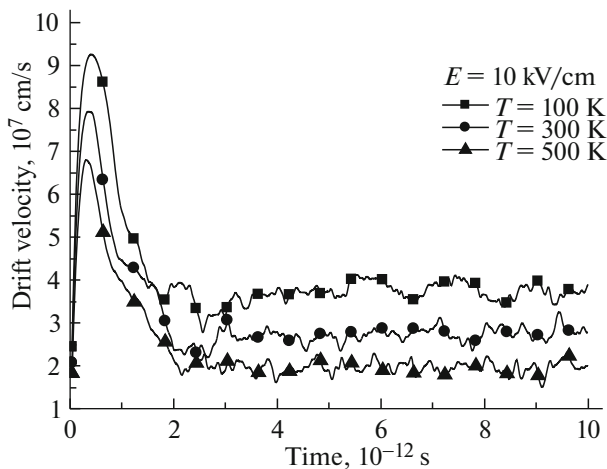


Fig. 7. Drift velocity vs. time at different electric fields and temperatures.

ture and electric field as function of time is plotted in Fig. 7. The velocity shows sharp increasing and reaches an over-speed regime typically 8×10^8 cm/s at temperature of 300 K, noting that, this value is higher than the stationary speed measured as 2.1×10^7 cm/s

at the same value of temperature. This over-speed is due to the strong acceleration of electrons by the electric field, whereas, some interactions occurred. Then, the velocity decreases until it reaches the stationary regime. In addition, high temperature leads to a decrease of the velocity peak. Furthermore, the augmentation of the electric field at a fixed value of temperature, caused precocious over-speed occurrence with more significant value, however, in such context the steady regime velocity become lower compared with weaker electric field.

4. CONCLUSIONS

In this work, the electronic transport in $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ material has been investigated and carried out using the ensemble Monte Carlo simulation. The results show that acoustics and polar optics interactions were dominant at weak electric field. Consequently, the drift velocity increased linearly and achieved maximum value of 2.7×10^7 cm/s. However, intervalley interactions dominated at higher electric field values, with a drift velocity of 2×10^7 cm/s.

REFERENCES

1. S. Adachi, *Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors* (Wiley, Singapore, 2009), Vol. 2.
2. M. Kawashima, K. Ohta, and S. Kataoka, *Int. Electron Dev. Meeting* 23, 372 (1977).
3. T. Ikoma, K. Sakai, Y. Adachi, and H. Yanai, *Electron. Lett.* **10**, 402 (1974).
4. A. Mitric, T. Duffar, C. Diaz-Guerra, V. Corregidor, L. C. Alves, C. Garnier, and G. Vian, *J. Cryst. Growth* **287**, 229 (2006).
5. G. Kipshidze, T. Hosoda, W. L. Sarney, L. Shterengas, and G. Belenky, *IEEE Photon. Technol. Lett.* **23**, 317 (2011).
6. S. G. Ghalestani, M. Ek, B. Ganjipoor, C. Thelander, J. Johansson, P. Caroff, and K. A. Dick, *Nano Lett.* **12**, 4914 (2012).
7. T. Hosoda, D. Wang, G. Kipshidze, W. L. Sarney, L. Shterengas, and G. Belenky, *Semicond. Sci. Technol.* **27**, 055011 (2012).
8. Z. Yuan, PhD Thesis (Stanford Univ., 2013).
9. L. Ma, W. Hu, Q. Zhang, P. Ren, X. Zhuang, H. Zhou, J. Xu, et al., *Nano Lett.* **14**, 694 (2014).
10. M. Levinshtein, S. Rumyansev, and M. Shur, *Handbook Series on Semiconductor Parameters: Ternary and Quaternary III-V Compounds* (World Scientific, Singapore, 1996), Vol. 2.
11. C. Liu, Y. Li, and Y. Zeng, *Engineering* **2**, 617 (2010).
12. M. G. Mauk and V. M. Andreev, *Semicond. Sci. Technol.* **18**, 191 (2003).
13. B. Bouazza, A. Guen-Bouazza, C. Sayah, and N. E. Chabanesari, *J. Mod. Phys.* **4**, 121 (2013).
14. D. Vasilevka, S. M. Goodnick, and G. Klimeck, *Computational Electronics: Semiclassical and Quantum Device Modeling and Simulation* (Taylor and Francis Group, Boca Raton, 2010).
15. C. Jacoboni and P. Lugli, *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation* (Springer, Vienna, 1989).

Résumé

Ce travail s'adresse à l'étude du transport des électrons dans les dispositifs électroniques à base de matériaux ternaires III-V et particulièrement à base du matériau $Ga_xIn_{1-x}Sb$ par la méthode Monte Carlo. En effet, dans le cas des dispositifs électroniques, il est nécessaire de coupler la méthode Monte Carlo avec l'équation de Poisson afin de redistribuer les charges électriques et donc le champ électrique dans tous les points du dispositif. L'objectif principal de notre travail est de faire l'étude et la simulation du transport électronique dans les transistors MESFET ET HEMT nanométriques à base du $Ga_xIn_{1-x}Sb$ par la méthode Monte Carlo.

Mots clés

Semi-conducteurs III-V, Matériau $Ga_xIn_{1-x}Sb$, Transport Electronique, Méthode Monte Carlo, Transistors MESFET et HEMT.

Abstract

This work addresses the study of electrons transport in electronic devices based on III-V ternary materials and particularly based on $Ga_xIn_{1-x}Sb$ material using Monte Carlo method. Indeed, in the case of electronic devices, it is necessary to couple the Monte Carlo method with the Poisson equation in order to redistribute the electric charges and therefore the electric field in all points of the device. The main objective of our work is to study and simulate the electronic transport in nanoscale MESFET and HEMT transistors based on $Ga_xIn_{1-x}Sb$ using the Monte Carlo method.

Keywords

III-V Semiconductors, $Ga_xIn_{1-x}Sb$ Material, Electronic Transport, Monte Carlo Method, MESFET and HEMT Transistors.

ملخص

يهدف هذا العمل على دراسة النقل الإلكتروني في الأجهزة على أساس المواد الثلاثية III-V وبالأخص على أساس مادة $Ga_xIn_{1-x}Sb$ بواسطة محاكاة مونت كارلو. وبالتالي، في حالة الأجهزة الإلكترونية، من الضروري الجمع بين طريقة مونت كارلو مع معادلة بواسون من أجل إعادة توزيع الشحنات الكهربائية والحقل الكهربائي في جميع نقاط الجهاز. الهدف الرئيسي من عملنا هو دراسة ومحاكاة النقل الإلكتروني في الترانزستورات النانو مترية HEMT و MESFET على أساس مادة $Ga_xIn_{1-x}Sb$ باستخدام طريقة مونت كارلو.

كلمات المفتاح

أشباه النواقل III-V، مادة $Ga_xIn_{1-x}Sb$ ، النقل الإلكتروني، محاكاة مونت كارلو، ترانزستور MESFET و HEMT