

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE ABOU-BAKR BELKAÏD

FACULTE DES SCIENCES DE L'INGENIEUR

Département d'Electronique

THESE DE MAGISTER EN ELECTRONIQUE

Spécialité : Signaux et Systèmes

Thème

APPLICATION DE LA METHODE DE
MONTE CARLO
AUX COMPOSES III-V

Présentée par : M^{elle} SAYAH CHOUKRIA

Soutenu en janvier 2002 devant la commission d'examen

Président:

M.B.BENYOUCEF

Professeur à l'Université de Tlemcen

Examineurs:

M.G.MERAD

Professeur à l'Université de Tlemcen

F.BEREKSI-REGUIG

Professeur à l'Université de Tlemcen

A.E.D.KADDOUN

Maître de Conférence à l'Université de Sidi Bel Abbes

K.E.GHAFFOUR

Maître de Conférence à l'Université de Tlemcen

Directeur de thèse:

N.E.CHABANE-SARI

Professeur à l'Université de Tlemcen

Codirecteur de thèse: B. BOUAZZA

Chargé de cours à l'Université de Tlemcen

Année Universitaire 2001-2002



جامعة أبي بكر بلقايد - تلمسان
كلية التكنولوجيا
المكتبة

REMERCIEMENTS

Ce travail été effectué au Laboratoire de Recherche de Matériaux et des Energies Renouvelables au sein de l'équipe de dispositif intégré, de l'Université ABOU-BAKR BELKAÏD, dirigé par Monsieur NASR-EDDINE CHABANE-SARI, Professeur et Doyen de la Faculté des Sciences de l'Université de Tlemcen. Ce travail est également le fruit d'une collaboration scientifique avec le Laboratoire de Physique de la Matière de l'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon. Nous remercions les professeurs DANIEL BARBIER et CHRISTIAN GONTRAND pour l'aide précieuse et les conseils qu'ils n'ont cessé de nous apporter.

Je remercie Monsieur NASR-EDDINE CHABANE-SARI très vivement de m'avoir accueilli au sein de l'équipe qu'il dirige, en me proposant le sujet et en assurant le suivi. Je le remercie également pour m'avoir fait bénéficier de ses compétences scientifiques, de ses qualités humaines. Je tiens particulièrement à lui exprimer ici ma profonde et amicale reconnaissance. Il est clair que la bonne ambiance, et donc l'efficacité de son équipe, reposent en grande partie sur ses qualités humaines.

Monsieur BENYOUNES BOUAZZA, chargé de cours, a également assuré la direction de ce travail. Sa constante disponibilité, ses compétences et ses qualités humaines m'ont permis d'aboutir. J'ai été très touchée par la confiance qu'il m'a témoignée tout au long de mon travail. La liberté qu'il m'a laissée m'a permis d'orienter ma recherche dans les directions qui me motivaient. Je le remercie chaleureusement et amicalement.

Je dois également remercier encore les membres de notre équipe de recherche du laboratoire en particulier Mme A. BOUAZZA ET Mr A. HAMDOUN pour les diverses discussions scientifiques qui ont beaucoup enrichi mes connaissances.

Je tiens à exprimer mes plus sincères remerciements à Monsieur le Professeur B. BENYOUCEF, qui me fait l'honneur d'être le président du jury. J'adresse également mes remerciements à Monsieur le Professeur G. MERAD, Monsieur le Professeur F. BEREKSI-REGUIG, Monsieur A. E. D. KADOUN Maître de conférences à l'Université de Sidi Bel Abbas et Monsieur K. E. GHAFfour Maître de conférences à l'Université de Tlemcen d'avoir accepté de participer à ce jury de thèse. Qu'ils trouvent ici l'expression de ma profonde gratitude.

J'adresse tous mes remerciements aux enseignants du cycle Post-graduation qui ont contribué à ma formation pour leur dévouement et leur abnégation.

Mes chaleureux remerciements vont également à mes amies et collègues, M^{elle} K. NOURI, S. DALI et F. ZAHUI. Qu'ils trouvent ici toute ma gratitude pour leur compréhension, pour le soutien moral qu'ils n'ont cessé de m'apporter au long de l'élaboration de ce travail.

Enfin, je ne saurais oublier dans ces remerciements, monsieur S. KARAI, A. SERRIER et monsieur N. BELKACEM ainsi que tous ceux que j'ai oublié de citer, et qui j'espère, ne m'en tiendront pas rigueur.

SOMMAIRE

INTRODUCTION.....	2
-------------------	---

CHAPITRE I

PROPRIETES PHYSIQUES DES MATERIAUX

SEMICONDUCTEURS III-V

I.1. STRUCTURE CRISTALLINE.....	6
I.2. METHODES DE CALCUL DE STRUCTURE DE BANDES D'ENERGIE	9
I.2.1. APPROXIMATIONS DE BASE	9
I.2.1.1. <i>L'Approximation de Born-Oppenheimer</i>	12
I.2.1.2. <i>L'Approximation de Hartrée-Fock</i>	13
I.2.2. METHODES DES ONDES PLANES ORTHOGONALISEES (OPW).....	14
I.2.3. METHODE DES PSEUDOPOTENTIELS	15
I.2.3.1. <i>Le principe du Pseudopotentiel</i>	15
I.2.3.2. <i>Théorème d'annulation</i>	16
I.3. STRUCTURES DE BANDES D'ENERGIE	16
I.3.1. ALLURE GENERALE DES BANDES D'ENERGIE	16
I.3.2. FORME DE LA BANDE DE CONDUCTION AU VOISINAGE DES MINIMA	19

CHAPITRE II

PHENOMENES DE TRANSPORT

ELECTRIQUE DANS LES SEMICONDUCTEURS

II.1. EQUATION DE BOLTZMANN	24
II.2. MECANISMES D'INTERACTION.....	25

II.2.1. INTERACTIONS ELECTRONS-PHONONS.....	26
II.2.1.1. <i>Interaction acoustique</i>	27
II.2.1.2. <i>Interaction piézo-électrique</i>	28
II.2.1.3. <i>Interaction optique polaire</i>	28
II.2.1.4. <i>Interaction intervallée équivalente et non équivalente</i>	29
II.2.1.5. <i>Interaction optique non polaire</i>	31
II.2.2. INTERACTION AVEC LES IMPURETES	31

CHAPITRE III

PRESENTATION DE LA METHODE DE MONTE CARLO

III.1. APPROCHE PARTICULAIRE DE MONTE CARLO	36
III.2. TEMPS DE VOL LIBRE	38
III.3. METHODE DU SELF SCATTERING	40
III.4. MOUVEMENT DES ELECTRONS	42
III.5. CHOIX DU MECANISME D'INTERACTION	45
III.6. CHOIX DES ANGLES DE DEVIATION.....	48
III.7. MISE EN ŒUVRE DE LA SIMULATION	51
III.8. DESCRIPTION DU LOGICIEL.....	54

CHAPITRE IV

RESULTATS DE LA SIMULATION DE MONTE CARLO

APPLICATION A L'ARSENIURE DE GALLIUM

IV.1. STRUCTURE DE BANDE	58
IV.2. PROBABILITES D'INTERACTION	59
IV.2.1. INTERACTIONS PREPONDERANTES DANS L'ASGA	60
IV.2.1.1. <i>Interaction optique polaire</i>	60
IV.2.1.2. <i>Interactions intervallées équivalentes et non équivalentes</i>	61
IV.2.2. INTERACTIONS INTERVENANT DE FAÇONS SECONDAIRES DANS L'ASGA :	62

IV.3. EVOLUTION DES PROBABILITES AVEC L'ENERGIE DES PORTEURS.....	62
IV.4. ETUDE DU PHENOMENE DE TRANSPORT EN REGIME STATIONNAIRE	
.....	63
IV.4.1. CARACTERISTIQUE VITESSE-CHAMP.....	64
IV.4.2. INFLUENCE DU DOPAGE SUR LA VITESSE DE DERIVE.....	67
IV.4.3. COMPARAISON AVEC LES RESULTATS DE LA LITTERATURE.....	68
IV.5. ETUDE DU PHENOMENE DE TRANSPORT EN CHAMP VARIABLE	
DANS LE TEMPS	69
IV.5.5. EXISTENCE DU PHENOMENE DE SURVITESSE.....	70
IV.5.2. COMPARAISON AVEC LES RESULTATS DE LA LITTERATURE.....	75
IV.6. CONCLUSION.....	77
CONCLUSION	80

ANNEXE A

CALCUL DE LA MASSE EFFECTIVE DANS LES

SEMICONDUCTEURS A STRUCTURE

CRISTALLINE ZINC-BLENDE

I. FORME DE LA BANDE DE CONDUCTION PRES DES MINIMA DE Γ , L ET X	
.....	83
I.1. VALLEE Γ	86
I.2. VALLEE L.....	87
I.3. VALLEE X.....	88

ANNEXE B
CALCUL DES PROBABILITES D'INTERACTION ET
DETERMINATION DE L'ANGLE DE DEVIATION

I. GENERALITES.....	91
I.1. INTERACTION OPTIQUE POLAIRE	92
I.1.1. <i>Calcul de la probabilité d'interaction</i>	94
I.1.2. <i>Détermination de l'angle β</i>	95
I.2. INTERACTION INTERVALLEE EQUIVALENTE ET NON EQUIVALENTE	96
I.3. INTERACTION ACOUSTIQUE	98
I.4. INTERACTION PIEZO-ELECTRIQUE	99
I.5. INTERACTION OPTIQUE NON POLAIRE	102
I.6. INTERACTION AVEC LES IMPURETES IONISEES	102

ANNEXE C
PRINCIPAUX PARAMETRES DU MATERIAUX GaAs
UTILISES DANS LA SIMULATION
DE MONTE CARLO

I. PARAMETRES RELATIFS AU MATERIAU.....	105
II. PARAMETRES RELATIFS A LA STRUCTURE DE BANDE.....	106
REFERENCES.....	108

INTRODUCTION

« Le commencement de toutes les sciences, c'est l'étonnement
de ce que les choses sont ce qu'elles sont. »

Aristote.

INTRODUCTION

Les besoins actuels de l'électronique et de la micro-électronique exigent des composants de plus en plus performants pour des applications en électronique ultra-rapides ou en optoélectronique, en télécommunications optiques et en hyperfréquence.

Ainsi, les électroniciens ont été amenés à concevoir des dispositifs dont les dimensions caractéristiques sont inférieures au micromètre pour améliorer les propriétés des circuits, les faire fonctionner de plus en plus vite et augmenter leur densité d'intégration.

Simultanément la recherche de très grandes rapidités les a conduit à se tourner vers de nouveaux matériaux dans lesquels les vitesses de transport électronique seraient très élevées. Parmi ces matériaux, les composés III-V, tel que l'arséniure de gallium, répondent particulièrement bien à ces critères. Les masses effectives électroniques y sont, en général, très faibles et les interactions des porteurs, avec le réseau, favorables à l'obtention de vitesses électroniques élevées.

Il est donc intéressant de réaliser une étude complète des possibilités offertes par ces matériaux et déterminer l'influence des conditions extérieures sur les effets qu'ils génèrent, rendant ainsi possible une utilisation rationnelle de ces matériaux au niveau des composants. Pour comprendre leur fonctionnement, on ne peut plus considérer le déplacement des électrons dans leur ensemble, mais il devient, au contraire, nécessaire de calculer une à une les trajectoires de ces particules qui font appel aux lois de probabilité des interactions entre électrons et les imperfections du réseau cristallin.

Le principe de la démarche consiste à simuler le comportement des électrons de la bande de conduction en utilisant les méthodes statistiques de Monte Carlo. Celles-ci s'avèrent tout à fait adaptées à cette étude parce qu'elles sont très souples d'emploi, et permettent en même temps la prise en compte des caractéristiques physiques et électroniques du matériau considéré.

Le présent travail consiste à montrer et à illustrer les possibilités que peut présenter la méthode de Monte Carlo dans l'étude de la dynamique électronique, en déterminant non seulement les valeurs moyennes (vitesse de dérive, énergie moyenne....) mais aussi les comportements non stationnaires qui font leur apparition dans le matériau.

Nous avons structuré le manuscrit de la manière suivante:

Le premier chapitre donne les principales propriétés des composés semi-conducteurs III-V dont le réseau cristallin est de type Zinc-Blende. Une présentation de la théorie des bandes permet de préciser la forme de la bande de conduction la plus basse à proximité de ces minima. Nous donnons en particulier les expressions permettant de calculer les masses effectives des électrons et les coefficients de non parabolicité dans les vallées Γ , L et X.

Dans le second chapitre, nous étudions et nous calculons les probabilités d'interaction des électrons de conduction avec, d'une part les vibrations du réseau cristallin, et d'autre part avec les impuretés.

Le troisième chapitre présente la méthode de Monte Carlo, ainsi que les différents paramètres mis en œuvre dans son application.

Enfin dans le quatrième chapitre, nous donnons les principaux résultats obtenus par l'application de cette méthode, notamment la vitesse de dérive des porteurs en régime transitoire et stationnaire ; l'énergie de porteurs dans les différentes vallées ainsi que les coefficients de repopulation de ces vallées, en fonction du temps et pour différents champs électriques.

CHAPITRE I

Propriétés Physiques Des Matériaux Semiconducteurs III-V

« Imagination is more important than knowledge. »

Albert Einstein

PROPRIETES PHYSIQUES DES MATERIAUX SEMICONDUCTEURS III-V

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

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

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

Dans ce chapitre nous abordons en premier lieu quelques propriétés de la structure Zinc-Blende dans laquelle cristallisent la plupart des composés III-V. Après un bref rappel des principes de calcul des structures de bandes énergétiques, nous présenterons l'allure générale des bandes d'énergies, en précisant la forme de la bande de conduction au voisinage des minima.

I.1. STRUCTURE CRISTALLINE

La plupart des composés III-V cristallisent dans la structure Zinc-Blende présentée sur la figure I-1. Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant (C, Ge, Si, etc.), est constituée de deux sous réseaux cubiques à faces centrées (CFC), l'un comportant les éléments de la rangée III et l'autre ceux de la rangée V, décalés l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale. Le tableau I-1 donne la valeur du paramètre cristallin des principaux composés III-V [1-2].

Matériau

Matériau	Paramètre du réseau en Å
AlAs	5.661
AlSb	5.138
GaP	5.449
GaAs	5.653
GaSb	6.095
InP	5.868
InAs	6.058
InSb	6.479

Tableau I-1 : Paramètre cristallin des principaux composés III-V

De ce fait, dans les matériaux III-V, les liaisons atomiques ne sont pas simplement covalentes comme dans le silicium. Elles reposent sur le transfert d'électrons des atomes du groupe V sur ceux du groupe III. Ainsi, l'arséniure de gallium, est constitué à partir de l'arsenic pentavalent et du gallium trivalent et est structuré de telle sorte que chaque atome de gallium a quatre atomes d'arsenic pour proches voisins et, inversement un atome d'arsenic a quatre proches voisins qui sont des atomes de gallium. Ces voisinages sont la conséquence d'échanges d'électrons entre atomes d'où résulte un cristal constitué d'un réseau d'ions Ga^- et As^+ qui ont tous quatre électrons périphériques[3]. Cette répartition est à l'origine des caractères partiellement covalent et partiellement ionique, qui sont orientées dans l'espace suivant les axes de symétrie d'un tétraèdre régulier.

Rappelons que la zone de Brillouin des réseaux CFC a la forme d'un octaèdre tronqué par les six faces d'un cube, comme cela est représenté sur la figure I-2. Elle présente un centre de symétrie à l'origine (noté Γ) et des axes de symétrie[1] :

- Les axes $\langle 100 \rangle$ à symétrie d'ordre 4.
- Les axes $\langle 111 \rangle$ à symétrie d'ordre 6.
- Les axes $\langle 011 \rangle$ à symétrie d'ordre 2.

Les points de rencontre de chacun de ces axes avec les frontières de la Zone de Brillouin jouent un rôle essentiel dans la théorie des bandes. On les note généralement de la manière suivante :

- Points X de coordonnées $(2\pi/a, 0, 0)$ sur les axes $\langle 100 \rangle$.
- Points L de coordonnées $(\pi/a, \pi/a, \pi/a)$ sur les axes $\langle 111 \rangle$.
- Points K de coordonnées $(0, 3\pi/2a, 3\pi/2a)$ sur les axes $\langle 011 \rangle$.

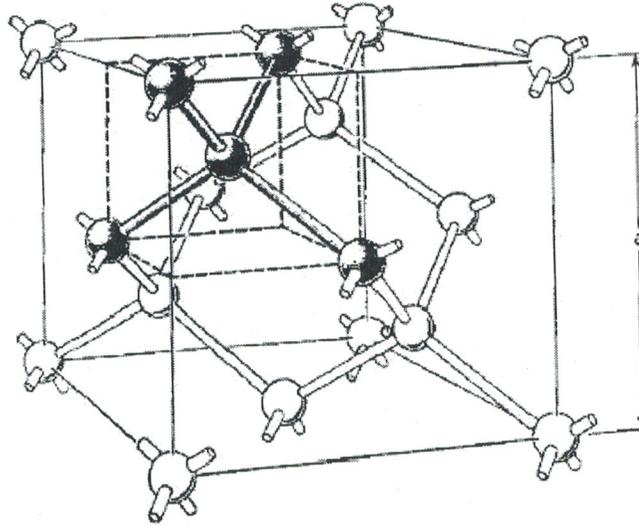


Figure I.1 : La maille élémentaire de la structure Zinc-Blende.

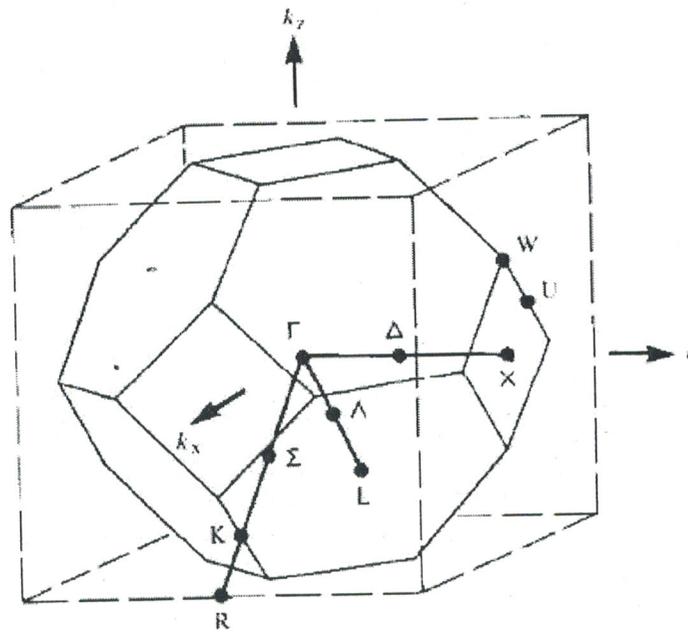


Figure I.2 : La première zone de Brillouin de la structure Zinc-Blende.

I.2. METHODES DE CALCUL DE STRUCTURE DE BANDES D'ENERGIE

Nous savons que la plupart des propriétés physiques des matériaux semiconducteurs, en particulier les propriétés électroniques, sont directement liées à la connaissance de leurs structures de bande.

Une multitude de méthodes ont été élaborées et développées pour calculer les structures de bandes. Toutes ces méthodes ont pour but de calculer la relation de dispersion de l'énergie et du vecteur d'onde $E_n(k)$ ainsi que les fonctions d'ondes propres $\psi_n(k)$. On dispose actuellement de plusieurs procédés de calcul de la structure de bandes. Nous en donnons un bref aperçu.

I.2.1. Approximations de base

Le calcul de structures de bandes est basée sur la résolution complète de l'équation de Schrödinger :

$$H\Psi = E\Psi \quad (\text{I-1})$$

où H est l'Hamiltonien du cristal, Ψ sa fonction d'onde propre, E l'énergie du cristal (sa valeur propre). La fonction d'onde du cristal dépend des coordonnées de toutes les particules qui le composent [4] :

$$\psi = \psi(r_1, r_2, \dots; R_1, R_2, \dots) = \psi(r_i; R_\alpha) \quad (\text{I-2})$$

r_i représente les coordonnées généralisées des électrons et R_α les coordonnées des noyaux.

L'opérateur Hamiltonien comprend toutes les formes d'énergie :

$$\left\{ \begin{array}{l} H = T_e + T_z + U_{ee} + U_{zz} + U_{ez} \\ H\psi = E\psi \end{array} \right. \quad (\text{I-3})$$

T_e et T_z représentent les énergies cinétiques des électrons et des noyaux et U_{ee} , U_{zz} et U_{ez} les énergies d'interaction des électrons, des noyaux et noyaux-électrons respectivement.

L'équation de Schrödinger (I-1) contient $3(Z+1)N$ variables, N étant le nombre d'atomes du cristal. Il est évident que l'on ne saurait obtenir une solution générale à cette équation. Cela tient non seulement à des difficultés de calcul d'ordre technique, mais à une impossibilité de fait, car la mécanique quantique moderne ne dispose d'aucune méthode pour résoudre des problèmes concernant un grand nombre de particules. Pour trouver une solution de l'équation de Schrödinger d'un système de particules se trouvant en interaction, il est indispensable de réduire ce système à un système de particules indépendantes.

Dans ce cas l'équation précédente peut être décomposée en un système d'équations, chaque équation ne décrivant que le mouvement d'une seule particule. En effet, si l'Hamiltonien d'un système de particules pouvait être transformé en une somme d'Hamiltoniens, telle que :

$$H = \sum_K H_K \quad (\text{I-4})$$

où H_K n'est fonction que des coordonnées de la $K^{\text{ième}}$ particule, c'est-à-dire:

$$H_K = -\frac{\hbar^2}{2m_K} \Delta_K + U_K(r_K) \quad (\text{I-5})$$

traduisant ainsi le comportement de particules libres de toute interaction, l'équation de Schrödinger du système de particules peut être alors résolue de la façon suivante:

La fonction d'onde du système se présente sous la forme du produit des fonctions d'onde de toutes les particules, et l'énergie totale du système est égale à la somme des énergies des particules :

$$\psi(r_1, r_2, \dots) = \psi_1(r_1)\psi_2(r_2)\dots \quad (\text{I-6})$$

et

$$E_K = \sum_K E_K \quad (\text{I-7})$$

E_k et Ψ_K étant liés par une relation telle que :

$$H_K \Psi_K(r_K) = E_K \Psi_K(r_K) \quad (\text{I-8})$$

Pour le démontrer, il suffit de porter l'équation (I-6) dans l'équation de Schrödinger d'un système de particules, et compte tenu de (I-8) on retrouve l'équation (I-7). On ne saurait passer de l'équation (I-3) concernant un système de particules en interaction à un système de particules indépendantes, sans procéder à des simplifications raisonnables ; on devra alors se contenter d'une solution approchée [5].

1.2.1.1. L'Approximation de Born-Oppenheimer

L'approximation de Born-Oppenheimer appelée aussi approximation Adiabatique tient compte de ce que les caractères du mouvement des particules légères (électrons) et lourdes (noyaux) sont fort différents [4 -5]. Du fait de son inertie, le noyau ne peut pas réagir au mouvement de chacun des électrons et se meut dans le champ résultant produit par tous les électrons.

L'hypothèse la plus grossière que l'on pourrait faire est celle qui supposerait que les noyaux atomiques sont immobiles. En adoptant cette hypothèse on simplifie notablement l'équation Schrödinger :

$$H_e = T_e + U_{ee} + U_{ez} \quad (U_z = 0, T_z = 0) \quad (\text{I-9})$$

Mais cette approximation est trop grossière, en ce sens qu'il serait préférable de tenir compte des mouvements des noyaux en faisant intervenir une nouvelle fonction d'onde concernant les noyaux Ψ_z . Nous pouvons maintenant représenter l'Hamiltonien du cristal à l'aide de deux opérateurs H_e et H_z :

$$H = H_e + H_z \quad (\text{I-10})$$

La fonction d'onde du cristal Ψ peut se mettre sous forme d'un produit de la fonction d'onde des électrons Ψ_e et celle des noyaux Ψ_z :

$$\Psi = \Psi_e \cdot \Psi_z \quad (\text{I-11})$$

avec $H_e \cdot \Psi_e = E_e \cdot \Psi_e \quad (\text{I-12})$

et $H_z \cdot \Psi_z = E_z \cdot \Psi_z \quad (\text{I-13})$

I.2.1.2. L'Approximation de Hartree-Fock

Les simplifications résultant de l'approximation de Born-Oppenheimer montrent que la fonction d'onde des électrons doit satisfaire aux équations :

$$H_e \Psi_e = E_e \Psi_e \quad (\text{I-14})$$

ou encore

$$(T_e + U_{ee} + U_{ez}) \cdot \Psi_e = E_e \cdot \Psi_e \quad (\text{I-15})$$

Cette dernière équation ne peut, elle non plus, être résolue, à moins de la réduire à l'équation concernant une seule particule. Si on suppose que les électrons n'interagissent pas entre eux ($U_{ij}=0$), en négligeant dans l'expression de l'Hamiltonien (I-15) l'énergie coulombienne d'interaction des électrons, le problème à N électrons se ramènera à un modèle à un seul électron. Ce résultat peut être atteint en faisant appel à la notion de champ Self-Consistent qui rend compte des interactions coulombiennes des électrons tout en substituant à un système d'électrons en interaction un système d'électrons indépendants. De cette façon, on peut écrire l'Hamiltonien du système sous forme d'une somme d'Hamiltoniens de chaque particule [4 -5] :

$$H_e = \sum_i H_i \quad (\text{I-16})$$

où l'Hamiltonien correspondant à l'électron i vaut :

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \Omega_i(\mathbf{r}_i) + U_i(\mathbf{r}_i) \quad (\text{I-17})$$

$\Omega_i(r_i)$ représente l'énergie potentielle de l'électron i soumis à l'action du champ produit par tous les autres électrons, et $U_i(r_i)$ son énergie potentielle dans le champ produit par tous les noyaux du cristal.

La fonction d'onde du système électronique a la forme d'un produit de fonctions d'onde de chacun des électrons, et l'énergie de ce système est, par conséquent, égale à la somme des énergies de tous les électrons :

$$\Psi_e(r_1, r_2, \dots) = \prod_i \Psi_i(r_i) \quad (\text{I-18})$$

$$E_e = \sum_i E_i \quad (\text{I-19})$$

avec

$$H_i \Psi_i = E_i \Psi_i \quad (\text{I-20})$$

1.2.2. Méthodes des Ondes Planes Orthogonalisées (OPW)

La méthode des Ondes Planes Orthogonalisées est basée sur la condition d'orthogonalité entre la fonction d'onde de l'électron de valence et les orbitales du cœur[5].

Cette méthode fut l'œuvre de Herring (1940). Il fit remarquer que, dans un solide, la fonction d'onde d'un électron de valence était presque une onde plane dans la région située entre les cœurs ioniques et qu'au voisinage des noyaux, les oscillations de la fonction d'onde pouvaient être représentées par la même onde plane en soustrayant de celle-ci les orbitales du cœur saturé. La soustraction rend possible l'orthogonalisation de la fonction d'onde en question aux états du cœur.

Cette approche porte le nom de la Méthode de l'Onde Plane Orthogonalisée (OPW). Par exemple ; un état de conduction du Sodium déduit du niveau 3s, est ainsi représenté par la différence entre une onde plane et les contributions des niveaux 1s, 2s et 2p.

I.2.3. Méthode des Pseudo potentiels

Le développement de la méthode des Ondes Planes Orthogonalisées donna naissance à la méthode dites des Pseudo Potentiels. Le formalisme de cette théorie a été introduit par Phillips et Kleinman en 1959, puis par Bassini et Celli en 1966 et fut développé par d'autres chercheurs. Ce formalisme s'appuie sur un concept qui stipule que les états cristallins des bandes de conduction et de valence doivent être orthogonaux aux états du cœur. Cette idée a constitué le principe de base de l'OPW.

Cette théorie a réalisé des succès inattendus au point que beaucoup de problèmes ont été résolus. Ainsi, elle a permis de prédire les caractéristiques essentielles de la structure électronique des solides bien avant que ces caractéristiques ne soient déterminées expérimentalement.

I.2.3.1. Le principe du Pseudopotentiel

Cette méthode de calcul considère seulement les électrons de valence. Les électrons du cœur sont supposés être bloqués dans une configuration atomique et les électrons de valence circulent sous un faible potentiel.

I.2.3.2. Théorème d'annulation

Le théorème d'annulation de Phillips et Kleinman dérive de la méthode OPW. Ce théorème décrit la fonction d'onde (prise comme une combinaison d'une onde plane et d'une fonction du cœur) orthogonale aux états du cœur qui peuvent être groupés pour former un potentiel orthogonal. Ce potentiel est répulsif car sa fonction est de garder les électrons de valence en dehors du cœur qui, est effectivement l'objet de l'orthogonalisation.

Si le potentiel répulsif est additionné au potentiel attractif du cœur ; ils s'annulent presque. Le potentiel restant est faible ; Ce potentiel est appelé le Pseudo potentiel [7]. Ce potentiel peut être traité en utilisant la méthode de l'électron presque libre ou d'autres techniques pour la résolution de l'équation de Schrödinger.

I.3. STRUCTURES DE BANDES D'ENERGIE

I.3.1. Allure générale des bandes d'énergie

En se limitant à la première Zone de Brillouin, La structure des bandes dans les composés III-V présente l'allure typique de la figure I.3.

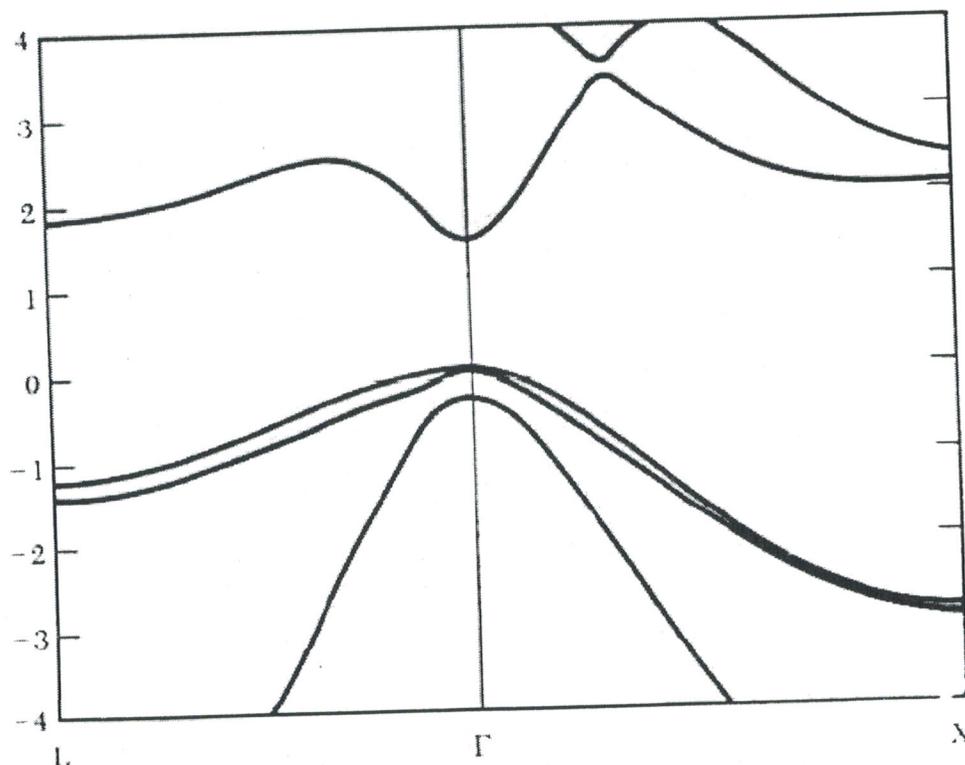


Figure I.3 : Structures des bandes d'énergie typique des composés III-V à intervalle de bande interdite direct.

Les bandes de conduction et de valence sont multiples, mais les propriétés de transport électronique dépendent principalement de la structure de la bande de conduction la plus basse (BC) et de celle de la bande de valence la plus élevée (BV) [1-9-10].

Les semiconducteurs III-V que nous étudierons sont à « transition directe ». Cela signifie que l'énergie minimale Γ_6 de la bande de conduction et les énergies maximales Γ_7 et Γ_8 de la bande de valence se font face au centre de la zone de Brillouin (figure I-4).

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

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

Dans certains matériaux comme GaAs et InP, les minima de ces vallées satellites et le minimum Γ sont séparés par une énergie de l'ordre de quelques dixièmes d'électron volt.

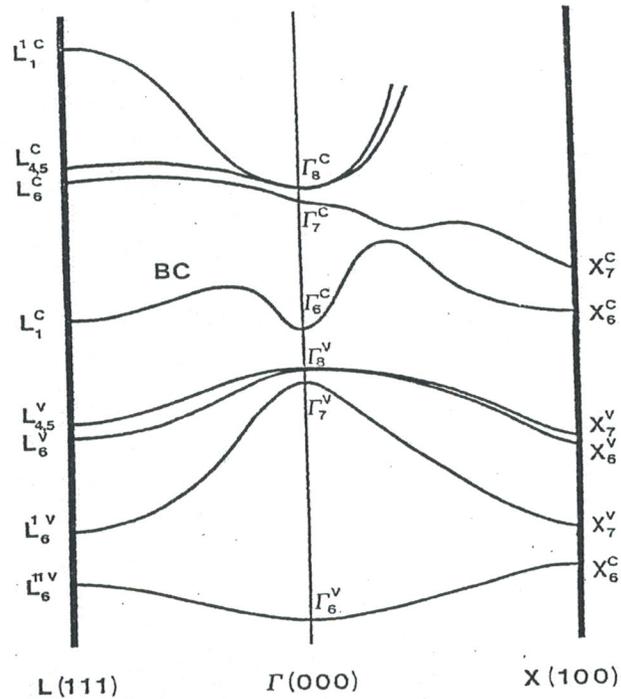


Figure I-4

I.3.2. Forme de la bande de conduction au voisinage des minima

En l'absence de champ électrique ou sous champ faible, les électrons peuplent le bas de Γ . En présence d'un champ important, leur énergie augmente et certains électrons peuvent être transférés dans les vallées L et X. Il est important donc d'étudier plus précisément, non seulement la forme de la vallée Γ à proximité de son minimum, mais également celle des vallées L et X pour déterminer les valeurs des principaux paramètres de transport : masse effective m^* et coefficient de non parabolicité.

Les vallées Γ, L ou X de la bande de conduction ne sont pas parfaitement paraboliques. On a toute fois besoin par moment de mettre en évidence cette non-parabolicité et ramener la relation entre l'énergie ε et le module du vecteur d'onde k à une formule du type [1-11] :

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon) \quad (\text{I-21})$$

où m^* est la masse effective pouvant dépendre éventuellement de l'énergie par:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 \varepsilon / \partial k^2} \quad (\text{I-22})$$

et α est un coefficient prenant en compte la non parabolicité de la vallée ($\alpha = 1/\varepsilon_g$). Les valeurs de ce paramètre sont données dans le tableau I-2.

Nous avons vu que la masse effective dépend de la courbure des bandes. Elle peut être reliée, dans la vallée Γ à l'intervalle de bande interdite ε_g et à la séparation Δ des sous bandes de valence au centre de la Zone de Brillouin (Splitting) par la formule suivante :

$$\frac{m_0}{m^*} = 1 + \frac{E_0}{3} \left(\frac{2}{\varepsilon_g} + \frac{1}{\varepsilon_g + \Delta} \right) \quad (\text{I-23})$$

avec

$$E_0 = \frac{2m_0 \hbar^2 P^2}{\hbar^2} \quad (\text{I-24})$$

où m_0 est la masse de l'électron au repos et \hat{P} est l'opérateur $-\hbar\nabla$. Ainsi, les électrons des semiconducteurs III-V à faible largeur de bande interdite comme InAs ou InSb ont des masses effectives très faibles.

Les vallées L et X ne sont pas à symétrie sphérique : la masse longitudinale m_l^* est différente de la masse transverse m_t^* et la masse effective de densité d'état peut être calculée par l'expression :

$$m^* = (m_l^{*1/2} \cdot m_t^*)^{2/3} \quad (\text{I-25})$$

Matériau	distance énergétique			masses effectives m^*/m_0			Coefficient de non parabolicité α		
	Gap ε_g	$\Delta\varepsilon_{\Gamma L}$	$\Delta\varepsilon_{\Gamma X}$	m_{Γ}^*/m_0	m_L^*/m_0	m_X^*/m_0	α_{Γ}	α_L	α_X
GaAs	1.43	0.33	0.52	0.063	0.22	0.58	0.610	0.461	0.204
InP	1.35	0.608	0.755	0.08	0.22	0.38	0.635	0.300	0.1
Ga _x In _{1-x} As	0.76	0.55	1.28	0.041	0.29	0.69	1.103	0.601	0.202

Tableau I-2 : Principaux paramètres de structure de bandes d'énergie à 300K pour quelques matériaux III-V.

CHAPITRE II

Phénomènes De Transport Electrique Dans Les Semiconducteurs

« Si j'ai appris une chose au cours de ma longue vie c'est que toute
notre science confrontée à la réalité apparaît comme primitive
et enfantine, et pourtant c'est ce que nous possédons de
plus précieuse. »

PHENOMENES DE TRANSPORT ELECTRIQUE DANS LES SEMICONDUCTEURS

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

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

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

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

II.1. EQUATION DE BOLTZMANN

La dynamique des porteurs libres dans les composants semiconducteurs repose sur la résolution de l'équation de Boltzmann (BTE) [4-14-17-18-19] :

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

Cette équation régit l'évolution de la fonction de distribution, qui est la probabilité de présence d'une particule au point (\vec{r}, \vec{k}) de l'espace des phases à l'instant t . Le second terme représente la variation de la fonction de distribution due aux mécanismes de diffusion résultant des gradients de concentration. Le troisième terme représente les effets des forces extérieures appliquées qui se traduit par la dérivée de l'impulsion :

$$\vec{F} = \hbar \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} = -e \cdot (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (\text{II-2})$$

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

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

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{COLL}} = \sum_{\vec{k}'} \left[f(\vec{r}, \vec{k}', t) S(\vec{k}', \vec{k}) - f(\vec{r}, \vec{k}, t) S(\vec{k}, \vec{k}') \right] \quad (\text{II-3})$$

En l'absence de champ magnétique externe et en tenant compte de l'équation (II-3), l'équation de Boltzmann devient :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f + \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f = \sum_{\vec{k}'} \left[f(\vec{r}, \vec{k}', t) S(\vec{k}', \vec{k}) - f(\vec{r}, \vec{k}, t) S(\vec{k}, \vec{k}') \right] \quad (\text{II-4})$$

A cause de sa complexité, cette équation aux dérivées partielles n'admet pas de solution analytique sauf dans un nombre limité de cas moyennant des hypothèses simplificatrices. Elle permet d'avoir accès directement à des grandeurs importantes en dynamique électronique telles que la vitesse et l'énergie des électrons.

II.2. MECANISMES D'INTERACTION

Lorsqu'un électron se déplace dans un cristal, il peut entrer en interaction avec les charges électriques présentes, atomes d'impureté ou autres porteurs ou par l'intermédiaire du champ électrique qu'il crée, échanger des quanta d'énergie ou phonons avec le réseau cristallin [10].

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

$$\lambda(\vec{k}) = \int_{\vec{k}'} S(\vec{k}, \vec{k}') \rho^3 \vec{k}' \quad (\text{II-5})$$

L'expression de $S(\vec{k}, \vec{k}')$ ne fait en général intervenir que le module des vecteurs \vec{k} à \vec{k}' et l'angle β qui les sépare. Dans les semiconducteurs III-V comme GaAs ou InP, les vallées Γ sont isotropes et le module de \vec{k} est relié de façon biunivoque à l'énergie ε (mesurée par rapport au bas de la vallée dans laquelle se trouve l'électron) [1] :

$$\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*} = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon) \quad (\text{II-6})$$

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

II.2.1. Interactions électrons-phonons

Dans ce paragraphe, nous allons donner les expressions des probabilités d'interaction pour différents processus envisageables (tous les calculs relatifs à toutes les interactions sont développés en annexe B) :

II.2.1.1. Interaction acoustique

Les interactions acoustiques sont élastiques, elles se manifestent donc à énergie constante. Lorsque un porteur subit une interaction acoustique, le module du vecteur d'onde dans cette vallée reste constant [12]. Elle est presque inexistante en vallée centrale, possède une probabilité assez forte en vallée latérale ; de plus, la distribution de l'angle β de déviation est quasi-uniforme.

L'angle de déviation β après interaction est tiré avec une distribution uniforme entre $[0, \pi]$, Cette interaction est très faible en vallée Γ et ses effets sont souvent masqués par ceux de la multitude d'interactions intervalles qui prédominent en vallées latérales [13]. La probabilité d'interaction acoustique par unité de temps est donnée par [12]:

$$\lambda_{ac}(\varepsilon) = \frac{K_B \cdot T \cdot E_{ac}^2 \cdot m^{*3/2}}{\rho \cdot s^2 \cdot \hbar^4 \cdot 3\pi \cdot \sqrt{2}} \cdot \delta^{1/2}(\varepsilon) \cdot \frac{3(1 + \alpha \cdot \varepsilon)^2 + (\alpha \cdot \varepsilon)^2}{(1 + 2\alpha \cdot \varepsilon)} \quad (\text{II-7})$$

$$\text{avec } \delta(\varepsilon) = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon) \quad (\text{II-8})$$

$$\delta(\varepsilon') = \varepsilon'(1 + \alpha\varepsilon') \quad (\text{II-9})$$

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

II.2.1.2. Interaction piézo-électrique

C'est une interaction qui existe dans les cristaux piézo-électriques et qui met en jeu un phonon acoustique de faible longueur d'onde. Elle n'occasionne que de faibles échanges d'énergie [10]. Son effet sur le comportement de l'électron est très faible car c'est une interaction élastique qui ne provoque quasiment aucune déviation. La probabilité est inversement proportionnelle à la racine carrée de l'énergie [13]. La probabilité d'interaction piézo-électrique par unité de temps est donnée par :

$$\lambda_{pi} = \frac{e^2 \cdot K_B \cdot T \cdot P_{pi}^2 \cdot m^{*1/2}}{4\sqrt{2} \cdot \pi \cdot \hbar^2 \cdot \epsilon_0 \cdot \epsilon_s \cdot \delta^{1/2}} \cdot \frac{I}{(1 + 2\alpha \cdot \epsilon)} \quad (II-10)$$

où

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

P_{pi} Potentiel piézo-électrique.

a est un angle très faible < 0.01 radians (voir annexe B).

II.2.1.3. Interaction optique polaire

L'interaction optique polaire est très importante dans toutes les vallées. L'énergie du phonon $\hbar w_0$ est comparable à celle des électrons à la température ambiante. L'équivalent en température pour la plupart des matériaux est de 200 à 600 K, on ne peut donc pas négliger la température du phonon devant celle des électrons et les collisions deviennent inélastiques.

Par sa prédominance cette interaction joue un rôle important dans l'évolution de la mobilité des porteurs à faible champ[12]. La probabilité d'interaction par unité de temps est donnée par :

$$\lambda_{OP} = \frac{e^2 \cdot w_{OP} \cdot m^{*1/2}}{4\sqrt{2} \cdot \epsilon_0 \cdot \pi \cdot \hbar} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \cdot \frac{1 + 2\alpha \cdot \epsilon'}{\delta^{1/2}(\epsilon)} \cdot F(\epsilon, \epsilon') \cdot \left(N_{OP} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \quad (\text{II-12})$$

$$\text{où } F(\epsilon, \epsilon') = \frac{1}{C} \left(A \cdot \text{Ln} \left| \frac{\delta^{1/2}(\epsilon) + \delta^{1/2}(\epsilon')}{\delta^{1/2}(\epsilon) - \delta^{1/2}(\epsilon')} \right| + B \right) \quad (\text{II-13})$$

$$\text{avec } A = [2 \cdot (1 + \alpha \cdot \epsilon) \cdot (1 + \alpha \cdot \epsilon') + \alpha(\delta(\epsilon) + \delta(\epsilon'))]^2 \quad (\text{II-14})$$

$$B = -2\alpha(\delta(\epsilon) \cdot \delta(\epsilon'))^{1/2} \cdot [4 \cdot (1 + \alpha \cdot \epsilon) \cdot (1 + \alpha \cdot \epsilon') + \alpha(\delta(\epsilon) + \delta(\epsilon'))] \quad (\text{II-15})$$

$$\text{et } C = 4(1 + \alpha \cdot \epsilon) \cdot (1 + \alpha \cdot \epsilon') \cdot (1 + 2\alpha \cdot \epsilon) \cdot (1 + 2\alpha \cdot \epsilon') \quad (\text{II-16})$$

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

II.2.1.4. Interaction intervallée équivalente et non équivalente

C'est au cours de ces interactions inélastiques, qu'ont lieu les transferts entre les vallées équivalentes ou non équivalentes. Comme le montre la structure de bande, ces interactions sont tout à fait inexistantes dans la vallée centrale à faible champ car l'électron n'a pas suffisamment d'énergie pour être transféré dans les vallées supérieures.

Mais dès que les conditions sur l'énergie sont satisfaites, les interactions intervallées jouent de loin le rôle le plus important parmi toutes les interactions, autant par leur forte probabilité que par leurs conséquences sur le comportement de l'électron. Un transfert ne peut avoir lieu que si l'énergie après interaction est supérieure à l'énergie au fond de la vallée d'accueil, ces énergies sont repérées par rapport au minimum de la bande de conduction [13].

La condition nécessaire pour qu'une interaction intervallée ait une chance d'intervenir est [12]:

$$\varepsilon_i \pm \hbar w_{ij} + \Delta_i - \Delta_j \geq 0 \quad (\text{II-17})$$

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

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

ε_i est l'énergie mesurée par rapport au bas de la vallée i .

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

Après un transfert éventuel de la vallée $\Gamma(000)$ vers les vallées de symétrie $L(111)$ et $X(100)$ la vitesse moyenne des porteurs chute car, d'une part, dans ces vallées les masses sont plus grandes que dans la vallée centrale et, d'autre part, les directions des vitesses sont aléatoires après une telle interaction [12].

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

$$\lambda_{ij}(\epsilon_i) = \frac{Z_{ij} \cdot m_j^{*3/2} \cdot E_{ij}^2}{\pi \cdot \sqrt{2} \cdot \rho \cdot \omega_{ij} \cdot \hbar^3} \cdot \left(N_{ij} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \cdot \delta_j(\epsilon') \cdot \frac{(1 + \alpha_i \cdot \epsilon_i)(1 + \alpha_j \cdot \epsilon'_j)}{(1 + 2\alpha_i \cdot \epsilon_i)} \quad (\text{II-18})$$

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

II.2.1.5. Interaction optique non polaire

Les interactions optiques non polaires sont intravallées et inélastiques. Elles n'interviennent que dans les vallées de type L(111) [12].

Dans ce cas, les effets sur l'état de l'électron sont comparables à ceux d'une interaction intervallée équivalente avec $Z_{ij}=1$ mais sa probabilité est très faible [13]. L'énergie du phonon optique non polaire est égale à 43 eV soit environ 550 K pour l'InP.

II.2.2. Interaction avec les impuretés

Plusieurs théories ont été développées pour rendre compte des interactions entre les électrons de conduction et les impuretés dans les solides. le modèle de H. Brooks et C. Herring tient compte des effets de charge d'espace au niveau de l'expression du potentiel $V(r)$ crée par chaque impureté supposée ionisée.

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

Ce modèle est préféré au modèle de E.M.Conwell et V.F.Weisskopf dans lequel ce potentiel est simplement coulombien [13-27].

L'interaction avec les impuretés est une interaction élastique dont la probabilité est indépendante de la concentration en impuretés ; celle-ci n'intervient que dans l'expression de la distribution de l'angle β de déviation qui se réduit à une fonction de dirac $\delta(\beta)$. Pour une concentration en impuretés $N=0$; l'effet de l'interaction est alors nul. Cette distribution tend à être uniforme quand le dopage est élevé, contribuant dans ce cas à diminuer d'autant plus la vitesse moyenne de l'électron.

Cette interaction, est fortement prépondérante en champ faible ou après les premiers transferts en vallée haute.

Son effet principal sera donc de diminuer la valeur de la mobilité en champ faible.

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

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2} \cdot \pi \cdot N_D \cdot e^4 \cdot \varepsilon^{-4/2}}{(4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_S)^2 \cdot m^{*1/2}} \cdot \frac{(1 + 2\alpha \cdot \varepsilon)}{(1 + \alpha \cdot \varepsilon)^{3/2}} \cdot I \quad (\text{II-19})$$

avec

$$I = \frac{[1 + 2e_k^2 (\theta/2k)^2]^2}{4(\theta/2k)^2 [1 + (\theta/2k)^2]} + e_k^2 [1 + 2e_k^2 (\theta/2k)^2] \text{Ln} \left[\frac{(\theta/2k)^2}{1 + (\theta/2k)^2} \right] + e_k^4 \quad (\text{II-20})$$

$$\text{où } e_k = \left(\frac{\alpha \varepsilon}{1 + 2\alpha \varepsilon} \right)^{1/2} \quad (\text{II-21})$$

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

$$\theta^2 = \frac{N_D \cdot e^2}{\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_s \cdot K_B T} \quad (\text{II-22})$$

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

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{e^2 \cdot m^{*1/2} \cdot k_B \cdot T}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_s \cdot \hbar^2 \cdot \sqrt{2}} \cdot \frac{1 + 2\alpha \varepsilon}{\delta(\varepsilon)^{1/2}} \quad (\text{II-23})$$

CHAPITRE III

Présentation De La Méthode De Monte Carlo

« Il ne peut y avoir de moral scientifique, mais il ne peut pas
non plus y avoir de science immorale. »

Henri Poincaré

PRESENTATION DE LA METHODE DE MONTE CARLO

La simulation par les méthodes de Monte Carlo est aujourd'hui une des techniques les plus utilisées pour l'étude du fonctionnement physique des composants électroniques offrant la possibilité de reproduire fidèlement les divers phénomènes microscopiques se produisant dans les matériaux semiconducteurs [21].

De façon plus précise, il apparaît que l'application des méthodes de Monte Carlo permet de se fixer un triple objectif. Premièrement, en facilitant l'étude des phénomènes de mobilité ou de diffusion dans les matériaux par la comparaison des résultats obtenus théoriquement avec les données expérimentales. Ce faisant, on peut apporter des éléments utiles et nouveaux sur les mécanismes physiques qui déterminent la dynamique électronique dans un semiconducteur. Deuxièmement en permettant une étude précise des variations de la vitesse de dérive et du coefficient de diffusion en régimes stationnaires ou non, ces méthodes peuvent 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 la simulation directe de certains de ces composants et s'avère en définitive une méthode d'approche plus précise plus fiable et même parfois plus simple que les techniques numériques classiques[24]. Les qualités de la méthode se définissent par la rapidité de son exécution et sa souplesse d'emploi dans les diverses applications.

La méthode de Monte Carlo est basée sur un processus à tirages au sort à partir de lois de probabilités calculées préalablement et contiennent l'essentiel de la physique du transport. Ces lois sont les probabilités d'interactions subies par les porteurs durant leur mouvement dans le semiconducteur[16].

Il y a deux approches possibles pour simuler le comportement des électrons dans un semiconducteur:

- Déterminer la fonction de répartition des électrons en résolvant l'équation de Boltzmann;
- Suivre le comportement de chaque électron au cours du temps.

La présente méthode que nous avons choisi est la simulation Particulaire de Monte Carlo et, nous allons la décrire en détail dans ce chapitre.

III.1. APPROCHE PARTICULAIRE DE MONTE CARLO

Cette approche consiste à suivre le comportement de chaque électron dans l'espace réel et dans l'espace des vecteurs d'ondes. Considérons un électron d'énergie $\varepsilon(t)$, de vecteur d'onde $k(t)$ placé en $r(t)$, où règne un champ électrique $E(r, t)$.

L'action de ce champ électrique, les échanges d'énergie et d'impulsion 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 on peut, théoriquement déterminer le comportement de chaque électron au cours du temps et dans l'espace.

Une telle approche, compte tenu des très grandes densités d'atomes dans les cristaux, est totalement irréaliste avec les moyens de calculs actuels [10 –22].

Afin de ramener le problème à quelque chose de réaliste, on peut faire les hypothèses suivantes :

- Une étude statistique des échanges d'énergie possibles entre les électrons et les modes de vibrations du réseau et les impuretés permet de calculer la probabilité de ces interactions et leur action sur l'énergie et le vecteur d'onde de l'électron.
- En supposant que ces interactions sont elles-mêmes instantanées, on peut faire déplacer les électrons en vol libre sous le seul effet du champ électrique entre deux chocs. Le temps de vol libre est à déterminer par tirage au sort.
- Lorsqu'une interaction a lieu, on détermine par tirage au sort quelle est sa nature et on modifie l'énergie et le vecteur d'onde de l'électron en conséquence.
- La répartition des électrons changeant, on calcule le champ électrique qui en résulte à des intervalles de temps suffisamment petits pour pouvoir le supposer constant entre deux calculs

Cette approche faisant appel à de nombreux tirages au sort entre dans la catégorie des méthodes de Monte Carlo.

III.2. 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 [15 -16].

Si $\lambda(k(t))\partial t$ la probabilité pour qu'un électron ait une interaction entre t et $t+\partial t$ (les expressions de $\lambda(k(t))$ pour les différents processus sont données au chapitre II paragraphe 2), la probabilité P au temps t pour que l'interaction ne se produise pas est donnée par [23-25] :

$$P_f(t) = \prod_i (1 - \lambda(k(t))\partial t) \quad (\text{III-1})$$

$$t = \sum_i \partial t_i \quad (\text{III-2})$$

ce qui donne :

$$P_f(t) = \exp\left(-\sum_i \lambda(k(t))\partial t_i\right) \quad (\text{III-3})$$

$$P_f(t) = \exp\left(-\int_0^t \lambda(k(t'))\partial t'\right) \quad (\text{III-4})$$

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

$$p(\Delta t) = \int_0^{\Delta t} \lambda(k(t)) \cdot \exp\left[-\int_0^t \lambda(k(t')) dt'\right] dt \quad (\text{III-5})$$

$$p(\Delta t) = 1 - \exp\left[-\int_0^{\Delta t} \lambda(k(t)) dt\right] \quad (\text{III-6})$$

C'est la probabilité (III-6) qui donnera 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 étant de tirer des nombres r à distribution uniforme entre 0 et 1 et de résoudre l'équation intégrale suivante:

$$\int_0^{\Delta t} \lambda(k(t)) dt = -Lnr \quad (\text{III-7})$$

malheureusement dans le cas général l'expression de (III-6) est assez complexe et l'équation (III-7) n'est pas intégrable analytiquement. Pour simplifier l'expression (III-6), Rees 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 ou Self Scattering [24].

III.3. METHODE DU 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 III.1) [10-15-16-28].

Ce qui fournit une expression particulièrement simple pour $p(\Delta t)$

$$p(\Delta t) = \Gamma e^{-\Gamma \Delta t} \quad (\text{III-8})$$

et si r est un nombre aléatoire à distribution uniforme entre 0 et 1 on aura d'après (III-7)

$$\Delta t = -\frac{1}{\Gamma} \cdot \text{Lnr} \quad (\text{III-9})$$

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} .

Etant donné que pour utiliser la relation (III-8) il faut se fixer à l'avance la valeur de Γ , il est nécessaire de connaître à priori la valeur maximum que prendra la quantité $\sum_i \lambda_i$ dans la simulation envisagée.