



Unité de Recherche Matériaux et Energies Renouvelables



UNIVERSITE ABOU BEKR BELKAID –TLEMCCEN

FACULTE DES SCIENCES EXACTES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

**Thèse de Doctorat
sur le thème**

**ASPECT DE MODELISATION DES PROPRIETES
PHYSIQUES DES ALLIAGES SEMICONDUCTEURS
II-VI A APPLICATION PHOTOVOLTAIQUE**

Présentée et soutenue publiquement pour l'obtention de

Diplôme de Docteur de l'Université de Tlemcen

Par

Mme KHEDIM SIHAM ep.BOUAYED

Devant le jury d'examinations

Directeur de Thèse : Pr. Boumédiène BENYOUCEF, Université de Tlemcen (Algérie)

Président de jury : Pr. Nasr-Eddine CHABANE SARI, Université de Tlemcen (Algérie)

Examineurs : Pr. Michel AILLERIE, Université de Metz (France)

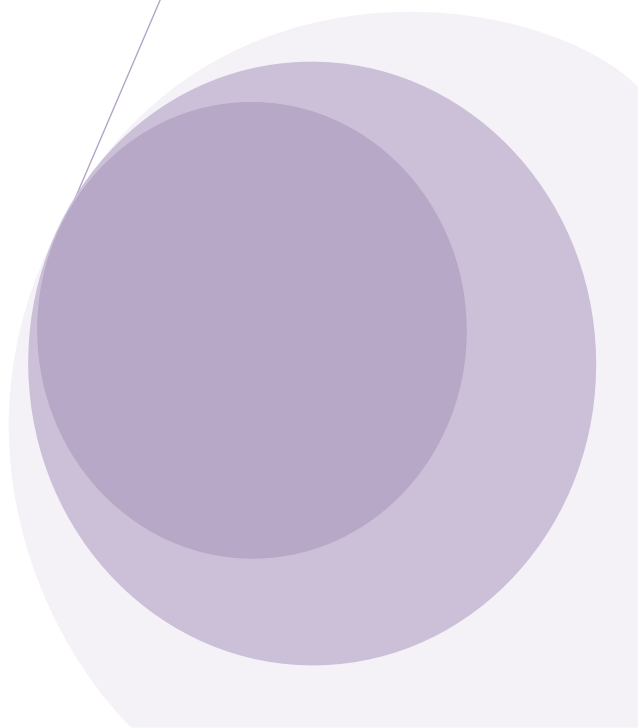
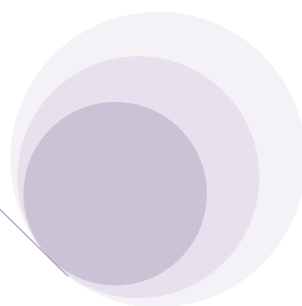
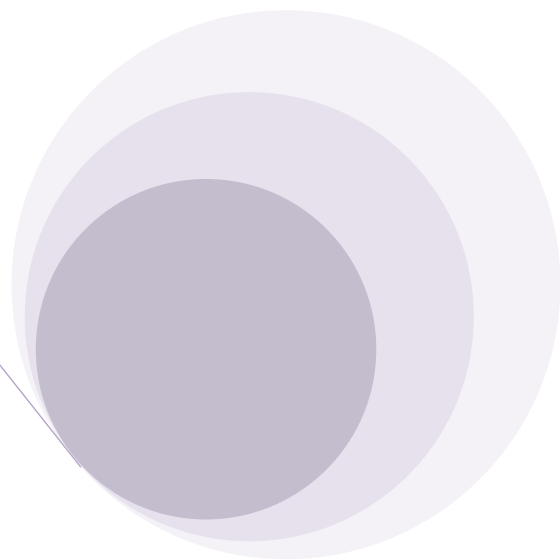
Pr. Zineb BENAMARA, Université de Sidi Belabbes (Algérie)

Pr. Abd-Edaïm KADOUN, Université de Sidi Belabbes (Algérie)

Dr. Benyounes BOUAZZA, Université de Tlemcen (Algérie)

Invité : Pr. Patrice BOURSON, Université de Metz (France)

DEDICACES



Dédicaces

« $E = mc^2$

L'énergie de ton idolâtrie est inversement proportionnelle au carré de la distance qui me sépare de vous. C'est aussi cela la relativité ... »

Léo Ferré

*A mon cher époux,
A ma très chère famille,
A mon adorable petit ange Malak.*

The page features a decorative graphic consisting of three sets of concentric purple circles. The largest set is in the top right, a medium-sized set is in the center, and another large set is in the bottom right. Two thin purple lines intersect at the center, forming an 'X' shape that passes through the circles.

REMERCIEMENTS

Remerciements

Voilà le moment tant attendu ! Les remerciements marquent à la fois, la fin de la rédaction pour tous les thésards et également un début pour le lecteur. C'est un moment de soulagement, le point final du manuscrit ! mais il s'agit avant tout du moment où on prend conscience du chemin parcouru pendant ces années.

Ce travail de thèse a été effectué au sein de la division Matériaux photovoltaïques de l'Unité de Recherche Matériaux et Energies Renouvelables de l'Université de Nemcen sous la direction du Pr. Boumediene Benyoucef.

Je réserve la première place à mon Directeur de thèse le Pr. Boumediene Benyoucef, je tiens à lui exprimer toute ma gratitude, il m'a accueilli et installé au sein de l'Unité, j'étais comme un électron perdu dans l'espace avec mon Magister en Physique des Plasmas, mais nos discussions très riches scientifiquement m'ont beaucoup aidé dans mon cheminement.

Je me dois également de remercier le Pr. Nasr-Eddine Chabane Sari, il a dirigé mes travaux de près, il a toujours été là pour me redonner le petit coup de pouce qui me manquait, et aujourd'hui m'a fait l'honneur d'être membre et président de mon jury. Votre enthousiasme et rigueur à la fois resteront légendaires !

Toute ma gratitude va également pour Mr. Michel Aillerie, Mme Zineb Benamara, Mr. Abd-Edaïm Kadoun et Mr. Benyounes Bouazza qui ont accepté d'être membres et examinateurs, j'espère que la lecture de la thèse était plaisante. Je remercie aussi Mr. Patrice Bourson qui a accepté mon invitation et nous a honoré par sa présence.

*From this day to the ending of the world,
But we in it shall be remember'd ;
We few, we happy few, we band of brothers ;
For he to-day that sheds his blood with me
Shall be my brother :*

*Et d'aujourd'hui à la fin des siècles,
Ce jour solennel ne passera jamais, sans qu'il n'y soit fait mention de nous ;
De nous, petit nombre d'heureux, frères d'armes ;
Car celui qui verse aujourd'hui son sang avec moi
Sera mon frère.*

William Shakespeare, Henry V, Acte IV, scène 3.

The page features a decorative graphic consisting of three sets of concentric circles in shades of purple, arranged vertically. The top set is the largest, the middle set is the smallest, and the bottom set is the largest. Two thin, light purple lines intersect at the center of the page, forming an 'X' shape that passes through the circles.

TABLE DES MATIERES

TABLE DES MATIERES

Dédicaces	i
Remerciements	ii
TABLE DES MATIERES	iv
INTRODUCTION	1
CHAPITRE I : LES MATERIAUX SEMICONDUCTEURS II-V	5
1. Généralités	5
2. Propriétés électroniques des semiconducteurs II-VI	7
2.1. Structure cristalline	7
2.2 Structure de bande d'énergie	8
2.3. Electrons et fonctions d'onde	12
2.3.1. Approximation des électrons presque libres	15
2.3.2. Approximation de liaison forte	18
3. Densité d'états	19
4. Conclusion	23
5. Références bibliographiques	23
CHAPITRE II : PHENOMENES DE TRANSPORT ET EQUATION DE BOLTZMANN	24
1. L'équation de Boltzmann	24
2. Les Méthodes Analytiques	31
2.1 Le Modèle Dérive-Diffusion et le Modèle Hydrodynamique	31
2.2 Le Modèle Monte Carlo	36
3. La Méthode Monte Carlo	36
4. Monte Carlo et l'équation de Boltzmann	39
5. Références	40

CHAPITRE III : MISE EN ŒUVRE DE LA SIMULATION MONTE CARLO	43
1. Introduction	43
2. Les différents éléments de la simulation	47
2.1. Fonction d'onde	47
2.2. Trajectoire de l'électron	49
2.3. Temps de vol libre	51
2.4. Choix de l'interaction	52
2.4.1. Procédure du choix d'interaction	55
2.4.2 Génération des nombres aléatoires	56
2.4.2.1. Méthode directe	56
2.4.2.2. Méthode du rejet	57
2.5. Choix des angles de déviation	58
2.6. Méthode du Self-Scattering	60
2.6.1. Procédure du Self-Scattering	61
2.6.2. Utilisation des collisions fictives	63
3. Conditions de transport dans les semiconducteurs	66
4. Avantages et inconvénients	66
5. Organigramme	68
6. Mécanismes et probabilités de collisions.....	70
6.1. Rappel sur les probabilités de collisions des porteurs	70
6.2. L'interaction optique polaire	72
6.3. Interaction intervallées équivalentes et non-équivalentes	74
6.4. Collisions sur le réseau	76
6.5. Collisions acoustiques intravallées	76
6.6. Collisions intervallées	77
7. Conclusion	78
8. Références	78

CHAPITRE IV : RESULTATS ET INTERPRETATIONS	81
1. Introduction	81
2. Conditions initiales	83
3. Les probabilités d'interactions	84
3.1 La diffusion des phonons acoustiques	85
3.1.1. Les interactions acoustiques dans ZnSe	86
3.1.2. Les interactions acoustiques dans ZnTe	87
3.1.3. Les interactions acoustiques dans ZnS	88
3.2. Les interactions intervallées	89
3.2.1. Les interactions intervallées dans ZnSe	89
3.2.2. Les interactions intervallées dans ZnTe	91
3.2.3. Les interactions intervallées dans ZnS	92
3.3. Les interactions intravallées	94
3.3.1. Les interactions intravallées dans ZnSe	94
3.3.2. Les interactions intravallées dans ZnTe	96
3.3.3. Les interactions intravallées dans ZnS	98
3.4. Les interactions optiques polaires	99
3.3.1. Les interactions optiques polaires dans ZnSe	99
3.3.2. Les interactions optiques polaires dans ZnTe	101
3.3.3. Les interactions optiques polaires dans ZnS	102
4. Les Propriétés de transport	104
4.1. Propriétés de transport du ZnSe	104
4.2. Propriétés de transport du ZnTe	108
4.3. Propriétés de transport du ZnS	112
4.4. Discussion et interprétation	115
5. Etude des paramètres en fonction de la température et Comparaison des matériaux	120

6. Références	126
CONCLUSION	127
Perspectives	129

The page features a decorative graphic consisting of three sets of concentric purple circles. The largest set is at the top right, a medium-sized set is in the center, and another large set is at the bottom right. Two thin purple lines intersect at the center, forming an 'X' shape that passes through the circles.

INTRODUCTION

INTRODUCTION

La compréhension de la dynamique des porteurs dans les matériaux semi-conducteurs est nécessaire pour l'amélioration des performances des composantes. En effet, ce sont les propriétés du matériau qui délimitent leurs performances. Ainsi, l'étude des propriétés physiques des matériaux, et les conditions améliorant à la fois les performances de la vitesse, et le temps de réponse à toute variation du champ électrique, permet le développement au sens large dans le domaine des semi-conducteurs.

Il est donc nécessaire d'effectuer une étude des possibilités offertes par les matériaux et déterminer l'influence des conditions extérieures et les effets qu'elles génèrent, rendant ainsi possible une utilisation rationnelle de ces matériaux.

Le séléniure de zinc (ZnSe), le tellure de zinc (ZnTe) et le sulfure de zinc (ZnS) sont parmi les matériaux semi-conducteurs du groupe II-VI importants en raison de leur vaste potentiel d'applications dans différents dispositifs optoélectroniques spécifiquement les diodes laser émettant de la lumière visible et dans la région bleue du spectre. Ils sont largement utilisés aussi pour leur grande efficacité dans les cellules photovoltaïques.

L'objectif de la recherche proposée porte sur l'étude du transport à champ variable dans les matériaux semi-conducteurs ZnSe, ZnTe et ZnS, afin d'obtenir une meilleure compréhension du processus de transport électronique dans les dispositifs semi-conducteurs modernes.

Les phénomènes de transport et la dynamique électronique étudiés dans le ZnSe, ZnTe et ZnS porte précisément sur l'énergie et la vitesse de dérive des électrons libres soumis à un champ constant ou variable au cours du temps et la diffusion.

L'étude consiste à simuler le comportement des porteurs de la bande de conduction en utilisant la méthode stochastique de Monte Carlo. Cette méthode s'avère tout à fait adaptée à l'étude des phénomènes de transport puisqu'elle permet la prise en compte des caractéristiques physiques et électroniques du matériau considéré, en dehors de sa souplesse et mise en œuvre relativement facile.

Les phénomènes de transport dans les semi-conducteurs résultent du comportement des électrons de la bande de conduction. Une approche analytique du problème nécessite la connaissance de la fonction de distribution de l'énergie des électrons. Celle-ci est obtenue en résolvant l'équation de Boltzmann. A cause de sa complexité, cette équation aux dérivées partielles n'admet pas de solution analytique sauf dans un nombre limité de cas, en prenant en compte des hypothèses simplificatrices. C'est pourquoi on fait appel à d'autres procédés, notamment les méthodes Monte Carlo.

La méthode de Monte Carlo fait intervenir le tirage de nombres aléatoires. Elle repose sur l'observation de ces nombres simulant directement les processus stochastiques étudiés. Elle permet d'avoir accès directement à des grandeurs importantes en dynamique électronique telle que la vitesse et l'énergie des électrons.

De façon plus précise, l'application de la méthode Monte Carlo permet de se fixer un triple objectif. Premièrement, en facilitant l'étude des phénomènes de mobilité ou de diffusion en volume dans les matériaux, on peut déterminer un certain nombre de paramètres physiques de transport. On peut apporter des éléments utiles et nouveaux sur les mécanismes physiques qui déterminent la dynamique électronique dans un semi-conducteur. Deuxièmement, en permettant une étude fine et précise des variations de la vitesse de dérive et du coefficient de diffusion en régime stationnaire ou non-stationnaire, cette méthode peut fournir les données de base nécessaires à la résolution numérique des composants à partir des équations de l'électrocinétique. Troisièmement, les techniques de Monte Carlo permettent largement la simulation directe de certains composants et s'avère plus précise, plus fiable et même plus simple que les méthodes classiques.

Les méthodes de Monte Carlo ont effectivement connu un grand développement au cours des dernières décennies notamment dans l'application aux problèmes de la dynamique électronique.

Après cette introduction, nous avons divisé notre travail en quatre parties.

Dans un premier chapitre, nous présentons les bases fondamentales des semi-conducteurs II-VI considérés dans cette étude ; à savoir ZnSe, ZnTe et ZnS.

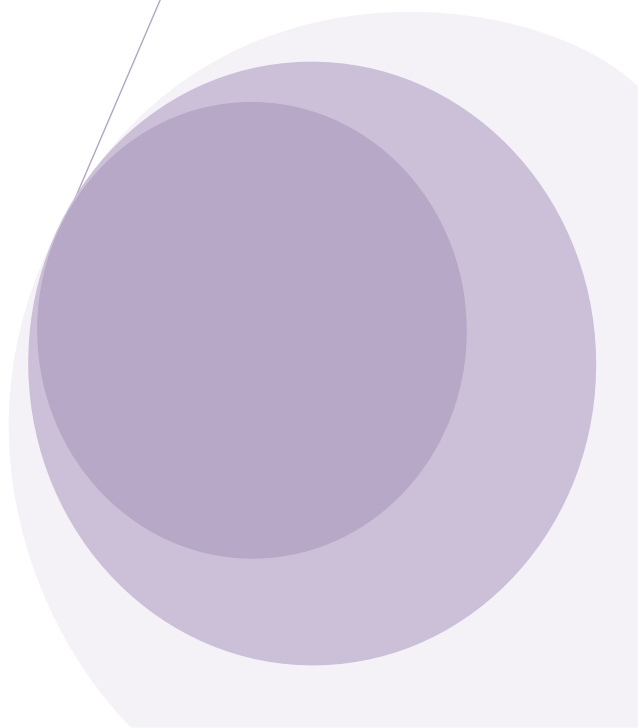
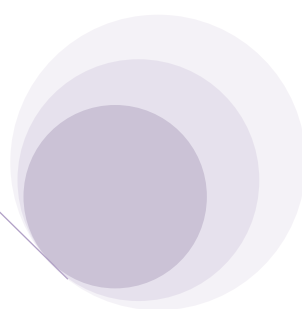
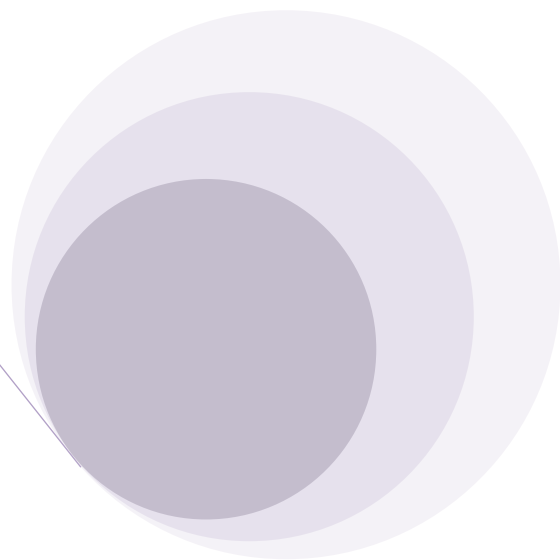
Dans le deuxième chapitre, nous étudions de manière aussi physique que possible l'équation de Boltzmann et sa résolution, en exposant comment elle est intégrée dans le modèle de Monte Carlo.

Dans le troisième chapitre, nous étudions la méthode Monte Carlo basée sur le procédé de collisions fictives et de self-scattering, nous étudions aussi les phénomènes d'interaction entre l'électron et le réseau cristallin et nous détaillons les probabilités des différents types d'interaction pris en compte.

Dans le quatrième et le dernier chapitre, nous présentons l'ensemble des résultats obtenus par la simulation de Monte Carlo. Nous présentons en premier lieu, les résultats des probabilités de collisions considérées. En deuxième lieu, nous présentons et discutons aussi bien les paramètres du premier ordre (énergie et vitesse de dérive) que celui du second ordre (le coefficient de diffusion). Nous étudions aussi l'effet de la température et du champ appliqué sur ces matériaux. Le chapitre est divisé en trois parties dont on expose dans chacune d'elles les résultats concernant les matériaux semi-conducteurs étudiés ZnSe, ZnTe et ZnS respectivement. Nous concluons le chapitre par une comparaison faite entre ces derniers.

Nous terminons ce travail par une conclusion générale.

CHAPITRE I



CHAPITRE I

LES MATERIAUX SEMICONDUCTEURS II-VI

Dans ce chapitre nous présentons les propriétés générales des systèmes que nous étudions, à savoir les semi-conducteurs II-VI suivants : ZnSe, ZnTe, et ZnS. Dans un premier temps, nous faisons des rappels sur les composés II-VI qui sont à la base des structures étudiées. Dans une deuxième partie, nous présentons les propriétés physiques spécifiques aux matériaux étudiés.

1. Généralités

Les semi-conducteurs sont définis comme étant des matériaux qui possèdent une résistivité électrique qui s'étale de 10^{-3} à $10^9 \Omega\text{cm}$. Autrement dit, ils représentent des matériaux qui ont une énergie de gap comprise entre 0 et ~ 3 eV. Les matériaux qui ont une énergie de gap nulle sont appelés les métaux où les semi-métaux, tandis que ceux qui ont une énergie de gap supérieure à 3 eV sont souvent appelés des isolants. Il y a des exceptions à ces définitions. Par exemple, le diamant semi-conducteur (dont l'énergie de gap est de l'ordre de 6 eV) et le semi-isolant GaAs (avec une énergie de gap égale à 1.5 eV) sont fréquemment utilisés. Le GaN, qui reçoit beaucoup d'attention comme matériau optoélectronique dans la région bleue, possède une énergie de gap de 3.5 eV.

Les semi-conducteurs se présentent sous plusieurs compositions chimiques avec une grande variété de structures cristallines. On peut avoir les semi-conducteurs élémentaires tels que le Si, le Ge ou des composés binaires tels que le GaAs. Plusieurs composés organiques comme le polyacétilène $(\text{CH})_n$ sont des semi-conducteurs. Quelques semi-conducteurs présentent un comportement magnétique ($\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$) ou ferroélectrique (SbSI), d'autres deviennent supraconducteurs

lorsqu'ils sont dopés avec des porteurs suffisants (GeTe et SrTiO₃). Certains supraconducteurs à haute température découverts récemment et qui ont des phases non métalliques sont aussi des semi-conducteurs. Par exemple, le La₂CuO₄ est un semi-conducteur mais il devient supraconducteur lorsqu'il est allié avec le Sr pour former le (La_{1-x}Sr_x)₂CuO₄.

Les semi-conducteurs sont primordiaux en électronique parce qu'ils offrent la possibilité de contrôler, par divers moyens, à la fois la quantité de courant électrique susceptible de les traverser et la direction que peut prendre ce courant.

Il y a plusieurs familles des semi-conducteurs, à savoir les semi-conducteurs IV-IV, III-V, ou II-VI. Seuls les II-VI font l'objet de cette recherche.

Les composés II-VI englobent, dans le sens large, les éléments du groupe II et les éléments du groupe VI du tableau périodique. En pratique, seuls les sulfures, tellures, sélénures de zinc, de cadmium et de mercure sont considérés car les composés qui sont à base de l'oxygène et du polonium ne peuvent pas former des semi-conducteurs.

L'objectif de la recherche proposée est d'analyser les performances des semi-conducteurs II-VI à gap direct à phase cubique zinc-blende. La pertinence de cette recherche provient de la demande croissante des applications de hautes performances et hautes puissances. Ces composés ont reçu beaucoup d'attention dans plusieurs secteurs. Par exemple, dans le marché des télécommunications, les transistors micro-ondes de très haute puissance sont demandés dans les stations de bases cellulaires. En outre, les applications dans le stockage de données ont exhorté le développement des courtes longueurs d'onde, y compris les détecteurs et les émetteurs dans le bleu et l'ultraviolet.

Les hétéro-structures étudiées sont à base de semiconducteurs II-VI de la famille des tellures : le tellure de zinc (ZnTe), de la famille des sélénure : sélénure de zinc (ZnSe), et de la famille des sulfures : sulfure de Zinc (ZnS).

Par la suite nous présentons un certain nombre d'information concernant ces matériaux massifs. Par soucis de clarté, la plupart des paramètres et grandeurs physiques sont présentés sous forme de tableaux.

2. Propriétés électroniques des semiconducteurs II-VI

2.1. Structure cristalline

Ces matériaux binaires cristallisent dans la structure cubique zinc-blende :

Les atomes de zinc et les atomes de sélénium, tellure ou sulfure, forment deux sous-réseaux cubiques à faces centrées, décalés l'un par rapport à l'autre d'un quart de la grande diagonale du cube (figure 1). La différence du paramètre de maille entre ZnSe, ZnTe, et ZnS est très importante car ce désaccord joue un rôle primordial dans la réalisation d'hétéro-structures.

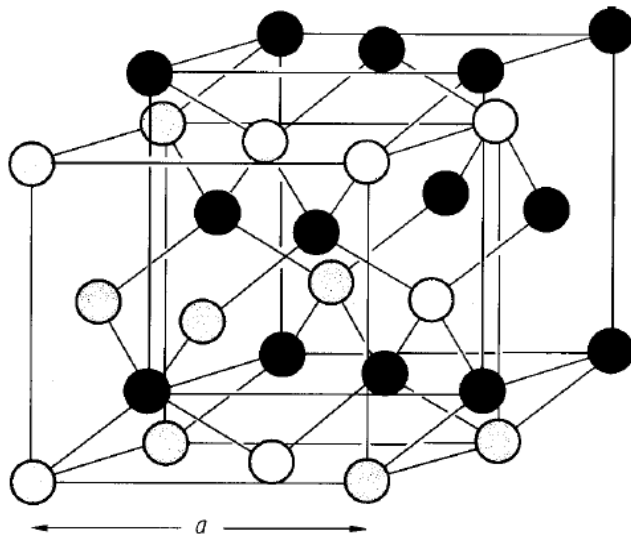


Figure 1 : La maille élémentaire d'une structure zinc-blende

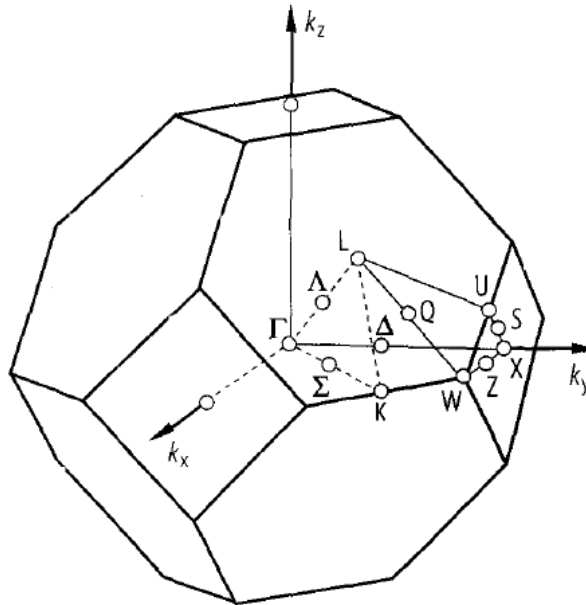


Figure 2 : la zone de Brillouin pour une structure zinc-blende

2.2 Structure de bande d'énergie

Les matériaux binaires II-VI sont des semiconducteurs à bande interdite directe : le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence se situent au centre de la zone de Brillouin (point Γ sur la figure 2).

L'absorption et l'émission de la lumière peuvent alors se faire avec conservation du vecteur d'onde sans impliquer d'interaction avec d'autres quasi-particules comme les phonons.

La bande de conduction est deux fois dégénérée au point Γ et possède la symétrie Γ_6 . On attribue aux états de la bande de conduction un spin effectif $s = 1/2$. Le couplage spin-orbite décompose le maximum de la bande de valence en un quadruplet de symétrie Γ_8 (spin effectif $j = 3/2$) et un doublet Γ_7 (spin effectif $j = 1/2$). Leur différence d'énergie est Δ_{SO} . Dans les matériaux considérés, ces deux niveaux sont suffisamment séparés pour qu'on puisse les traiter comme

complètement découplés (tableau 1). Les structures de bande $E(\vec{k})$, calculées avec le formalisme de la méthode du pseudopotentiel [1], sont représentées sur la figure 3.

Les composés II-VI se caractérisent par la transition directe avec un minimum au point $\vec{k} = 0$. La raison à cela est que le rapport des intervalles $\Gamma_{1c} - \Gamma_{2'}$ et $\Gamma_{2'} - \Gamma_{1v}$ dans les cristaux homopolaires est plus petit que les rapports correspondants aux frontières des zones, par exemple $(L_{2'} - L_{1c}) / (L_{1c} - L_{1v})$. Il en découle que le point $\Gamma_{2'}$ se trouve abaissé par rapport à L_1 et X_1 .

La tendance générale, est telle que pour une formule donnée des composés II-VI par exemple, la largeur de bande interdite tend à diminuer lorsque le numéro atomique moyen augmente. Cette diminution de la largeur de la bande interdite est due au fait que les niveaux «s» cherchent à se situer au dessous des autres niveaux électroniques, notamment les niveaux «p» des atomes les plus lourds.

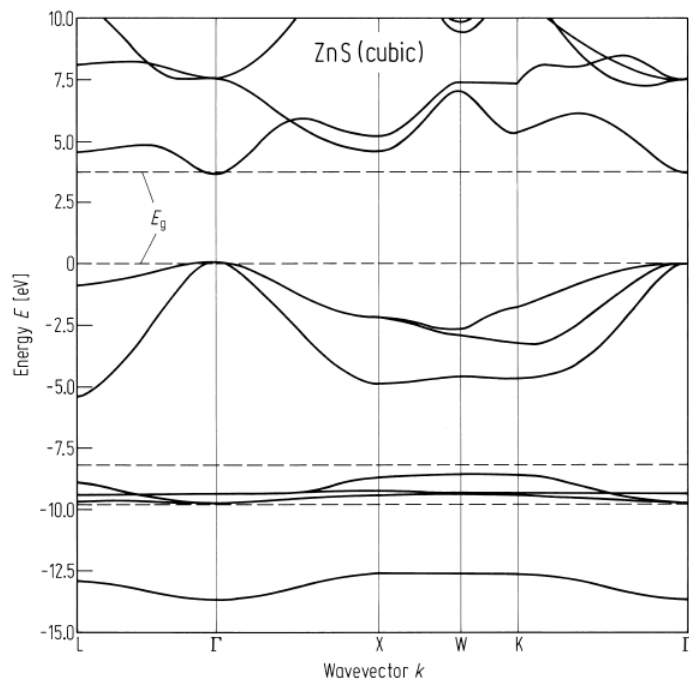
Les informations concernant la bande de valence ont été obtenues par l'étude des propriétés électriques. Ces données ont permis de postuler l'existence d'un maximum en $\vec{k} = 0$, dans le cas où la masse effective moyenne des trous est $\sim 0.6 m_0$.

Une étude de piézo-résistance confirme ces résultats. Ces études des propriétés optiques confirment également le modèle d'une bande interdite directe.

Le tableau 1 récapitule les grandeurs caractéristiques près du point Γ où E_g est la largeur de bande interdite, ε_0 et ε_∞ : constantes diélectriques statiques, et m_h , m_e : masses effectives des porteurs (trous et électrons).

Tab. 1 – Valeurs de quelques paramètres physiques de ZnSe, ZnTe et ZnS

	ZnSe	ZnTe	ZnS
E_g (eV)	2.8215[3]	2,391[4]	3.78[2]
Δ_{SO} (eV) [5]	0,45	0,95	0,085
ϵ_∞ [6]	6.11	7,28	5,7
ϵ_0 [6]	9.1	10,3	8.9
m_h^*/m_0	0,57[2]	0,6[7]	0,49[2]
m_e^*/m_0	0,142[8]	0,11[7]	0,28[2]
m_e/m_0 [5]	0,21 [8]	0,15[7]	2,18[9]

**Figure. 3.a** : Structure de bande pour ZnS cubique [9]

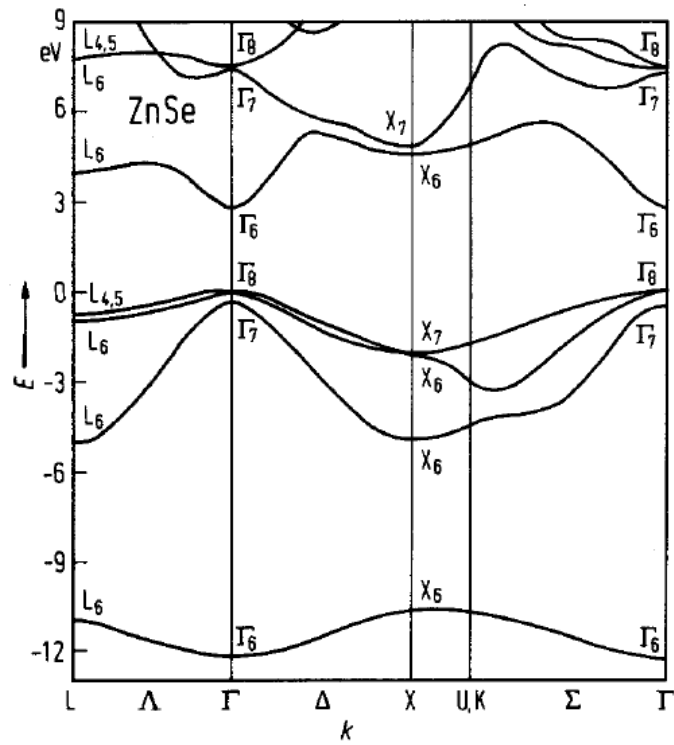


Figure 3.b : Structure de bande pour ZnSe cubique [9]

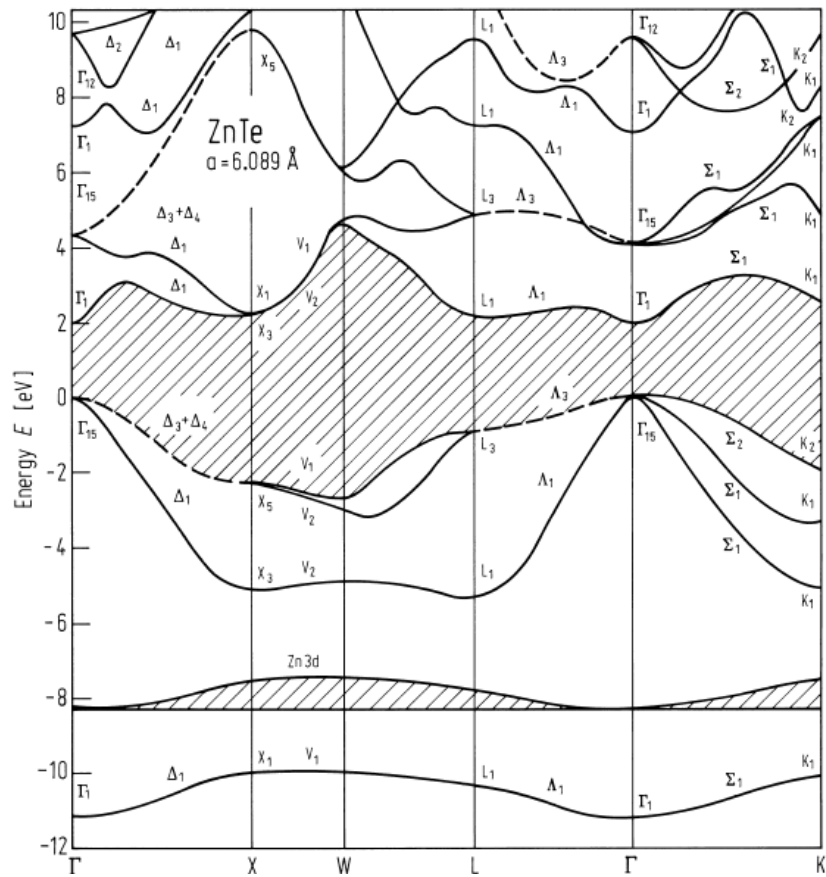


Figure 3.c : Structure de bande pour ZnTe cubique [9]

2.3. Electrons et fonctions d'onde

Dans un semi-conducteur un courant électrique est favorisé par deux types de porteurs: les électrons et les trous. La propagation par l'intermédiaire d'électrons est similaire à celle d'un conducteur classique: des atomes fortement ionisés passent leurs électrons en excès le long du conducteur d'un atome à un autre, depuis une zone ionisée négativement à une autre moins ionisée négativement. La propagation par l'intermédiaire de trous est différente: les charges électriques voyagent d'une zone ionisée positivement à une autre moins ionisée positivement par le mouvement d'un trou créé par l'absence d'un électron dans une structure électrique quasi-pleine.

Les états quantiques d'un électron sont décrits par des fonctions d'onde, solutions de l'équation de Schrödinger.

Dans le modèle de l'électron libre, un électron dans un potentiel constant, les fonctions d'onde sont des ondes planes progressives :

$$\psi(r) = \psi_0 \exp(ikr) \quad (1)$$

La fonction d'onde est caractérisée par son vecteur d'onde :

$$k = n \frac{2\pi}{\lambda} \quad (2)$$

où n est le vecteur unitaire dans la direction de propagation de l'onde correspondant à la direction du mouvement de l'électron et λ la longueur d'onde. Pour des conditions aux limites appropriées, le vecteur d'onde k est quantifié. Par exemple, dans un cristal à symétrie cubique et de dimension macroscopique caractéristique L :

$$k = (k_x, k_y, k_z) = \frac{2\pi}{L} (n_x, n_y, n_z) \quad (3)$$

où n_x, n_y, n_z sont trois nombres quantiques susceptibles de prendre les valeurs :

$$n_j = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (4)$$

L'énergie de l'électron est celle d'une particule libre :

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (5)$$

Le gaz d'électron traité au moyen de la fonction de distribution statistique de Fermi-Dirac permet d'interpréter avec succès les propriétés électroniques des métaux simples.

$$f(E) = \frac{\exp((\mu-E)/kT)}{1+\exp((\mu-E)/kT)} = \frac{1}{\exp((E-\mu)/kT)+1} \quad (6)$$

La valeur $E_f = \mu$ s'appelle énergie de Fermi et correspond à l'énergie limite qui sépare, au zéro absolu, les niveaux occupés des niveaux vides. Cette énergie est caractéristique du matériau.

Le modèle n'est pourtant pas satisfaisant pour expliquer, par exemple, la différence entre un métal et un isolant et encore moins les propriétés des semi-conducteurs. Il faut tenir compte du potentiel cristallin qui n'est pas constant dans le solide.

Un cristal est caractérisé par ses propriétés de symétrie de translation. Les ions et les électrons de valence qui leur sont plus ou moins liés créent un potentiel périodique :

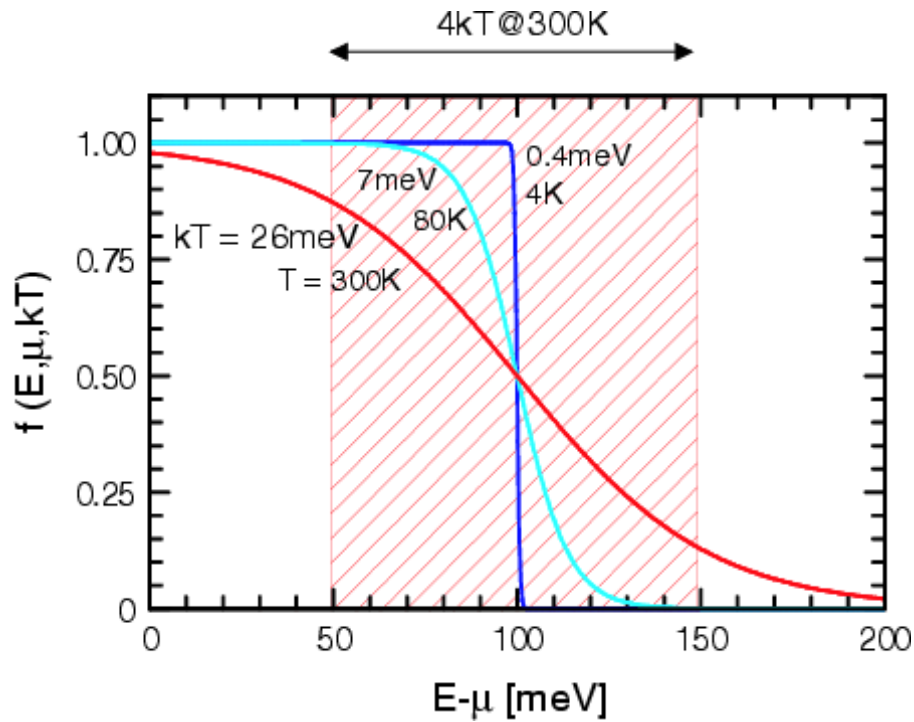


Figure 4 : La distribution de Fermi-Dirac pour les électrons pour différentes températures

$$V(r) = V(r + R_j) \tag{7}$$

où R_j est le vecteur de translation du réseau.

Les solutions de l'équation de Schrödinger pour une particule dans un tel potentiel périodique sont des fonctions d'onde de Bloch :

$$\psi(r) = u_k(r) \exp(ikr) \tag{8}$$

où $u_k(r)$ est un facteur d'amplitude qui a la périodicité du réseau

$$u_k(r) = u_k(r + R_j) \tag{9}$$

Dans la direction k_x

$$k_x = \frac{n_x 2\pi}{L} = \frac{n_x 2\pi}{Na} \tag{10}$$

N est le nombre de cellules unitaires dans la direction x du réseau de paramètre a :

$$L = Na.$$

Les solutions du problème sont périodiques dans l'espace direct et dans l'espace réciproque. La zone de Brillouin définie par $-\frac{\pi}{a} \leq k_x \leq \frac{\pi}{a}$ est une cellule unitaire du réseau réciproque dans laquelle toutes les solutions apparaissent de sorte qu'il suffit de considérer les vecteurs \mathbf{k} à l'intérieur de la zone de Brillouin. En particulier,

$$(k_x)_{\max} = \frac{\pi}{a} = \frac{2\pi}{Na} (n_x)_{\max} \quad (11)$$

de sorte que : $(n_x)_{\max} = \frac{N}{2}$. Il y a donc N valeurs possibles pour le nombre quantique n_x , à savoir :

$$n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{N}{2} \quad (12)$$

Chaque état peut être occupé par 2 électrons de nombre quantique de spin opposé. Dans un réseau linéaire, les N états peuvent donc recevoir 2N électrons. Ce résultat est important pour expliquer la répartition des métaux et isolants parmi les corps solides. Une autre conséquence du potentiel périodique est l'apparition en certains points de la zone de Brillouin de discontinuités d'énergie donnant lieu à des bandes interdites.

2.3.1. Approximation des électrons presque libres

Dans cette approximation, un électron est considéré dans un potentiel périodique faiblement modulé qui agit comme une perturbation sur l'état de l'électron. C'est le cas lorsque l'énergie cinétique de l'électron est grande par rapport à l'énergie potentielle. Cette approximation est principalement valable pour un électron de valence dans les métaux où le potentiel des ions du réseau est fortement écranté par le grand nombre d'électrons de valence dont la charge négative tend à s'accumuler au voisinage des ions positifs. Les fonctions d'onde, solutions du problème quantique d'un électron dans un potentiel périodique $V(r)$, sont les fonctions d'onde de Bloch. On les appelle aussi orbitales cristallines car elles s'étendent sur des grandes distances par rapport aux distances interatomiques. Elles sont

périodiques dans l'espace \mathbf{r} et dans l'espace réciproque \mathbf{k} . Elles représentent les fonctions propres décrivant les états électroniques auxquels correspondent les valeurs propres de l'énergie $E(k)$. De même que tous les états apparaissent dans la zone de Brillouin, toutes les valeurs possibles de l'énergie apparaissent aussi dans la zone. (Figure 6). Dans la zone de Brillouin, $E(k)$ est une fonction multiforme de k . L'introduction de l'indice de bande n permet de numérotter les valeurs croissantes de l'énergie pour un k donné ; pour le réseau unidimensionnel $V(x)$, on peut écrire :

$$E_n(k) = E_n\left(k_x + n \frac{2\pi}{a}\right) \tag{13}$$

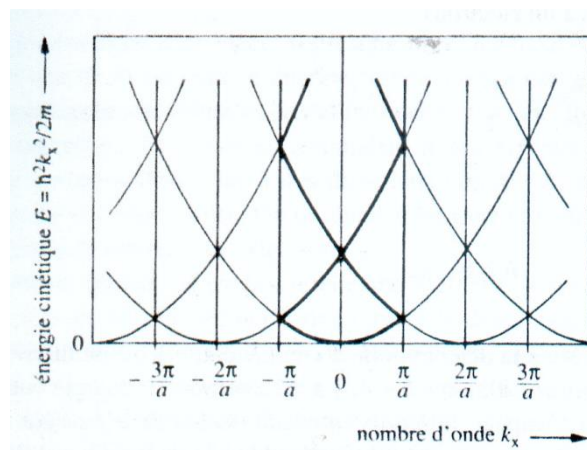


Figure 5 : Structure de bandes d'énergie pour un électron libre dans un cristal de paramètre de réseau a à une dimension

Un calcul des perturbations au moyen de développement en séries de Fourier montre que l'introduction d'un potentiel périodique $V(x)$, petit par rapport à l'énergie totale de l'électron E , conduit à deux valeurs distinctes de l'énergie (dans le cas du modèle linéaire à un électron) :

$$E_n(k_{xn}) = \frac{\hbar^2 k_{xn}^2}{2m} \pm \frac{\Delta E_n}{2} \tag{14}$$

avec $k_{xn} = \frac{n\pi}{a}$ $n = \pm 1, \pm 2, \dots$

où ΔE_n est la largeur de la discontinuité d'énergie entre la bande inférieure d'indice n et la bande supérieure d'indice $n+1$. La discontinuité d'énergie entre deux bandes dites permises s'appelle la bande interdite. Les fonctions d'onde de ces états interdits ne sont plus des ondes de Bloch périodiques et normées, mais des exponentielles. La largeur de bande interdite (le gap) ΔE_n est déterminée par la modulation du potentiel $V(x)$. Le calcul montre que ΔE_n vaut pratiquement le coefficient de Fourier du potentiel périodique $V(x)$ calculé au point $k_x = n \frac{\pi}{a}$.

Un schéma de bande d'énergie électronique typique est représenté sur la Figure 7 pour le cas d'une perturbation du potentiel relativement petite.

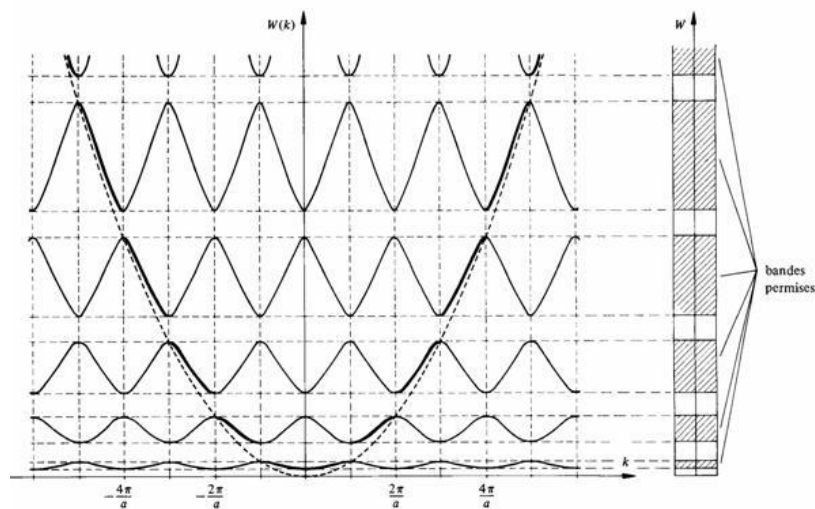


Figure 6 : Structure de bandes d'énergie pour un électron dans un potentiel périodique de périodicité a .

2.3.2. Approximation de liaison forte

L'approximation de la liaison forte conduit à la formation de bandes d'énergie dans les corps solides typiquement covalents ou ioniques. Elle est donc complémentaire de celle de l'électron presque libre qui s'applique aux métaux. Elle considère les électrons du cristal comme appartenant aux atomes ou aux ions et ainsi soumis à l'influence des potentiels atomiques de type coulombien. Les états correspondant aux électrons de valence sont relativement étendus. Ils sont ainsi perturbés par la présence des atomes ou ions voisins. Les fonctions d'onde atomiques se superposent donc partiellement pour former des orbitales cristallines, satisfaisant le théorème de Bloch. Les fonctions d'onde des électrons dans le cristal, venant originellement des états de valence, sont représentées par des combinaisons linéaires de fonctions atomiques.

Dans les atomes, les niveaux d'énergie des électrons sont discrets. Dans un corps solide, l'interaction entre les électrons conduit à l'éclatement de leurs niveaux d'énergie. Comme l'effet touche un grand nombre d'électrons équivalents, l'éclatement des niveaux d'énergie séparés par des intervalles infimes donne des bandes d'énergie d'une certaine largeur. Plus les états atomiques sont perturbés par l'interaction avec les voisins, comme les états des électrons de valence, plus la bande d'énergie devient large quand les atomes se rapprochent (Figure 7). Les niveaux profonds, par contre des électrons du cœur atomique ne sont pratiquement pas influencés et les électrons sont bien décrits par les solutions quantiques atomiques.

Le résultat important de l'approximation de la liaison forte est que le spectre des énergies des électrons qui déterminent les propriétés électroniques des solides est formé de bandes d'énergie séparées par des bandes interdites ou qui se recouvrent en partie.

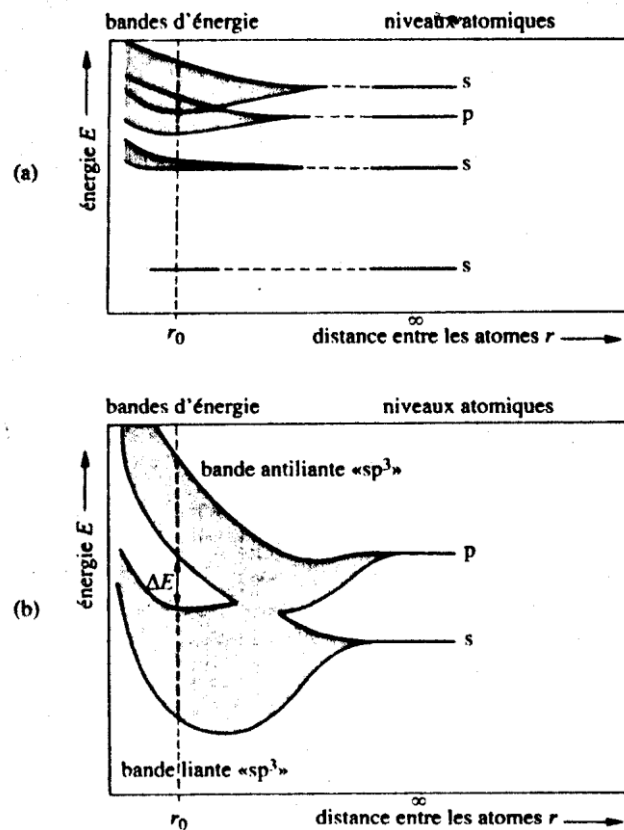


Figure 7 : Approximation de la liaison forte. (a) comme dans un solide ionique ou métallique où les états atomiques conservent partiellement leur symétrie ; (b) comme dans un cristal covalent avec formation d'états hybrides.

Cette approche n'est pas fondée sur la propriété de périodicité des potentiels agissant sur les électrons de valence. Elle est donc plus générale que l'approximation de l'électron presque libre et reste valable pour les solides non cristallisés, les amorphes, les verres, les polymères. La notion de bande d'énergie est donc à utiliser dans l'ensemble des corps solides, sans négliger d'ailleurs le fait que des niveaux discrets d'énergie peuvent exister également, en rapport avec des états localisés associés à des défauts de tout type.

3. Densité d'états

Pour une énergie $E = \text{constante}$, l'équation $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ est l'équation d'une surface d'énergie constante dans l'espace k_x, k_y, k_z . Pour le réseau cubique, les surfaces sont des sphères d'équation :

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad (15)$$

et de rayon

$$k = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (16)$$

A chaque point du réseau réciproque défini par un ensemble de nombres quantiques (n_x, n_y, n_z) ou (k_x, k_y, k_z) correspond un état électronique pouvant recevoir deux électrons. Dans l'espace réciproque, chaque état occupe un volume compris entre deux points du réseau, à savoir $8\pi^3 / L^3 = 8\pi^3 / V$, où V est le volume caractéristique du cristal, dans le cas le plus simple à symétrie cubique, de paramètre a , $V = L^3 = (Na)^3$. On exprime donc la densité d'états dans l'espace réciproque sous la forme :

$$N(k) = \frac{V}{8\pi^3} \quad (17)$$

En supposant un électron par atome et par cellule unitaire du cristal, il y a N électrons. A la température $T = 0$, tous les états sont occupés au-dessous d'une énergie maximale E_F appelée énergie de Fermi. Dans l'espace réciproque, la surface d'énergie constante correspondant au niveau d'énergie de Fermi

$$E = \hbar^2 \frac{(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m} = E_F \quad (18)$$

Est appelée sphère de Fermi, de rayon

$$k_F = |k_F| = \left(\frac{2mE_F}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (18 \text{ bis})$$

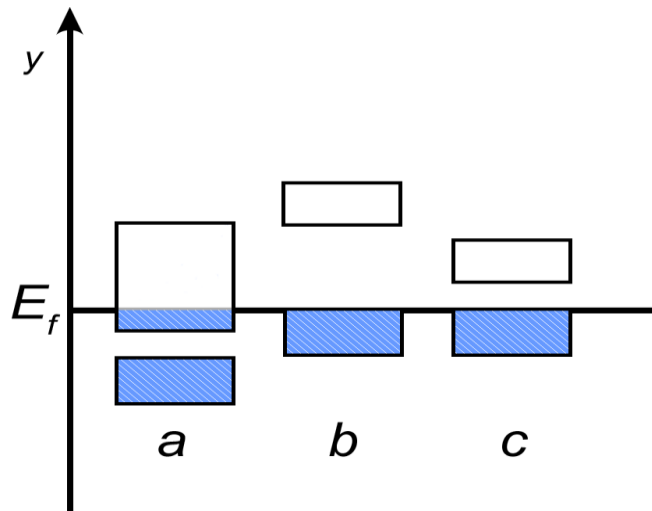


Figure 8 : Schéma théorique établi selon la théorie des bandes d'énergie indiquant suivant les cas la position respective de la bande de valence et de la bande d'énergie : a) Métal; b) Isolant; c) Semi-conducteur; y) Énergie; E_f) Niveau de Fermi.

Au total, il y a $N/2$ états occupés correspondant aux points du réseau réciproque à l'intérieur de la sphère de Fermi, dont le nombre est égal au volume divisé par le volume de la cellule unitaire, selon eq.17 et eq.18 bis.

$$\frac{N}{2} = \frac{4\pi}{3} k_F^3 \frac{V}{8\pi^3} \quad (19)$$

La densité d'états $\rho(E)$ est définie comme le nombre d'états électroniques compris entre les surfaces d'énergie constante E et $E+dE$, correspondant à des vecteurs d'onde k et $k+dk$. La relation eq.19 est valable pour toute énergie E et pour tout vecteur \mathbf{K} associé. Par dérivation, on a

$$dN = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} dE \quad (20)$$

C'est la densité d'états $\rho(E)$ qui donne le quotient du nombre volumique des états pour un électron dans un intervalle infiniment petit d'énergie, par la largeur de cet

intervalle, compte tenu du nombre quantique du spin. Ainsi, le nombre d'états électronique dans l'intervalle d'énergie comprises entre E et $E + dE$ vaut $dN = dN = \rho(E)dE$, avec

$$\rho(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} \quad (21)$$

La densité d'états est proportionnelle à $E^{1/2}$ et au volume de l'échantillon. Il est possible de normaliser la densité par unité de volume, avec l'inconvénient que la densité prend de très grandes valeurs. Il est donc préférable de normaliser la densité d'états par rapport au volume atomique Ω , à savoir :

$$\rho(E) = \frac{\Omega}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} \quad (22)$$

La variation de la densité d'états en fonction de l'énergie est illustrée sur la figure 9.

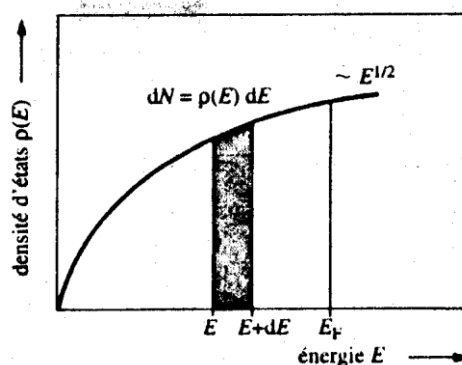


Figure 9 : Densité d'état pour un électron dans un système à trois dimensions de symétrie cubique.

La densité d'états correspond à la surface tramée dans l'intervalle $E, E+dE$. De la définition de $\rho(E)$, il résulte, inversement, que le nombre total d'états vaut, par unité de volume :

$$N = \int_0^{E_F} dN = \int_0^{E_F} \rho(E) dE \quad (23)$$

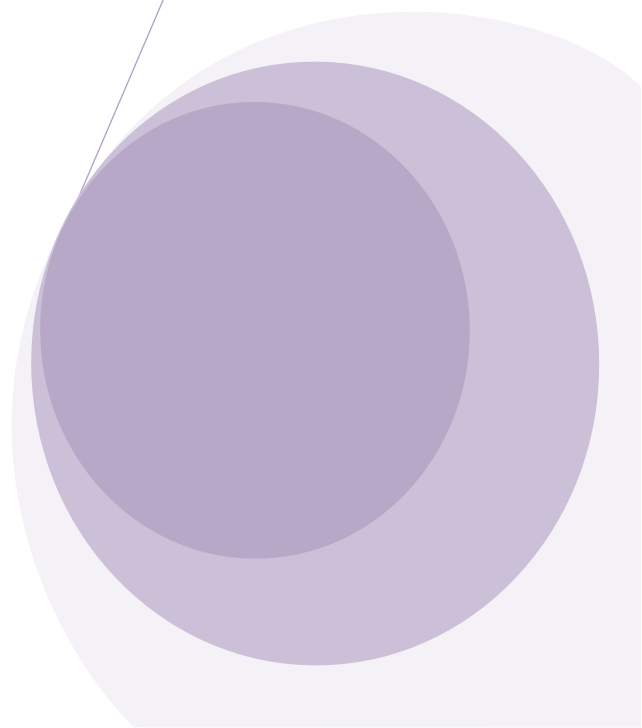
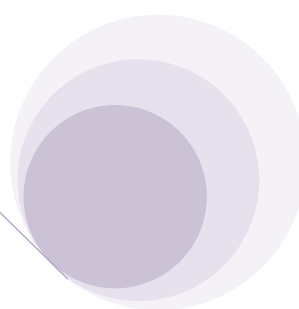
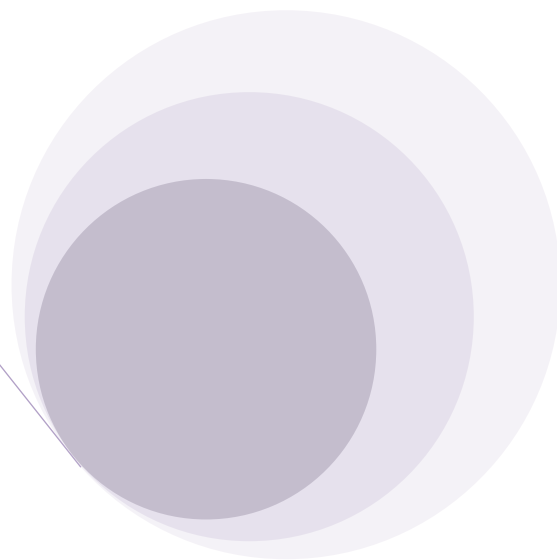
4. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons donné les propriétés physiques des matériaux II-VI et spécifiquement le séléniure de zinc, le tellure de zinc et le sulfure de zinc. Nous nous sommes intéressés à leur phase zinc-blende. Nous avons aussi détaillé les phénomènes physiques qui apparaissent dans ces matières et qui leurs sont caractéristiques. Grace à la contribution de ses caractéristiques uniques, une amélioration des dispositifs à base de ces semi-conducteurs est possible, mais aussi une nouvelle approche de la modélisation des phénomènes physiques est nécessaire. Dans le chapitre suivant nous traitons de manière détaillée les phénomènes de transport électrique se produisant dans les semi-conducteurs considérés.

5. Références bibliographiques

- [1] Landolt-Börnstein. *Semiconductors*, volume III/17.B. Springer, Berlin,1999.
- [2] D. T. F. Marple. *J. Appl. Phys.*, 35 :539, 1964.
- [3] H. D. Riccius. « Infrared Lattice Vibrations of Zinc Selenide and Zinc Telluride ». *J. Appl. Phys.*, 39 :4381, 1968.
- [4] M. Aven and B. Segall. « Carrier Mobility and Shallow Impurity States in ZnSe and ZnTe ». *Phys. Rev.*, 130 :81, 1963.
- [5] B. Clerjaud, A. Gélineau, D. Gallard, and K. Saminadayar. « Cyclotron resonance from photoexcited electrons in ZnTe ». *Phys. Rev. B*,19 :2056, 1979.
- [6] J. Baars and F. Sorger. « Reststrahlen spectra of *HgTe* and *CdxHg_{1-x}Te* ». *Solid State Commun.*, 10 :875, 1972.
- [7] B. segall and D. T. F. Marple. *Physics and Chemistry of II-VI compounds*. p317. M. Aven and J. S. Prener, 1967.
- [8] R. Romestain and C. Weisbuch. « Optical Detection of Cyclotron Resonance in Semiconductors ». *Phys. Rev. Lett.*, 45 :2067, 1980.
- [9] Y. Zhang,W.K. Ge,M.D. Sturge, J.S. Zheng and B.X.Wu: *Phys. Rev. B* 47, 6330 (1993).

CHAPITRE II



CHAPITRE II

PHENOMENES DE TRANSPORT ET EQUATION DE BOLTZMANN

1. L'équation de Boltzmann

Le comportement d'un gaz électronique dans un matériau semi-conducteur soumis à une force $q\vec{E}$, est régi par l'équation de transport de Boltzmann. Si on considère dans le matériau un ensemble de porteurs indépendants représentés par leurs positions $\vec{r}(t)$ et leurs vecteurs d'onde $\vec{k}(t)$, le couple \vec{k}, \vec{r} définit un état dans l'espace des phases. Si on note par $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$ la densité de probabilité qu'à l'instant t le porteur est dans l'état \vec{k}, \vec{r} , la valeur moyenne de toute grandeur $\phi(\vec{k})$ caractéristique du système vaudra :

$$\phi(\vec{r}, t) = \langle \phi(\vec{k}) \rangle = \frac{1}{4\pi^3} \int_{\text{domaine } \vec{k}} \phi(\vec{k}) f(\vec{k}, \vec{r}, t) d^3k \quad (1)$$

où $\frac{1}{4\pi^3}$ est la densité d'état dans l'espace des phases.

Résoudre l'équation de Boltzmann consiste à trouver l'allure et l'évolution de cette densité, ce qui permet alors de calculer toutes les grandeurs moyennes caractéristiques des phénomènes étudiés (diffusion, mobilité, énergie, vitesse, ...).

L'équation de transport de Boltzmann (BTE) est la forme de la fonction de distribution des charges dans des conditions hors équilibre dans un semi-conducteur :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{F_{ext}}{\hbar} \cdot \nabla_k f + v \cdot \nabla_x f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Collisions}} \quad (2)$$

Cette équation régit le mouvement des charges dans l'espace des phases à six dimensions formé par l'espace réel et les vecteurs d'onde (appelé aussi l'espace des phases ou k-points).

La fonction de distribution $f(k, r, t)$ définit la probabilité de trouver une particule à la position r dans l'espace réel, avec k vecteur d'onde au temps t . A partir d'une distribution initiale donnée de particules, la BTE décrit le comportement de la fonction de distribution f en fonction du temps, où F_{ext} est le champ électrique externe appliqué au semiconducteur, et v est la vitesse moyenne de la distribution.

Cependant, la BTE n'a pas une solution exacte aux conditions hors équilibre. Deux hypothèses ont été faites dans la résolution de la BTE. La première est que la fonction de distribution est supposée être classique ; les composants de l'espace réel et de l'espace des phases sont précisés en même temps. Bien sûr, cela viole le principe d'incertitude d'Heisenberg. Par conséquent, la BTE est valide uniquement lorsque les effets quantiques ne sont pas présents. Deuxièmement, les collisions dans la BTE sont supposées être instantanées. Cependant, elles ont une durée finie, et techniquement, le champ extérieur peut influencer sur les porteurs de charge lors d'une collision. Aucune de ces hypothèses n'influe sur les résultats de ce travail. Les dispositifs analysés dans cette étude ne contiennent pas les effets quantiques (parce que l'échelle des dispositifs est assez grande pour éviter de tels effets), alors l'hypothèse classique est valide, et l'hypothèse de l'instantanéité des collisions est invalide seulement à des champs très élevés.

En résumé résoudre l'équation de Boltzmann consiste à trouver l'allure et l'évolution de cette densité, ce qui permet alors de calculer toutes les grandeurs moyennes caractéristiques des phénomènes étudiés. (Diffusion, mobilité, ...), Sous une forme très générale, l'équation de Boltzmann s'écrit :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} f + q \frac{\vec{E}}{\hbar} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{k}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{collision}} \quad (3)$$

où la fonction f peut dépendre explicitement de \vec{k} , \vec{r} et t . \vec{v} est la vitesse d'un porteur que l'on peut calculer si l'on connaît la structure de bande $\mathcal{E}(\vec{k})$.

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \vec{k}} \quad (4)$$

f peut dépendre de \vec{r} quand le champ électrique \vec{E} dans le semi-conducteur est non uniforme spatialement ; elle peut aussi dépendre explicitement du temps quand on observe des phénomènes non stationnaires dus à la présence de champs dépendant du temps.

Dans le cas d'un système homogène sur lequel aucune force n'est appliquée ($E=0$), la vitesse moyenne des porteurs est nulle et ceux-ci ne sont soumis qu'à l'agitation thermique correspondant à la température du réseau T_L . La fonction de distribution est alors celle de Fermi-Dirac.

$$f_0(\vec{k}) = \frac{1}{\exp\left[\frac{\mathcal{E}(\vec{k}) - \mathcal{E}_F}{k_B T_L}\right] + 1} \quad (5)$$

Pour un matériau non dégénéré et à une température qui n'est pas trop basse, on a une bonne approximation de $f_0(\vec{k})$ en écrivant :

$$f_0(\vec{k}) = f_0(\mathcal{E}) = A \exp\left(-\frac{\mathcal{E}(\vec{k})}{k_B T_L}\right) \quad (6)$$

Quand on soumet les porteurs à un champ électrique la fonction de distribution est modifiée, la vitesse moyenne des porteurs n'est plus nulle et un courant apparaît. Les porteurs absorbent de l'énergie provenant du champ électrique au taux

$$\left(\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t}\right)_{champ} = q \vec{v} \cdot \vec{E} \quad (7)$$

L'équilibre thermodynamique est atteint quand le taux de perte d'énergie due aux collisions $(\partial \mathcal{E} / \partial t)_{collisions}$, et le taux de gain d'énergie dû au champ électrique sont égaux. La population électronique peut alors avoir une énergie moyenne plus

grande que celle du réseau. Il s'ensuit que la nouvelle distribution obtenue dans ce cas pourra être différente de la Maxwellienne (6).

Le second membre de l'équation de Boltzmann qui s'écrit $(\partial\varepsilon/\partial t)_{collisions}$ représente la variation temporelle de la distribution compte tenu des interactions des porteurs avec le milieu ambiant.

Si $S(\vec{k}, \vec{k}')$ représente la densité de probabilité par unité de temps qu'un porteur dans l'état \vec{k} subisse un choc l'amenant dans un autre état \vec{k}' à d^3k' près, le terme de collision pourra s'écrire [1]

$$(\partial\varepsilon/\partial t)_{collisions} = - \int d^3k' \left[\frac{S(\vec{k}, \vec{k}')f(\vec{k})(1 - f(\vec{k}')) - S(\vec{k}', \vec{k})f(\vec{k}')}{(1 - f(\vec{k}))} \right] \quad (8)$$

où les termes $1 - f$ tiennent compte du principe d'exclusion de Pauli. Pour un matériau non dégénéré le nombre d'états occupés $f(\vec{k})$ est toujours faible devant 1 et l'état \vec{k}' est donc pratiquement toujours libre de sorte que :

$$(\partial\varepsilon/\partial t)_{collisions} = - \int d^3k' \left[S(\vec{k}, \vec{k}')f(\vec{k}) - S(\vec{k}', \vec{k})f(\vec{k}') \right] \quad (9)$$

ce qui peut se mettre sous la forme :

$$(\partial\varepsilon/\partial t)_{collisions} = -\lambda(\vec{k})f(\vec{k}) + \int S(\vec{k}', \vec{k})f(\vec{k}') d^3k' \quad (10)$$

en ayant posé

$$\lambda(\vec{k}) = \int S(\vec{k}, \vec{k}')d^3k' \quad (11)$$

La masse de littérature consacrée à la résolution de l'équation de Boltzmann, est considérable et ne pouvant citer celle-ci, nous référons le lecteur au livre de Conwell [2] qui est un grand classique dans ce domaine et à [3] qui représente une complète mise à jour dans ce sujet.

Etant donné la forme intégró-différentielle de l'équation de Boltzmann et la complexité des interactions subies par les porteurs, il est difficile voire impossible dans le cas général, de trouver une forme analytique exacte de la solution. C'est la raison pour laquelle on a eu recours soit à des hypothèses simplificatrices menant à un traitement analytique ou semi-analytique, soit à des résolutions numériques sur calculateurs.

Dans le cas où le champ électrique est suffisamment faible en amplitude (c'est le cas du régime ohmique, on a coutume d'écrire :

$$f(\vec{k}) = f_0(\varepsilon) + f_1(\vec{k}) \quad (12)$$

où $f_0(\varepsilon)$ est une distribution de Boltzmann à la température du réseau et $f_1(\vec{k})$ est un terme de dérive d'amplitude proportionnelle à la force appliquée et beaucoup plus petit que $f_0(\varepsilon)$. De plus, dans la limite d'une bande d'énergie sphérique et parabolique, de collisions élastiques et pourvu que $S(\vec{k}, \vec{k}')$ ne dépende que du module de \vec{k} et de l'angle β entre \vec{k} et \vec{k}' [1], on peut introduire un temps de relaxation ne dépendant que du module de \vec{k} par :

$$\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t}\right)_{collisions} = -\frac{f_1(\vec{r}, \vec{k})}{\tau(k)} \quad (13)$$

Ceci mène à une expression de f_1 particulièrement simple. Si le champ est appliqué selon la direction \vec{k}_z , on trouve pour un système homogène et stationnaire

$$f_1 = \frac{qv_z \tau(k) f_0}{K_B T_L} E \quad (14)$$

Dans le cas où le champ électrique est si grand que la relation (12) n'est plus valable, on peut chercher une solution sous la forme d'un développement en série de polynômes de Legendre

$$f(\vec{k}) = \sum_{n=0}^{\infty} S_n(k) P_n(\cos\theta) \quad (15)$$

où $S_n(k)$ ne dépend que du module du vecteur d'onde \vec{k} et $P_n(\cos\theta)$ est le polynôme de Legendre de degré n , θ représente l'angle polaire entre le vecteur d'onde \vec{k} et la direction du champ électrique appliqué. Cette écriture nécessite que la fonction $f(\vec{k})$ possède une symétrie de révolution autour de la direction du champ électrique pour que l'angle azimutal de \vec{k} n'intervienne pas. Quand on transporte l'équation (15) dans l'équation obtenue avec (3) et (8), en séparant les coefficients des polynômes de tout ordre et en utilisant les propriétés d'orthogonalité des $P_n(\cos\theta)$ pour éliminer la dépendance en θ , on aboutit dans le cas général à un système infini d'équations différentielles couplées reliant S_{n-1}, S_n et S_{n+1} [4,5,6]. L'écriture peut encore être simplifiée en supposant que pour des mécanismes de collision approximativement élastiques et isotropes la distribution $f(\vec{k})$ est à peu près symétrique ($f(k, \theta) \simeq f(k, -\theta)$) et par suite que le développement peut être arrêté au premier ordre, donnant ainsi

$$f(\vec{k}) = S_0(\varepsilon) + S_1(\varepsilon)\cos\theta \quad \text{si } \varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (16)$$

où $S_0(\varepsilon)$ représente la partie symétrique de la distribution qui à cause de l'effet du champ électrique est différente de $f_0(\varepsilon)$.

Ainsi, par exemple dans le cas du Germanium de type P, dans l'hypothèse que $S_0(\varepsilon)$ peut être représentée par la combinaison de deux Maxwelliennes du type (6) dans laquelle T_L est remplacée par deux températures T_e dites électroniques, plus grandes que T_L (ne représentant en fait que l'énergie moyenne des porteurs) ; la limite du domaine d'application de chaque maxwellienne est située à l'énergie du phonon optique intravallée impliqué dans les interactions [7].

Dans le cas d'une bande d'énergie ellipsoïdale, il est toujours possible de se ramener au modèle simple de (16), en faisant le changement de coordonnées ramenant à une bande sphérique [8], le champ électrique \vec{E} est alors transformé en un champ électrique équivalent \vec{E}^* par le même changement de coordonnées qui

transforme la vallée ellipsoïdale en vallée sphérique. Il est par ailleurs avantageux d'écrire (16) sous la forme équivalente suivante [2, 9]

$$f(\vec{k}) = S_0(\varepsilon) + k \cos\theta g(\varepsilon) \quad (17)$$

Au lieu de chercher $f(\vec{k})$ sous forme d'un développement limité qui la plupart du temps est difficilement justifiable, on peut essayer de poser à priori une forme de distribution qui rend compte à la fois de l'effet de dérive des porteurs dans l'espace des \vec{k} et de l'augmentation de leur énergie moyenne au-dessus de l'énergie de réseau. La fonction suivante dite distribution de Maxwell déplacée est souvent employée :

$$f(\vec{k}) = A \exp\left(-\frac{\hbar^2(\vec{k}-\vec{k}_d)^2}{2 m^* K_B T_e}\right) \quad (18)$$

où A ne dépend pas de \vec{k} , $\vec{k}_d = \frac{m^* \vec{v}_d}{\hbar}$, T_e étant la température électronique, v_d la vitesse de dérive due au champ appliqué et m^* la masse effective pouvant dépendre éventuellement de l'énergie par :

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial \vec{k}^2}} \quad (19)$$

Cette hypothèse est propre à des matériaux où la concentration en porteurs est telle que l'interaction porteur-porteur prédomine sur tous les autres types d'interaction, interactions porteur-réseau en particulier [10,11].

L'hypothèse d'une distribution telle que (18) présente un intérêt certain car si on transforme l'équation de Boltzmann en ces deux équations qui lient les taux de perte d'énergie et de moment des porteurs par les collisions aux taux de gain par le champ électrique ainsi qu'il est montré dans [3] et si on moyenne celles-ci grâce à (18), on aboutit à un système de deux équations non linéaire où les seules inconnues sont v_d et T_e , E jouant le rôle de paramètre. Ces deux équations peuvent être aisément résolues numériquement et l'intérêt de (18) est de mener à une

résolution quasi-analytique du problème. Cette technique peut aussi être appliquée à la détermination des régimes transitoires où v et T sont variables dans le temps. Les deux équations qui sont à résoudre contiennent alors en plus le temps comme paramètre [12]. De la même manière on peut imaginer de tenir compte d'une évolution spatiale de (18), voire même de résoudre avec cette distribution un composant réel au prix d'une certaine complication [13] où le champ varierait à la fois dans le temps et dans l'espace. Il faut toutefois ne pas oublier que la forme de (18) est d'autant plus rigoureuse que les interactions entre porteurs sont prédominantes et qu'elle s'applique d'autant mieux que la concentration en porteurs est élevée.

A la température ambiante en pratique la concentration doit être plus grande que 10^{18} cm^3 , ce qui est réalisé dans la zone active des composants courants.

2. Les Méthodes Analytiques

Les méthodes analytiques pour la simulation de matériaux semi-conducteurs sont très utiles. Ils fournissent des précisions moyennes et un temps d'exécution rapide. Ces méthodes peuvent également être utilisées lorsque le temps de simulation est très long, les structures des dispositifs en 3D, où une mise en dispositif complexe est nécessaire, les méthodes de simulation analytiques sont efficaces. Le modèle Dérive-Diffusion et le modèle hydrodynamique sont les deux modèles de simulation analytique de BTE les plus largement utilisés.

2.1 Le Modèle Dérive-Diffusion et le Modèle Hydrodynamique

Le modèle Dérive-Diffusion (DD) commence par une version simplifiée de BTE, qui est ensuite réduite à des équations différentielles simples en utilisant la méthode des moments. Le modèle DD simplifie d'abord la BTE en supposant que le changement dans la distribution des particules peut être approché par l'hypothèse de temps de relaxation τ (Eq. 28).

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{collisions}} = -\frac{f - f_0}{\tau} \quad (28)$$

Maintenant, avec la BTE simplifiée, les deux premiers moments sont évalués pour donner les équations de continuité des porteurs (28) et les équations de Dérive-Diffusion(29).

Ces équations, lorsqu'elles sont combinées avec l'équation de Poisson, forment le modèle DD.

$$\begin{aligned}\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla_x \cdot (nv) &= 0 \\ \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla_x \cdot (pv) &= 0\end{aligned}\tag{29}$$

$$J_n = q\mu_n n F + qD_n \nabla_x n\tag{30}$$

$$J_p = q\mu_p p F + qD_p \nabla_x p$$

Le modèle DD donne de bons résultats lors du calcul de la distribution moyenne des particules (tensions, courants, etc) pour des dispositifs de taille assez grande, mais il diverge rapidement lorsque les transitions évoluent rapidement et lorsque l'analyse exige une connaissance de la distribution à haute énergie. Ce travail se concentre sur des dispositifs submicroniques, alors le modèle DD n'est pas applicable. Le claquage d'un dispositif est un phénomène de haute énergie, et la simulation en régime à haute énergie est un point faible du modèle DD.

De plus, les dimensions caractéristiques dans ce travail sont petites, et d'autant plus la dimension caractéristique du dispositif rétrécit, le système s'écarte des conditions d'équilibre et peut générer une évolution rapide des transitions, ceci constitue une autre faiblesse du modèle DD. Une option permet d'essayer de remédier à ces inconvénients est de prendre des moments supplémentaires de la BTE.

Le modèle hydrodynamique améliore le modèle DD, mais pas dans les cas analysés dans ce travail. Le modèle hydrodynamique consiste à prendre plus de moments de la BTE. Il ajoute des effets de température et de la continuité de l'énergie, augmentant légèrement la validité du simulateur pour les hautes énergies. L'objectif de ce travail repose entièrement sur les effets des hautes énergies, de sorte

que le modèle hydrodynamique ne peut pas être utilisé. Des informations détaillées sur le modèle hydrodynamique se trouvent dans Smith et al. [18].

Il ressort finalement de tout ce qui vient d'être dit qu'aucun traitement analytique n'est possible que dans certains cas particuliers et que les hypothèses faites pour rendre le problème résolu, restreignent parfois considérablement le domaine de validité des solutions trouvées. Une étude plus complète nécessitant moins d'hypothèses restrictives peut être entreprise quand on dispose de moyens de calculs suffisants pour résoudre numériquement l'équation de Boltzmann. Il en résulte alors que la qualité des résultats acquis dépend plutôt des possibilités des calculateurs utilisés que des restrictions physiques. Les méthodes numériques sont essentiellement de deux types : les techniques itératives et les techniques de Monte Carlo. Dans les applications de ces techniques effectuées jusqu'à présent les seules hypothèses restrictives nécessaires sont les suivantes :

- en premier lieu, les collisions subies par les porteurs quelque soit leur type sont instantanés et s'effectuent sur place dans le cristal.

- en second lieu, la présence du champ ne modifie pas la façon dont s'effectue les interactions, en d'autres termes, $S(\vec{k}', \vec{k})$ est indépendant de la force électrique appliquée et ne dépend que de l'état du porteur à l'instant considéré. Il en résulte que les collisions d'une part et les accélérations ou décélérations dues au champ électrique d'autre part, sont des événements indépendants et parfaitement délimités dans le temps et dans l'espace (les hypothèses étaient déjà implicitement admises dans les autres méthodes).

Dans la méthode itérative, l'équation de Boltzmann est transformée en une expression intégrale de $f(\vec{k}, t)$ [14] :

$$f(\vec{k}, t) = \int_0^\infty ds \int d^3 k' f(\vec{k}', t-s) S(\vec{k}', \vec{k} - \frac{q\vec{E}s}{\hbar}) \exp\left\{-\int_0^s \lambda\left(\vec{k} - \frac{q\vec{E}y}{A}\right) dy\right\} \quad (20)$$

Une simplification considérable de (20) peut être obtenue en superposant aux mécanismes de collisions existant normalement un nouveau mécanisme qui ne change pas l'état du système lorsqu'il intervient (c'est la collision fictive [15]). La densité de probabilité de choc d'une telle collision peut avoir la forme :

$$S_0(\vec{k}, \vec{k}') = \lambda_0(\vec{k})\delta(\vec{k} - \vec{k}') \quad (21)$$

où δ est le symbole de Kronecker. S_0 relie \vec{k} seulement avec lui-même, ceci ne modifie par la trajectoire de la particule, et $\lambda_0(\vec{k})$ peut donc être quelconque.

Choisissant :

$$\lambda_0(\vec{k}) = \Gamma - \lambda(\vec{k}) \quad (22)$$

où Γ est une constante, on transforme (20) sous la forme :

$$f(\vec{k}, t) = \int_0^\infty ds \int d^3k' f(\vec{k}', t-s) S^* \left(\vec{k}', \vec{k} - \frac{q\vec{E}s}{h} \right) e^{-\Gamma s} \quad (23)$$

avec

$$S^*(\vec{k}', \vec{k}) = S(\vec{k}', \vec{k}) + S_0(\vec{k}', \vec{k}) \quad (24)$$

Chaque itération procède en deux temps. Une fonction $g_n(\vec{k}, t)$ est calculée à partir de la $n^{\text{ième}}$ évaluation de la fonction f cherchée, selon la relation :

$$g_n(\vec{k}, t) = \int d^3k' f_n(\vec{k}', t) S^*(\vec{k}', \vec{k}) \quad (25)$$

qui donne alors la $(n+1)^{\text{ième}}$ itération de (23)

$$f_{n+1}(\vec{k}, t) = \int_0^\infty g_n \left(\vec{k} - \frac{q\vec{E}s}{A}, t-s \right) e^{-\Gamma s} ds \quad (26)$$

Après un nombre suffisant d'itérations, les distributions calculées convergent vers une limite $f(\vec{k})$ ne dépendant plus du temps et qui est indépendante de la fonction choisie au départ des itérations. La convergence est d'autant plus rapide que Γ est

choisi petit avec la condition que $\lambda_0(\vec{k})$ soit toujours positif ou nul. Cette méthode a été également appliquée au cas de champ électrique variable dans le temps [16].

Une autre méthode itérative repose sur la détermination de la fonction de distribution sous forme d'un développement en série entière par rapport au temps [17]. Le système est soumis à un échelon de champ électrique constant et uniforme à $t \geq 0$. A $t < 0$, le système est en équilibre à champ nul avec $f(\vec{k}, t) \equiv f_0(\varepsilon)$. On cherche la nouvelle distribution sous la forme :

$$f(\vec{k}, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\partial^n f}{\partial t^n} \right)_{t=0} \frac{t^n}{n!} \quad (27)$$

à un instant t ultérieur à 0. Comme on ne peut pas, en fait calculer qu'un nombre limité de dérivées de f , on doit procéder par petits pas Δt successifs, et le processus représenté dans (27) est répété à $\Delta t, 2\Delta t, \dots, N\Delta t$ jusqu'à ce que la distribution n'évolue plus. Les dérivées successives nécessaires sont calculées simplement en dérivant terme à terme les deux membres de l'équation de Boltzmann homogène. La méthode est applicable pour toute variation temporelle de champ électrique, le premier pas d'itération à choisir étant celui où le système à l'équilibre est représenté par $f_0(\varepsilon)$ qui est la forme la plus simple possible.

2.2 Le Modèle de Monte Carlo

Avec tous les inconvénients des méthodes analytiques (au moins en ce qui concerne ce travail), nous examinons le modèle Monte Carlo (MC).

Le modèle Monte Carlo est sans doute la façon la plus précise de simuler les phénomènes de transport dans les matériaux semi-conducteurs et les dispositifs.

Tout d'abord, un aperçu de la méthode Monte Carlo est donné, et le cas particulier de résoudre la BTE est examiné.

3. La Méthode Monte Carlo

La méthode de Monte Carlo (MC) Metropolis a été introduite en physique de la matière condensée par Metropolis et coll. en 1953 [19]. Elle porte ce nom parce qu'elle est basée sur le hasard. Cette méthode permet l'estimation des moyennes de grandeurs physiques données par la formulation de Gibbs de la mécanique statistique sous la forme d'intégrales multidimensionnelles. Comme c'est une méthode stochastique, elle peut être utilisée pour résoudre un grand nombre de problèmes mathématiques. Elle est basée sur le tirage de nombres aléatoires pour réaliser le calcul d'une quantité déterministe : résoudre une équation intégral-différentielle (la BTE dans ce cas).

La technique de MC est en effet particulièrement adaptée au calcul des intégrales de dimension supérieure à dix. Les premières simulations furent réalisées dans l'ensemble canonique (N , V et T constants), puis la technique fut étendue aux autres ensembles statistiques. On génère une séquence aléatoire d'états accessibles (chaîne de Markov) dans l'espace des configurations du système. On échantillonne en privilégiant les régions où le facteur de Boltzmann ($\exp(-U/kBT)$), c'est-à-dire la densité de probabilité de l'ensemble canonique dans cet espace, est le plus élevé (algorithme de Metropolis). La probabilité d'une configuration particulière d'énergie potentielle U_i est alors proportionnelle à $\exp(-U_i/kBT)$, autrement dit l'acceptation d'une configuration de la chaîne de Markov est pondérée par une

fréquence proportionnelle au facteur de Boltzmann. Une propriété d'équilibre est alors obtenue comme une moyenne simple sur les configurations acceptées. Cette exploration de l'espace des configurations, en suivant l'algorithme de Metropolis, constitue le premier cas d'échantillonnage suivant l'importance en mécanique statistique. Elle est encore largement utilisée de nos jours parce qu'elle représente un moyen simple et relativement efficace d'obtenir des moyennes de grandeurs physiques dans un ensemble statistique. Il est important de noter que ces moyennes sont obtenues malgré l'incapacité de connaître explicitement la densité de probabilité normalisée de l'ensemble considéré. Les estimations directes de l'énergie libre (entropie, énergie libre de Helmholtz, enthalpie, enthalpie libre) sont donc impossibles alors que les différences d'énergies libres (correspondant à des rapports de densités de probabilité) sont accessibles et font l'objet de méthodes particulières.

La méthode de MC est en général limitée au calcul des propriétés statiques puisque seule la partie configurationnelle de l'espace des phases est explorée et que le temps n'est pas une variable explicite. Les propriétés dynamiques sont inaccessibles et devront être obtenues par une autre technique.

Du point de vue des applications, ces méthodes sont aujourd'hui indispensables dans des domaines aussi variés et différents que la finance, la mise au point de nouveaux microcomposants électroniques, la sismologie, les télécommunications, en ingénierie ou en physique, mais aussi en biologie, en sciences sociales, etc. Par exemple, en chimie, en physique, ou même en biologie, de nombreux problèmes exigent l'analyse des propriétés dynamiques d'un nombre tellement grand d'objets (particules atomiques, atomes, molécules ou macromolécules), que ceci ne peut se faire que par des techniques de type MC.

Ces simulations reposent sur une description moléculaire en termes de positions et quantités de mouvement d'un ensemble de particules qui constituent le système. L'approximation de Born-Oppenheimer est adoptée, c'est-à-dire que l'on exprime l'hamiltonien du système en fonction des variables nucléaires, le mouvement (rapide) des électrons étant moyenné. Faisant l'approximation supplémentaire

qu'une description par la mécanique classique est adaptée, on peut écrire le hamiltonien H du système comme la somme de l'énergie cinétique K , et de l'énergie potentielle U , de l'ensemble des coordonnées de position r_i , et des quantités de mouvement p_i de chaque atome i .

$$H(r^N, p^N) = K(p^N) + U(r^N) \quad (31)$$

L'énergie cinétique a une expression bien établie alors que l'énergie potentielle qui décrit les interactions interatomiques est en général mal connue et constitue, de ce fait, une limitation importante de cette méthode de simulation. La majorité des calculs réalisés reposent sur cette description classique du système, mais l'incorporation de degrés de liberté électroniques est possible.

L'énergie potentielle est l'ingrédient principal des simulations. On peut soit prendre un potentiel simple, afin de réaliser une investigation théorique ou une étude générique, soit rechercher un potentiel empirique plus réaliste pour modéliser les interactions du système réel et le valider sur certaines propriétés pertinentes. Dans ce dernier cas, on peut espérer faire des prédictions sur le système réel avec de bonnes chances de succès si l'on utilise le potentiel dans les conditions de sa validité. D'autre part, les calculs sont réalisés sur un nombre fini de molécules et afin d'éviter des effets de surface, on adopte en général des conditions aux limites périodiques (dites de Born-Von Kármán) qui permettent de simuler un système infini d'images de la boîte de simulation de base.

Les travaux les plus anciens font état des premiers succès qui ont établi la simulation comme un outil majeur d'investigation de la physique de la matière condensée. La méthode de MC fut développée par Von Neumann, Ulam et Metropolis, à la fin de la seconde guerre mondiale, pour l'étude de la diffusion des neutrons dans un matériau fissile.

N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller et E. Teller [20] furent les pionniers de l'investigation de la matière par simulation à l'ordinateur. Ils réalisèrent la simulation d'un liquide simple (disques durs se

déplaçant en deux dimensions) par la méthode de MC. Ils proposèrent ce qui porte désormais le nom de MC Metropolis et qui est devenu la base des simulations MC des systèmes de particules en interaction. Wood et Parker [21] mirent en évidence une transition de phase solide-fluide à haute densité par MC. Il s'agissait d'un système de particules interagissant via un potentiel (énergie potentielle) de Lennard-Jones comme modèle de l'argon. Ceci permit une comparaison à l'expérience. Le bon accord obtenu rendit ce potentiel très populaire. La même année, Wood et Jacobson [22] réalisèrent une simulation MC sur le modèle de la Dynamique Moléculaire utilisé par Alder et Wainwright. Ils ont obtenu les mêmes résultats, montrant ainsi l'équivalence des deux méthodes et que l'hypothèse ergodique d'équivalence des moyennes d'ensemble et temporelle était satisfaite pour ce système. Ce résultat était loin d'être évident à l'époque.

4. Monte Carlo et l'équation de Boltzmann

Une meilleure façon de comprendre la méthode de MC appliquée à la BTE est d'analyser l'algorithme physiquement. Tous les électrons au cours d'une simulation de MC suivent strictement les premiers principes de la physique. Cela soulève beaucoup d'ambiguïtés dans la physique des matériaux et dispositifs.

La méthode MC de résolution de la BTE fournit une solution exacte et convergente [23-24]. La seule limite à sa précision est les premiers principes de la physique inclus dans le modèle (et des erreurs numériques). L'avantage majeur de la méthode est le fait que les mécanismes de collisions des porteurs sont inclus, il n'y a pas d'approximation de relaxation temporelle. Ceci devient très important lorsqu'on analyse l'énergie d'une distribution de porteurs de charge.

L'idée de base de la résolution est littéralement de suivre la trajectoire des particules. Les particules (les électrons dans cette recherche ou un ensemble d'entre eux) sont suivies à travers leurs six dimensions (trois dans l'espace réel, et trois dans l'espace des vecteurs d'onde) sur une longue période de temps, des informations macroscopiques peuvent être évaluées statistiquement à partir des variables

microscopiques. Par exemple, dans une simulation d'un semi-conducteur massif, 20 000 électrons sont simulés durant 5 ps. Pendant la simulation, l'énergie de chaque électron est enregistrée à chaque pas de temps discret, et quand la simulation s'achève, l'énergie moyenne pour l'ensemble peut être calculée. C'est la méthode de simulation: observer des particules dans un matériau (ou un dispositif), enregistrer leurs paramètres microscopiques, puis calculer les variables macroscopiques à partir de ces valeurs.

Ainsi, on a seulement deux étapes dans la simulation, répétées plusieurs fois:

1. description des électrons en fonction de la physique newtonienne classique.
2. Collisions potentielles des électrons.

Bien sûr, la simulation MC réelle comporte de nombreuses étapes assez compliquées, mais l'idée de base est résumée dans ces deux étapes globales. Dans le chapitre suivant on examine de plus près la simulation MC, y compris les algorithmes utilisés et les données.

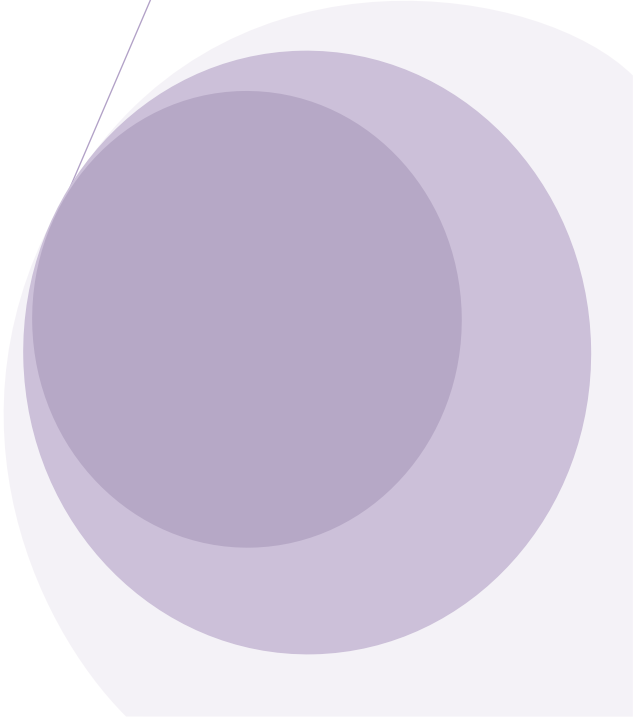
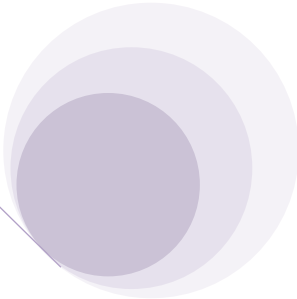
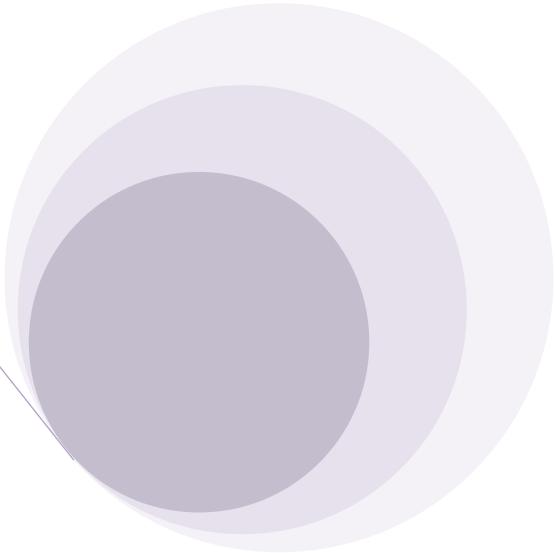
5. Références

- [1] J. TAVERNIER, D. CALECKI, « Introduction aux phénomènes de transport linéaires dans les semiconducteurs, Masson, Paris 1979.
- [2] E.M. CONWELL, "High field transport in semiconductors", Solid-State Physics, Supplement 9, Academic Press, 1967.
- [3] P.J. Price, "Solid-state electronics", Volume 21, p.9 (1977).
- [4] H.G. REIK, H. RISKEN, Physical Review, Volume 124, p.777 (1961).
- [5] G.A. BARAFF, Physical Review, Volume 133, p.A26 (1964).
- [6] M. ASCHE, O.G. SARBEI, Physica Status Solidi, Volume 33, p.9 (1969).
- [7] G. PERSKY, D.J. BARTELINK, Physical Review B, Volume 1, p.1614 (1970).

- [8] C. HERRING, E. VOGT, *Physical Review*, Volume 101, p.944 (1956).
- [9] B.R. NAG, “Theory of Electrical Transport in Semiconductors, Pergamon Press, (1972).
- [10] H. FROELICH, B.V. PARANJAPE, *Proceedings of the Physical Society of London*, Volume B69, p.21 (1956).
- [11] P.P. DEBYE, E.M. CONWELL, *Physical Review*, Volume 93, p.693 (1954).
- [12] P. DAS, D.K. FERRY, *Solid-State Electronics*, Volume 19, p.851 (1976).
- [13] R. BOSCH, H. THIM, *IEEE Transactions on Electron Devices*, Volume 21, p.16 (1974).
- [14] H. BUDD, *Physical Review*, Volume 158, p.798 (1967).
- [15] H.D. RESS, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Volume 30, p.643 (1969).
- [16] H.D. RESS, *IBM Journal of Research and Development*, Volume 13, p.537 (1969).
- [17] J.P. NOUGIER, M. ROLAND, *Physical Review B*, Volume 8, p.5728 (1973).
- [18] W. FAWCETT, A.D. ROARDMAN, S. SWAIN, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Volume 31, p.1963 (1970).
- [19] A. W. Smith and K. F. Brennan, “Hydrodynamic simulation of semiconductor devices,” *Progress in Quantum Electronics*, vol. 21, no. 4, pp. 293–360, 1997.
- [20] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, “Equation of state calculations by fast computing machines”, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
- [21] W. W. Wood, F. R. Parker, “Monte Carlo equation of state of molecules interacting with the Lennard-Jones potential. I. A supercritical isotherm at about twice the critical temperature.” *J. Chem. Phys.* **27**, 720 (1957).
- [22] W. W. Wood, J. D. Jacobson, “Preliminary results from a recalculation of the Monte Carlo equation of state of hard spheres.”, *J. Chem. Phys.* **27**, 1207 (1957).

- [23] K. F. Brennan, E. Bellotti, M. Farahmand, J. Haralson II, P. P. Ruden, J. D. Albrecht, and A. Sutandi, “Materials theory based modeling of wide band gap semiconductors: from basic properties to devices,” *Solid-State Electronics*, vol. 44, no. 2, pp. 195–204, 2000.
- [24] H. Kosina, M. Nedjalkov, and S. Selberherr, “Theory of the Monte Carlo method for semiconductor device simulation,” *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 47, no. 10, pp. 1898–908, 2000.

CHAPITRE III



CHAPITRE III

MISE EN ŒUVRE DE LA SIMULATION MONTE CARLO

1. Introduction

Le but de ce chapitre est non seulement de décrire la méthode MC, mais aussi de mettre en lumière les aspects particuliers et d'analyser les avantages et les inconvénients. Néanmoins avant de poursuivre, il semble nécessaire de rappeler un certain nombre de concepts qui seront utiles à l'élaboration de cette méthode : trajectoire de l'électron, probabilités de vol libre, de collision et de réorientation durant une collision.

La méthode de MC étudiée permet de remplir deux fonctions essentielles. La première est consacrée au calcul des probabilités à partir des expressions usuelles. La deuxième fonction est destinée à déterminer les grandeurs instantanées définies sur un ensemble d'électrons (l'énergie, la vitesse, la position) par la procédure du «Self-Scattering» [2] pour laquelle, les durées de vol libre sont distribuées pour chaque électron. La mise en œuvre a été adoptée initialement par Kurosawa [11], puis améliorée par d'autres auteurs [12]. Elle est basée sur un processus de tirage au sort à partir de lois de probabilités d'interactions subies par les porteurs durant leur mouvement dans le semi-conducteur [13].

L'idée de base de la méthode consiste à simuler le mouvement dans le temps d'un ou plusieurs porteurs par la génération de la trajectoire dans l'espace des vecteurs d'onde des points représentatifs de ces porteurs, tenant compte premièrement de l'accélération due aux forces appliquées aux porteurs (champs électrique dans la majorité des cas) :

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{q\vec{E}}{\hbar} \quad (1)$$

deuxièmement, des collisions subies par ces porteurs induisant des transitions brutales entre états.

Connaissant la trajectoire dans l'espace des vecteurs d'onde \vec{k} , il est possible de se replacer dans l'espace géométrique réel quand on connaît la structure de bande d'énergie $\epsilon(k)$ permettant de calculer la vitesse des porteurs à chaque instant, (relation (4) du chapitre II) laquelle, par intégration, donne la position du porteur au cours du temps.

Il est possible d'accéder à toutes les grandeurs moyennes ; énergie moyenne, vitesse de dérive...Celles-ci peuvent être déduites de deux façons différentes : soit par l'observation d'un grand nombre de particules permettant de calculer les moyennes d'ensemble (cette définition est utile quand les conditions d'étude changent dans le temps), soit par observation d'un seul électron pendant une durée suffisamment grande.

La mise en œuvre de la méthode MC a été effectuée de deux façons différentes. La plus ancienne est due à Kurosawa [1] et a été reprise et considérablement améliorée par Rees, Fawcett et Price [2, 3, 4, 5]. Elle a, par la suite, connu un grand succès et a été appliquée à de nombreux matériaux. Nous rappelons qu'elle consiste à calculer suivant une distribution bien particulière les durées "exactes" entre deux collisions successives, situant ainsi les états du porteur au cours du temps. C'est à partir d'une trajectoire irrégulièrement échantillonnée que les paramètres de transport recherchés doivent être approchés par le calcul des moyennes adéquates.

La méthode que nous avons développée dans notre laboratoire est sensiblement différente ; l'état du porteur est examiné régulièrement dans le temps permettant ainsi d'obtenir une trajectoire régulièrement échantillonnée mais avec un pas de temps Δt choisi suffisamment petit. Le choix du pas Δt est un des problèmes majeurs dans cette méthode. Nous nous étendrons plus loin sur cette question.

Dans cette méthode, le porteur subit successivement des phases d'accélération libre de durée Δt au bout desquelles, la probabilité de collision est testée à l'aide de tirage d'un nombre aléatoire. Il en résulte que l'on obtiendra ainsi une décomposition des durées de libres parcours en un nombre entier de pas Δt choisis.

Considérons un électron d'énergie $\varepsilon(t)$ et de vecteur d'onde $\vec{k}(t)$, placé en $r(t)$ ou est appliqué un champ électrique $E(\vec{r}, t)$.

Sous l'action du champ électrique \vec{E} , les échanges d'énergie et d'impulsion de l'électron avec le réseau cristallin, et la déviation de sa trajectoire par les impuretés, vont modifier son énergie, son vecteur d'onde et sa position. En appliquant les lois de la mécanique et de l'électrodynamique, nous pouvons déterminer théoriquement le comportement de chaque électron dans le temps et dans l'espace des vecteurs d'ondes. Mais, une telle approche, compte tenu de la grande densité d'atomes dans les cristaux, est irréalisable avec des moyens de calcul peu performants. Afin de rendre le problème plus réalisable :

- 1) Nous faisons une étude statistique des échanges d'énergie possibles, entre les électrons, les modes de vibrations du réseau et les impuretés, ce qui nous permet de calculer la probabilité de ces interactions et leur action sur l'énergie et le vecteur d'onde de l'électron. Chaque processus de collision a une densité $s(\vec{k}, \vec{k}')$ qui caractérise la probabilité pour qu'un électron passe de l'état défini par le vecteur d'onde \vec{k} à un autre état défini par le vecteur d'onde \vec{k}' , par unité de temps.
- 2) Nous supposons que ces interactions sont instantanées, les électrons sont alors déplacés en vol libre sous le seul effet du champ électrique, entre deux chocs. La procédure adoptée initialement par Kurosawa [7] pour déterminer les temps de libre parcours Δt , est de tirer au sort des nombres aléatoires r à distribution uniforme entre 0 et 1 [8].
- 3) Lorsqu'une interaction a lieu, nous déterminons sa nature par tirage au sort, et nous modifions, en conséquence, l'énergie et le vecteur d'onde de l'électron

calculés par l'équation de Boltzmann. La répartition des électrons change; nous calculons alors le champ électrique qui en résulte à des intervalles de temps suffisamment petits, pour pouvoir supposer ce champ constant entre deux calculs [4],[9].

Nous considérons un modèle simplifié à trois vallées non paraboliques mais isotropes. Dans les vallées supérieures, nous calculons la masse des électrons par la relation [10] :

$$\alpha = (1 - m^*/m_0) \times \varepsilon$$

où m_0 est la masse de l'électron dans le vide, m^* sa masse effective, ε son énergie et α le coefficient de non parabolicité de la vallée où il se trouve. Cette relation n'est pas exactement celle appliquée dans le cas du modèle complet ; mais elle est suffisante pour décrire le comportement électrique du composé.

Nous voulons déterminer la probabilité pour qu'un porteur effectue un vol libre de durée quelconque Δt , sachant qu'il est soumis à un champ électrique \vec{E} et à N processus de collisions de types quelconques. La relation entre le champ et le vecteur d'onde, est donnée par le principe de la dynamique :

$$\frac{\partial \vec{k}}{\partial t} = \frac{q \vec{E}}{\hbar}$$

$\Gamma(\vec{K})$ est la probabilité par unité de temps, pour que le porteur ayant le vecteur d'onde \vec{K} , subisse une collision de type quelconque l'amenant à un autre état \vec{K}' . Cette probabilité est donnée par la relation :

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

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

La probabilité $P(t)$ pour que le porteur effectue un vol libre de durée supérieure à t , est le produit de deux probabilités statistiquement indépendantes.

L'une est la probabilité pour que le porteur effectue un vol libre de durée supérieure à $t - dt$ et t .

$$1 - \Gamma(\bar{k}(t - dt)) dt$$

ainsi :

$$p(t) = p(t - dt) [1 - \Gamma(\bar{k}(t - dt)) dt]$$

En faisant tendre dt vers 0 :

$$\frac{dp}{dt} = -\Gamma[\bar{k}(t)] p(t)$$

Après intégration, on obtient :

$$p_n(t) = \exp \left\{ - \int_0^t \Gamma(\bar{k}(t')) dt' \right\}$$

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

$$p(t) dt = \Gamma(k(t)) \exp \left\{ - \int_0^t \Gamma(k(t')) dt' \right\} dt$$

La résolution de cette équation afin de générer la distribution du temps libre pour ces particules pour une simulation Monte Carlo standard, nous ramène à utiliser la technique de self Scattering.

2. Les différents éléments de la simulation

2.1. Fonction de distribution

Parmi les quantités fondamentales qui conditionnent l'évolution des porteurs, figure la fonction de distribution du moment $f(\vec{k})$ et la densité d'énergie $n(\epsilon)$ donnant le nombre de porteurs dont l'énergie vaut ϵ à $d\epsilon$ près. En effet ces fonctions qui peuvent dépendre aussi de l'espace et du temps permettent de calculer toutes les quantités moyennes qui caractérisent, le régime que l'on étudie. Il faut cependant mentionner que tout en étant capable de déterminer ces distributions, les méthodes de MC permettent le calcul direct des valeurs moyennes sans avoir à calculer au

préalable ces distributions. Néanmoins, il peut être utile de les connaître ne serait-ce que pour éclaircir l'interprétation de certains résultats.

Si l'on considère un matériau à bande de conduction multiple, les distributions peuvent être différentes pour chaque vallée. Ceci résulte du fait que les porteurs ne subissent pas les mêmes interactions selon la vallée où ils se trouvent et aussi du fait qu'ils ressentent le champ électrique différemment à cause des masses effectives qui diffèrent d'une bande à l'autre. On doit dans ce cas considérer des histogrammes particuliers à chaque type de vallée. Ayant divisé l'espace réciproque en cellules élémentaires de volumes égaux $\Delta k_x, \Delta k_y, \Delta k_z$ chacune centrée sur un point $\{k_x, k_y, k_z\}$, la valeur de la fonction de distribution $f(k_x, k_y, k_z)$ sera proportionnelle au temps total que le porteur aura séjourné dans le volume élémentaire autour du point considéré. Cette distribution est normée automatiquement quand on la divise par la durée totale de simulation. D'autre part, la population moyenne d'une vallée particulière sera définie comme proportionnelle au temps total passé par le porteur dans la vallée considérée.

On peut de la même façon définir soit globalement soit dans chaque vallée la densité d'énergie $n(\epsilon)$ en discrétisant l'échelle des énergies avec un pas $\Delta\epsilon$ et en comptant le temps de séjour de l'énergie du porteur autour de ϵ à $\Delta\epsilon$ près.

Ces définitions ne sont toutefois valables que si le système observé est stationnaire. Quand le système est non-stationnaire, c'est-à-dire quand les distributions dépendent explicitement du temps, les définitions précédentes doivent s'appliquer non plus à un seul, mais à toute une population de porteurs équivalents que l'on observe simultanément et les distributions seront dans ce cas proportionnelles au nombre de porteurs présent à un instant donné t , dans le volume $\Delta^3 k$ centré sur \vec{k} , dans l'intervalle $\Delta\epsilon$ centré sur ϵ , dans la vallée considérée. La normalisation se fait alors par rapport au nombre total de porteurs. L'extension de ces définitions à des distributions qui dépendraient aussi de la position dans l'espace réel est immédiate.

2.2. Trajectoire de l'électron

Le comportement au cours du temps des électrons de la bande de conduction résulte à la fois de l'action du champ électrique appliqué et de l'effet des interactions relatives à la présence du réseau cristallin.

Dans cette simulation l'échelle des temps est discrétisée en pas réguliers où la durée Δt est faible devant le temps moyen qui sépare deux collisions consécutives. La simulation du comportement de chaque électron au cours du temps consiste alors en une succession de traitements élémentaires à chaque pas. Le traitement de chaque pas Δt commence par une phase dite de vol libre où l'électron n'est soumis qu'à l'action du champ pendant la durée Δt . Au bout de ce temps Δt , la probabilité pour qu'il subisse une interaction est déterminée. Une procédure permet alors de décider si elle a eu lieu effectivement ou non. Après avoir subi éventuellement les effets d'une interaction, l'électron est à nouveau entraîné dans une phase de vol libre pendant une durée Δt pour un nouveau cycle d'évolution.

On décrit l'électron à chaque instant par son vecteur d'onde et par son énergie. Dans l'espace réciproque, la bande de conduction présente des minima d'énergie appelés vallées au voisinage desquelles l'énergie est simplement reliée au module du vecteur d'onde. L'ensemble de ces relations permet de définir la structure de bande relative aux différentes vallées considérées dans le semi-conducteur.

L'action du champ et l'effet des interactions peuvent se traduire par une variation du vecteur d'onde $\Delta \vec{k}$; sous l'action accélératrice du champ entre des instants t et $t + \Delta t$, le vecteur d'onde devient :

$$\vec{k}(t + \Delta t) = \vec{k} + \frac{q \vec{E} \Delta t}{\hbar} \quad (2)$$

Au cours d'une interaction supposée instantanée, l'électron change d'état et son vecteur d'onde devient :

$$\vec{k}_{\text{final}}(t) = \vec{k}_{\text{initial}}(t) + \Delta \vec{k}_{\text{interaction}} \quad (3)$$

Durant son vol libre, l'électron se déplace dans l'espace réel et l'espace des vecteurs d'onde, sous l'action d'un champ électrique constant E (figures 5.2 et 5.3). L'évolution de son vecteur d'onde, suivant l'axe des x , est donnée par l'équation fondamentale de la dynamique :

$$k(t) = k(0) - \frac{eE}{\hbar} t$$

En notant m^* sa masse effective, et α le coefficient de non parabolicité de la vallée dans laquelle il se trouve ; l'énergie de l'électron est liée à son vecteur d'onde par la relation :

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

d'où l'on tire son énergie :

$$\varepsilon(t) = \frac{1}{2\alpha} \left[\sqrt{1 + \frac{2\alpha \hbar^2 k^2(t)}{m^*}} - 1 \right]$$

La vitesse de l'électron est donc donnée par l'expression :

$$v(t) = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\partial \varepsilon(t)}{\partial k} = \frac{\hbar k(t)}{m^* (1 + 2\alpha \varepsilon(t))}$$

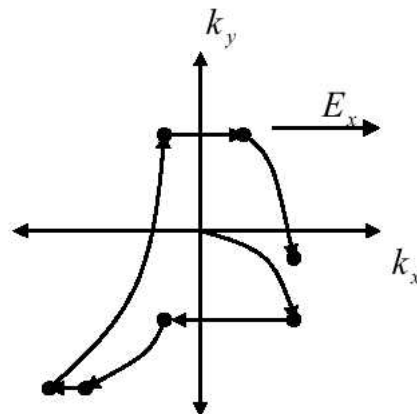


Figure. 2 : Mouvement d'un électron dans l'espace des vecteurs d'onde [19].

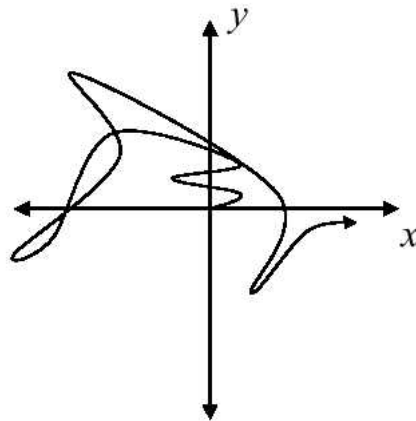


Figure. 3 : Mouvement d'un électron dans l'espace réel [19].

2.3. Temps de vol libre

Le mouvement des particules est décrit comme étant une succession de vols libres (sous l'action du seul champ électrique), entrecoupée d'interactions instantanées [17].

$\lambda(k(t))\partial t$ représente la probabilité pour qu'un électron ait une interaction entre t et $t + \partial t$ la probabilité $P_f(t)$ pour que l'interaction ne se produise pas au temps t , est donnée par [18] :

$$p_f(t) = \prod_i (1 - \lambda(k(t))\partial t)$$

en prenant

$$t = \sum_i \partial t$$

on a alors :

$$p_f(t) = \exp\left(-\sum_i \lambda(k(t))\partial t_i\right)$$

ou bien

$$p_f(t) = \exp\left(-\int_0^t \lambda(k(t'))\partial t'\right)$$

on déduit alors la probabilité pour que l'électron ait un vol libre pendant Δt :

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

$$p(\Delta t) = 1 - \exp\left[-\int_0^{\Delta t} \lambda(k(t)) dt\right]$$

La relation précédente nous donne les durées de vol libre qui seront effectivement suivies d'un choc.

La procédure adoptée initialement par Kurosawa pour déterminer les temps de libre parcours est de tirer des nombres r à distribution uniforme entre 0 et 1 et de résoudre l'équation intégrale suivante :

$$\int_0^{\Delta t} \lambda(k(t)) dt = -Lnr$$

Cette équation n'est pas intégrable analytiquement. Pour simplifier, Rees a suggéré d'ajouter à l'ensemble des mécanismes de collisions réelles, le processus du Self Scattering [2].

2.4. Choix de l'interaction

Quand le réseau agit sur le parcours de l'électron ses possibilités d'interaction sont multiples. La densité de probabilité par unité de temps $s(\vec{k}, \vec{k}')$ pour qu'une interaction donnée j fasse passer l'électron d'un état \vec{k} à un état \vec{k}' est supposée connue [1]. L'intégration sur tous les états finals \vec{k}' fournit la probabilité $\lambda_{j,\vec{k}}$ par unité de temps pour qu'un électron dans l'état \vec{k} subisse l'interaction j , $\lambda_{j,\vec{k}} \cdot \Delta t$ est alors la probabilité P_j pour que l'interaction ait lieu au bout du temps Δt . Si N est le nombre d'interactions possibles, la probabilité totale d'interaction est :

$$P = \sum_{j=1}^N P_j \quad (9)$$

C'est un nombre qui croit linéairement avec la durée du pas Δt . Ce pas est choisi au préalable suffisamment petit pour qu'à chaque instant, P soit inférieure à 1.

$1 - P$ représente alors, la probabilité pour que l'électron poursuive son parcours sans perturbation provenant du réseau. Un nombre réel est tiré au hasard entre 0 et 1 suivant une distribution uniforme. Et selon la valeur du nombre r , on définit la nature de l'interaction qui aura lieu ou éventuellement l'absence de l'interaction.

Une fois l'interaction choisie, elle est supposée instantanée, son effet provoque une discontinuité dans l'évolution de l'état de l'électron. Ceci se traduit par un éventuel échange d'énergie et par un brusque changement d'orientation de la vitesse de l'électron. Dans l'espace des moments ceci signifie une variation instantanée du vecteur d'onde en module et en direction.

C'est un changement d'orientation du vecteur d'onde qui décrit la déviation subie par l'électron. Le vecteur d'onde final \vec{k}' est repéré par rapport au vecteur d'onde initial par un angle de déviation β . La densité de probabilité $s(\vec{k}, \vec{k}')$ relative au passage d'un état \vec{k} à un état \vec{k}' ne dépend généralement que des modules de \vec{k} et \vec{k}' , c'est-à-dire des énergies avant et après interaction ϵ et ϵ' et de l'angle β entre \vec{k} et \vec{k}' (schéma 2). Les valeurs de β et du module de \vec{k}' étant définies, il existe encore une infinité d'états possibles et équivalents \vec{k}' décrivant uniformément un cône d'axe \vec{k} et d'angle β .

L'expression de la probabilité d'interaction peut se mettre sous la forme :

$$p(\epsilon) = C_\epsilon \int_0^\pi f_\epsilon(\beta) d\beta \quad (10)$$

La fonction normalisée :

$$g_\epsilon(\beta) = \frac{f_\epsilon(\beta)}{\int_0^\pi f_\epsilon(\beta') d\beta'} \quad (11)$$

définit donc la fonction suivant laquelle l'angle β est distribué. Si $F(\beta)$ est la fonction de répartition de β par définition $dF = g_\epsilon(\beta) d\beta = dr$ où r est un réel

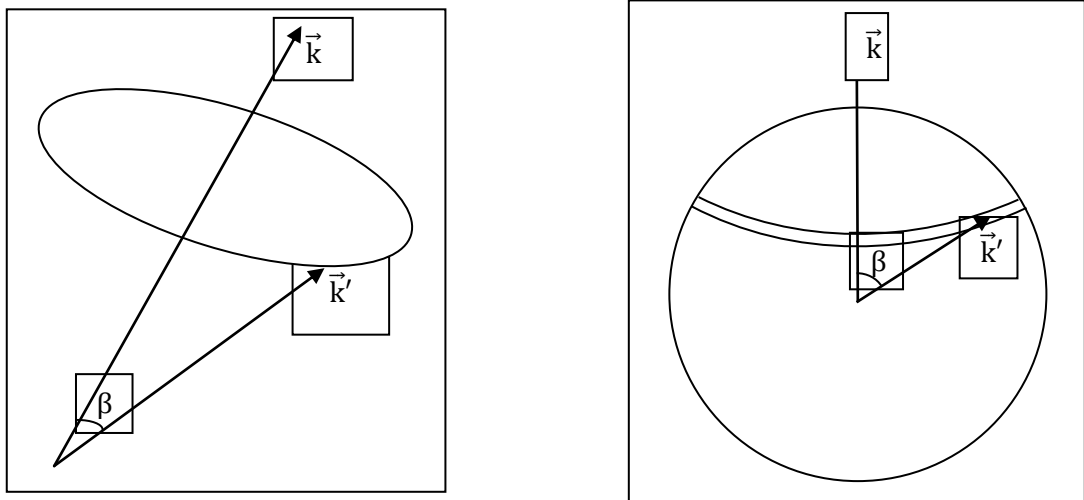
uniformément distribué entre 0 et 1. Donc à tout réel r tiré au hasard uniformément entre 0 et 1 est associé suivant la relation :

$$r = \int_0^\beta g_\epsilon(\beta') d\beta' \quad (12)$$

un angle β dont la fonction de distribution est $g_\epsilon(\beta)$. C'est par cette procédure que sera déterminé l'angle β entre \vec{k} et \vec{k}' après interaction. En particulier, dans le cas où $s(\vec{k}, \vec{k}')$ ne dépend que de l'énergie finale ϵ' et tous les états finals sont équiprobables sur une sphère de rayon k' dans l'espace des moments (schéma 3) et à tout réel r compris entre 0 et 1 correspond un angle β tel que :

$$r = \frac{1}{2} \int_0^\beta \sin(\beta') d\beta' = \frac{1}{2} (1 - \cos\beta) \quad (13)$$

Il arrive, pour certaines interactions, que la détermination de l'angle β en fonction du réel r , ne soit pas immédiate. Les méthodes utilisées alors font appel à des techniques d'analyse numérique.



Le traitement élémentaire par Monte Carlo qui vient d'être présenté a lieu pour chaque électron à chaque pas Δt (voir organigramme). A l'instant $t = 0$, l'état initial $\vec{k}(0)$ de chaque électron correspond à une énergie tirée au hasard suivant la distribution de Maxwell-Boltzmann. Dans la simulation, le traitement élémentaire

peut aussi bien servir à un ensemble de n électrons en tenant compte d'éventuelles variations du champ électrique au cours du temps. Cette simulation est donc facilement adaptable à une très grande variété de conditions d'étude.

2.4.1. Procédure du choix d'interaction

Cette méthode a été utilisée en champ statique et variable, en particulier pour tenir compte de la nouvelle énergie entre deux collisions successives. A chaque instant $t_n = n \delta t$, la probabilité $p[\vec{k}(t_n)]$ pour que le porteur subisse une collision, sera connue et pourra être utilisée pour déterminer par tirage au sort, si une collision a effectivement eu lieu ou non à la fin du δt considéré. Dans ce but ; nous comparons la quantité $p[\vec{k}(t_n)]$ à un nombre r tiré au hasard, dans une distribution uniforme entre 0 et 1. Ce nombre r sert aussi au choix de l'interaction qui aura effectivement lieu dans le cas où le test est positif (figure.6).

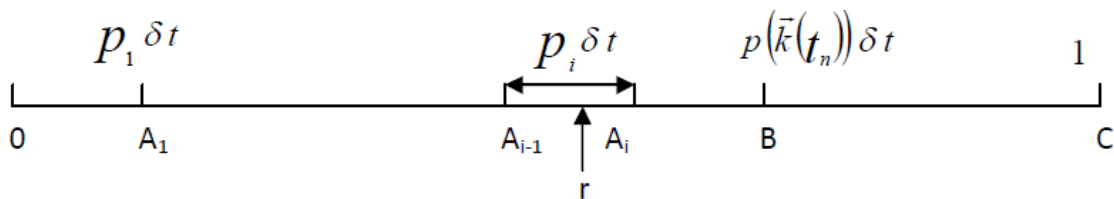


Figure.6 : Le schéma indique la procédure de choix de l'interaction.

Quand r se situe entre les points A_{i-1} et A_i , le i ème type d'interaction a lieu. Le segment BC représente la probabilité qu'il ne se passe rien après le pas δt .

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

La première constatation est que les libres parcours vécus par le porteur sont nécessairement constitués d'un nombre aléatoire de pas δt . Plus δt est petit, meilleure est la valeur approchée de la durée de parcours. Il en résulte que δt doit être beaucoup plus petit que le plus court des libres parcours. Cette condition garantit également que la quantité p ne peut jamais être plus grande que 1.

De plus, le tirage de r se fait selon une distribution uniforme ; le fait de tirer l'interaction de rang i ne dépend pas de l'ordre dans lequel ces interactions sont effectuées, le résultat de test ne dépend que de la largeur p du segment correspondant, soit en pratique de l'énergie du porteur au moment considéré.

2.4.2. Génération des nombres aléatoires

La méthode de Monte Carlo est basée sur la génération de nombres aléatoires qui suivent une loi uniforme dans l'intervalle $[0,1]$ où p et q sont des constantes appropriés :

$$r_i = pr_{i-1} \pmod{q}$$

Le premier élément de cette suite est choisi par l'utilisateur, et les autres nombres sont donnés par un algorithme mathématique.

Les nombres aléatoires x suivant une loi de probabilité $f(x)$ dans l'intervalle $[a,b]$, peuvent être obtenus à partir des nombres aléatoires r distribués dans l'intervalle $[0,1]$, par plusieurs méthodes [20].

2.4.2.1 Méthode directe [19].

Si $f(x)$ est normalisée pour $x \in [a, b]$:

$$r = F(x_r) = \int_a^{x_r} f(x) dx$$

Si $f(x)$ n'est pas normalisée, alors :

$$r = \frac{\int_a^{x_r} f(x) dx}{\int_a^b f(x) dx}$$

Cette méthode permet d'avoir un nombre aléatoire x_r tel que $a < x_r < b$, et qui est donné par :

$$x_r = a + (b-a)r$$

Parfois on ne peut pas utiliser cette méthode, car les intégrales précédentes sont difficiles à calculer par la méthode analytique.

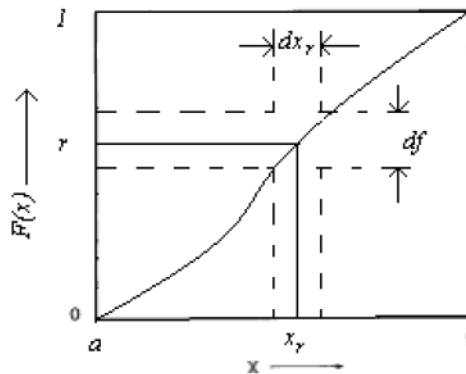


Figure 7 : Technique directe : génération de la variable aléatoire x_r avec une fonction de probabilité $f(x)=dF(x)/dx$ [20].

2.4.2.2 Méthode du rejet [19].

Soient C un nombre positif tel que $C \geq f(x)$ pour $x \in [a, b]$, r_1' deux nombres aléatoires suivant une loi uniforme sur $[0,1]$; on a alors :

$$x_1 = a + (b-a)r_1 \text{ et } f_1 = r_1' C$$

Où x_1 et f_1 sont des nombres aléatoires suivant respectivement une loi uniforme sur $[a, b]$ et $[0, C]$.

Si

$$f_1 \leq f(x_1), \text{ alors } x = x_1$$

Dans le cas contraire, on prend une nouvelle paire r_2 et r_2' ; et les itérations sont poursuivies jusqu'à avoir l'équation :

$$f_i \leq f(x_i)$$

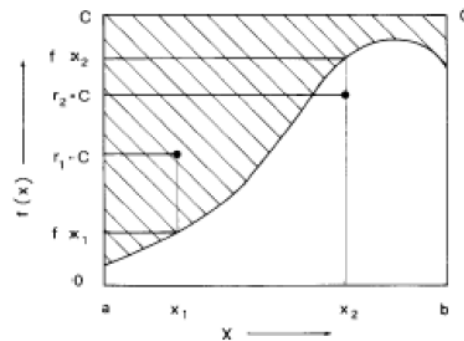


Figure 8 : Technique de rejet, génération de la variable aléatoire xr , avec une fonction de probabilité $f(x)$ [20].

2.5. Choix des angles de déviation

Quand une interaction est choisie, elle est supposée instantanée ; et son effet provoque une discontinuité dans l'évolution de l'état de l'électron. Cet effet se manifeste à la fois par un éventuel échange d'énergie, et par un brusque changement d'orientation de la vitesse de l'électron. Il se traduit dans l'espace des moments, par une variation instantanée du vecteur d'onde, en module et en direction.

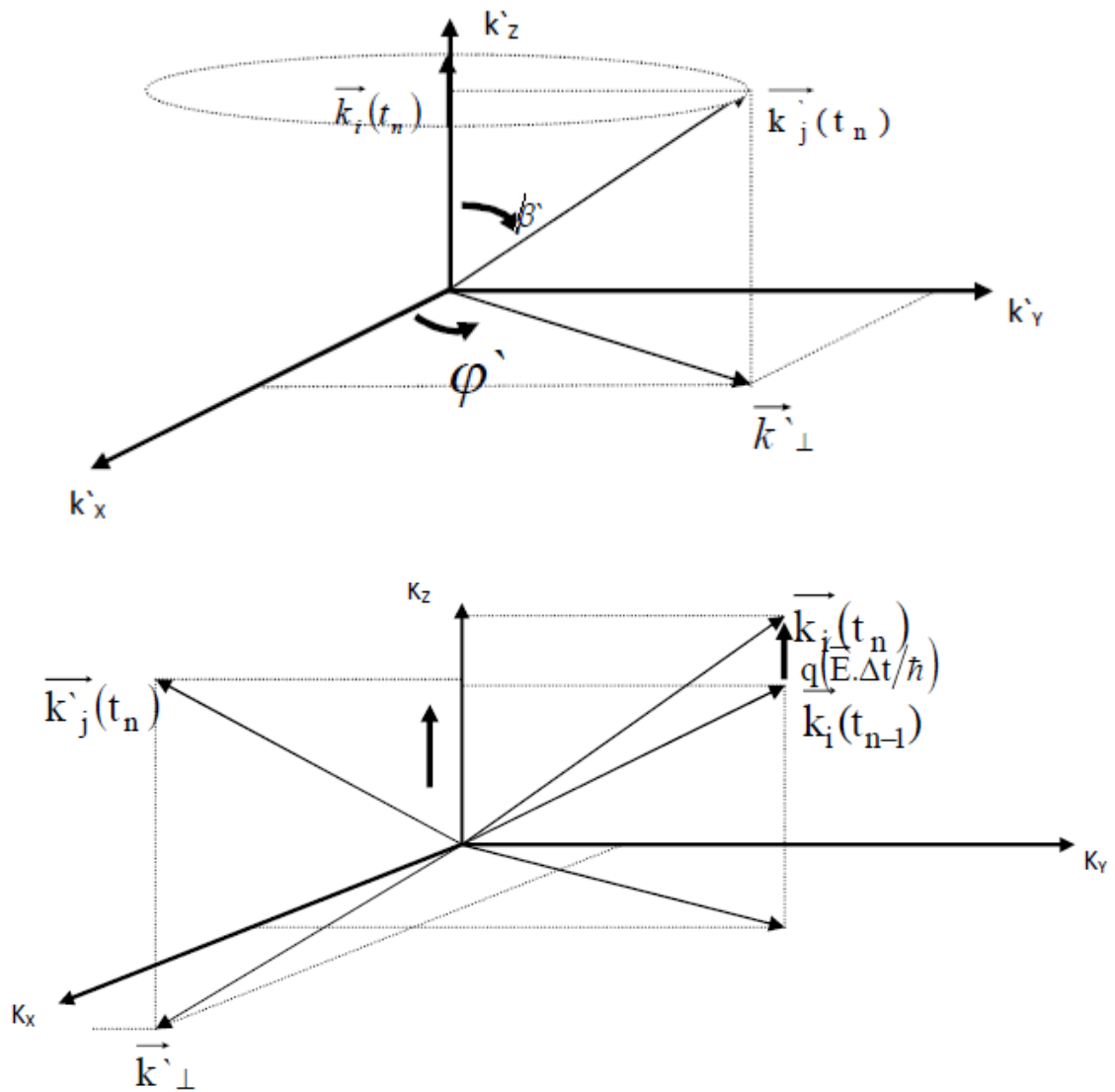
Tout échange éventuel d'énergie au cours de l'interaction, se traduit donc au niveau du vecteur d'onde par une variation brutale de son module qui ne dépend que des énergies initiale ε et finale ε' .

C'est un changement d'orientation du vecteur d'onde (figure 4) qui décrit la déviation subie par l'électron. Le vecteur d'onde k' est repéré par rapport au vecteur d'onde initial k , par un angle de déviation θ .

L'angle de déviation du vecteur d'onde est déterminé par tirage au sort, suivant une loi de probabilité caractéristique de l'interaction [19]. Pour cela, on tire deux nombres aléatoires $r1$ et $r2$ suivant des distributions dépendant du type de l'interaction qui vient d'être choisie, en se plaçant dans un repère lié au vecteur d'onde k , avant la collision (figure 5). Ces deux nombres sont tels que :

$$\begin{cases} \varphi = 2\pi.r_1 \\ \cos\beta = 1 - 2r_2 \end{cases}$$

Il arrive pour certaines interactions, que la détermination de l'angle β en fonction du réel r , ne soit pas immédiate.



2.6. Méthode de self scattering

Cette méthode consiste à introduire une interaction fictive supplémentaire dite «Self Scattering λ_{sc} » qui est sans effet sur le mouvement de l'électron. La probabilité λ_{sc} est choisie de manière à ce que la probabilité totale d'interaction $\Gamma = \lambda_{sc} + \sum_i \lambda_i$ soit une constante (Figure 1).

La succession des opérations est alors sans changement, mais le Self-Scattering doit maintenant figurer parmi les interactions susceptibles de se produire à la fin du vol libre.

Il faut cependant que Γ soit au moins égale aux plus grandes sommes $\sum_i \lambda_i$ susceptibles d'être atteintes, de telle manière à éviter des valeurs négatives de λ_{sc} .

Il est nécessaire de se fixer à l'avance la valeur de Γ ; pour cela il faut connaître à priori la valeur maximum que prendra la quantité $\sum_i \lambda_i$ dans la simulation envisagée. Une fois la durée de vol libre Δt déterminée, on calcule l'ensemble des probabilités des interactions susceptibles de se produire à l'instant considéré. Comme on a nécessairement par définition :

$$\sum_{i=0}^N \lambda_i(\vec{k}) = \lambda$$

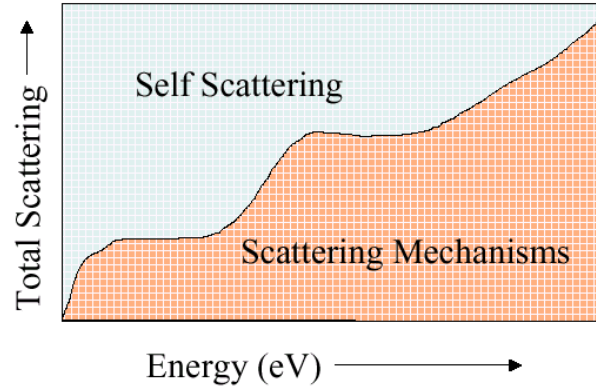
Le tirage d'un nouveau nombre aléatoire r à distribution uniforme entre 0 et 1 permet d'écrire, par le test de l'inégalité :

$$r < \sum_{i=0}^m \lambda_i(\vec{k}) = \lambda_{sc} + \sum_{i=1}^m \lambda_i(\vec{k})$$

Pour toute valeur m , il y a un processus d'interaction choisi qui interviendra. Il apparaît dans ce test que la collision choisie peut être une collision fictive dont la probabilité est λ_{sc} .

Si c'est le cas, elle laissera le vecteur d'onde inchangé et le mouvement se poursuivra directement pour le Δt suivant. Dans le cas contraire ; de nouveaux nombres aléatoires permettent de définir la position du vecteur d'onde, après le choc. L'avantage de cette procédure est le choix de la valeur de Γ de manière à

minimiser le nombre de collisions fictives, puisque ces collisions ne jouent aucun rôle sur la trajectoire de l'électron. Il faut signaler que cette première méthode a été utilisée par de nombreux auteurs, pour étudier un grand nombre de matériaux [2].



2.6.1. La procédure du Self-Scattering

Rappelons que nous avons défini par $S_q(\vec{k}, \vec{k}')$ la densité de probabilité par unité de temps qu'un porteur de vecteur d'onde \vec{k} passe de façon instantané dans un autre état \vec{k}' par l'intermédiaire d'une collision de type q . S'il existe N processus différents de collision, q sera compris entre 1 et N . L'expression exacte de ces différentes probabilités est donnée par la physique du solide.

Pour l'instant, nous voulons déterminer la probabilité qu'un porteur effectue un vol libre de durée quelconque Δt sachant qu'il est soumis à un champ électrique \vec{E} et à N processus de collision de types quelconques. La relation entre champ et vecteur d'onde est donnée par le principe de la dynamique (relation (1)) et nous notons par $\lambda(\vec{k})$ la probabilité par unité de temps que le porteur ayant le vecteur d'onde \vec{k} subisse une collision de type quelconque, l'amenant dans un autre état \vec{k}' différent de \vec{k} . On a évidemment par définition :

$$\lambda(\vec{k}) = \int d^3k' \sum_{q=1..N} S_q(\vec{k}, \vec{k}') \quad (4)$$

Supposons qu'à l'instant $t = 0$, le porteur est dans l'état décrit par \vec{k} . La probabilité $P(t)$ que le porteur effectue un vol libre de durée supérieure à t est le produit de deux probabilités statistiquement indépendantes. L'une est la probabilité que le porteur effectue un vol libre de durée supérieure à $t - dt$, l'autre qu'il ne subisse pas de collision entre $t - dt$ et t . Cette dernière vaut :

$$1 - \lambda(k(t - dt))dt \quad (5)$$

On a donc :

$$P(t) = P(t - dt)[1 - \lambda[\vec{k}(t - dt)]dt] \quad (6)$$

Déterminer la durée des libres parcours effectués par le porteur n'est pas tout ; encore faut-il spécifier ce qu'il devient après le choc. La quantité $S_q(\vec{k}, \vec{k}')$ nous renseigne sur cela. Elle contient l'information sur les positions du vecteur d'onde avant et après le choc, celui-ci s'effectuant de telle sorte qu'il vérifie les principes de conservation de l'énergie et du vecteur d'onde (ou moment) :

$$\epsilon(\vec{k}') = \epsilon(\vec{k}) \pm \hbar \omega_q \quad (7)$$

$$\vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q} \quad (8)$$

où $\hbar \omega_q$ et \vec{q} sont l'énergie et le vecteur d'onde du phonon impliqué dans la collision, le signe + indiquant qu'il y a eu absorption du phonon, le signe - qu'il y a eu émission. On repère généralement la position du nouveau vecteur \vec{k}' par rapport à celle de \vec{k} par l'angle β dont tourne la direction du vecteur d'onde durant la collision. $S_q(\vec{k}, \vec{k}')$ donne alors la densité de probabilité de cet angle β ($0 < \beta < \pi$) qui peut être aussi une fonction de l'énergie.

Dans la procédure de self-scattering, les durées de vol libre sont distribuées suivant une loi dont l'expression est simplifiée par l'introduction d'une interaction fictive aux effets nuls dite "self-scattering". L'état de l'électron est alors connu à des instants répartis de façon irrégulière. La procédure de discrétisation du temps en pas

réguliers, permet de s'affranchir de cette procédure statistique de choix des durées de vol libre. Elle offre en particulier l'avantage de réaliser facilement des moyennes instantanées tous les Δt sur un ensemble d'électrons, au cours des études en régime non stationnaire.

Le choix du pas Δt doit satisfaire un compromis ; si le pas Δt est choisi trop grand, la somme des probabilités d'interactions au bout du temps Δt peut dépasser 1, ce qui signifie qu'il n'a pas été tenu compte d'au moins une interaction qui aurait dû avoir lieu au bout d'une durée inférieure à Δt . Par contre, si la durée Δt de vol libre est trop courte, la probabilité pour que l'électron poursuive son trajet sans avoir subi d'interaction au bout du temps Δt est importante et l'observation de l'électron pendant un temps donné nécessitera de considérer un grand nombre de pas dont la plus grande partie ne donnera lieu à aucune interaction. Néanmoins, il est nécessaire que le pas Δt soit suffisamment petit pour que la distribution des intervalles de temps entre interactions puisse être reproduite de façon suffisamment fidèle.

2.6.2. Utilisation des collisions fictives

Considérons un porteur qui à l'instant t vient de subir une collision l'ayant amené dans l'état $\vec{k}(t)$. Nous savons que la probabilité que ce porteur effectue un vol libre de durée Δt puis subisse un choc durant un temps dt vaut :

$$P(\Delta t)dt = \lambda[\vec{k}(t + \Delta t)] \exp\left\{-\int_0^{\Delta t} \lambda[\vec{k}(t + u)]du\right\} dt \quad (14)$$

En effet les événements de vol libre et de collision sont supposés être statistiquement indépendants. C'est la probabilité (14) qui donnera les durées de vol libre qui seront effectivement suivies d'une collision. La procédure adoptée initialement par Kurosawa [1] pour déterminer les temps de libre parcours étant de tirer des nombres r à distribution uniforme entre 0 et 1 et de résoudre l'équation intégrale suivante

$$r = \int_0^{\Delta t} P(\Delta t) d\Delta t \quad (15)$$

Malheureusement dans le cas général l'expression de (14) est assez complexe et l'équation (15) n'est pas intégrable analytiquement. Pour simplifier l'expression de (14), Rees [2] a suggéré d'ajouter à l'ensemble des mécanismes de collisions entrant en jeu un processus d'interaction qui ne modifie pas l'état du système lorsqu'on le fait intervenir : c'est ce qu'on appelle le processus de collision fictive dont la probabilité par unité de temps vaut :

$$d^3k'S_0(\vec{k}, \vec{k}') = \lambda_0(\vec{k})\delta(\vec{k} - \vec{k}')d^3k' \quad (16)$$

Cette probabilité est non nulle seulement si $\vec{k} = \vec{k}'$. On voit donc que si l'on ajoute cette probabilité aux autres $S_q(\vec{k}, \vec{k}')$ elle ne modifiera en rien la trajectoire de l'électron. En conséquence, la fonction $\lambda_0(\vec{k})$ peut être choisie de façon tout à fait arbitraire. Dans la méthode de MC habituelle on choisit la fonction $\lambda_0(\vec{k})$ de sorte que

$$\lambda_0(\vec{k}) + \lambda(\vec{k}) = \Gamma = \text{constante indépendante de } \vec{k}$$

Si r est un nombre aléatoire à distribution uniforme entre 0 et 1 on aura d'après (15)

$$\Delta t = -\frac{1}{\Gamma} \ln r \quad (17)$$

Une fois la durée de vol libre Δt déterminée, on calcule l'ensemble des probabilités des interactions susceptibles de se produire à l'instant considéré. Le tirage d'un nouveau nombre aléatoire s à distribution uniforme entre 0 et 1 permet, par le test de l'inégalité

$$s < \sum_{q=0}^m \lambda_q(\vec{k}) = \lambda_0(\vec{k}) + \sum_{q=1}^m \lambda_q(\vec{k}) \quad (18)$$

pour tout m , de choisir le processus d'interaction qui interviendra effectivement. Il apparaît dans ce test que la collision choisie peut être une collision fictive dont la probabilité est λ_0 . Si c'est le cas, elle laissera le vecteur l'onde inchangé et le mouvement se poursuivra directement pour le Δt suivant. Dans le cas contraire, de nouveaux nombres aléatoires permettent de définir la position du vecteur d'onde

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

La suite des valeurs instantanées enregistrée durant la simulation par cette méthode constitue une trajectoire irrégulièrement échantillonnée dans le temps. De celle-ci il est toujours possible de tirer un échantillonnage régulier lorsque le champ de force appliqué est indépendant du temps.

A chaque instant $t_n = n \delta t$, la probabilité $\lambda[\vec{k}(t_n)]$ que le porteur subisse une collision sera connue et pourra être utilisée pour déterminer par tirage au sort si une collision a effectivement eu lieu ou non à la fin du δt considéré. Pour cela, on comparera la quantité $\lambda[\vec{k}(t_n)]\delta t$ à un nombre r tiré au hasard dans une distribution uniforme entre 0 et 1. Ce nombre r sert aussi au choix de l'interaction qui aura effectivement lieu dans le cas où le test est positif.

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

Une constatation est que les libres parcours vécus par le porteur sont constitués d'un nombre entier de pas δt . Plus δt est petit, plus la valeur approchée de la durée de libre parcours sera bonne. Il en résulte que δt doit être beaucoup plus petit que le plus court des libres parcours.

3. Conditions de transport dans les semiconducteurs

La simulation qui vient d'être décrite nécessite une bonne connaissance des caractéristiques du matériau étudié, en l'occurrence le ZnSe, ZnTe et ZnSe. En particulier, les caractéristiques de la bande de conduction jouent un rôle prépondérant dans l'étude des phénomènes de transport. Les niveaux des minima de vallées indiquent l'énergie à partir de laquelle un électron peut transférer, modifiant ainsi éventuellement ses conditions de transport. De plus, dans une vallée donnée, l'évolution de l'énergie en fonction de son vecteur d'onde \vec{k} détermine la masse effective de l'électron qui suivant qu'il est "lourd" ou "léger" pourra se déplacer plus ou moins rapidement dans le champ électrique. Plusieurs modèles de structure de bande ont été proposés dans la littérature notamment à 2 et 3 vallées [6,7].

Cette étude des phénomènes de transport est menée avec un modèle de structure de bande de conduction à 3 vallées. Ce modèle présente une vallée centrale Γ_c en point (0,0,0) au minimum absolu de la bande de conduction, des vallées latérales à symétrie X correspondant à des minima relatifs dans les directions [100], et des vallées à symétrie L présentant des minima relatifs inférieurs à ceux des vallées X dans les directions [111].

4. Avantages et inconvénients

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

Un autre avantage des méthodes de MC est leur souplesse d'utilisation. Une fois le processus élémentaire de simulation mis au point, les conditions d'utilisation de celle-ci peuvent être pratiquement variées à l'infini. L'application la plus simple que

L'on puisse imaginer est l'étude de la dynamique électronique dans un matériau supposé infini et homogène soumis à des conditions stationnaires en fonction du temps. La mise en œuvre de la méthode ne peut guère être limitée que par l'incertitude des caractéristiques du matériau étudié, mais ceci est commun à tout mode d'étude, MC ou autre. La situation peut se compliquer quand le matériau étudié est inhomogène ou lorsque le champ appliqué n'est plus constant dans le temps ni uniforme dans l'espace. Dans le cas où les concepts habituels de bande d'énergie, de collisions instantanées restent valides, la méthode de MC montre sa supériorité lorsque les phénomènes se compliquent quelque peu, parce qu'elle permet de tenir compte facilement des effets non-stationnaires spatiaux ou temporels que l'on veut étudier. Nous pensons que l'on peut insister sur le fait que cette méthode est la seule susceptible d'étudier les manifestations des porteurs chauds quelque soient les régimes de champ appliqué en effet de volume ou dans des composants. Elle tient compte de façon complète des formes de bandes d'énergie même complexes (cas des alliages ternaires et quaternaires) et de tous les détails de la dynamique microscopique avec des hypothèses simplificatrices réduites au minimum.

Dans de nombreuses méthodes de résolution des phénomènes de transport de porteurs chauds, nous savons que la force externe (champ électrique) est traitée comme une perturbation et que les résultats obtenus sont parfois plus dignes de confiance en champ faible qu'en champ fort. Un des intérêts de la méthode de Monte Carlo est que la force n'est jamais traitée comme une perturbation, levant ainsi une hypothèse restrictive.

En contre partie, la méthode de Monte Carlo est entachée d'erreur statistique. Comme pour tout phénomène statistique, il est possible d'améliorer la précision en augmentant la durée d'observation t . Malheureusement, l'amélioration de l'erreur n'évolue qu'en $1/\sqrt{t}$; et ceci peut être un gêne important quand on étudie des comportements fins : estimation d'une mobilité différentielle négative ou vitesse de pic en fonction de certains paramètres (température ou dopage du matériau, par

exemple). Ce problème nécessite un soin particulier en absence d'une relation analytique. Il découle que cette méthode nécessite parfois des moyens de calcul importants.

Une autre propriété caractéristique jouant en défaveur de la méthode de Monte Carlo est que celle-ci fonctionne moins bien en champ faible qu'en champ fort, au moins quand on s'intéresse à la vitesse de dérive. Une bonne estimation de la moyenne exigera une longue intégration, et par conséquent un allongement du temps de calcul.

5. Organigramme [16]

Pour permettre une meilleure compréhension de la méthode de Monte Carlo utilisée, nous présentons son organigramme sur la figure 6.

Le traitement du problème comporte deux étapes, pour chaque porteur :

1. Une étape de vol libre entre l'instant t et $t+\Delta t$, pendant laquelle l'état du porteur est donné par les lois de la dynamique, compte tenu de son état à l'instant t . Pour le porteur p , on connaît donc la position du vecteur d'onde $k_p(t)$, sa position r_p à l'instant t et son énergie ε qui est fonction de la position du vecteur d'onde [20] :

$$\varepsilon_p(t) = \varepsilon(\vec{k}_p(t))$$

On effectue un vol libre de durée Δt , et l'on a :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{k}_p(t + \Delta t) = \vec{k}_p(t) + \frac{e\vec{E}}{\hbar} \Delta t \\ \vec{r}_p(t + \Delta t) = \vec{r}_p(t) + \int_t^{t+\Delta t} \vec{v}_p(t') \partial t \\ \varepsilon_p(t + \Delta t) = \varepsilon(\vec{k}_p(t + \Delta t)) \end{array} \right.$$

2. La deuxième étape de calcul consiste à rechercher si le porteur a subi ou non une collision : S'il y a eu collision (recherche de l'interaction pendant l'intervalle de temps Δt par tirage au sort d'un nombre aléatoire), nous calculons son nouvel état.

S'il n'y a pas eu d'interaction, l'état du porteur n'est pas modifié.

S'il y a eu interaction, on place l'interaction précisément à l'instant $t+\Delta t$ et on cherche le nouveau vecteur d'onde k_p après le choc, par tirage au sort. Son état est maintenant défini par :

$$\begin{cases} \vec{k}_p(t + \Delta t) \\ \varepsilon_p(t + \Delta t) = \varepsilon(\vec{k}_p(t + \Delta t)) \\ \vec{r}_p(t + \Delta t) = \vec{r}_p(t + \Delta t) \end{cases}$$

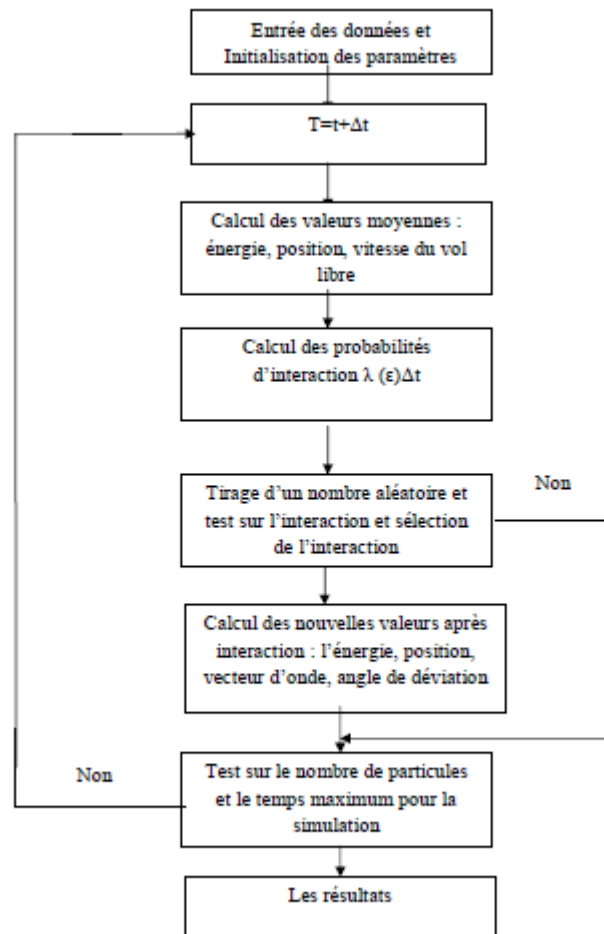


Figure 10 : Organigramme de la méthode de Monte Carlo [14].

6. Mécanismes et probabilités de collisions

Parmi les mécanismes de collisions que les porteurs sont susceptibles de subir, nous devons distinguer les collisions intravallées et les collisions intervallées. Les interactions intravallées provoquent des transitions du vecteur d'onde des porteurs à l'intérieur de la même vallée. Elles peuvent être de plusieurs types : collisions sur phonons acoustiques, collisions sur phonons optiques. Pour un matériau dopé, les collisions avec les impuretés ionisées sont supposées intravallées et élastiques.

Les collisions intervallées sont de deux types. Elles peuvent occasionner les transferts entre deux vallées dont les axes principaux sont perpendiculaires. Ces transitions, dites de type f, relient chaque vallées à quatre autres vallées à l'intérieur de la première zone de Brillouin.

L'autre type de collision intervallée connecte deux vallées dont les axes principaux sont colinéaires, ce sont les transitions dites de type g. des travaux théoriques portant sur les propriétés de symétrie de la bande de conduction sont interdites [8].

Seuls peuvent intervenir dans les transitions de type g les phonons de la branche longitudinale optique et pour les transitions f les phonons des branches transversales optiques et longitudinales acoustiques.

6.1. Rappel sur les probabilités de collisions des porteurs

Rappelons que $S(\vec{k}, \vec{k}')$ représente par définition la densité de probabilité par unité de temps qu'un porteur effectue durant un choc, une transition l'amenant de l'état \vec{k} à l'état \vec{k}' .

La démarche de calcul qui va suivre est commune à tous les types d'interactions considérés ; la probabilité $\lambda(k)$ par unité de temps qu'un électron qui se trouve dans l'état \vec{k} subisse une interaction, se calcule en intégrant sur tous les états finals \vec{k}' , la densité de probabilité $s(\vec{k}, \vec{k}')$ de passage de l'état \vec{k} à un état \vec{k}' , cette probabilité s'écrit :

$$\lambda(k) = \frac{v}{8\pi^3} \cdot 2\pi \int_0^\pi \left[\int_0^\infty s(\vec{k}, \vec{k}') k'^2 dk' \right] \sin\beta' d\beta' \quad (19)$$

où

$\frac{v}{8\pi^3}$ désigne la densité d'état dans l'espace des moments et le facteur 2π traduit la symétrie de révolution autour de \vec{k} de l'ensemble des états possibles \vec{k}' . Dans un premier temps, l'intégration se fait par rapport au module k' ; grâce aux relations entre vecteur d'onde et énergie :

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

et

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

(20)

il est possible de tous exprimer en fonction des énergies ε et ε' ; dans un stade intermédiaire, après intégration sur l'énergie la probabilité $\lambda(\varepsilon)$ peut se mettre sous la forme :

$$\lambda(\varepsilon) = C_\varepsilon \int_0^\pi f_\varepsilon(\beta') d\beta' \quad (21)$$

laissant apparaître, exprimée à un facteur multiplicateur près, la fonction de distribution de l'angle β de déviation. L'intégration menée à son terme, donne la probabilité d'interaction cherchée.

Il s'agit ensuite de résoudre, en fonction du paramètre r tiré au hasard entre 0 et 1, l'équation

$$\int_0^\beta f_\varepsilon(\beta') d\beta' = r \int_0^\pi f_\varepsilon(\beta') d\beta' \quad (22)$$

pour obtenir un angle de déviation β suivant la distribution $f_\varepsilon(\beta)$.

6.2. L'interaction optique polaire :

L'interaction optique polaire est inélastique : elle est accompagnée d'une émission ou absorption de phonon $\hbar\omega_0$. Les seules énergies possibles après interaction sont donc $\varepsilon \pm \hbar\omega_0$. Le passage d'un état \vec{k} à un état \vec{k}' au cours de cette interaction est décrit par la fonction densité de probabilité :

$$s(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot B_0(\vec{k}, \vec{k}') \cdot \{N_0 \cdot \delta(\varepsilon(k') - \varepsilon(k) + \hbar\omega)(N_0 + 1) \cdot \delta((\varepsilon(k') - \varepsilon(k) - \hbar\omega))\} \quad (23)$$

où

$$B_0(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{e^2 \cdot \hbar\omega}{2\pi\varepsilon_0 |\vec{k} - \vec{k}'|^2} \cdot \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right) \cdot G(k, k')$$

$$G(k, k') = \left[\left(\frac{1 + \alpha \cdot \varepsilon(k)}{1 + 2\alpha \cdot \varepsilon(k)} \cdot \frac{1 + \alpha \cdot \varepsilon(k')}{1 + 2\alpha \cdot \varepsilon(k')} \right)^{1/2} \left(\frac{\alpha \cdot \varepsilon(k)}{1 + 2\alpha \cdot \varepsilon(k)} \cdot \frac{\alpha \cdot \varepsilon(k')}{1 + 2\alpha \cdot \varepsilon(k')} \right)^{1/2} \cos\beta \right]^2$$

et

$$N_0 = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_0/K_B \cdot T) - 1}$$

N_0 est la fonction de répartition des phonons. $G(k, k')$ représente l'intégrale de recouvrement prenant en compte la non-parabolicité des bandes d'énergie. ε_∞ et ε_s sont les permittivités diélectriques relatives, T la température du réseau, K_B la constante de Boltzmann, \hbar la constante de Planck et e la charge de l'électron.

Calculons la probabilité des interactions de type optique polaire.

L'intégration sur tous les états \vec{k}' s'écrit :

$$\lambda(k) = \frac{v}{8\pi^3} \cdot 2\pi \int_0^\pi \int_0^\infty s(\vec{k}, \vec{k}') k'^2 \sin\beta \, d\beta \, dk' \quad (24)$$

Le changement de variable

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

puis l'intégration sur ε' en posant $\gamma(\varepsilon) = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon)$ et $\gamma(\varepsilon') = \varepsilon'(1 + \alpha\varepsilon')$

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{e^2 m^{*1/2} \omega_0}{\sqrt{2} 4\pi \hbar \varepsilon_0} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right) \frac{\sqrt{\gamma(\varepsilon')}}{1 + 2\alpha\varepsilon} \int_0^\pi \frac{(\sqrt{1 + \alpha\varepsilon} \cdot \sqrt{1 + \alpha\varepsilon'} + \alpha\sqrt{\varepsilon\varepsilon'} \cos\beta)^2}{\gamma(\varepsilon) + \gamma(\varepsilon') - 2\cos\beta \sqrt{\gamma(\varepsilon) \cdot \gamma(\varepsilon')}} \cdot \sin\beta \, d\beta$$

$$\times \begin{cases} N_0 \\ N_0 + 1 \end{cases}$$

après intégration sur l'angle β donne

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{e^2 m^{*1/2} \omega_0}{\sqrt{2} 4\pi \hbar \varepsilon_0} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right) \frac{1 + 2\alpha\varepsilon'}{\sqrt{\gamma(\varepsilon)}} \cdot F(\varepsilon, \varepsilon') \cdot \left(N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \quad (25)$$

où

$$F(\varepsilon, \varepsilon') = \frac{1}{C} \left(A \cdot \ln \left| \frac{\sqrt{\gamma(\varepsilon)} + \sqrt{\gamma(\varepsilon')}}{\sqrt{\gamma(\varepsilon)} - \sqrt{\gamma(\varepsilon')}} \right| + B \right)$$

$$A = [2(1 + \alpha\varepsilon)(1 + \alpha\varepsilon') + \alpha(\gamma(\varepsilon) + \gamma(\varepsilon'))]^2$$

$$B = -2\alpha\sqrt{\gamma(\varepsilon) \cdot \gamma(\varepsilon')} \cdot [4(1 + \alpha\varepsilon)(1 + \alpha\varepsilon') + \alpha(\gamma(\varepsilon) + \gamma(\varepsilon'))]$$

$$C = 4(1 + \alpha\varepsilon)(1 + \alpha\varepsilon')(1 + 2\alpha\varepsilon)(1 + 2\alpha\varepsilon')$$

Déterminons l'angle β .

L'équation précédente fait apparaître la fonction $f_\varepsilon(\beta)$ de distribution en $\cos\beta$ de l'angle β qui peut s'écrire :

$$f_\varepsilon(\beta) = \frac{(\sqrt{1 + \alpha\varepsilon} \cdot \sqrt{1 + \alpha\varepsilon'} + \alpha\sqrt{\varepsilon\varepsilon'} \cos\beta)^2}{\gamma(\varepsilon) + \gamma(\varepsilon') - 2\cos\beta \sqrt{\gamma(\varepsilon) \cdot \gamma(\varepsilon')}} \sin\beta \quad (26)$$

Soit r un nombre réel tiré au hasard entre 0 et 1, il s'agit de déterminer l'angle β vérifiant :

$$r \int_0^\pi f_\varepsilon(\beta') d\beta' = \int_0^\beta f_\varepsilon(\beta') d\beta' \quad (27)$$

Ce qui donne après intégration :

$$\frac{A}{2} \cdot \ln \left(1 + \frac{2\sqrt{\gamma(\varepsilon)\gamma(\varepsilon') \cdot (1 - \cos\beta)}}{(\sqrt{\gamma(\varepsilon)} - \sqrt{\gamma(\varepsilon')})^2} \right) + \frac{B}{2} (1 - \cos\beta) - \alpha^2 \gamma(\varepsilon)\gamma(\varepsilon') \cdot (1 - \cos^2\beta) - r \left[A \cdot \ln \frac{\sqrt{\gamma(\varepsilon)} + \sqrt{\gamma(\varepsilon')}}{\sqrt{\gamma(\varepsilon)} - \sqrt{\gamma(\varepsilon')}} + B \right] = 0 \quad (28)$$

C'est une équation insolvable analytiquement en β . Pour contourner la difficulté une résolution numérique directe de l'équation (27) est faite. C'est une fonction monotone en $\cos\beta$ et s'annule pour des valeurs très voisines de 1. La méthode des tangentes initialisées à $\cos\beta_0 = 1$ permet très rapidement d'obtenir la solution.

6.3. Interaction intervalles équivalentes et non-équivalentes

Au cours des interactions intervalles, les transferts de charge entre vallées équivalentes et non-équivalentes ont lieu. Et selon le type d'interaction on a soit émission ou absorption de phonon. Le transfert ne peut avoir lieu que si l'énergie après interaction est supérieure à l'énergie minimum de la vallée d'accueil, ces énergies sont repérées par rapport au minimum de la bande de conduction.

L'expression de la densité de probabilité de passage de l'état \vec{k} à un état \vec{k}' en transférant de la vallée i à la vallée j équivalente ou non, est :

$$S_{ij}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot B_{ij}(k, k') \cdot \left(N_{ij} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta[\varepsilon_j(k') - \varepsilon_i(k) + \Delta_j - \Delta_i \pm \hbar\omega_{ij}] \quad (29)$$

où

$$B_{ij}(k, k') = \frac{Z_{ij} \hbar E_{ij}^2 (1 + \alpha_i \varepsilon_i) (1 + \alpha_j \varepsilon_j)}{2 \rho \omega_{ij} V (1 + 2 \alpha_i \varepsilon_i) (1 + 2 \alpha_j \varepsilon_j)}$$

et

$$N_{ij} = \frac{1}{\exp(\hbar \omega_{ij} / K_B T) - 1}$$

$\hbar \omega_{ij}$ représente l'énergie du phonon échangé, Δ_i et Δ_j sont les énergies relatives aux fonds de vallées i et j , ε_i et ε_j sont les énergies dans chaque vallée, α_i et α_j sont les coefficients de non-parabolicité, Z_{ij} est le nombre de vallées d'accueil j partant de la vallée i , E_{ij} est le potentiel de déformation entre la vallée i et la vallée j et enfin ρ représente la masse volumique du matériau.

L'intégration sur tous les états finals donne :

$$\lambda_{ij}(\varepsilon_i) = \frac{Z_{ij} m_j^{*3/2} E_{ij}^2}{\sqrt{2} \pi \rho \omega_{ij} \hbar^3} \left(N_{ij} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \frac{\gamma_j(\varepsilon_j) (1 + \alpha_i \varepsilon_i) (1 + \alpha_j \varepsilon_j)}{(1 + 2 \alpha_i \varepsilon_i)} \quad (30)$$

Remarquons que $S_{ij}(\vec{k}, \vec{k}')$ ne dépend pas de l'angle de déviation β , c'est-à-dire que sur une sphère qui représente l'énergie finale, tous les états \vec{k}' sont équiprobables.

Alors l'angle β est choisi en tirant au hasard un nombre réel r entre 0 et 1 tel que :

$$r = \int_0^\beta \frac{\sin \beta \, d\beta}{2}$$

ou encore

$$\cos \beta = 1 - 2r \quad (31)$$

6.4. Collisions sur le réseau

Elles sont de deux types en ce qui concerne les systèmes étudiés dans notre travail :

- a) Les collisions sur phonons acoustiques de grandes longueurs d'onde autorisent des transferts $\vec{k} \rightarrow \vec{k}'$ avec échange de phonons de faible énergie correspondant à des vecteurs d'onde \vec{q} très petits. Ces transitions sont considérées comme quasiment élastiques aux températures étudiées.
- b) Les collisions intervallées impliquant des phonons (optiques et acoustiques) de grande énergie et de grand vecteur d'onde sont par contre fortement inélastiques.

6.5. Collisions acoustiques intravallées

Le processus de collision par interaction avec le potentiel de déformation dû aux vibrations acoustiques de grandes longueurs d'onde a été élaboré par Schokley et Bardeen [9]. Cette interaction est considérée comme élastique au-dessus de quelques degrés Kelvin. Incluant l'effet de non-parabolicité des bandes d'énergie, la probabilité d'interaction recherchée est :

$$S(\vec{k}, \vec{k}') d^3 k' = \frac{q^2 k_B T_L E_1^2}{4\pi^2 \hbar s^2 \rho} G(\vec{k}, \vec{k}') \delta(\epsilon(\vec{k}) - \epsilon(\vec{k}')) d^3 k' \quad (32)$$

s est la vitesse du son isotrope, ρ la densité du matériau et E_1 (en eV) le module du potentiel de déformation acoustique. Dans le cas d'une bande d'énergie parabolique on aurait $G = 1$ et S ne dépendrait plus de l'angle entre \vec{k} et \vec{k}' .

La densité de probabilité par unité de temps qu'un porteur effectue une transition l'amenant de l'état \vec{k} vers un autre état \vec{k}' quelconque :

$$\lambda_{ac}(\epsilon) = \frac{q^2 (2m_D^*)^{3/2} k_B T_L E_1^2}{2\pi \rho s^2 \hbar^4} \sqrt{\epsilon(1 + \alpha\epsilon)} \quad (33)$$

où m_D^* est la masse de densité d'état.

Cette expression fait apparaître la fonction de distribution de l'angle β . Après tirage au hasard d'un nombre réel r compris entre 0 et 1, on obtient l'angle en résolvant l'équation suivante :

$$r \int_0^\pi (1 + \alpha\varepsilon + \alpha\varepsilon \cos\beta')^2 \sin\beta' d\beta' = \int_0^\beta (1 + \alpha\varepsilon + \alpha\varepsilon \cos\beta')^2 \sin\beta' d\beta'$$

d'où la solution :

$$\cos\beta = \frac{((1+2\alpha\varepsilon)^3(1-r)+r)^{1/3}-1}{\alpha\varepsilon} - 1 \quad (34)$$

6.6. Collisions intervallées

Les états initial et final ne sont pas dans la même vallée, la probabilité de transfert doit être proportionnelle égale au nombre de vallées accessibles.

$$S_{i,j}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{q^2 D_{i,j}^2 z_j}{8\pi^2 \rho \omega_{i,j}} G_{i,j}(\vec{k}, \vec{k}') \left\{ (\bar{N}_{i,j} + 1) \delta(\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{k}') + \hbar\omega_{i,j}) \cdot (\bar{N}_{i,j} + 1) \delta(\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{k}') - \hbar\omega_{i,j}) \right\} \quad (35)$$

où le terme supérieur concerne la collision avec émission de phonon, et le terme inférieur la collision avec absorption de phonon. $\hbar\omega_{i,j}$ est l'énergie échangée durant la collision, $D_{i,j}$ est le module du potentiel de déformation intervallée en eV/m, et $\bar{N}_{i,j}$ est le nombre de phonon par mode. z_j est le nombre de vallées accessibles pour le transfert considéré. L'intégration de $S_{i,j}(\vec{k}, \vec{k}')$ sur tous les états finals \vec{k}' donne dans le cas de l'émission d'un photon :

si $\varepsilon > \hbar\omega_{i,j}$:

$$\lambda_{ij}(\varepsilon) = \frac{q^2 D_{i,j}^2 z_j (m_D^*)^{3/2}}{\sqrt{2\pi} \rho \omega_{i,j} \hbar^3} (\bar{N}_{i,j} + 1) \left\{ (\varepsilon - \hbar\omega_{i,j}) (1 + \alpha[\varepsilon - \hbar\omega_{i,j}]) \right\}^{1/2} (1 + 2\alpha[\varepsilon - \hbar\omega_{i,j}]) \quad (36)$$

ou bien

$$\lambda_{ij}(\varepsilon) = 0 \quad \text{si } \varepsilon \leq \hbar\omega_{i,j}$$

en ce qui concerne l'absorption d'un photon, on a :

$$\lambda_{ij}(\varepsilon) = \frac{q^2 D_{i,j}^2 z_j (m_D^*)^{3/2}}{\sqrt{2\pi\rho\omega_{i,j}\hbar^3}} \bar{N}_{i,j} \{(\varepsilon + \hbar\omega_{i,j})(1 + \alpha[\varepsilon + \hbar\omega_{i,j}])\}^{1/2} (1 + 2\alpha[\varepsilon + \hbar\omega_{i,j}]) \quad (37)$$

7. Conclusion

En conclusion, la simulation consiste à suivre la trajectoire de chaque électron qui est constituée par une suite de vols libres effectués sous l'influence de la force externe (champ électrique), séparés par des chocs sur les différents obstacles présentés par le milieu où évolue le porteur. Ces chocs sont considérés comme des collisions de durée nulle faisant passer instantanément le vecteur d'onde représentatif du porteur d'une valeur \vec{k} à une autre valeur \vec{k}' . L'avantage des méthodes de MC est de pouvoir obtenir à la fois la durée de vol libre et les états du porteur après les collisions en utilisant un procédé basé d'une part sur le tirage de nombres aléatoires et d'autre part sur la connaissance des densités de probabilité correspondant aux interactions auxquelles est soumis le porteur. Nous avons défini tous les processus intervenant dans la mise en œuvre de la simulation, commençant par la trajectoire du porteur, la durée du vol libre, le choix du pas de temps, les différentes collisions que peut subir le porteur, et en fin sa réorientation après la collision.

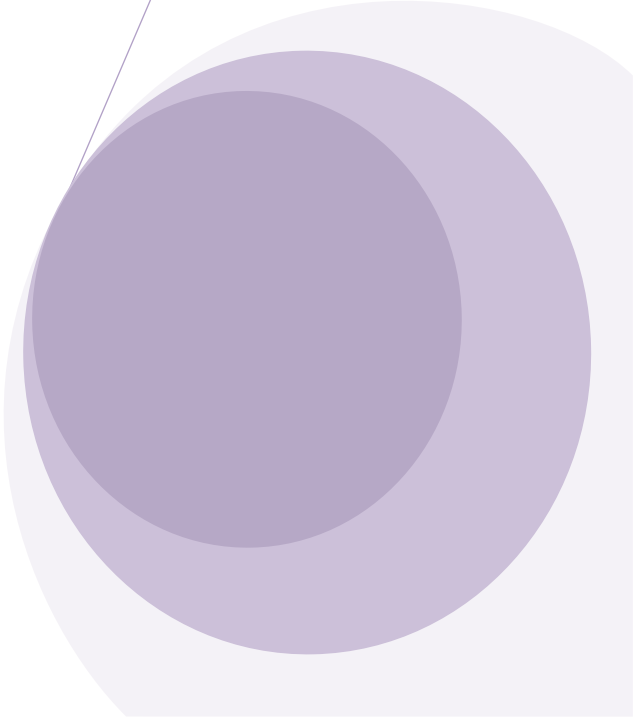
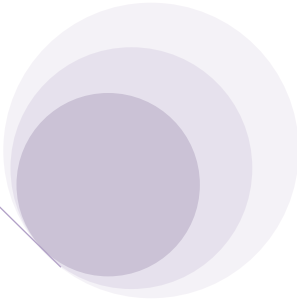
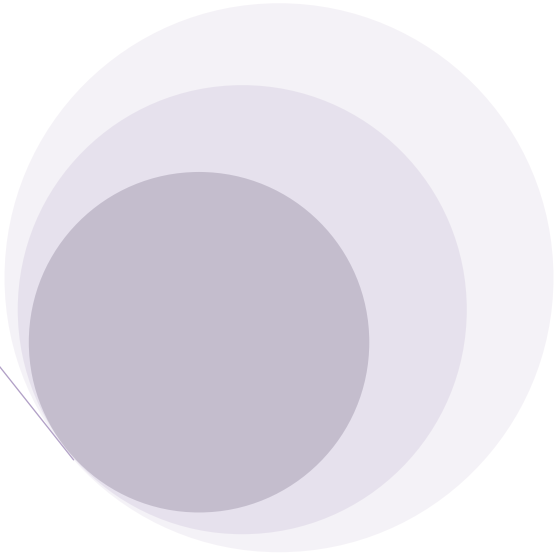
8. Références :

- [1] J. TAVERNIER, D. CALECKI, « Introduction aux phénomènes de transport linéaires dans les semiconducteurs, Masson, Paris 1979.
- [2] E.M. CONWELL, "High field transport in semiconductors", Solid-State Physics, Supplement 9, Academic Press, 1967.
- [3] P.J. Price, "Solid-state electronics", Volume 21, p.9 (1977).

- [4] H.G. REIK, H. RISKEN, *Physical Review*, Volume 124, p.777 (1961).
- [5] G.A. BARAFF, *Physical Review*, Volume 133, p.A26 (1964).
- [6] M. ASCHE, O.G. SARBEI, *Physica Status Solidi*, Volume 33, p.9 (1969).
- [7] G. PERSKY, D.J. BARTELINK, *Physical Review B*, Volume 1, p.1614 (1970).
- [8] C. HERRING, E. VOGT, *Physical Review*, Volume 101, p.944 (1956).
- [9] B.R. NAG, “Theory of Electrical Transport in Semiconductors, Pergamon Press, (1972).
- [10] H. FROELICH, B.V. PARANJAPE, *Proceedings of the Physical Society of London*, Volume B69, p.21 (1956).
- [11] P.P. DEBYE, E.M. CONWELL, *Physical Review*, Volume 93, p.693 (1954).
- [12] P. DAS, D.K. FERRY, *Solid-State Electronics*, Volume 19, p.851 (1976).
- [13] R. BOSCH, H. THIM, *IEEE Transactions on Electron Devices*, Volume 21, p.16 (1974).
- [14] H. BUDD, *Physical Review*, Volume 158, p.798 (1967).
- [15] H.D. RESS, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Volume 30, p.643 (1969).
- [16] H.D. RESS, *IBM Journal of Research and Development*, Volume 13, p.537 (1969).
- [17] J.P. NOUGIER, M. ROLAND, *Physical Review B*, Volume 8, p.5728 (1973).
- [18] W. FAWCETT, A.D. ROARDMAN, S. SWAIN, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Volume 31, p.1963 (1970).
- [19] A. W. Smith and K. F. Brennan, “Hydrodynamic simulation of semiconductor devices,” *Progress in Quantum Electronics*, vol. 21, no. 4, pp. 293–360, 1997.

- [20] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, “Equation of state calculations by fast computing machines”, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
- [21] W. W. Wood, F. R. Parker, “Monte Carlo equation of state of molecules interacting with the Lennard-Jones potential. I. A supercritical isotherm at about twice the critical temperature.” *J. Chem. Phys.* **27**, 720 (1957).
- [22] W. W. Wood, J. D. Jacobson, “Preliminary results from a recalculation of the Monte Carlo equation of state of hard spheres.”, *J. Chem. Phys.* **27**, 1207 (1957).
- [23] K. F. Brennan, E. Bellotti, M. Farahmand, J. Haralson II, P. P. Ruden, J. D. Albrecht, and A. Sutandi, “Materials theory based modeling of wide band gap semiconductors: from basic properties to devices,” *Solid-State Electronics*, vol. 44, no. 2, pp. 195–204, 2000.
- [24] H. Kosina, M. Nedjalkov, and S. Selberherr, “Theory of the Monte Carlo method for semiconductor device simulation,” *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 47, no. 10, pp. 1898–908, 2000.

CHAPITRE IV



CHAPITRE IV

RESULTATS ET INTERPRETATIONS

1. Introduction :

Nous présentons dans ce chapitre les résultats obtenus des systèmes étudiés par la simulation de Monte Carlo, à savoir le sélénure de zinc (ZnSe), le tellure de zinc (ZnTe) et le sulfure de zinc (ZnS).

Dans ce travail, nous utilisons un programme écrit en langage Fortran 90 MSDEV. Le programme a été développé au sein de l'URMER (Unité de Recherche Matériaux et Energies Renouvelables) par Dr. A. SAYAH et Dr. B. BOUAZZA, que nous avons modifié en ajoutant une sous-routine calculant le coefficient de diffusion.

Ce programme permet de réaliser deux tâches essentielles. La première est consacrée au calcul des probabilités d'interaction à partir des expressions usuelles, en utilisant un modèle à trois vallées (Γ , L, X), isotropes et non paraboliques. Les interactions prises en compte sont dues aux phonons acoustiques, aux phonons optiques polaires intervalles et aux impuretés.

La deuxième tâche est de déterminer les grandeurs instantanées définies sur un ensemble d'électrons (l'énergie, la vitesse, la position) par la procédure du Self-Scattering, pour laquelle les durées de vol libre sont distribuées pour chaque électron.

Les résultats obtenus sont fortement dépendants de nombreux paramètres qui caractérisent le matériau et qui, malheureusement, sont parfois très mal connus. Le tableau 1 résume les paramètres des matériaux étudiés. La recherche de ces derniers a été faite avec beaucoup de soin.

Tab.1 : l'ensemble des paramètres utilisés dans la simulation.

Paramètres physiques	ZnSe	ZnTe	ZnS
m_{Γ}^*	0.17	0.20	0.28
m_{L}^*	0.51	0.31	0.22
m_{X}^*	0.316	0.36	0.40
Permittivité à haute fréquence	6.20	7.6	4.4
Permittivité à basse fréquence	9.20	10.4	9.6
α_{Γ}	0.67	0.58	0.69
α_{L}	0.43	0.40	0.65
α_{X}	0.20	0.22	0.36
$\Delta\Gamma L$	1.58	1.88	1.49
$\Delta\Gamma X$	1.49	1.48	1.45
Densité	5420	5650.	4075
Vitesse de son	458	4777	5668

La procédure d'exécution de ce programme est composée de trois étapes essentielles qui peuvent être résumées comme suit:

1. Lecture du fichier de données concernant les paramètres du matériau utilisé, tels que les énergies du gap, les masses effectives, les potentiels de déformation, les coefficients de non parabolicité, la vitesse du son, le dopage, la température du réseau, les champs électrique appliqués..etc.
2. Exécution du logiciel.
3. Obtention des résultats sous forme de fichiers de sorties : les valeurs des probabilités d'interaction, les vitesses pour les différentes vallées, les énergies pour les différentes vallées...

2. Conditions initiales

Dans cette simulation numérique nous nous sommes rapprochés le plus possible du cas réel, alors tous les calculs sont faits avec un paquet de 20000 électrons. Ce nombre nous semble assez bon pour représenter le cas réel. Nous avons fait une étude préliminaire qui a montré que les résultats obtenus avec un paquet de 50000 électrons sont les mêmes que ceux obtenus avec 20000 électrons, mais un temps de calcul beaucoup plus long. De ce fait, nous n'avons pas trouvé l'intérêt d'augmenter le nombre d'électron.

Nous avons travaillé sous différentes conditions de champs et de température de réseau. Premièrement nous avons fixé la température et tourné la simulation pour différentes valeurs de champ électrique en mode stationnaire et transitoire et ceci pour rendre compte de l'effet du champ électrique sur les grandeurs relatifs au transport électronique à savoir ; la vitesse, l'énergie et la diffusion des porteurs. Les valeurs du champ électrique sont comprises entre 100 et 700 kV/cm.

En deuxième lieu, nous nous sommes intéressés aux effets de la température sur ces grandeurs. Alors, nous avons varié les températures durant l'application d'un champ électrique statique. Nous avons varié les températures de 100 à 900 K.

Le régime stationnaire est atteint quand il y a un équilibre entre l'accélération fournie par le champ électrique appliqué, et le freinage dû aux collisions. Dans ce régime ; la vitesse moyenne a une composante non nulle dans la direction du champ électrique : c'est «la vitesse de dérive». L'énergie cinétique globale a deux composantes : la première est liée à l'effet de l'agitation thermique, et la deuxième est due à l'effet du champ électrique appliqué. Ces composantes dépendent des collisions. Nous allons présenter dans l'ordre les résultats obtenus pour les trois matériaux ZnSe, ZnTe et ZnS :

- Les probabilités des interactions élastiques et inélastiques.
- Les paramètres de transport à savoir l'énergie, la vitesse et la diffusion des électrons en régime stationnaire.
- Les paramètres de transport en régime transitoire.
- Effet de la température sur les propriétés de transport.

3. Les probabilités d'interactions

Parmi toutes les interactions pouvant survenir à l'électron au cours de son évolution ; certaines ont un impact décisif sur son comportement, par leurs fréquences et leurs effets marqués : ce sont principalement les interactions optiques polaires en vallée centrale à faible champ, et les interactions intervallées en champ fort. Ces interactions sont inélastiques, et la probabilité d'émission est supérieure à la probabilité d'absorption dès que l'électron possède suffisamment d'énergie pour émettre un phonon.

L'électron a tendance à transmettre au réseau une partie de l'énergie que lui a fournie le champ électrique. Les collisions sur les phonons acoustiques de grande longueur d'onde, autorisent des transferts avec échange de phonons de faible énergie. Ces transitions intravallées sont considérées comme quasiment élastiques aux températures étudiées.

Nous focalisons maintenant notre attention sur les mécanismes d'interaction qui agissent sur les porteurs dans un cristal massif. Comme d'habitude dans les transports semiclassiques, la dynamique des interactions électroniques est supposée être indépendante du champ appliqué, et les collisions sont supposées se produire instantanément.

Tous les calculs de diffusion analysés ne considèrent que les interactions à deux corps. Dans un semiconducteur, les transitions électroniques induisant le transport de charges peuvent être classées comme intravallées lorsque les états initiaux et finaux se situent dans la même vallée, ou intervallées quand ils se trouvent dans de différentes vallées. La plus importante source des interactions qui déterminent ces transitions dans des

cristaux massifs homogènes sont les phonons, les impuretés, et d'autres porteurs. L'interaction des phonons avec les porteurs de charge est due à la déformation du cristal parfait autrement produite par les phonons à travers le mécanisme du potentiel de déformation ou par les forces électrostatiques produites par les ondes de polarisation qui accompagnent les phonons. En outre, les impuretés peuvent être neutres ou ionisés.

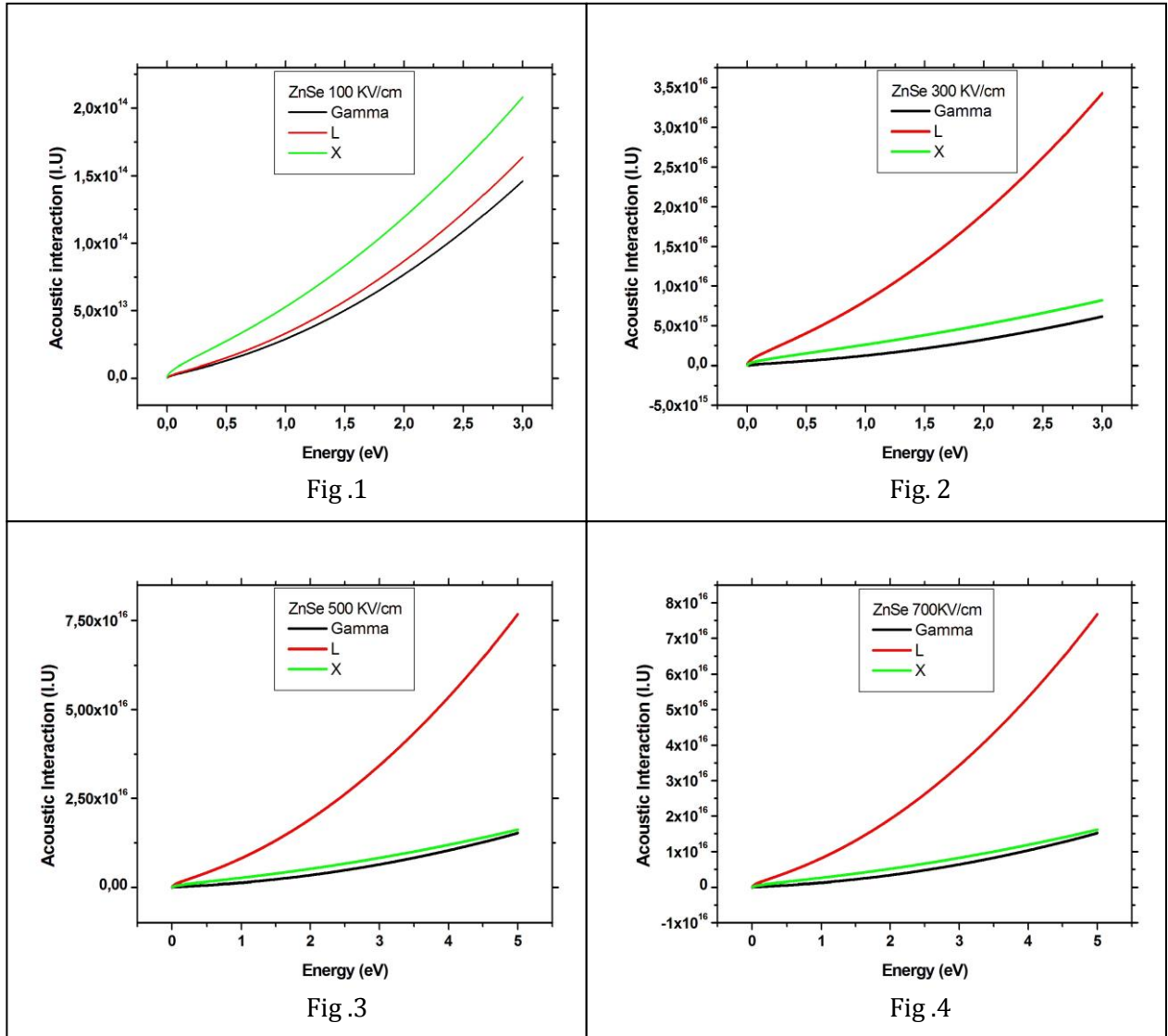
Dans ce dernier cas, le type de l'interaction est type Coulombienne, tandis qu'en principe l'interaction est de portée beaucoup plus courte et l'effet global des impuretés est en général beaucoup plus faible. Comme la section efficace Coulombienne diminue rapidement lorsque le moment de transfert K augmente, en raison de grand k dû aux transitions intervallées, la diffusion Coulombienne des impuretés ionisées doit, en général, être considéré que pour les transitions intravallées [1].

Il est très intéressant de présenter une brève discussion sur la physique des principaux phénomènes de diffusion qui sont pris en compte dans cette recherche.

3.1 La diffusion des phonons acoustiques

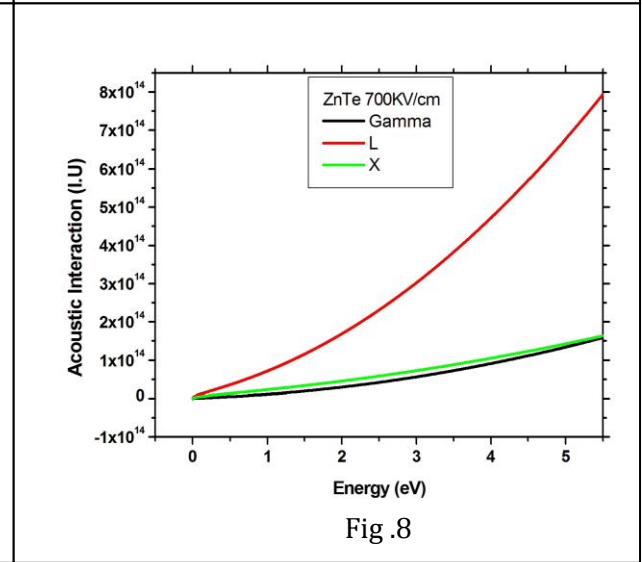
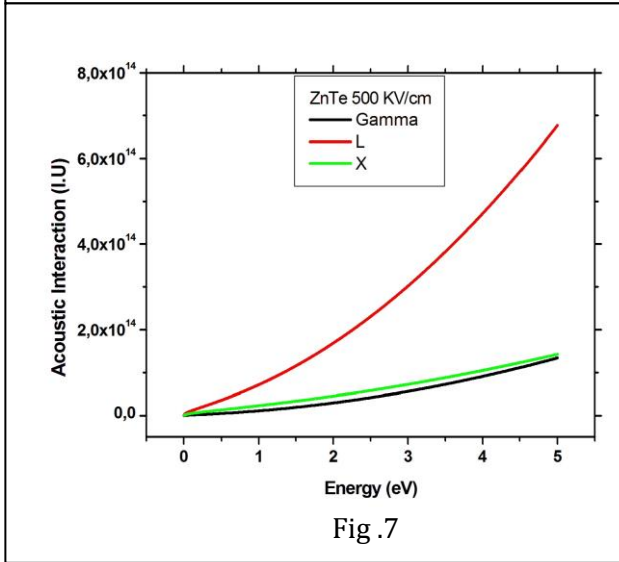
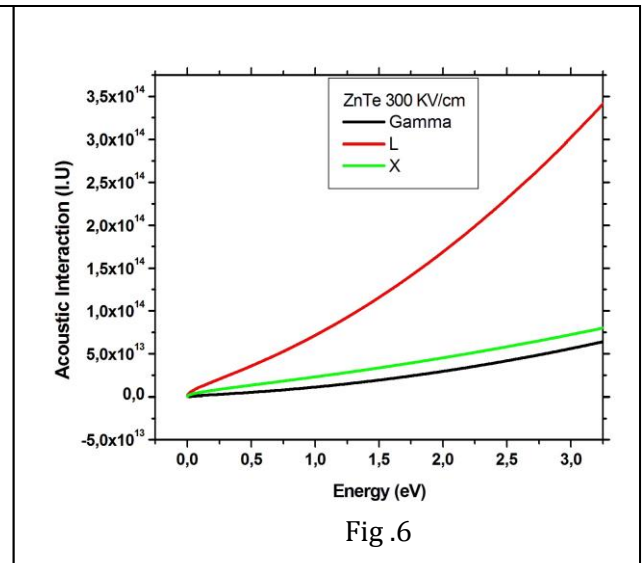
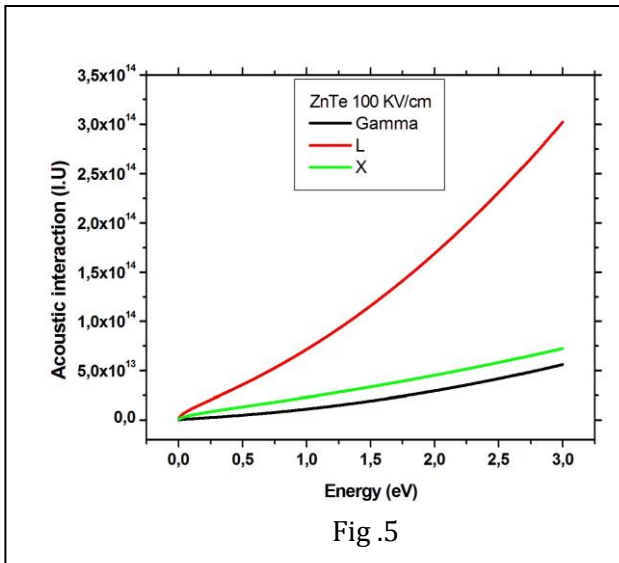
Le transfert d'énergie maximum pour une interaction électronique avec émission de phonons acoustiques est, en général, beaucoup plus petite que l'énergie des électrons, et donc la diffusion acoustique est très souvent considérée comme un processus élastique, comme dans notre cas. Il faut souligner que lorsque la température est élevée ou le champ est fort, l'énergie moyenne des électrons est plus grande que l'énergie des phonons optiques, et ce genre de phonons peut assumer le transfert d'énergie entre les électrons et le réseau [2].

3.1.1. Les interactions acoustiques dans ZnSe



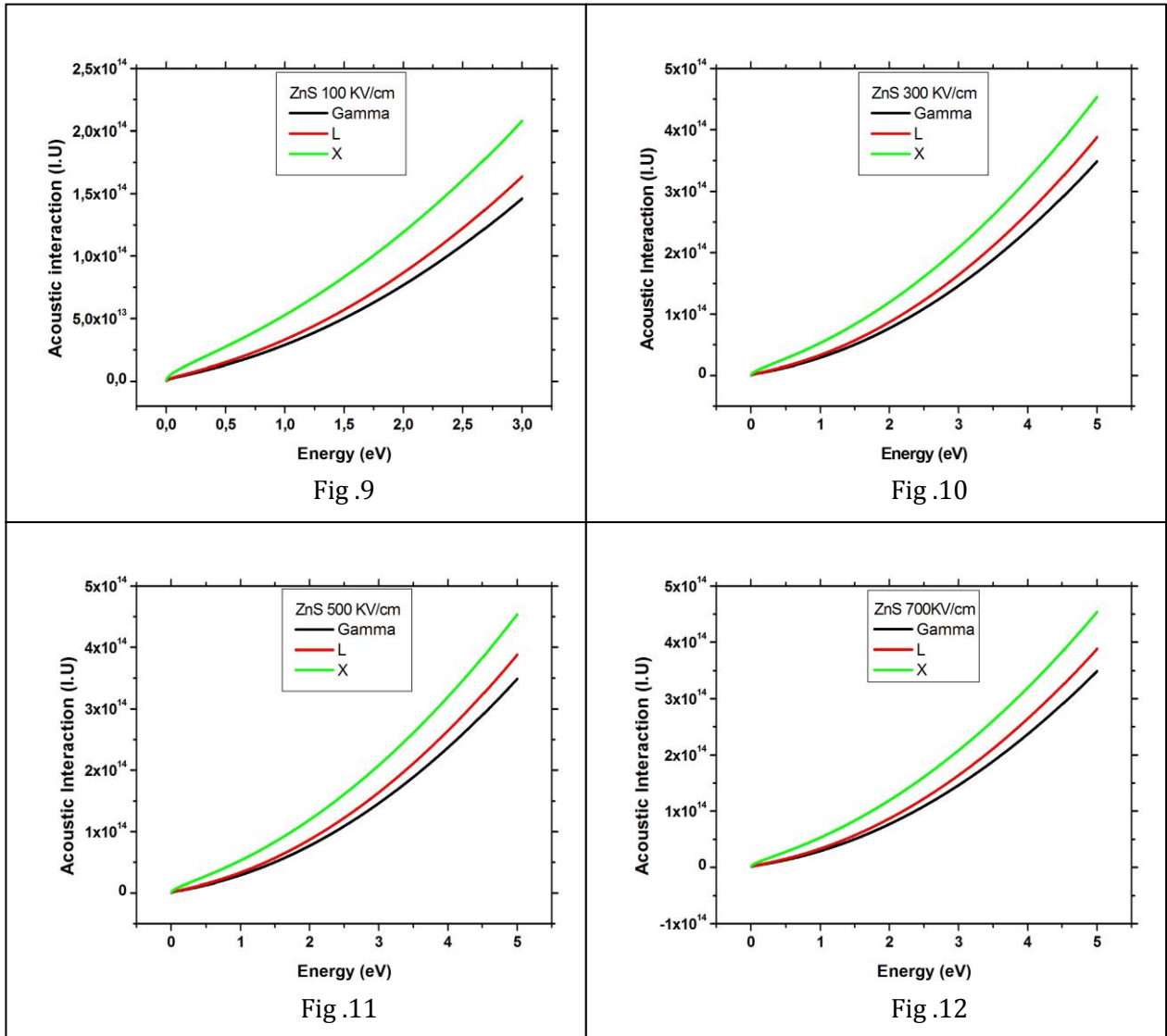
Figures 1 à 4 : Variation du taux d'interactions à phonon acoustiques avec l'énergie des électrons dans le ZnSe pour les trois vallées (Γ , L, X) et pour différentes valeurs du champ électrique.

3.1.2. Les interactions acoustiques dans ZnTe



Figures 5à 8 : Variation du taux d’interactions à phonon acoustiques avec l’énergie des électrons dans le ZnTe pour les trois vallées (Γ, L, X) et pour différentes valeurs du champ électrique.

3.1.3. Les interactions acoustiques dans ZnS



Figures 9 à 12 : Variation du taux d'interactions à phonon acoustiques avec l'énergie des électrons dans le ZnS pour les trois vallées (Γ , L, X) et pour différentes valeurs du champ électrique.

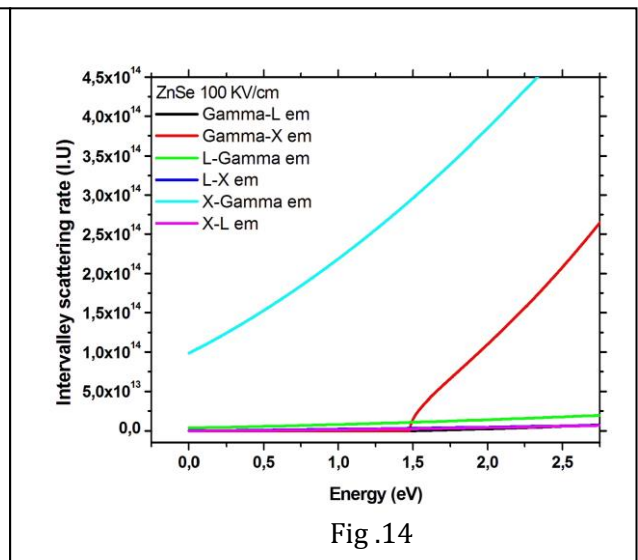
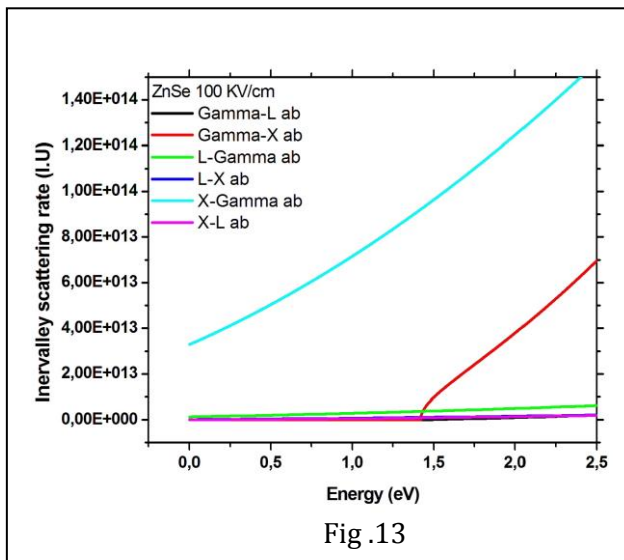
Ces interactions sont les plus dominantes parmi les interactions élastiques et elles sont provoquées essentiellement par les effets des impuretés. Pour les matériaux ZnSe et ZnTe, le taux d'interactions est faible dans la vallée Γ . Dans la vallée X, la probabilité augmente peu ; et dans la vallée L, elle augmente considérablement avec l'énergie. Pour le matériau ZnS, le taux d'interactions est faible dans les vallées Γ et L, elle augmente considérablement avec l'énergie dans la vallée X.

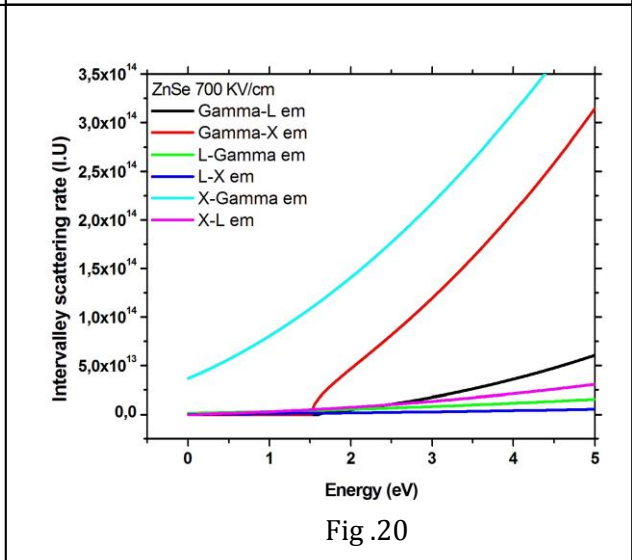
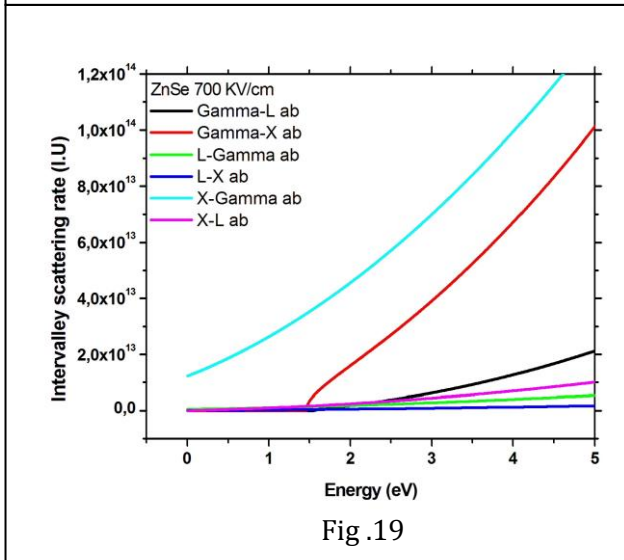
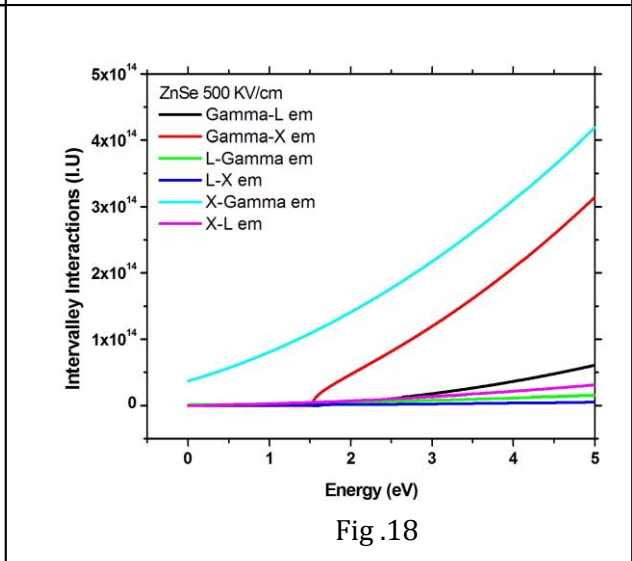
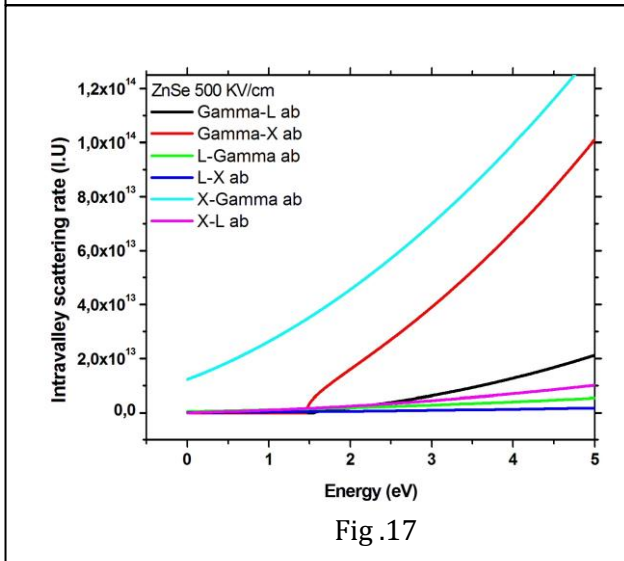
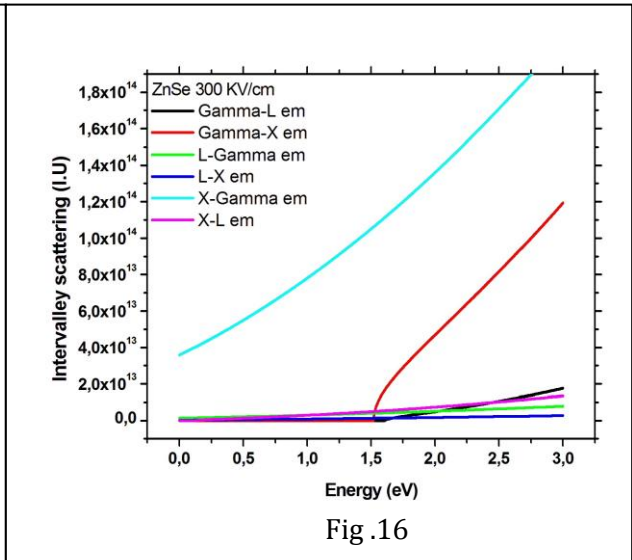
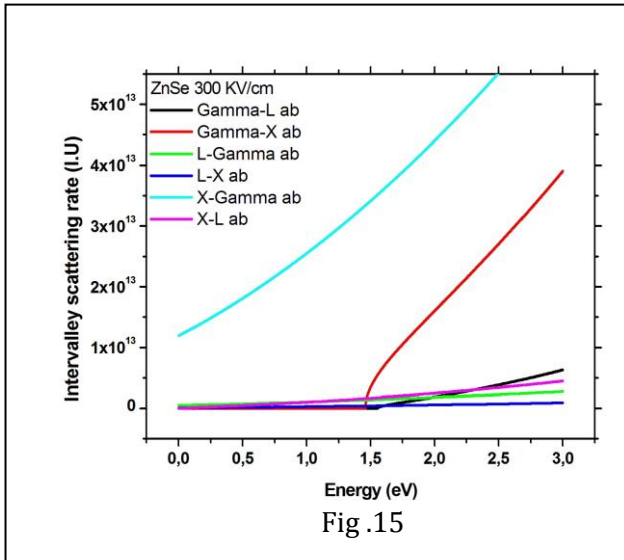
Pour des températures ou des champs électriques très élevés, l'interaction acoustique devient prédominante, l'énergie de l'électron est plus importante que celle d'un phonon optique.

3.2. Les interactions intervallées

Ces interactions sont dues essentiellement aux transitions intervallées qui permettent le transfert des porteurs d'une vallée à une autre vallée équivalente ou non équivalente. Elles engendrent l'absorption ou l'émission d'un phonon. Son énergie dépend de l'écart d'énergie entre la vallée de départ et la vallée d'arrivée. Une interaction intervallée ne peut avoir lieu que si l'énergie après absorption ou émission du phonon, est supérieure à l'énergie minimum de la vallée d'arrivée. Nous représentons les résultats des transitions entre les vallées Γ -L, Γ -X, L- Γ , L-X, X- Γ , et X-L en absorptions et émissions. On remarque que les interactions intervallées sont plus importantes en émission qu'en absorption et qu'elles sont plus importante pour le ZnS que pour le ZnSe ou le ZnTe. Ces interactions augmentent avec l'énergie des porteurs, et elles sont plus importantes dans les vallées supérieures où la masse effective des électrons est plus grande. Ces interactions augmentent dans le cas du ZnS car l'énergie de gap ainsi que l'énergie des autres vallées sont plus grandes.

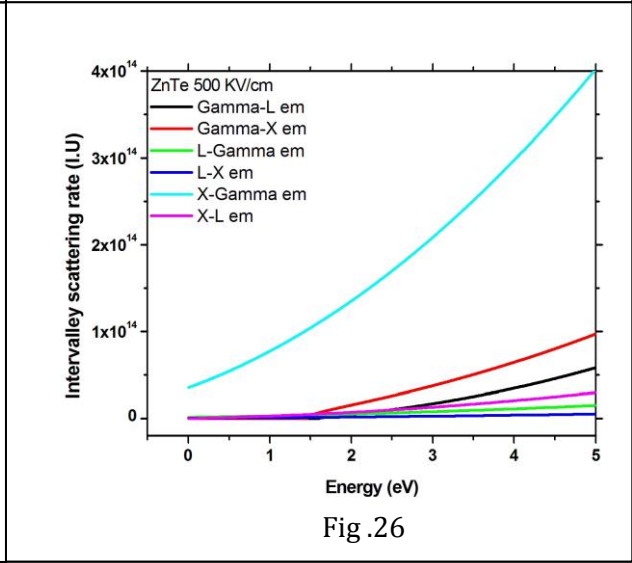
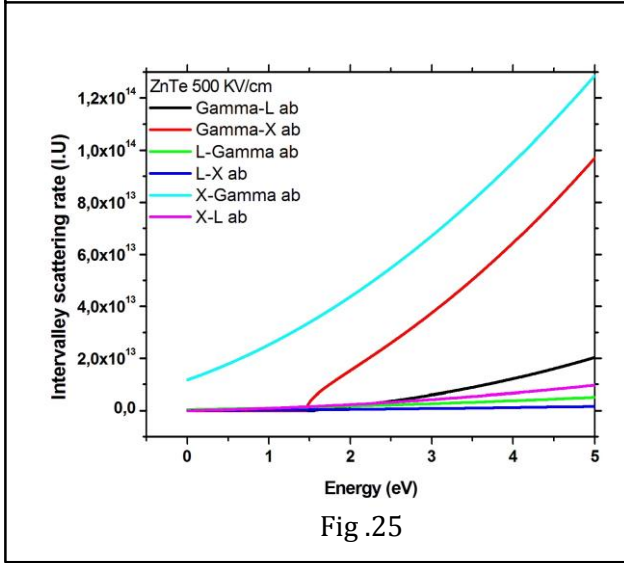
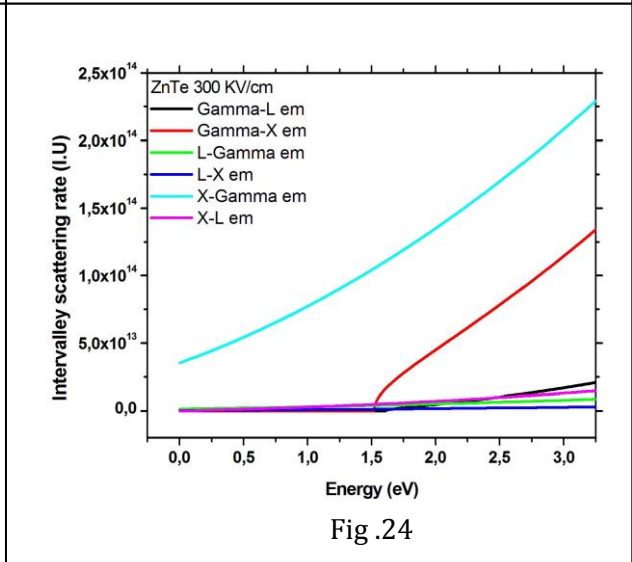
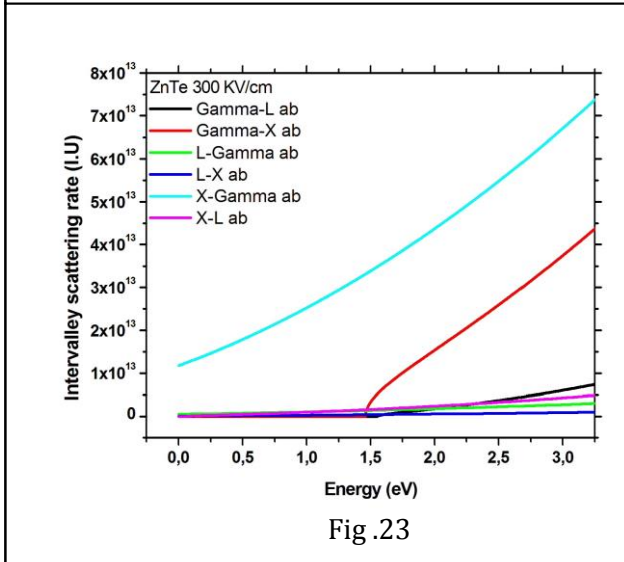
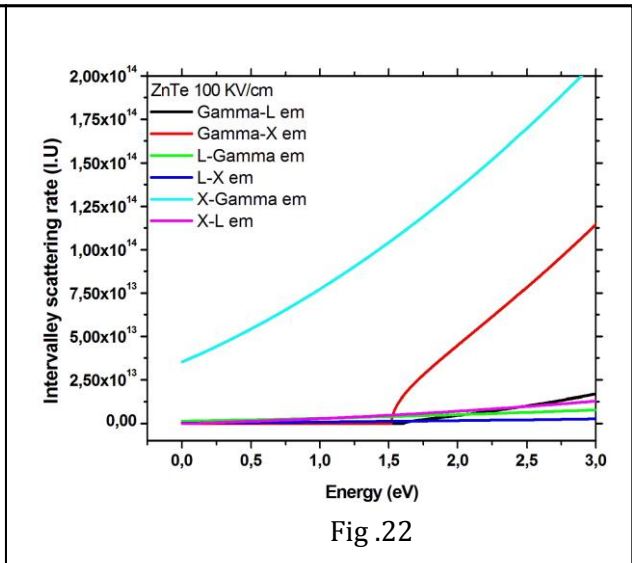
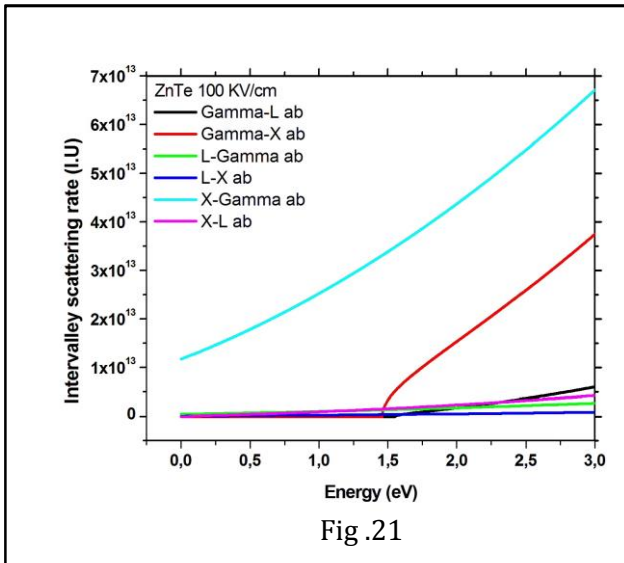
3.2.1. Les interactions intervallées dans ZnSe

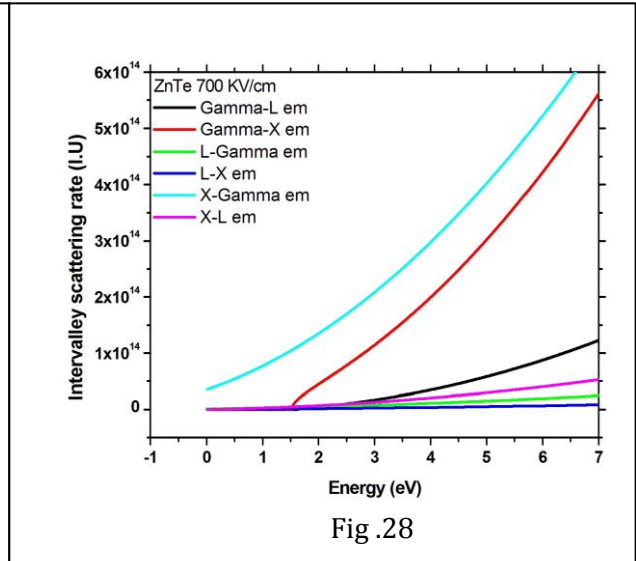
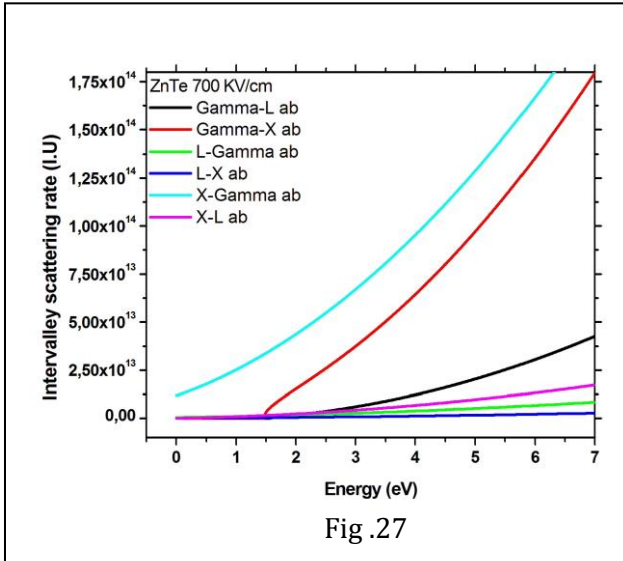




Figures 13 à 20 : Variation du taux d'interactions intervalles avec l'énergie des électrons dans le ZnSe en absorption et en émission et ceci pour différentes valeurs du champ électrique.

3.2.2. Les interactions intervalées dans ZnTe

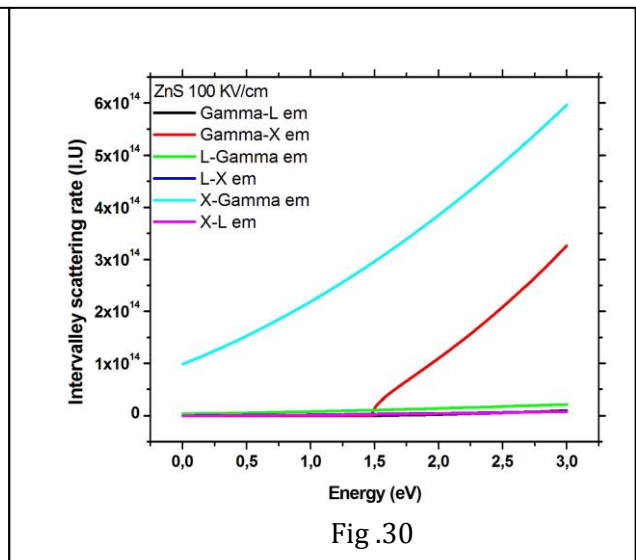
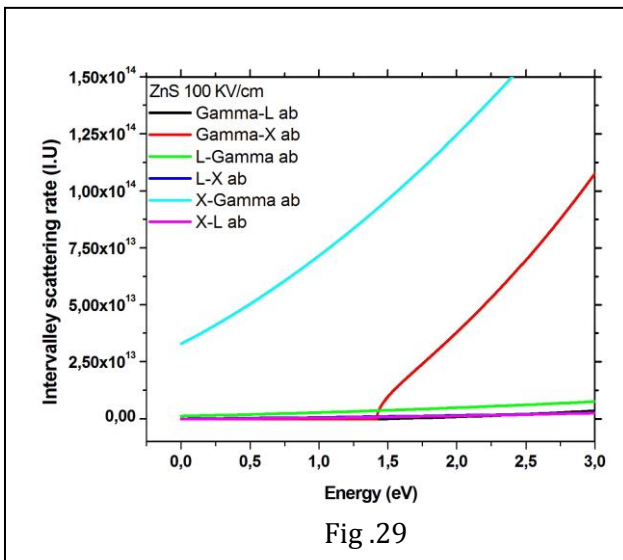


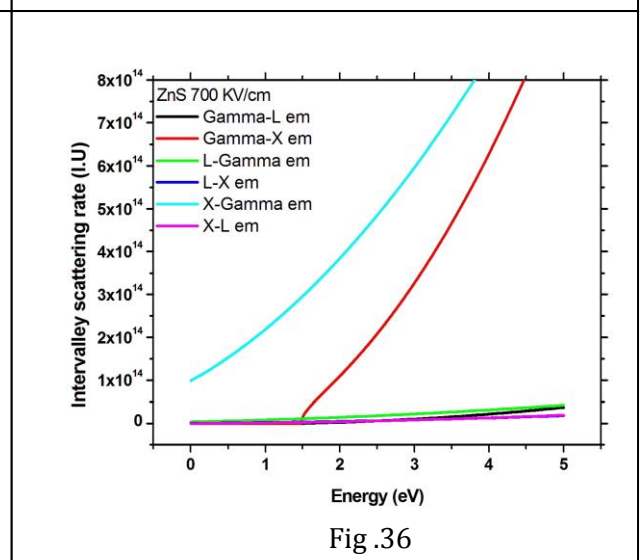
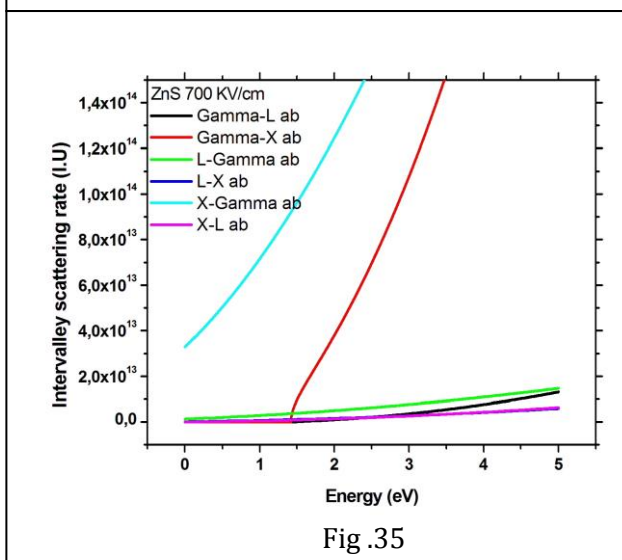
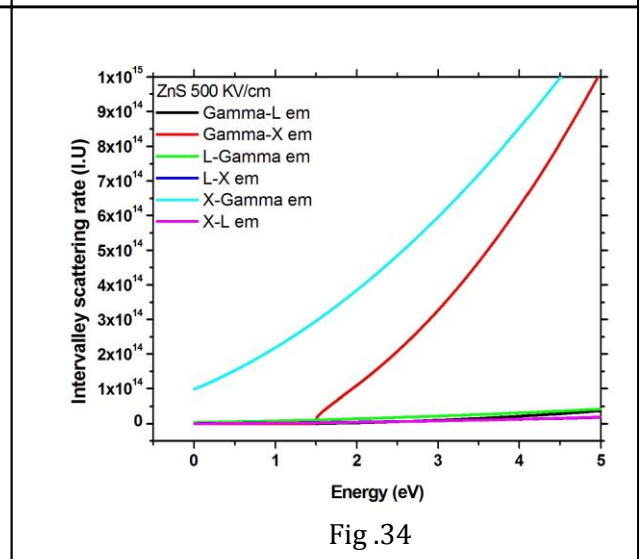
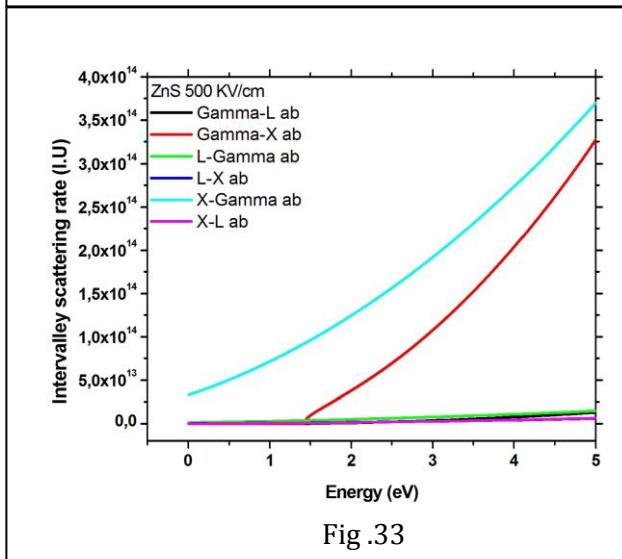
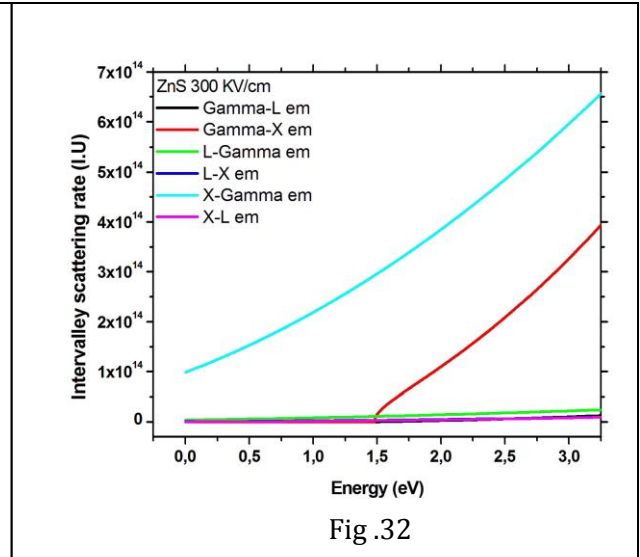
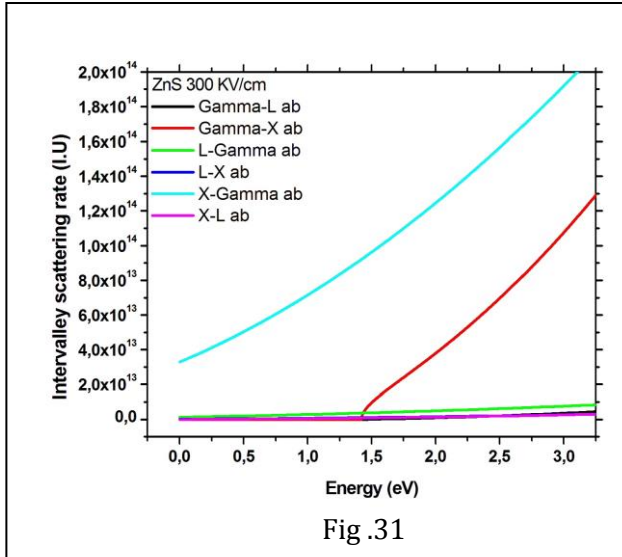


Figures 21 à 28 : Variation du taux d'interactions intervalles avec l'énergie des électrons dans le ZnTe en absorption et en émission et ceci pour différentes valeurs du champ électrique.

Pour ZnTe, les valeurs de ces interactions sont négligeables, ceci est dû essentiellement aux faibles énergies de gap et les énergies des vallées L et X d'une part et d'autre part au fait que les interactions L- Γ et X- Γ deviennent très importantes, ainsi les électrons dans ce cas ont tendance à revenir à la vallée d'origine Γ .

3.2.3. Les interactions intervalles dans ZnS





Figures 29 à 36 : Variation du taux d'interactions intervalles avec l'énergie des électrons dans le ZnS en absorption et en émission et ceci pour différentes valeurs du champ électrique.

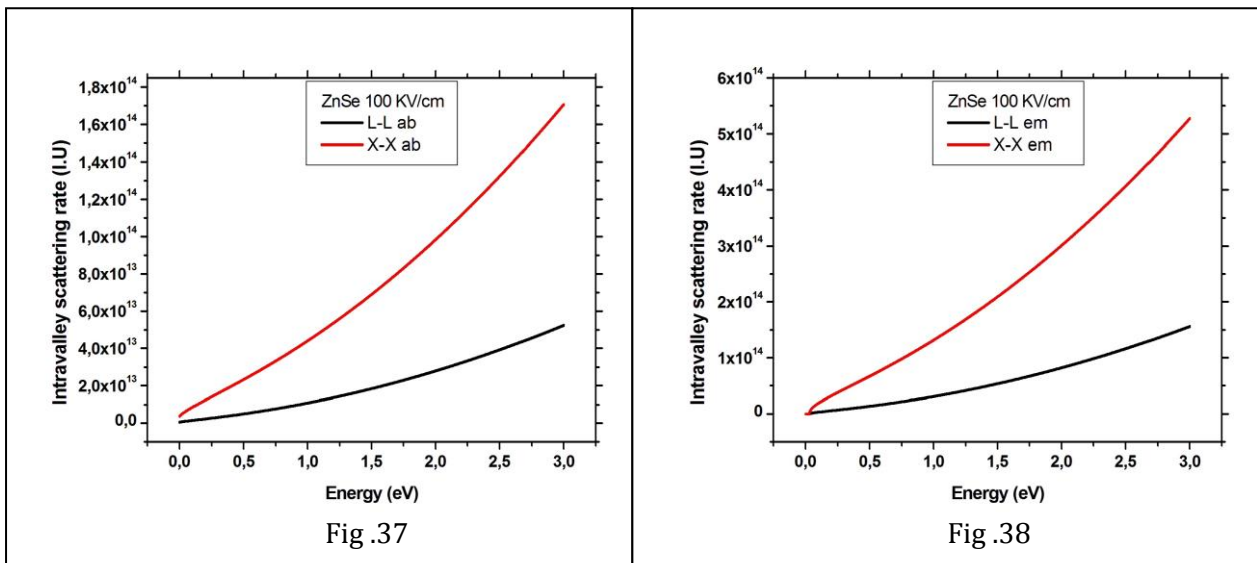
3.3. Les interactions intravallées

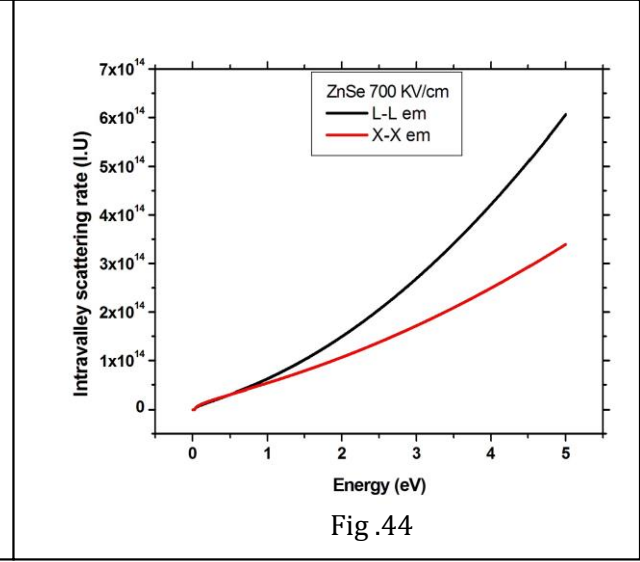
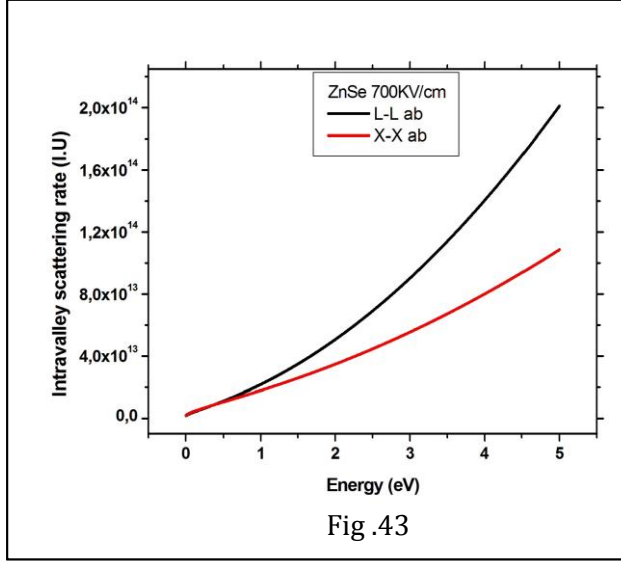
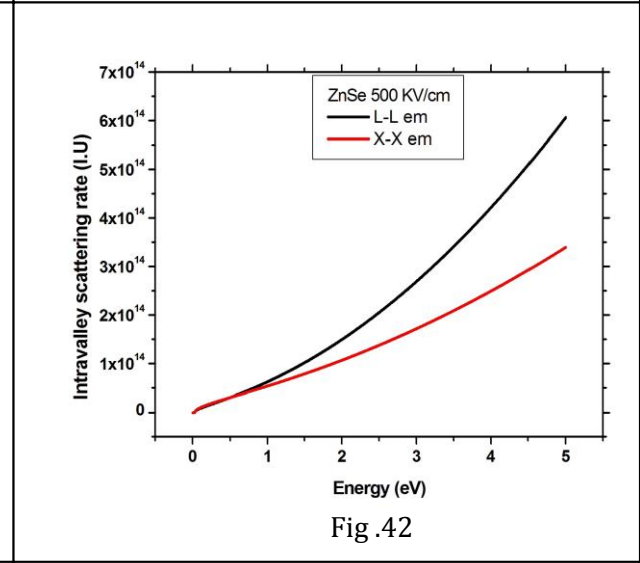
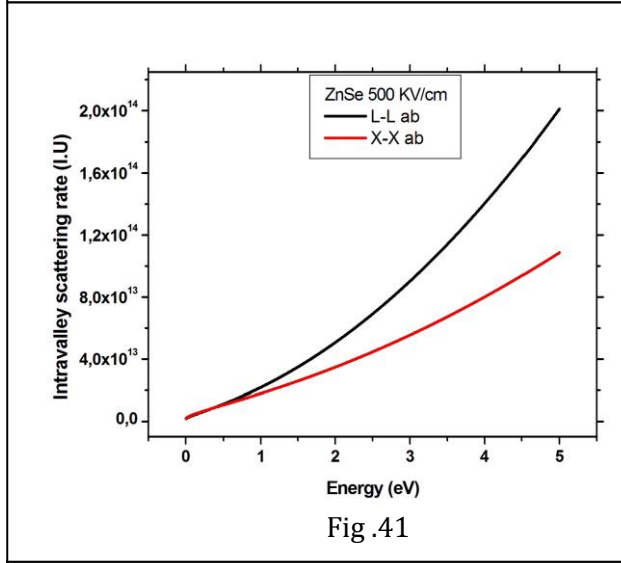
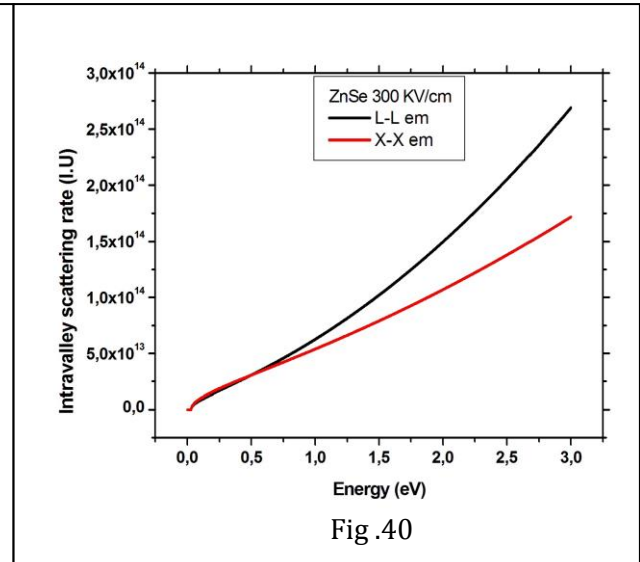
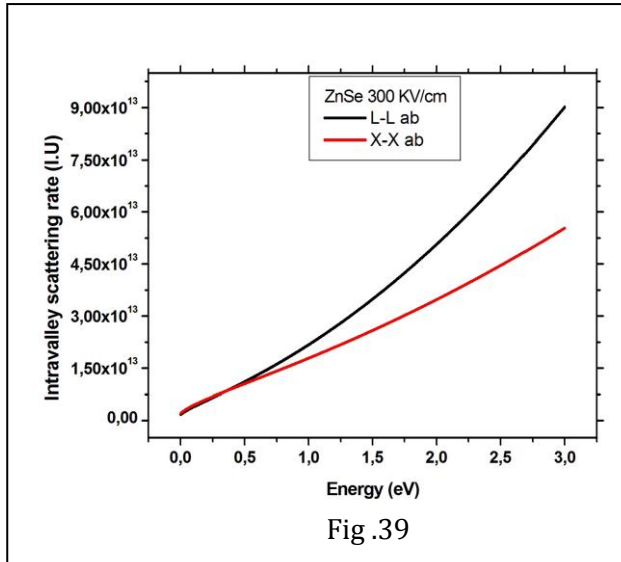
Ces interactions augmentent avec l'énergie des porteurs, et elles sont plus importantes dans les vallées supérieures où la masse effective des électrons est plus grande. Là aussi, les probabilités d'émissions sont plus grandes que celles d'absorptions.

Ces interactions augmentent dans le cas du ZnS car l'énergie de gap ainsi que l'énergie des autres vallées sont plus grandes.

Pour ZnTe, les valeurs de ces interactions sont négligeables, ceci est dû essentiellement aux faibles énergie de gap et les énergies des vallées L et X d'une part et d'autre part au fait que les interactions L- Γ et X- Γ deviennent très importantes, ainsi les électrons dans ce cas ont tendance à revenir à la vallée d'origine Γ .

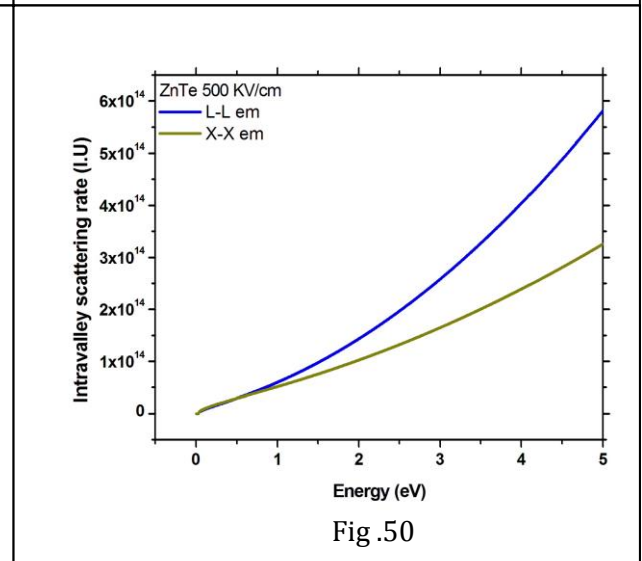
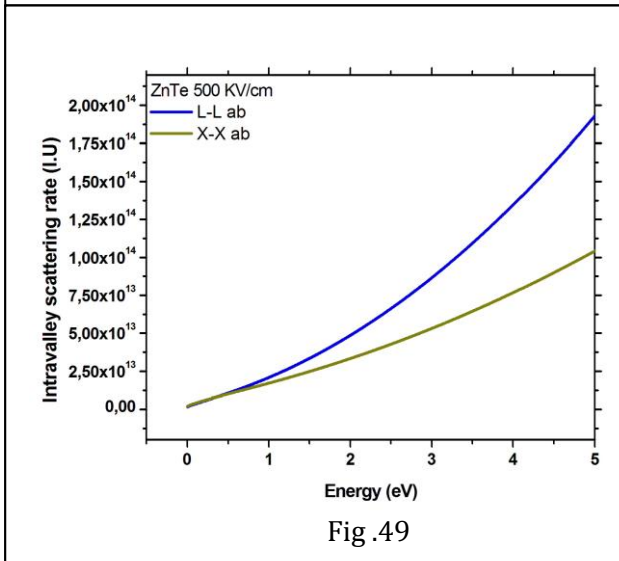
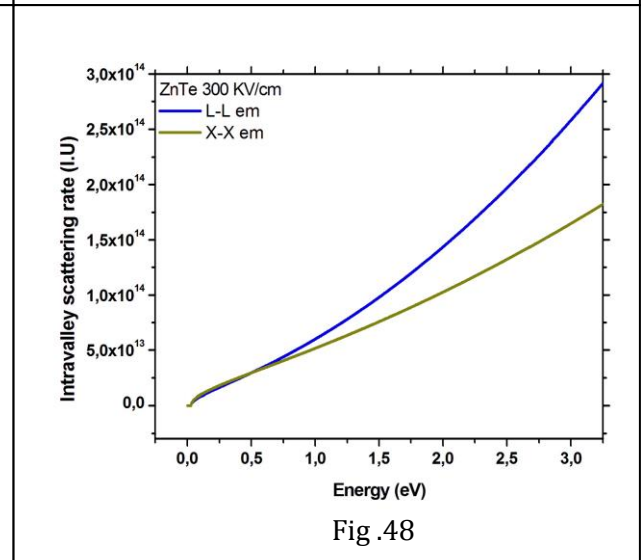
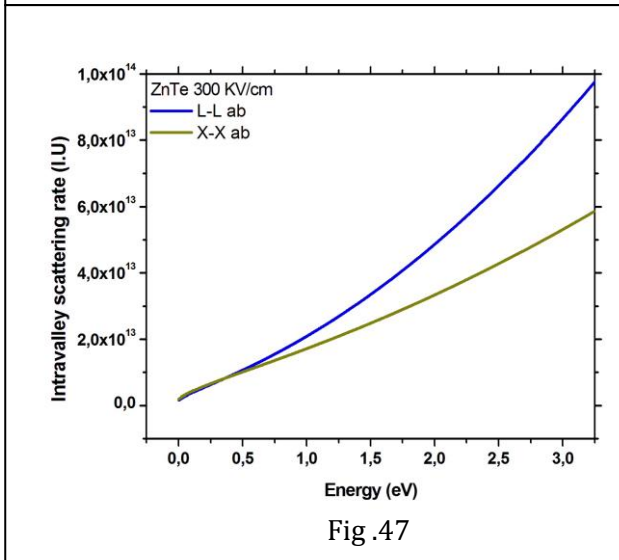
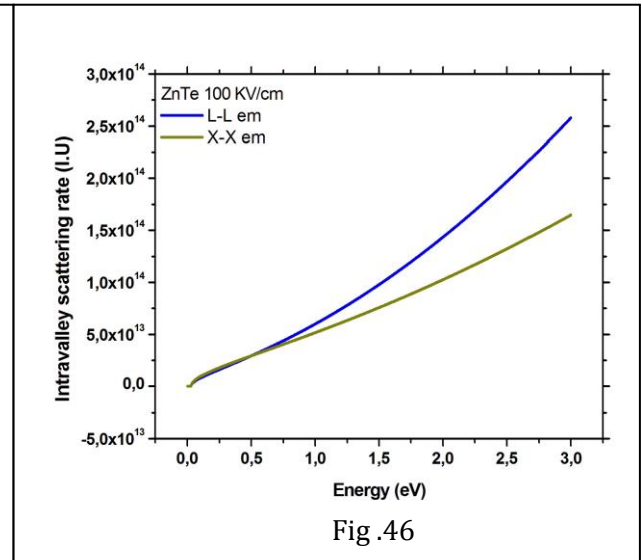
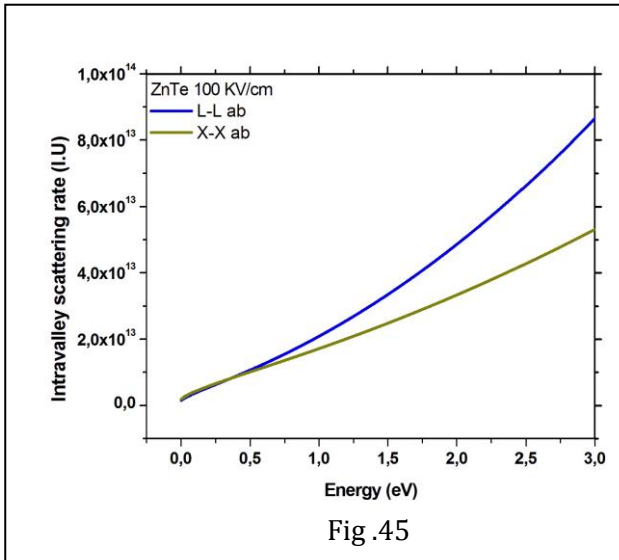
3.3.1. Les interactions intravallées dans ZnSe

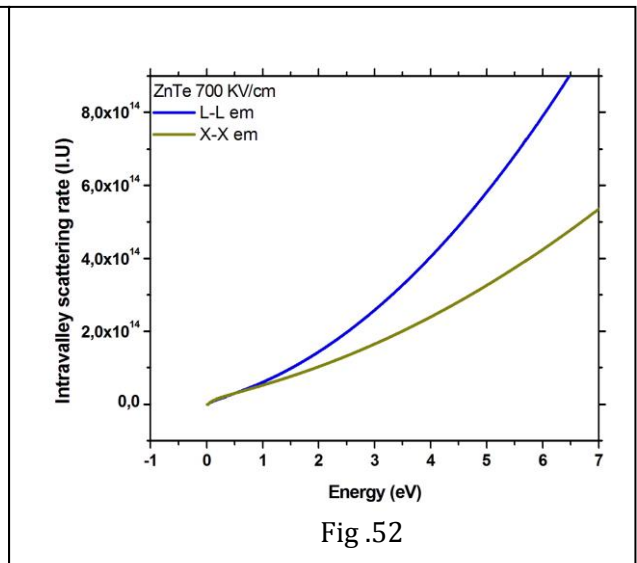
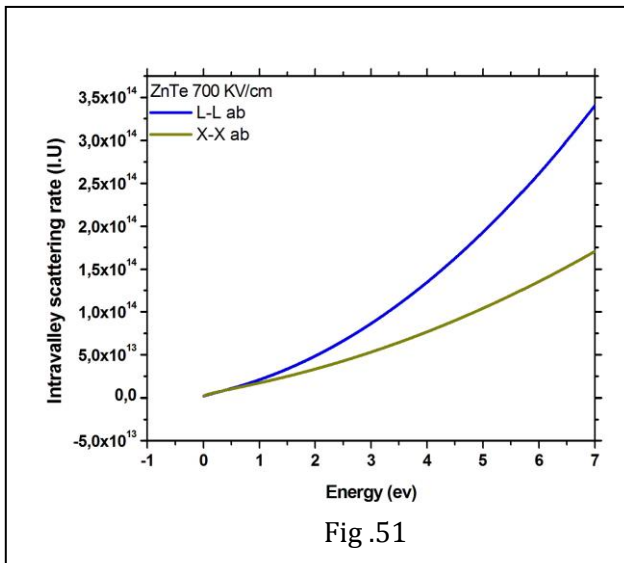




Figures 37 à 44 : Variation du taux d'interactions intravallées avec l'énergie des électrons dans le ZnSe en absorption et en émission et ceci pour différentes valeurs du champ électrique.

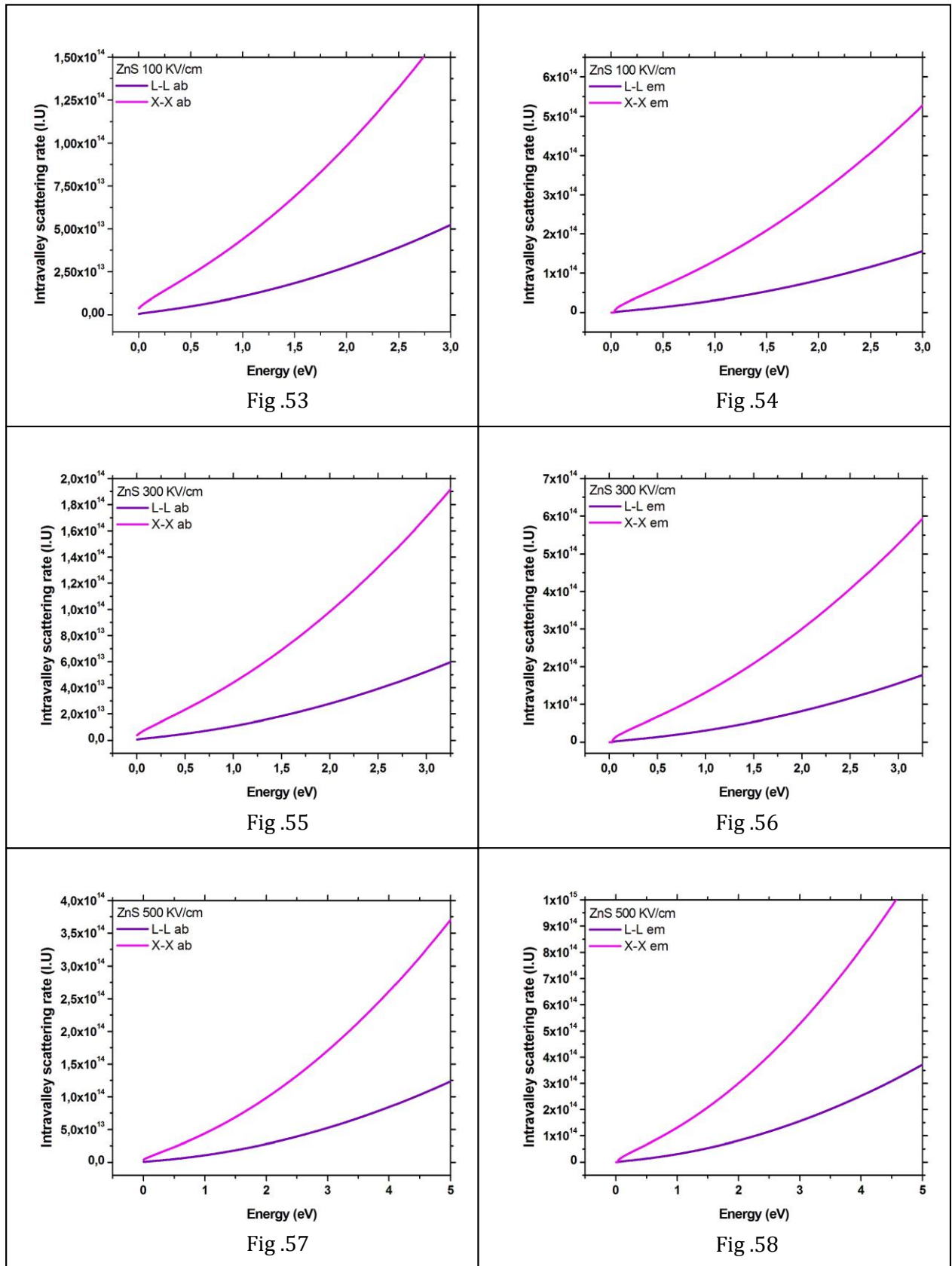
3.3.2. Les interactions intravallées dans ZnTe

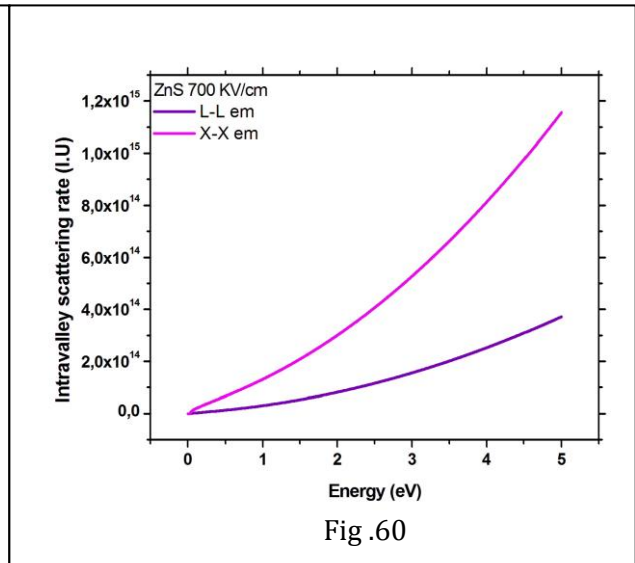
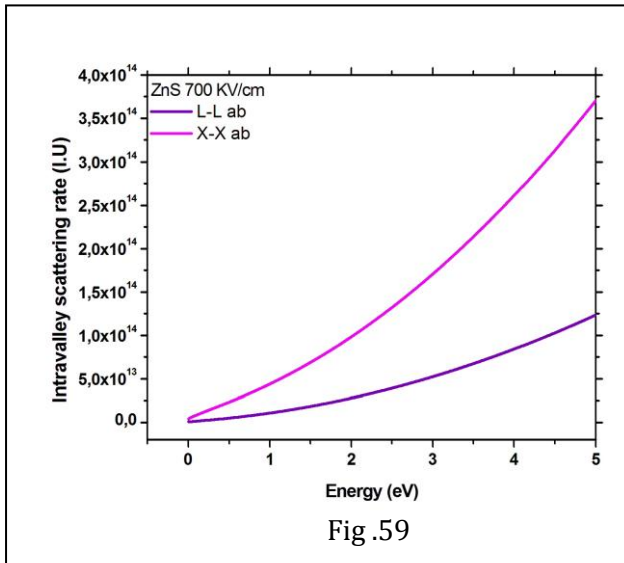




Figures 45 à 52: Variation du taux d'interactions intravallées avec l'énergie des électrons dans le ZnTe en absorption et en émission et ceci pour différentes valeurs du champ électrique.

3.3.3. Les interactions intravallées dans ZnS



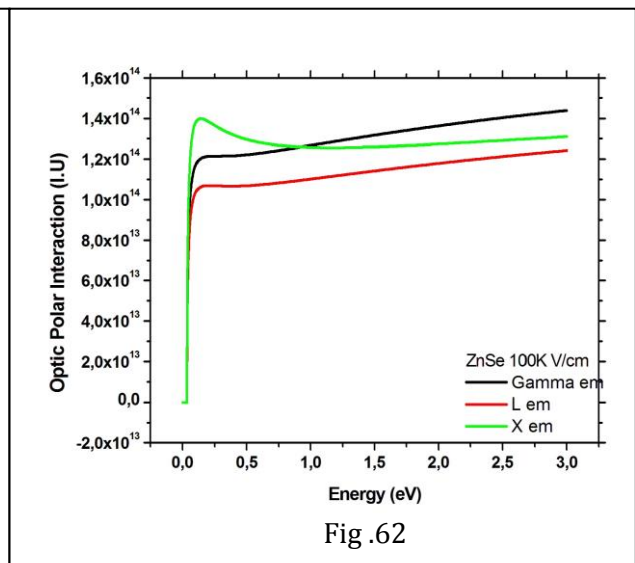
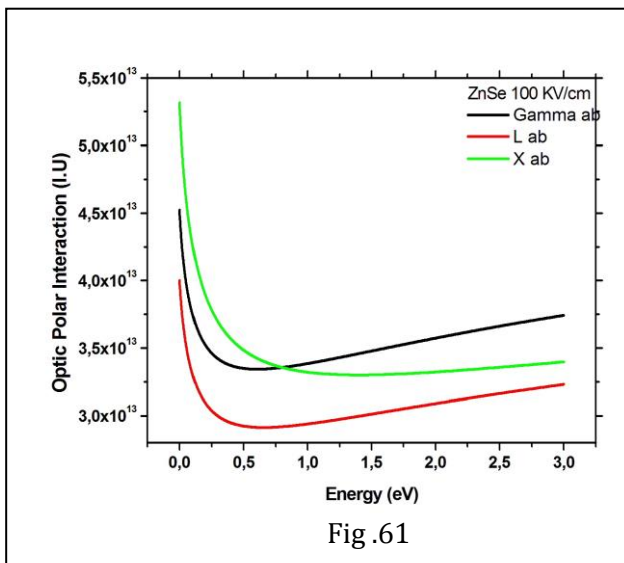


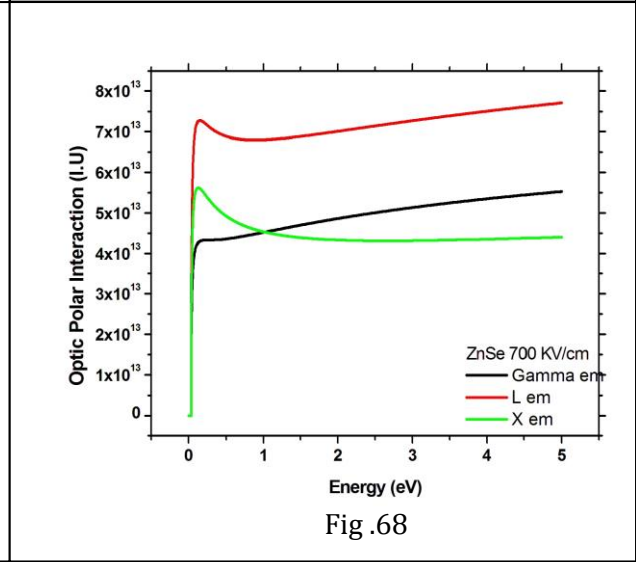
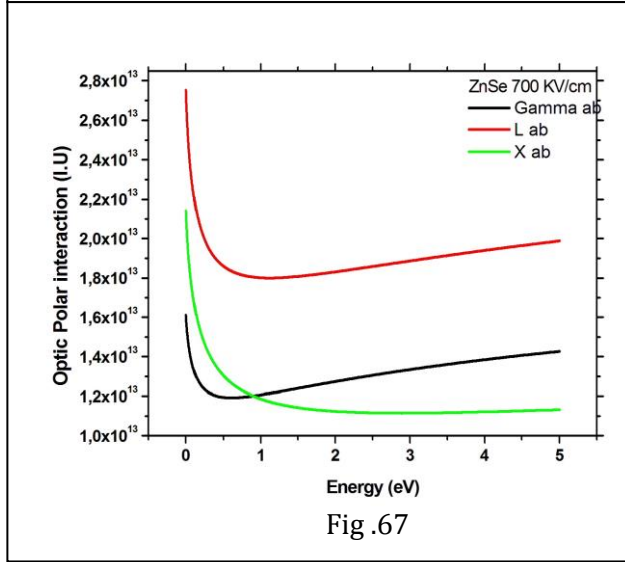
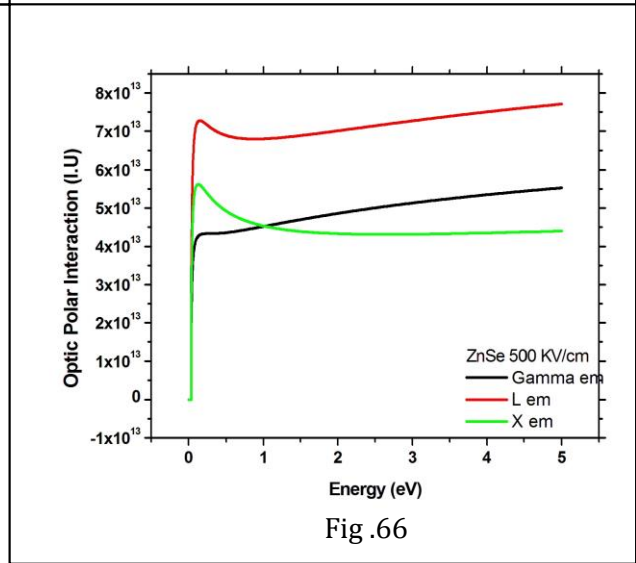
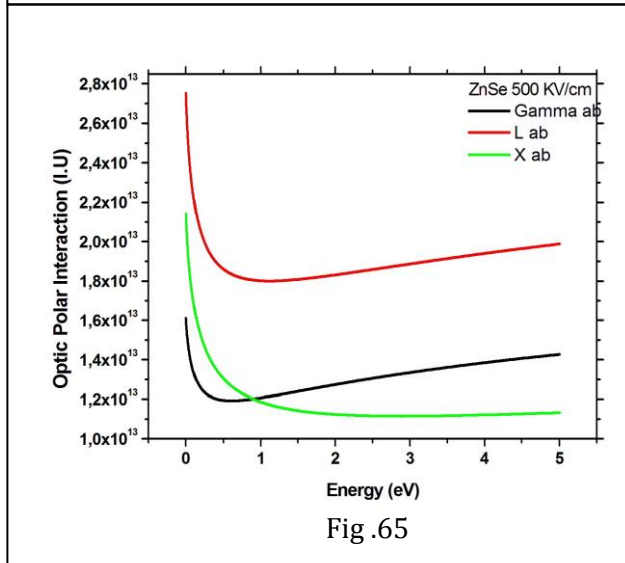
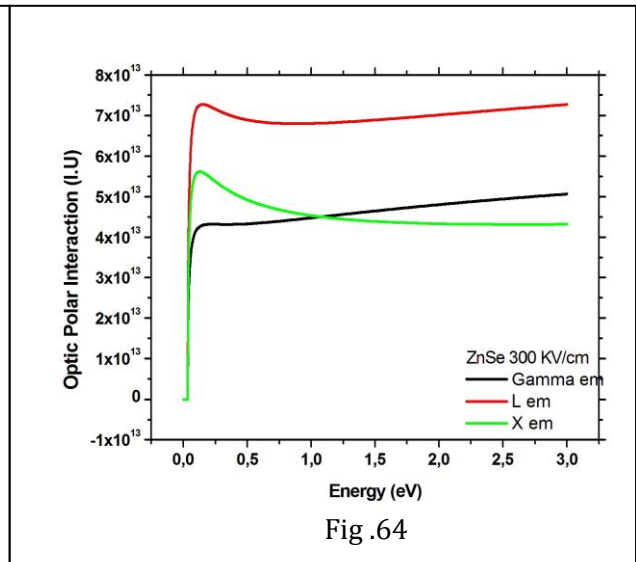
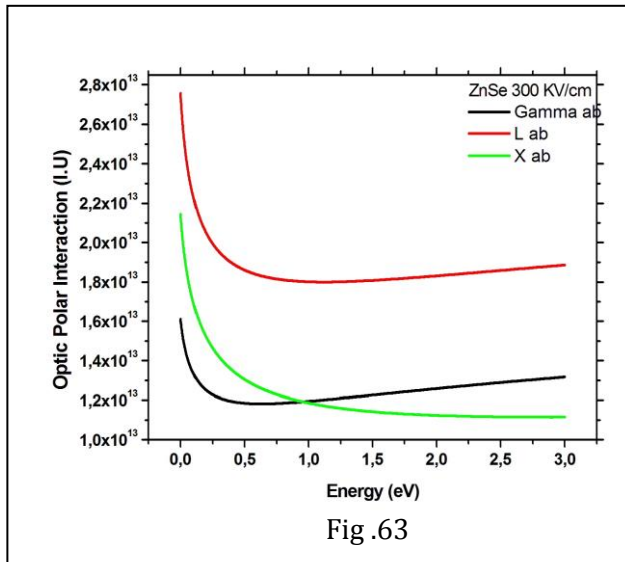
Figures 53 à 60: Variation du taux d'interactions intravallées avec l'énergie des électrons dans le ZnS en absorption et en émission et ceci pour différentes valeurs du champ électrique.

3.4. Les interactions optiques polaires

La nature électrostatique de l'interaction favorise la diffusion, alors ce mécanisme est fortement anisotrope. Pour des énergies d'électrons élevées, le taux de diffusion optique polaire diminue avec l'augmentation de l'énergie.

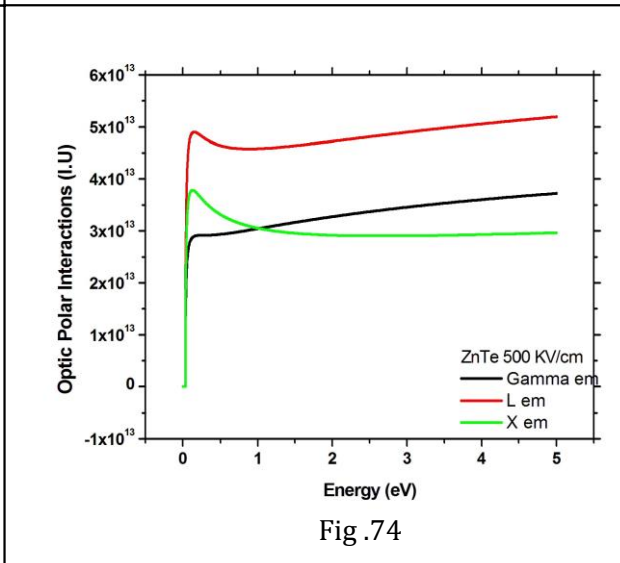
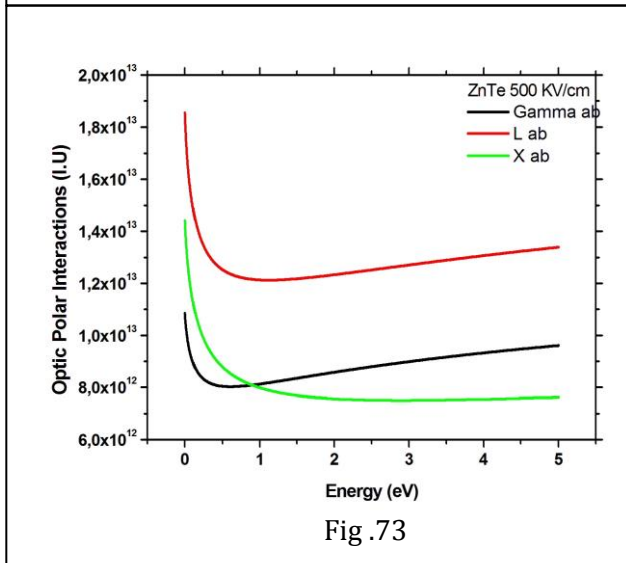
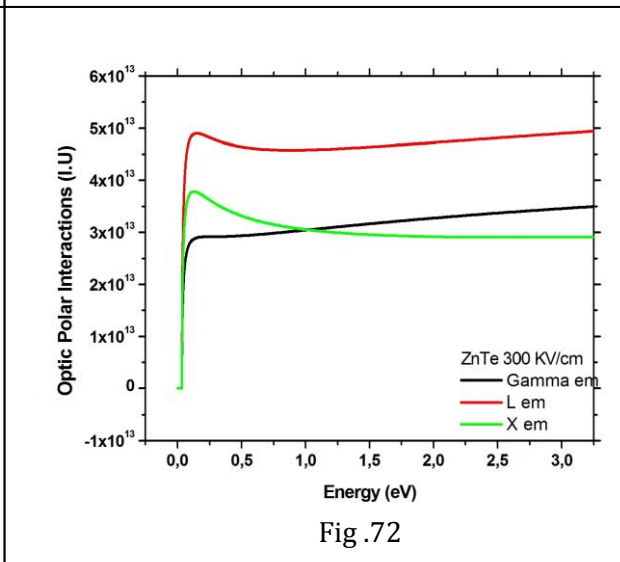
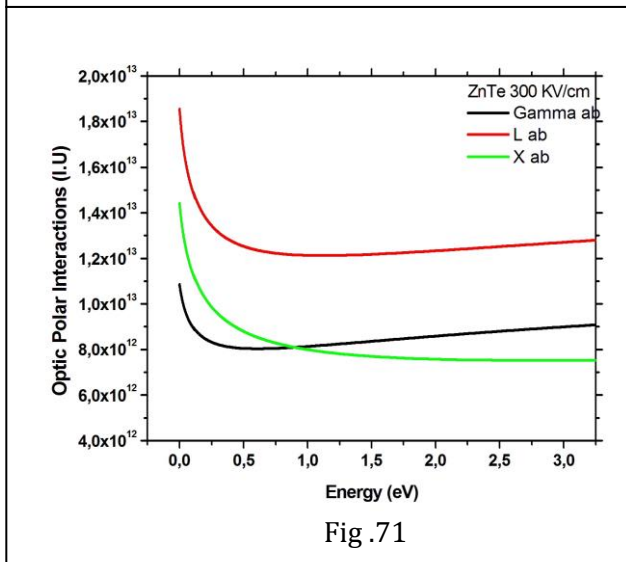
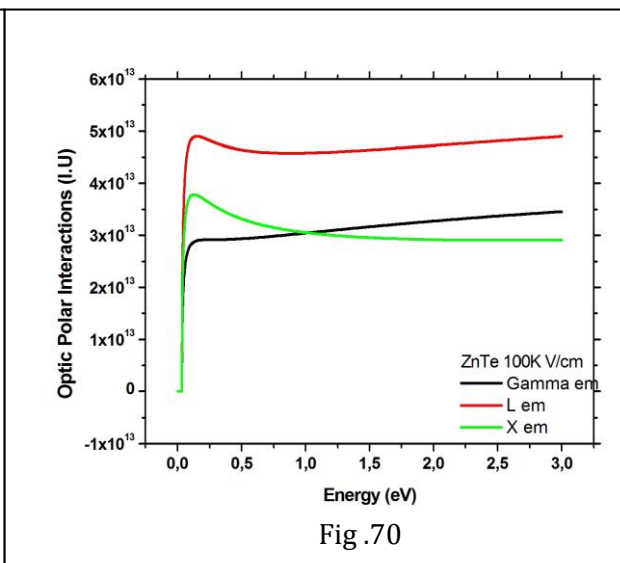
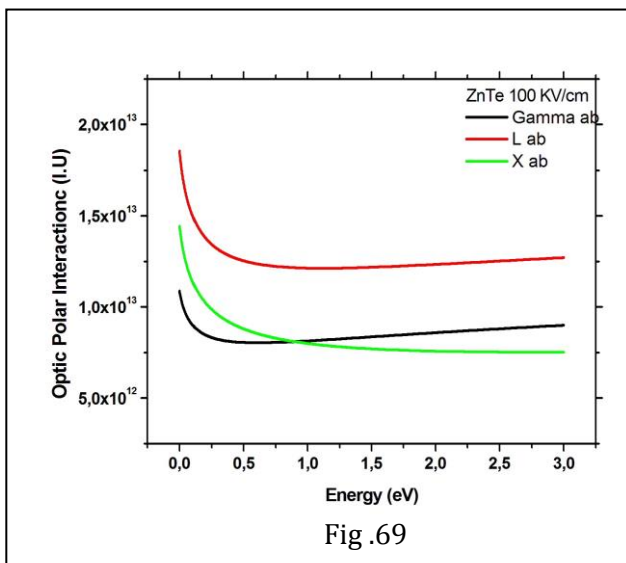
3.4.1. Les interactions optiques polaires dans ZnSe

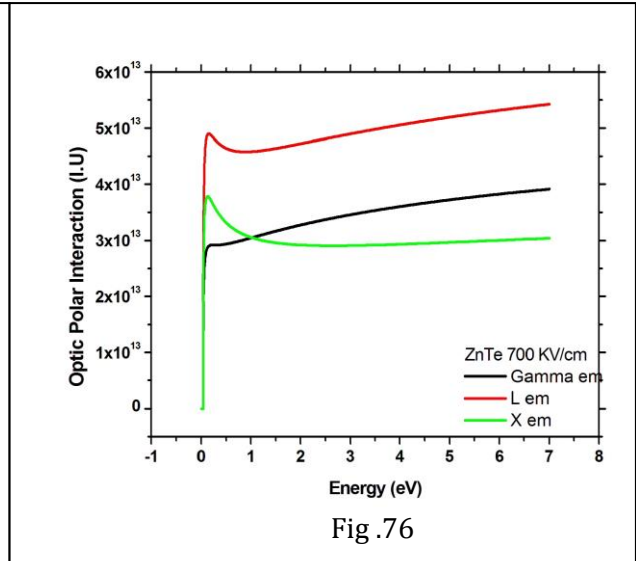
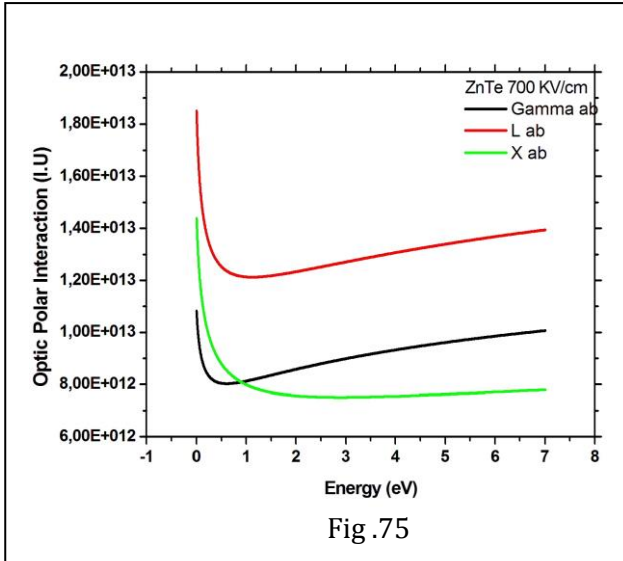




Figures 61 à 68: Variation du taux d'interactions à phonons optiques polaires avec l'énergie des électrons dans le ZnSe en absorption et en émission et ceci pour différentes valeurs du champ électrique.

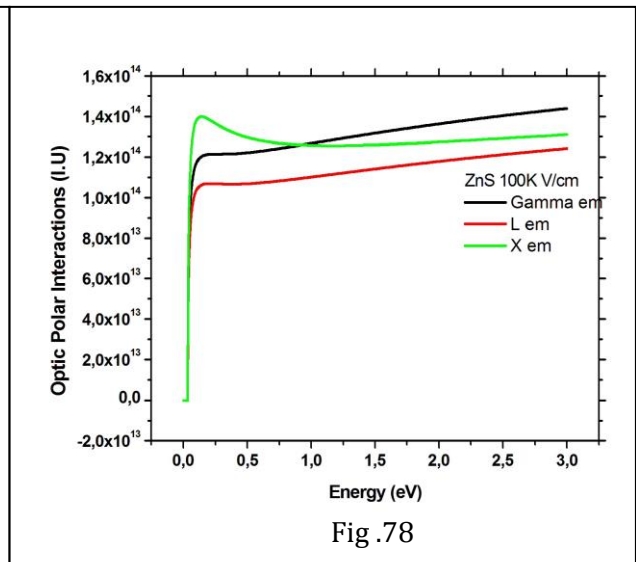
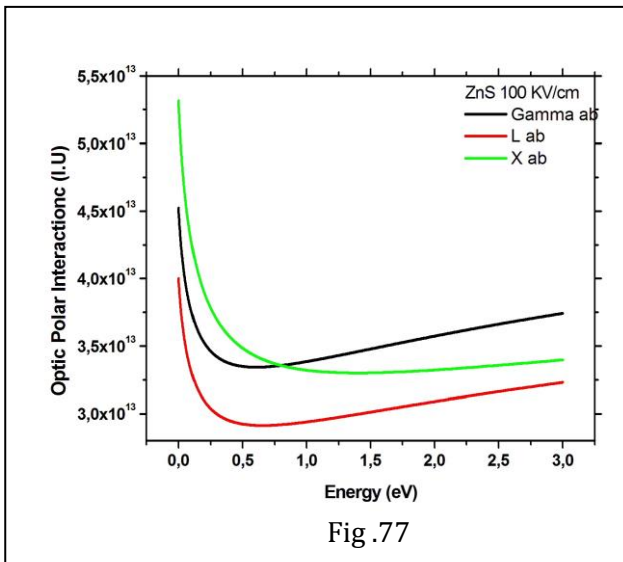
3.4.2. Les interactions optiques polaires dans ZnTe

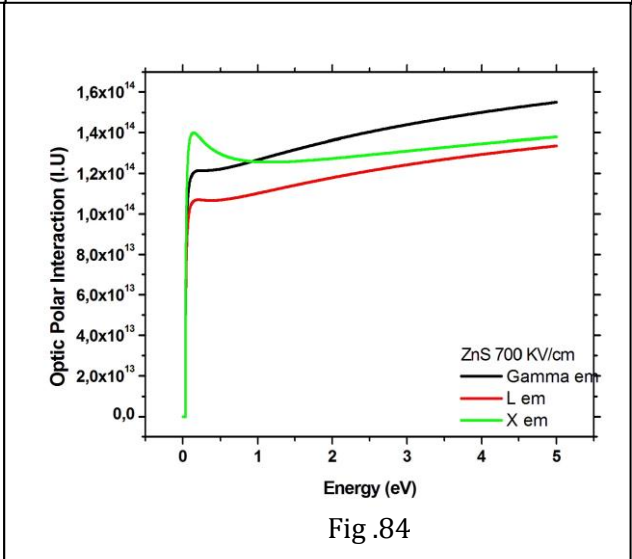
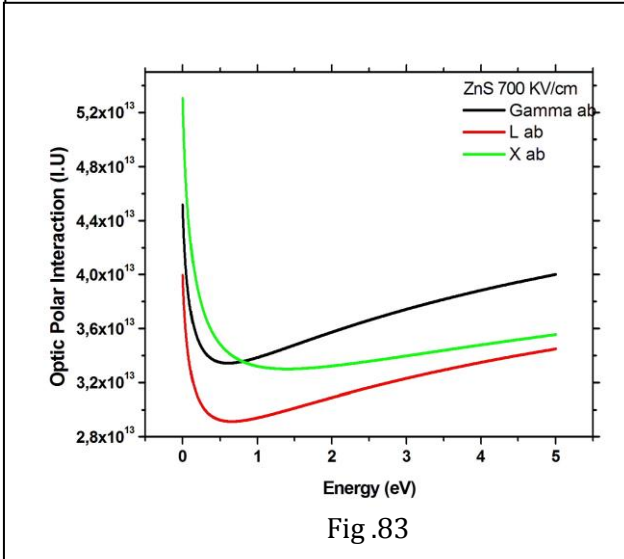
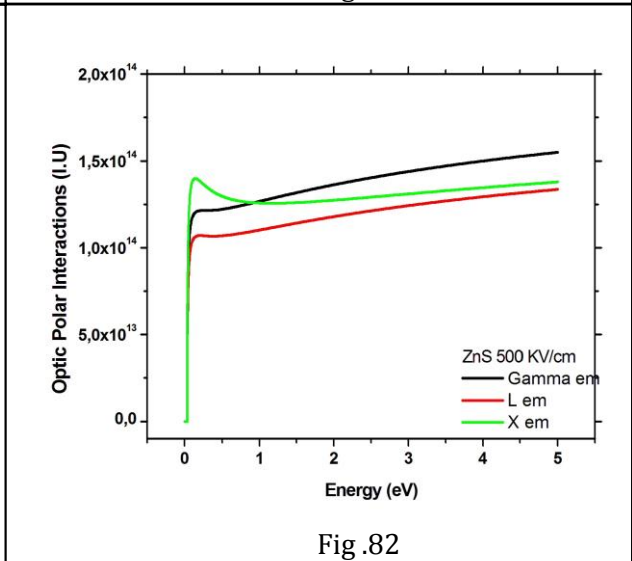
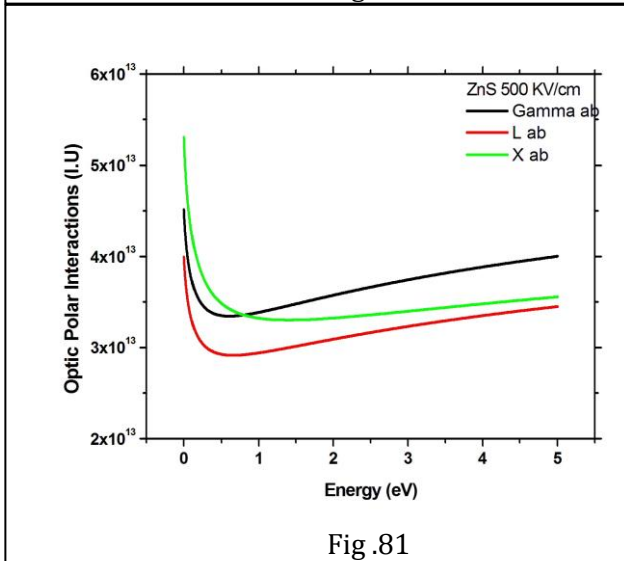
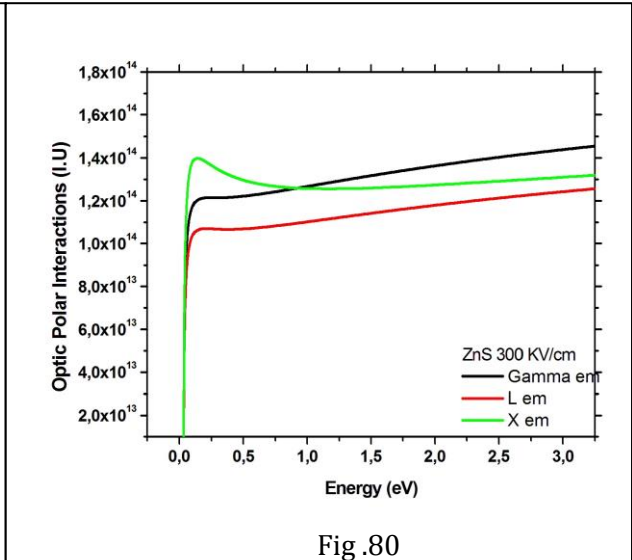
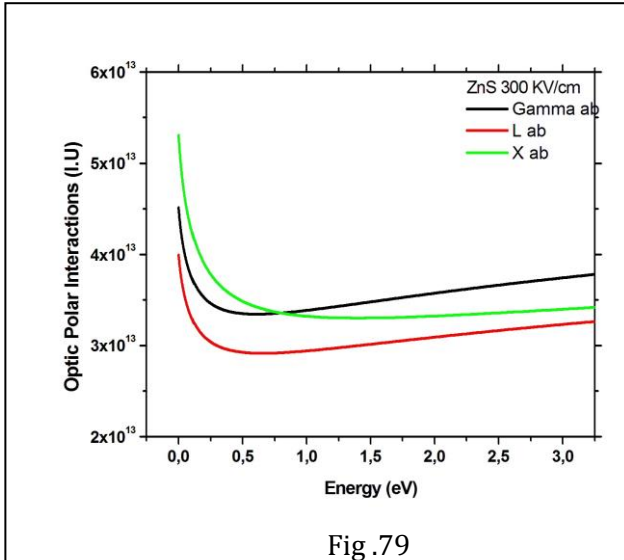




Figures 69 à 76: Variation du taux d'interactions à phonons optiques polaires avec l'énergie des électrons dans le ZnTe en absorption et en émission et ceci pour différentes valeurs du champ électrique.

3.4.3. Les interactions optiques polaires dans ZnS





Figures 77 à 84: Variation du taux d'interactions à phonons optiques polaires avec l'énergie des électrons dans le ZnS en absorption et en émission et ceci pour différentes valeurs du champ électrique.

4. Les Propriétés de transport

4.1. Propriétés de transport du ZnSe

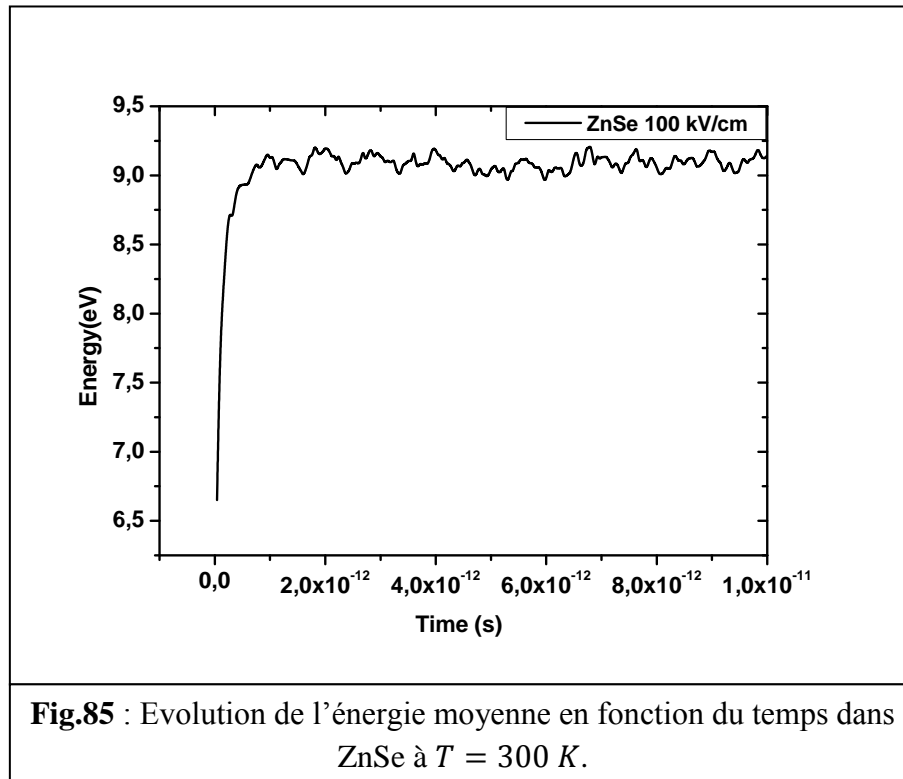


Fig.85 : Evolution de l'énergie moyenne en fonction du temps dans ZnSe à $T = 300 K$.

Nous présentons sur la figure 85 l'énergie moyenne des porteurs dans ZnSe en fonction du temps à température de réseau $T = 300 K$ et pour un champ électrique égale à $100 eV/cm$, et sur la figure 86 l'énergie moyenne en fonction du temps pour différentes valeurs de champ électrique à la même température dans ZnSe. Les courbes ont la même forme. On remarque que pour de forts champs électriques les porteurs acquièrent des énergies plus élevées pour les mêmes conditions de température. En comparant les courbes, on remarque que les porteurs atteignent des énergies autant plus élevées que le champ est fort pour la même température. L'énergie atteint une valeur d'environ $9,1 eV$ pour $E = 100 eV/cm$. Notons également que deux phases existent. Dans la première phase, les porteurs sont rapidement accélérés et l'énergie est quasi-linéaire. En ce moment les

collisions sont de plus en plus nombreuses, conduisant à une propagation de la distribution d'énergie. Par la suite, dans la seconde phase, les porteurs se stabilisent, car les électrons perdent leur énergie lors des collisions.

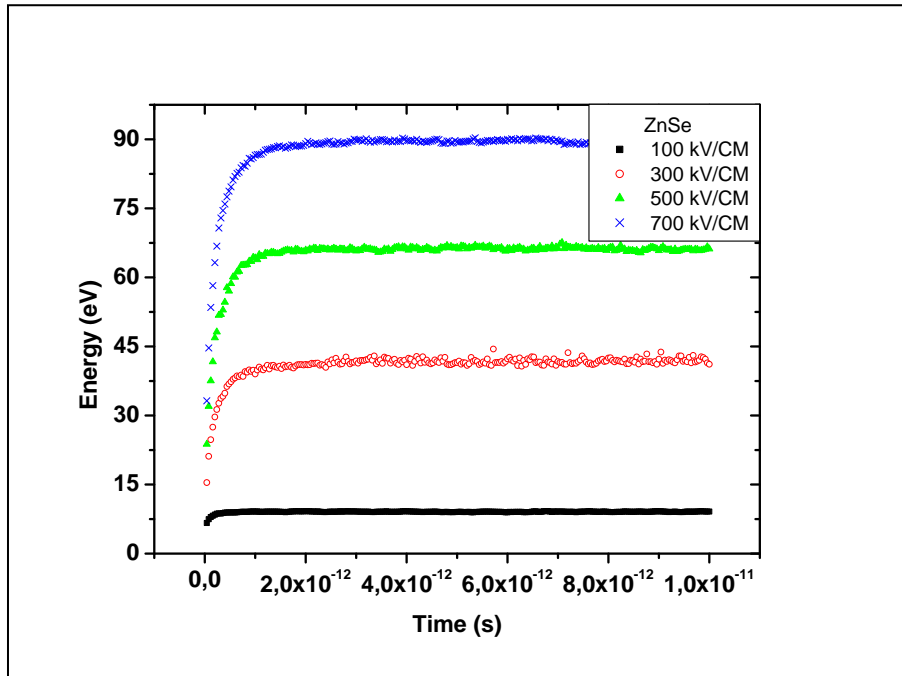


Fig.86 : Comparaison de l'évolution de l'énergie moyenne en fonction du temps dans ZnSe pour plusieurs valeurs du champ électrique à $T = 300 K$.

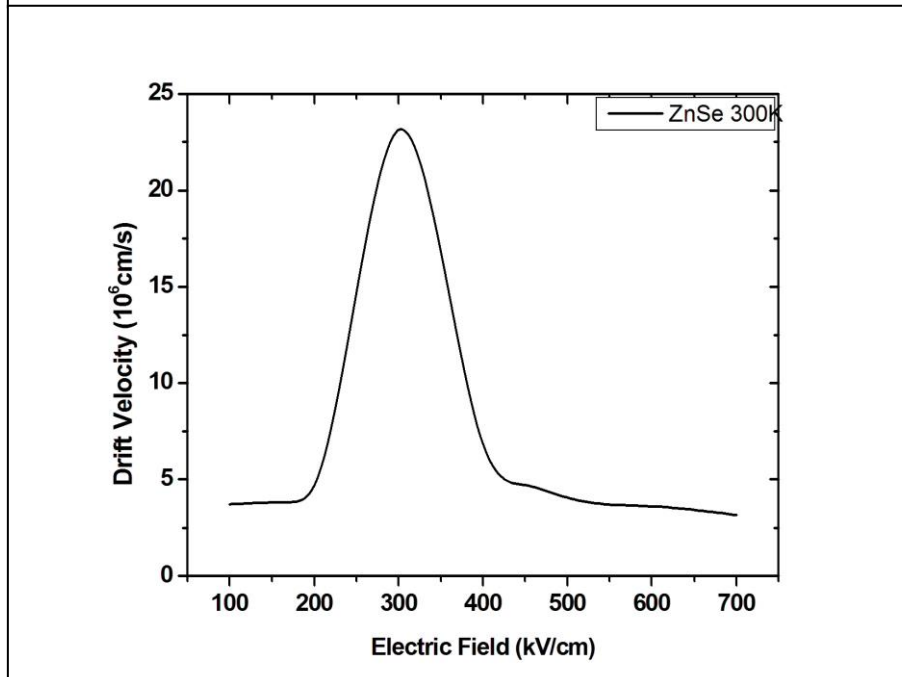


Fig .87 : Evolution de la vitesse de dérive en fonction du champ électrique à $T = 300 K$

La courbe de la figure 87 représente la variation de la vitesse de dérive en fonction du champ électrique à $T = 300 K$ dans ZnSe. La courbe montre l'existence de trois phases: une augmentation rapide et linéaire de la vitesse de dérive suivie d'un pic d'environ $3,3 \cdot 10^7 \text{ cm/s}$ à $E = 300 \text{ Ev/cm}$, puis la diminution de la vitesse, jusqu'à saturation. En fait, les porteurs sont dans la vallée centrale Γ . Pendant les phases de vol libre, ces derniers sont soumis à l'influence du champ électrique et sont donc accélérés en raison de la faible valeur de la masse effective, et en conséquence, ils acquièrent de l'énergie. Atteignant un seuil, ces porteurs perdent leur vitesse et leur énergie dans les collisions. A cause des interactions, les électrons sont en mesure de gagner en énergie suffisamment pour transférer de la vallée Γ aux vallées latérales L ou X. Une fois les porteurs sont dans les vallées plus élevées, leur énergie va converger vers une valeur stationnaire puisque toute l'énergie acquise par les électrons va compenser l'énergie qu'ils ont cédée au réseau cristallin. Ainsi, la vitesse de dérive diminue jusqu'à saturation. Le phénomène de survitesse a été étudié par de nombreux auteurs avec des simulations spécifiques de type Monte Carlo. Il apparaît dans les semiconducteurs lorsqu'ils sont soumis à un champ électrique, des effets transitoires à prendre en compte existent lorsque des électrons sont soumis à un champ électrique. La distribution des porteurs dans ce cas est une distribution de Maxwell Boltzmann. L'effet du champ électrique a pour effet immédiat déplaçant les points représentatifs des électrons dans la même direction dans l'espace des vecteurs d'ondes.

Figure 88 montre l'évolution du coefficient de diffusion dans ZnSe en fonction du temps à champ fort ($E = 300 \text{ kV/cm}$). La forme de la courbe présente une pente raide, ce qui traduit à la fois, l'action d'accélération du champ, renforcée par la faible valeur de la masse effective dans la vallée centrale, et l'anisotropie due aux interactions

dominantes qui favorisent la vitesse dans la direction parallèle au champ. Après cette première phase, la forme des courbes montre une saturation. Ceci s'explique par le fait que les électrons ont transféré vers les vallées latérales, et ont subi des interactions et donc, ont perdu leur excès d'énergie, d'où la saturation.

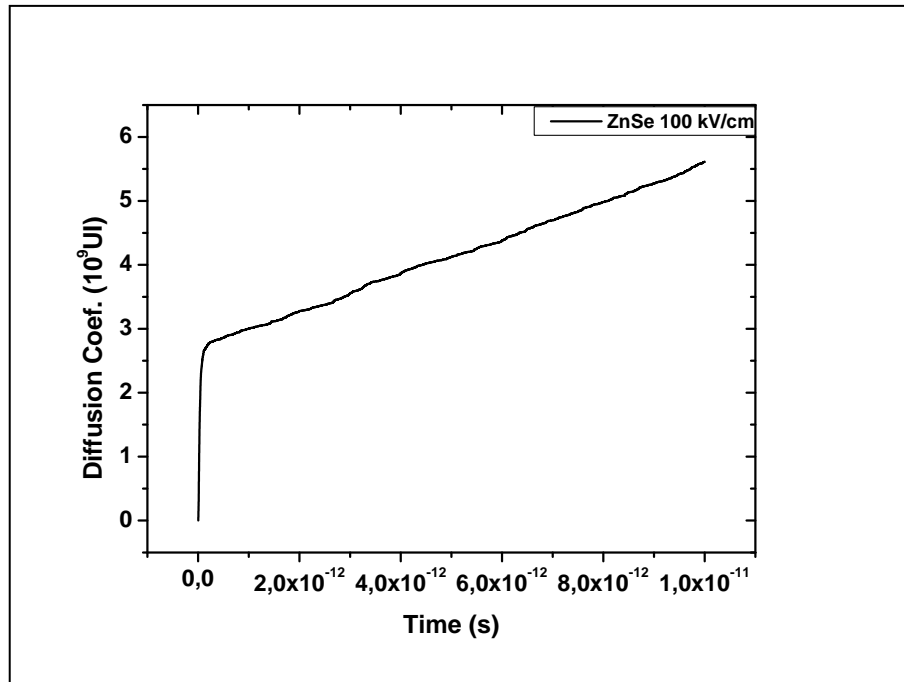


Fig. 88 : Evolution du coefficient de diffusion en fonction du temps dans ZnSe pour $E=100 \text{ kV/cm}$.

Les définitions du coefficient de diffusion par l'étalement d'un paquet et par le bruit, qui n'impliquent aucune condition sur le champ électrique, sont appliquées également pour champ fort. Les méthodes Monte Carlo permettent de contourner les difficultés que présente la définition d'un coefficient de diffusion pour les champs forts. Ces définitions tiennent compte à la fois de la distribution des électrons dans les vallées, et les transferts.

4.2. Propriétés de transport du ZnTe :

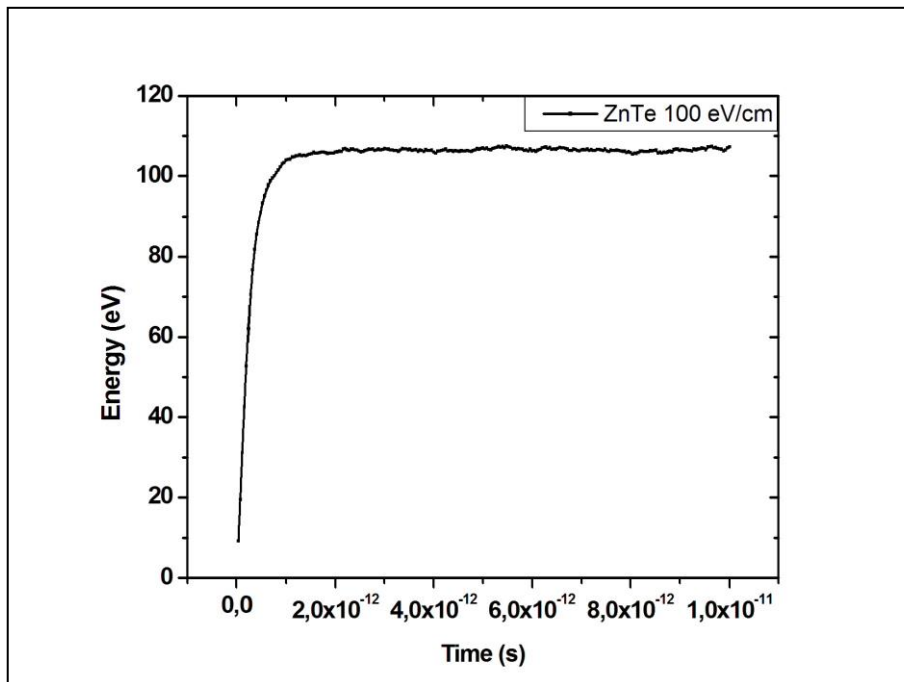


Fig.89 : Evolution de l'énergie moyenne en fonction du temps dans ZnTe pour un champ électrique $E=200$ Ev/cm à $T = 300$ K.

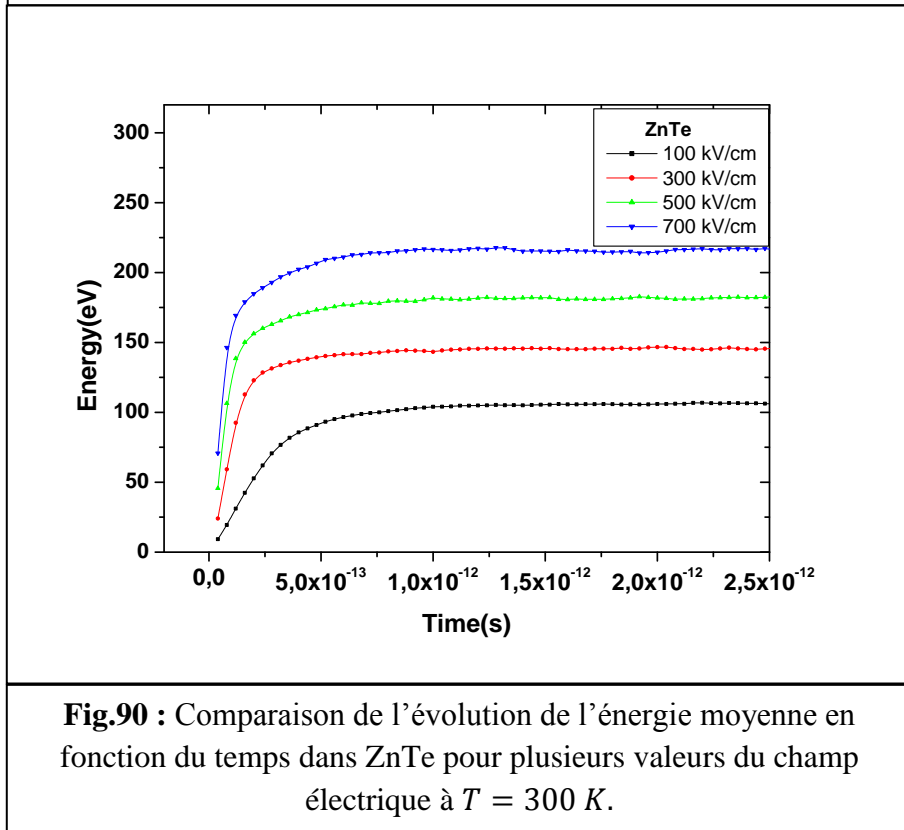


Fig.90 : Comparaison de l'évolution de l'énergie moyenne en fonction du temps dans ZnTe pour plusieurs valeurs du champ électrique à $T = 300$ K.

Nous présentons sur la figure 89 l'énergie moyenne des porteurs dans ZnTe en fonction du temps à température de réseau $T = 300 K$ et pour un champ électrique égale à $100 eV/cm$. Sur la figure 90, nous présentons l'énergie moyenne en fonction du temps pour différentes valeurs de champ électrique à la même température dans ZnTe. Les courbes ont la même forme et sont similaires à celles obtenues dans ZnSe. En comparant les courbes, on remarque que les porteurs atteignent des énergies autant plus élevées que le champ est fort pour la même température. L'énergie atteint une valeur d'environ $90 eV$ pour $E = 100 eV/cm$. Notons également que les deux phases précédemment décrites existent. Dans la première phase, les porteurs sont rapidement accélérés et l'énergie est quasi-linéaire. Dans la seconde phase, les porteurs se stabilisent, car les électrons perdent leur énergie lors des collisions.

La courbe de la figure 91 représente la variation de la vitesse de dérive en fonction du champ électrique à $T = 300 K$ dans ZnTe. La courbe montre l'existence de trois phases: une augmentation rapide et linéaire de la vitesse de dérive suivie d'un pic d'environ $2,3 \cdot 10^7 cm/s$ à $E = 100 K$, puis la diminution de la vitesse, jusqu'à saturation.

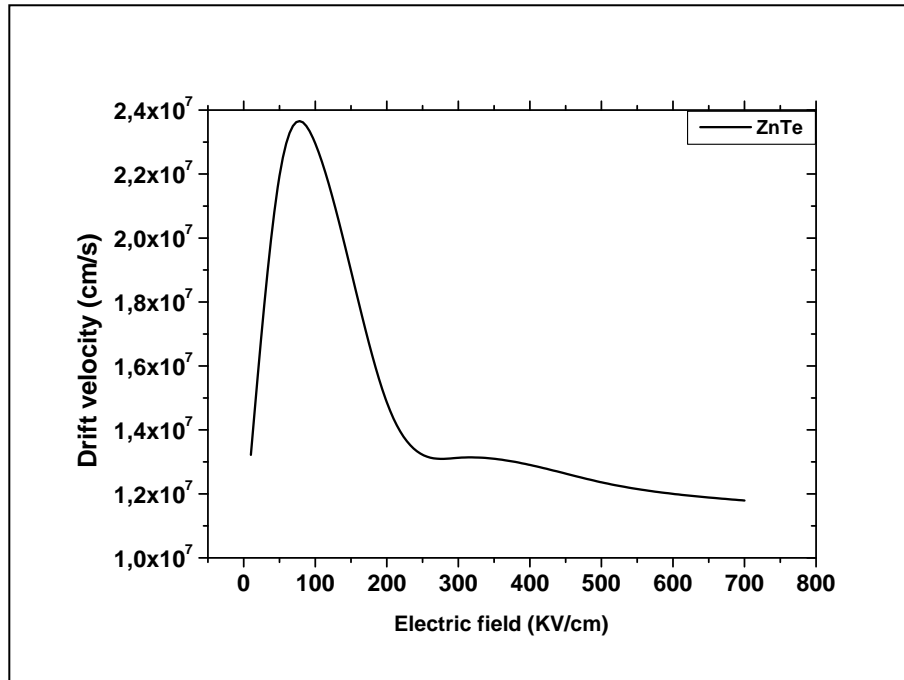


Fig .91 : Evolution de la vitesse de dérive en fonction du champ électrique à $T = 300 K$

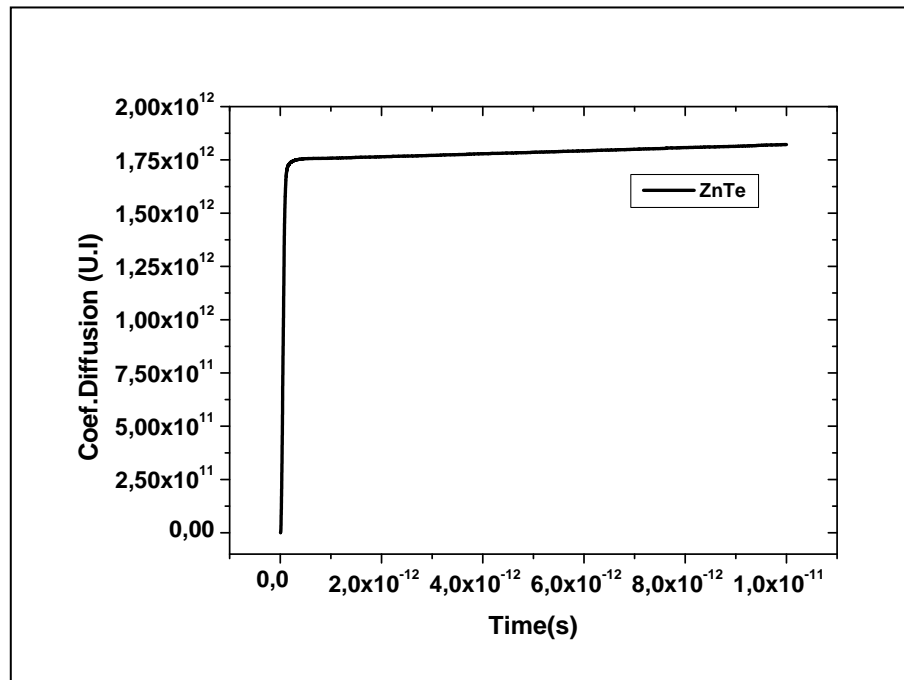


Fig .92 : Evolution du coefficient de diffusion dans ZnTe en fonction du temps à $T = 300 K$.

La figure 92 montre l'évolution du coefficient de diffusion dans ZnTe en fonction du temps à champ fort ($E = 300 \text{ kV/cm}$). La forme de la courbe présente une pente raide puis une saturation, ce qui traduit, l'action d'accélération du champ, renforcée par la faible valeur de la masse effective dans la vallée centrale, et l'anisotropie due aux interactions dominantes qui favorisent la vitesse dans la direction parallèle au champ. La saturation de la courbe traduit le transfert des électrons vers les vallées latérales.

4.3. Propriétés de transport du ZnS :

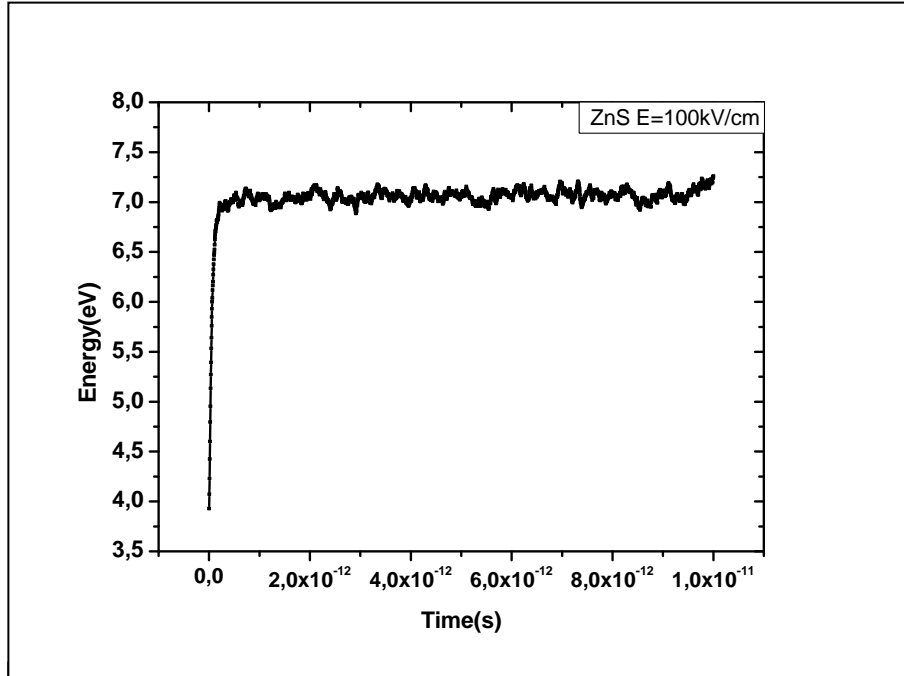


Fig.93 : Evolution de l'énergie moyenne en fonction du temps dans ZnS pour un champ électrique $E = 100 \text{ eV/cm}$ à $T = 300 \text{ K}$.

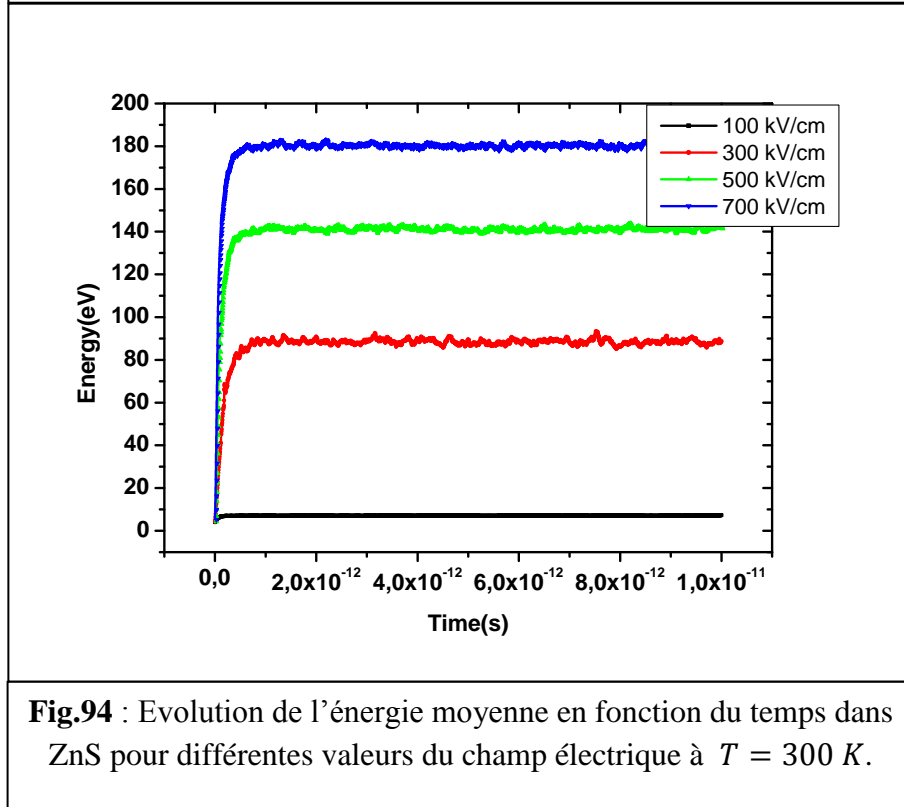
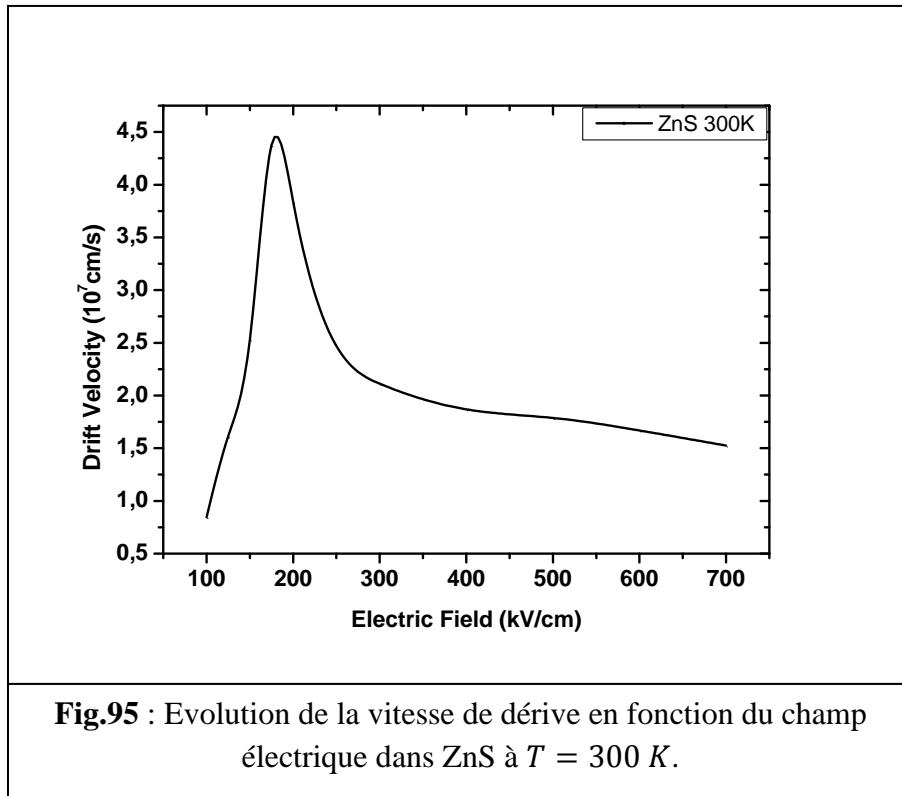


Fig.94 : Evolution de l'énergie moyenne en fonction du temps dans ZnS pour différentes valeurs du champ électrique à $T = 300 \text{ K}$.

Nous présentons sur la figure 93 l'énergie moyenne des porteurs dans ZnS en fonction du temps à température de réseau $T = 300 K$ et pour un champ électrique égale à $100 eV/cm$. Sur la figure 94, nous présentons l'énergie moyenne en fonction du temps pour différentes valeurs de champ électrique à la même température dans ZnS. Les courbes ont la même forme et sont similaires à celles obtenues dans ZnSe et ZnTe. En comparant les courbes, on remarque que les porteurs atteignent des énergies autant plus élevées que le champ est fort pour la même température. L'énergie atteint une valeur d'environ $7 eV$ pour $E = 100 eV/cm$. Notons également que les deux phases précédemment décrites existent. Dans la première phase, les porteurs sont rapidement accélérés et l'énergie est quasi-linéaire. Dans la seconde phase, les porteurs se stabilisent, car les électrons perdent leur énergie lors des collisions.

La courbe de la figure 95 représente la variation de la vitesse de dérive en fonction du champ électrique à $T = 300 K$ dans ZnS. La courbe montre l'existence de trois phases: une augmentation rapide et linéaire de la vitesse de dérive suivie d'un pic d'environ $4,3 \cdot 10^7 cm/s$ à $E = 100 K$, puis la diminution de la vitesse, jusqu'à saturation.

La figure 96 montre l'évolution du coefficient de diffusion dans ZnS en fonction du temps à champ fort ($E = 300 kV/cm$). La forme de la courbe est décrite précédemment, elle présente une pente raide puis une saturation, ce qui traduit, l'action d'accélération du champ, renforcée par la faible valeur de la masse effective dans la vallée centrale, et l'anisotropie due aux interactions dominantes qui favorisent la vitesse dans la direction parallèle au champ. La saturation de la courbe traduit le transfert des électrons vers les vallées latérales.



4.4. Discussion et interprétation

Les grandeurs moyennes directement accessibles dans la simulation sont l'énergie, la vitesse de dérive et la répartition des populations dans chaque vallée.

Parmi ces grandeurs, la vitesse de dérive en régime stationnaire est le paramètre qui a été le plus largement traité, aussi bien numériquement qu'expérimentalement [13-15].

C'est pourquoi l'accent sera mis particulièrement sur la détermination de la vitesse. Le système est soumis à l'action d'un champ continu appliqué à l'instant $t = 0$, il est nécessaire pour étudier le régime stationnaire d'attendre un temps de simulation τ supérieur à la durée du régime transitoire pour que le système acquière un régime dont les caractéristiques moyennes sont indépendantes du temps. En s'appuyant sur le principe que l'ensemble des états occupés par un seul électron au cours du temps est représentatif des états qu'occuperait un ensemble d'électron à un instant donné et en conséquence la moyenne sur le temps et la moyenne sur un ensemble sont identiques.

Ainsi les grandeurs telles que la vitesse et l'énergie seront calculées à partir de moyennes relatives à un seul électron et réalisées sur le temps.

En particulier, la composante v_i de la vitesse d'un électron suivant une direction est définie à chaque instant par :

$$v_i = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_r}{\partial k_i}$$

Compte tenu de la relation qui lie l'énergie relative de l'électron au module de son vecteur d'onde, l'expression de la vitesse instantanée s'exprime :

$$\vec{v}(t) = \frac{\hbar \vec{k}(t)}{m^* m_0 (1 + 2\alpha \varepsilon_r(t))}$$

C'est cette expression qui est calculée à chaque pas puis moyennée sur le temps pour obtenir la vitesse moyenne en régime stationnaire.

Le pas qui a été choisi est de 10^{-15} s pour n'importe qu'elle valeur de champ électrique.

En champ faible, l'électron est en vallée centrale. Pendant les phases de vol libre, il est fortement accéléré sous l'effet du champ électrique à cause de la faible valeur de la masse effective. Cette accélération ainsi que la forte anisotropie qui caractérise les interactions optiques polaires prédominantes contribuent à ce que la mobilité soit élevée en champ faible. Quand le champ devient assez élevé, l'électron peut transférer et peupler les vallées hautes. Sa vitesse moyenne est fortement limitée. En effet, en vallée supérieure, la valeur de la masse effective est plus grande. En plus, seul l'excès de l'énergie sur le niveau de la vallée intervient en tant qu'énergie cinétique. Ces deux facteurs réduisent considérablement le module de la vitesse, pendant le séjour en vallée supérieure. D'autre part, les interactions intervallées sont prédominantes. A cause de leur effet de « random », l'ensemble des vitesses après transferts n'apporte qu'une faible contribution à la vitesse moyenne de l'électron.

Avec l'augmentation du champ électrique qui favorise le peuplement de vallées supérieures, multiplie les limites de la vitesse moyenne qui décroissent en fonction du champ, à partir d'un champ qui est le champ critique. Cette décroissance est très rapide sur quelques kV/cm au dessus du champ critique, ce qui entraîne une mobilité différentielle. Les interactions intervallées jouent un rôle sur la vitesse de l'électron ce qui justifie l'importance des valeurs des potentiels de déformation intervallée sur la détermination de la mobilité électronique.

Quand le champ est très fort, l'électron séjourne en vallée haute la plupart du temps ; sa vitesse en fonction du champ diminue lentement vers une vitesse de saturation qui ne dépend que de

l'énergie du phonon intervallée équivalente échangé dans la vallée les plus hautes où l'électron séjourne constamment.

La fig.3 représente la vitesse $V(E)$ obtenue avec la simulation MC qui se base sur le modèle 3 vallées. Ceci permet de définir la mobilité statique dans le ZnSe intrinsèque, le champ de seuil de 500 kV/cm environ. On observe une valeur de la vitesse pic très vite atteinte de l'ordre de $2-4 \cdot 10^7$ cm/s correspondant au transfert en vallée haute depuis la vallée centrale des porteurs.

En champ fort le modèle fait intervenir des types d'interactions intervallées appropriées à la structure de bande du matériau.

La décroissance de la vitesse moyenne liée à la présence d'une concentration en impuretés est remarquable en champ faible et autour du champ critique. La déformation de la caractéristique $V_d(E)$ liée à la présence d'impuretés est caractérisée par une diminution de la mobilité en champ faible, par une décroissance de la vitesse pic et une légère augmentation du champ critique. Quand le champ augmente l'effet des impuretés est négligeable.

Il existe dans la littérature de nombreuses références aussi bien expérimentales [I] que numériques [II] relatives à la caractéristique $V_d(E)$.

La particularité de la méthode MC présentée réside dans l'utilisation du self-scattering. Elle diffère en ceci des autres méthodes qui font généralement intervenir la discrétisation du temps en pas réguliers.

Cette méthode présente en outre le grand avantage de son exploitation facile pour détermination des grandeurs instantanées définies sur un ensemble d'électron, on connaît l'état de chaque électron et on peut déterminer alors directement le comportement moyen instantané de l'ensemble des électrons.

L'étude qui a été menée jusqu'à présent ne concerne que les caractéristiques de transport en régime stationnaire des semiconducteurs ZnSe, ZnTe et ZnS, or dans l'emploi de ces

matériaux dans les composants ou en logique ultrarapide, les porteurs sont soumis à des champs qui varient rapidement dans le temps. Il est donc intéressant de connaître leur comportement en régime non-stationnaire et en particulier d'étudier les conditions pour lesquelles la vitesse est maximale.

Dans la simulation, il n'existe aucune condition relative au champ électrique appliqué. Et grâce à la procédure MC, l'évolution des grandeurs telles que l'énergie et vitesse peut être directement obtenue en réalisant les moyennes à chaque pas sur l'ensemble des électrons. La simulation donc peut facilement rendre compte de tout effet non-stationnaire dans le matériau.

Les conditions de transport propres à la vallée centrale sont caractérisées par une faible masse effective et par des interactions dont les effets anisotropes favorisent la direction du champ. Dans ces conditions, et sous l'effet du champ fort, les électrons sont littéralement propulsés en masse vers les énergies élevées où ils acquièrent de fortes vitesses. Il leur devient alors possible de transférer vers les vallées latérales. Mais à cause de la valeur de la probabilité de transfert qui limite à chaque pas le nombre des électrons transférant effectivement, ils restent en vallée centrale une fraction importante d'électrons légers rapidement portés à des vitesses de plus en plus élevées. Ce processus est responsable du phénomène de "survitesse" qui apparaît de façon transitoire et pendant lequel la vitesse moyenne de l'ensemble des électrons peut prendre des valeurs largement supérieures à la vitesse en régime stationnaire. L'effet de survitesse disparaît quand il y a plus en vallée centrale d'électrons excédentaires par rapport aux conditions d'équilibre relatives au champ fort appliqué.

La réponse à un champ de 100 kV/cm d'un paquet de 20 000 électrons initialement en vallée centrale en champ nul est représentée sur les figures fig.87, fig.91, et fig.95, pour les trois différents

matériaux. La survitesse enregistrée présente une valeur maximale de $3,2 \times 10^7$ dans le *ZnSe*, $2,4 \times 10^7$ dans le *ZnTe* et $4,4 \times 10^7$ dans le *ZnS*, durant quelques ps environ. Notons que lorsque la vitesse passe par sa valeur maximale, l'énergie présente un phénomène de relaxation sur toute la durée du régime transitoire, au bout de quelques ps, le régime stationnaire est à nouveau atteint pour chacune de ces grandeurs. Ces résultats ne dépendent pas des conditions initiales pourvu que le champ soit assez faible pour que tous les électrons soient initialement en vallée centrale, par contre l'amplitude et la durée de la survitesse dépendent de la valeur du champ fort appliqué.

L'amplitude de ce phénomène de survitesse détermine les performances en fréquence et en puissance de composants réalisés à partir de ce matériau étudié, et conditionnée par sa durée ; le temps de transfert des électrons sur une distance donnée. Il serait donc intéressant de déterminer les paramètres physiques qui favorisent la survitesse et de comparer le phénomène produit dans le *ZnSe* avec les autres matériaux *ZnTe* et *ZnS*.

L'étude précédente sur la vitesse décrivant les mécanismes responsables du phénomène de survitesse montre que les matériaux qui sont susceptibles présenter de fortes survitesses sont ceux pour lesquels la masse effective est très faible en vallée centrale et l'écart d'énergie entre la vallée centrale et les vallées latérales les plus accessibles, est très élevé de façon à laisser le temps aux électrons d'acquérir de très fortes vitesses avant de transférer. Le tableau I résumant les propriétés physiques des matériaux étudiés dans ce travail, donne leurs valeurs des masses effectives et écarts d'énergie, montre ainsi qu'il faut s'attendre à ce que, dans des conditions de champ identiques, les performances de survitesse de *ZnS* soient meilleures que celles dans le *ZnSe* ou le *ZnTe*.

5. Etude des paramètres en fonction de la température et Comparaison des matériaux

Ce paragraphe est consacré à la description de quelques résultats typiques obtenus concernant les paramètres de 1^{er} ordre, à savoir vitesse de dérive et énergie à différentes conditions de température de réseau $100 \leq T \leq 900 \text{ K}$.

Les résultats présentés ici sont obtenus en appliquant le champ électrique selon la direction Z. Avec cette condition de polarisation, les vallées présentent une parfaite symétrie par rapport à la direction du champ électrique. Il s'en suit que les porteurs seront chauffés par le champ électrique de la même façon, quelle que soit la vallée où ils sont situés.

Les figures 97, 98, et 99 représentent l'évolution de l'énergie moyenne avec l'amplitude du champ électrique à différentes températures. Le comportement est assez différent selon la température du réseau. A $T = 100 \text{ K}$, pour les champs électriques voisins de zéro, l'énergie des porteurs est petite et la distribution est peu étalée. Il en résulte qu'il n'y a aucun porteur susceptible d'émettre des phonons intervallée de haute énergie ; c'est-à-dire aucun porteur dont l'énergie ne soit au moins égale à l'énergie émise dans une collision inélastique. Ceci conduit à une augmentation assez rapide de l'énergie moyenne. Néanmoins quand le champ augmente, l'ensemble des porteurs s'échauffe, la distribution d'énergie s'élargit, le nombre de porteurs susceptibles d'émettre un phonon augmente, et l'accroissement d'énergie moyenne avec le champ électrique sera plus faible. Aux températures de réseau hautes, ce phénomène n'est pas détectable car même en champ faible, la distribution d'énergie des porteurs est assez étalée pour permettre une émission assez importante de phonons très énergétiques englobant tous les types de phonons intervenant dans les collisions.

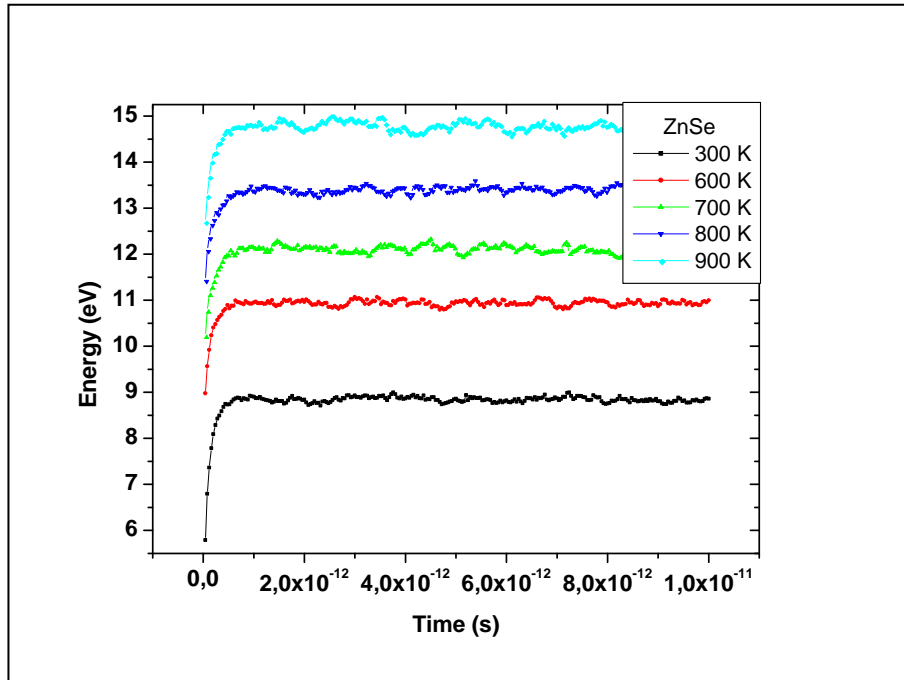


Fig. 97 : L'évolution de l'énergie moyenne en fonction du temps dans ZnSe pour un champ électrique $E = 100 \text{ kV/cm}$ à différentes températures.

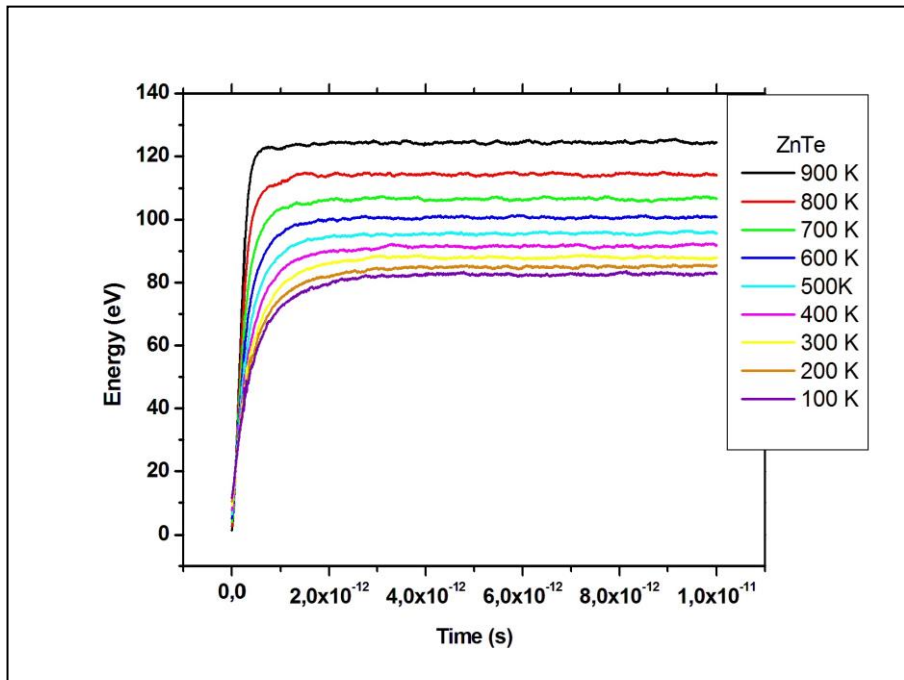
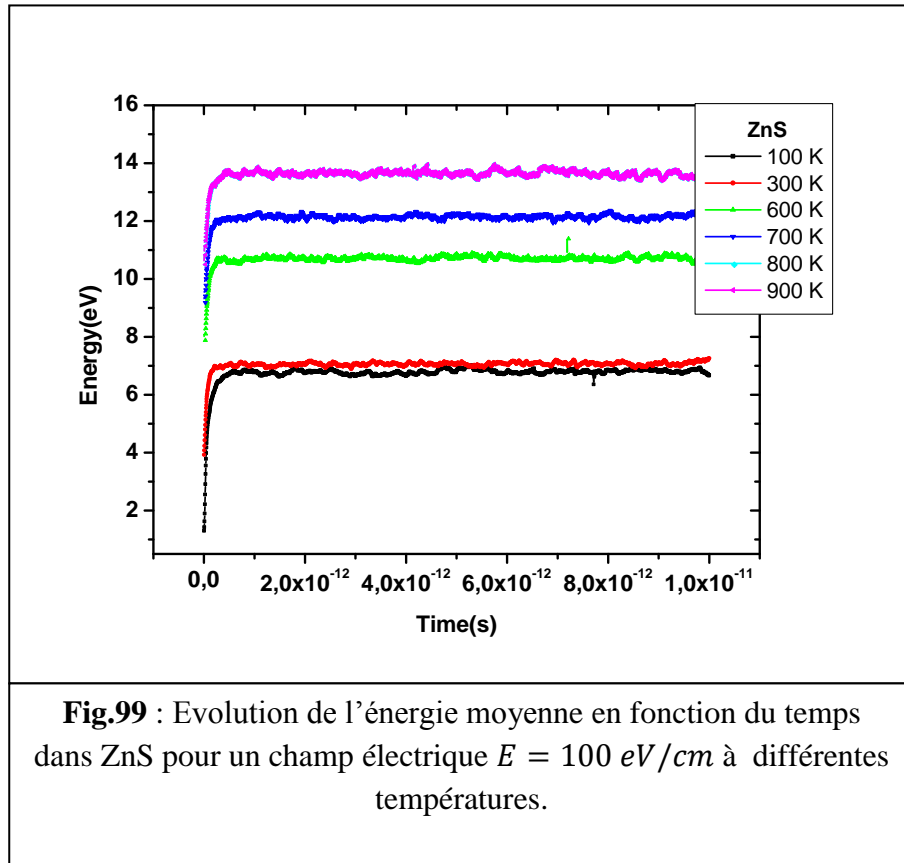


Fig.98 : Evolution de l'énergie moyenne en fonction du temps dans ZnTe pour un champ électrique $E = 100 \text{ eV/cm}$ à différentes températures.



Sur les figures 100, 101 et 102, on remarque l'influence de la température sur la durée et l'amplitude de la survitesse illustrée sur les figures qui représentent l'évolution de vitesse de dérive en réponse à des températures de 100 et 600 K dans ZnSe, ZnTe et ZnS respectivement et qui montrent que la survitesse est d'autant plus élevée et brève que la température est haute.

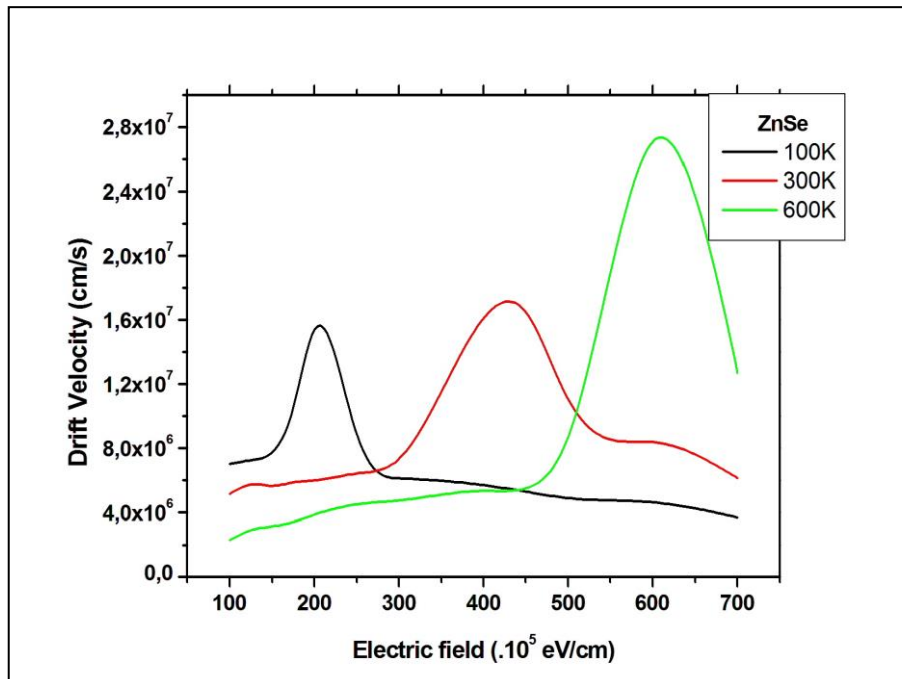


Fig.100 : Evolution de la vitesse de dérive en fonction du champ électrique dans ZnSe à $T = 100, 300 K$ et $600 K$.

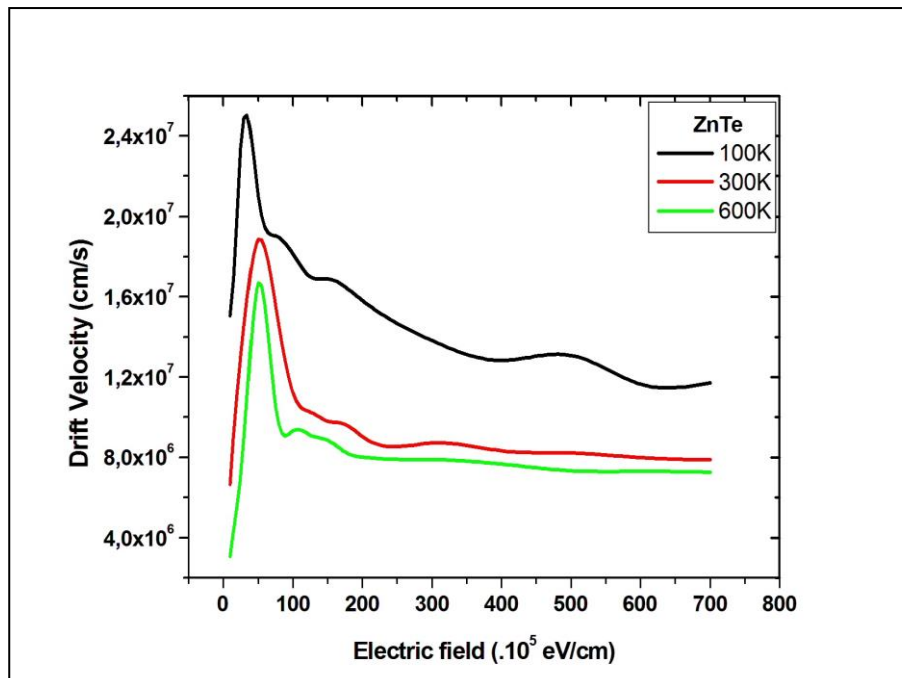
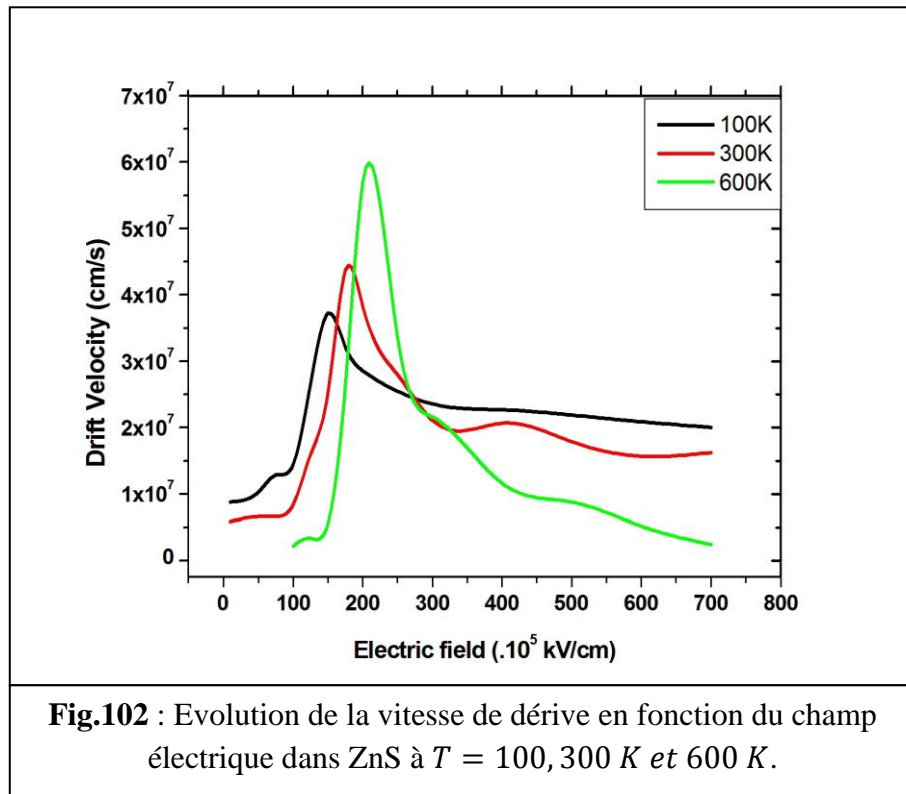


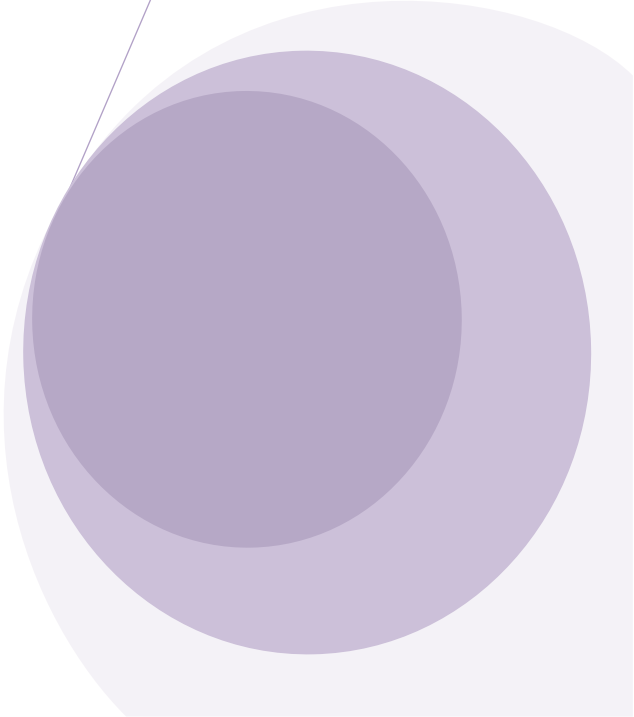
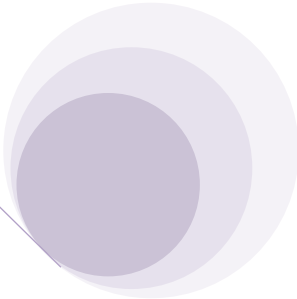
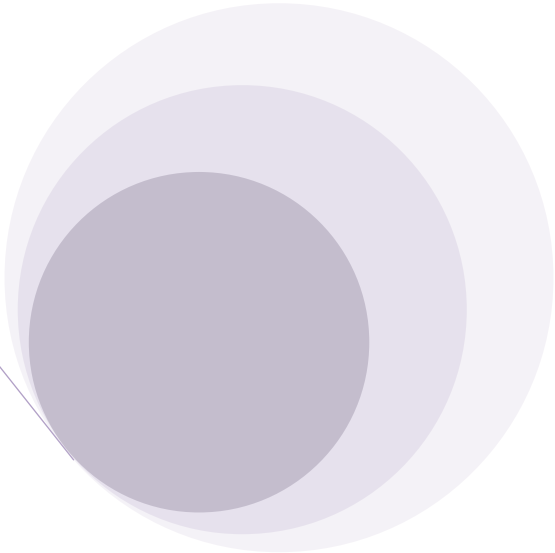
Fig.101 : Evolution de la vitesse de dérive en fonction du champ électrique dans ZnTe à $T = 100, 300 K$ et $600 K$.



6. Références

- [1] P. Lugli and C. Jacoboni, in The Monte Carlo method for Semiconductor Devices Simulation, edited by S. Selberherr (Springer-Verlag, Wien/New York, 1989).
- [2] J. Zimmermann, étude par la méthode de Monte Carlo des phénomènes de transport électronique dans le Silicium de type N en régimes stationnaire et non stationnaire. Application à la simulation des composants submicroniques, Thèse de doctorat d'état, U.de Lille 1, 1980.

CONCLUSION



CONCLUSION

Au cours de ce travail, nous avons effectué une étude sur les phénomènes de transport dans les matériaux $ZnSe$, $ZnTe$ et ZnS . Nous avons montré que ces phénomènes sont générés par le transfert des électrons entre la vallée centrale Γ et les vallées latérales L et X . Ils sont régis par l'équation de transport de Boltzmann, une équation non résolue analytiquement. Nous avons utilisé alors, un puissant outil que nous avons décrit en détail qui est la méthode de Monte Carlo. Nous avons montré que c'est une méthode probabiliste parfaitement adaptée à l'étude du transport électronique, et que cette méthode est un outil non seulement facile d'emploi mais aussi peut être utilisé dans différentes conditions initiales de champ électrique et de température. Les seules conditions restrictives sont les suivantes :

- Les collisions subies par les porteurs quelque soit leur type sont instantanées et s'effectuent dans le cristal.
- La présence du champ ne modifie pas la façon dont s'effectuent les collisions.

Les paramètres que nous avons étudiés sont directement accessibles par la simulation et sont les paramètres de premier ordre : l'énergie et la vitesse de dérive, et de second ordre : le coefficient de diffusion.

Les étapes de la simulation sont traitées avec rigueur. Elles reposent sur l'observation d'un ensemble de 20.000 électrons. Et à chaque pas de calcul, nous opérons par une multitude de traitements élémentaires. L'état initial de chaque électron correspond à une énergie tirée au hasard suivant la distribution de Maxwell-Boltzmann. Le traitement de chaque pas de temps commence par une phase de vol libre où l'électron n'est soumis qu'à l'action du champ

électrique, au bout de ce temps, la probabilité pour qu'il subisse une collision est déterminée. Une procédure permet alors de décider si elle a eu effectivement lieu ou non. Après avoir subi les effets de la collision, l'électron est à nouveau entraîné dans une phase de vol libre pendant un autre pas de temps pour un nouveau cycle d'évolution. Ce traitement élémentaire a lieu pour chaque électron à chaque pas de temps. On calcule alors les grandeurs macroscopiques en moyennant les valeurs instantanées.

Ainsi, par l'application de la simulation nous avons mis en évidence l'évolution de l'énergie des porteurs en fonction du temps ainsi que l'évolution de la vitesse de dérive en fonction du champ appliqué. Le champ électrique est appliqué selon la direction $\langle 100 \rangle$ et compris entre les valeurs de 100 et 700 kV/cm. Nous avons montré qu'en champ faible, l'électron est en vallée centrale. Pendant les phases de vol libre, il est fortement accéléré sous l'effet du champ électrique à cause de la faible valeur de sa masse effective. Cette accélération ainsi que la forte anisotropie qui caractérise les interactions optiques polaires prédominantes contribuent à ce que la mobilité soit élevée en champ faible. Quand le champ devient assez élevé, l'électron peut transférer et peupler les vallées latérales. En effet, les électrons sont littéralement propulsés en masse vers les énergies élevées où ils acquièrent de fortes vitesses. Il leur devient alors possible de transférer vers les vallées latérales. Mais à cause de la valeur de la probabilité de transfert qui limite à chaque pas le nombre des électrons transférant effectivement, ils restent en vallée centrale une fraction importante d'électrons légers rapidement portés à des vitesses de plus en plus élevées. Ce processus est responsable du phénomène de "survitesse" qui apparaît de façon transitoire et pendant lequel la vitesse moyenne de l'ensemble des électrons peut prendre des valeurs largement supérieures à la vitesse en régime stationnaire.

Quand le champ est fort, l'électron séjourne en vallées hautes la plupart du temps ; sa vitesse en fonction du champ diminue lentement vers une vitesse de

saturation qui ne dépend que de l'énergie du phonon intervallée équivalente échangé dans la vallée les plus hautes où l'électron séjourne constamment.

L'amplitude de ce phénomène de survitesse détermine les performances en fréquence et en puissance de composants réalisés à partir de ce matériau étudié, et conditionnée par le temps de transfert des électrons sur une distance donnée.

Nous avons étudié l'effet de la température sur les paramètres de transport. nous avons travailler avec des températures de réseau comprises entre 100 K et 900 K . Nous avons montré que le comportement des porteurs est assez différent selon la température du réseau.

Aussi nous nous sommes intéressés aux mécanismes de la diffusion au sein des matériaux. L'étude a permis l'évaluation de l'évolution du coefficient de diffusion en fonction du champ appliqué. Nous avons vu que la méthode Monte Carlo permet de contourner les difficultés que présente la définition du coefficient de diffusion pour les champs forts et qui tient compte à la fois de la distribution des électrons dans les vallées, et les transferts.

Enfin nous avons comparé les résultats des différents matériaux, et de ce fait, nous pouvons conclure que ZnSe et ZnS sont mieux adaptés pour des applications optoélectroniques, et ZnTe est mieux adapté pour les applications photovoltaïques.

Perspectives :

Comme perspective, il serait intéressant d'élargir l'application de cette simulation à d'autres matériaux ternaires à partir de ces matériaux binaires et par la suite l'application aux composants électroniques faits à partir de ces matériaux. Aussi nous nous proposons de compléter notre travail par une partie expérimentale reposant sur l'élaboration et la caractérisation de ces matériaux ZnSe, ZnTe et ZnS ainsi que des matériaux ternaires et composants électroniques.

ملخص

خصائص نقل الإلكترونات في ZnS , ZnSe ZnTe ذات أهمية كبيرة نظرا لتطبيقاتها التكنولوجية العديدة وبالتحديد في تطبيق الضوئية. في هذا العمل، نحقق في العديد من نتائج الحساب التقنية مونت كارلو. متوسط الكميات التي يمكن الوصول إليها مباشرة هي سرعة الانجراف، و طاقة الناقلات ونشرها. الأسلوب نحن اختاره لدراسة ظواهر النقل يستخدم نموذج دي ثلاث ابعاد غير مكافئ. وقد تم الحصول على النتائج من خلال تطبيق الحقل الكهربائي في الاتجاه <100>. أخيرا ، قمنا بمقارنة نتائجنا، و خلصنا إلى الأنسب لتطبيقات المواد الكهروضوئية.

Résumé

Les propriétés de transport des électrons dans ZnSe, ZnTe et ZnS sont d'un grand intérêt en raison de leurs nombreuses applications technologiques notamment en application photovoltaïque. Dans ce travail, nous étudions les résultats des calculs de simulation de Monte Carlo. Les quantités moyennes directement accessibles par la simulation sont la vitesse de dérive, l'énergie et la diffusion des porteurs. La méthode que nous avons choisi pour l'étude des phénomènes de transport utilise un modèle à trois vallées non-paraboliques. Les résultats ont été obtenus en appliquant un champ électrique dans la direction <100>. Enfin, nous avons comparé nos résultats et nous avons conclu lequel de ces matériaux est le mieux adapté pour les applications photovoltaïques.

Abstract

The transport properties of electrons in ZnSe, ZnTe and ZnS are of great interest because of their numerous technological applications namely in photovoltaic application. In this work, we investigate several calculation results of Monte Carlo device simulation. The average quantities directly accessible by the simulation are the drift velocity, the energy s and diffusion of carrier. We choose the method to study the transport phenomena uses a three valley model non-parabolic. The results have been obtained by applying the electric field in the direction <100>. Finally, we compared our results and we concluded witch material is best suited for photovoltaic applications.

Mots-Clé: *Simulation Monte Carlo, Transport électronique, Matériaux semiconducteurs (ZnSe, ZnTe, ZnS), Vitesse de dérive, Energie électronique, coefficient de diffusion.*