

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



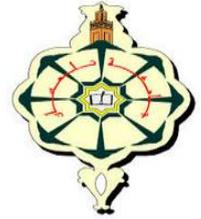
**UNIVERSITE ABOU BAKR BELKAID TLEMCCEN**

**FACULTE DES SCIENCES**

**DE L'INGENIEUR**

**DEPARTEMENT GENIE-ELECTRIQUE**

**ELECTRONIQUE**



**Thèse de Doctorat**

**Sur le thème**

**Modélisation du transport des porteurs de charge dans les  
dispositifs actifs MESFET, MOSFET à base de GaInP par la  
méthode de Monte Carlo**

Présentée et soutenue publiquement Pour l'obtention du diplôme de Docteur en Electronique

Spécialité : Micro-électronique

Par :

**Mr MASSOUM.NOURDINE**

En 2014 devant les membres du jury :

F.BREKSI-REGUIG	Professeur à l'université de Tlemcen	Président
B.BOUAZZA	Maitre de conférences à l'université de Tlemcen	Directeur de thèse
A.KADDOUN	Professeur à l'université de Sidi Bel Abbas	Examineur
M <sup>me</sup> C.SAYAH	Maitre de conférences à l'université de Ain Témouchent	Examineur
M <sup>me</sup> A.Guen.BOUAZZA	Maitre de conférences à l'université de Tlemcen	Examineur

# Dédicace

*Avec toute mon affection*

*Ma profonde reconnaissance*

*Je dédie ce modeste travail*

*A mon adorable petite ange Ilef*

*-mon père, mon frère abdmajid que dieu bénisse leur âme*

*-ma mère qui a sacrifié ce quelle avait de plus cher pour m'éclairer le chemin de la vie*

*-mon frère abdelhafid pour sa gentillesse et pour son aide édifiante*

*-et spécialement mon frère mohamed pour son soutien moral permanent et ses encouragements incessants que dieu bénisse son âme*

*-mes très chers enfants Mohamed tarek, Kawther, Assaouir, Meriem, Ilef ainsi que leur mère*

*-mes sœurs, nièces (spécialement ines et maisa), neveux, beaux-frères et formidables belles-sœurs*

*Et enfin à tous ceux qui ont sacrifié leurs temps pour la science, et à tous ceux qui utilisent la science pour le bien et la prospérité de l'humanité.*

**Nordine Massoum**

# Remerciements

*Ce travail a été effectué, grâce à Dieu tout puissant, au sein de la faculté des Sciences de l'Université Abou Bekr Belkaid de TLEMCEM.*

*Mes remerciements vont en particulier à Monsieur Benyounes Bouazza, Maître de conférence à l'université de Tlemcen pour avoir accepté de m'encadrer ainsi que pour ses compétences scientifiques, il a toujours été là pour me redonner le petit coup de pouce qui me manquait, aussi pour son aide afin de traiter les formes logistiques et administratives liés à cette thèse, ses conseils et ses qualités humaines m'ont permis de mener à bien ce travail.*

*J'adresse également mes plus vifs remerciements à Monsieur f.Briksi-Reguig professeur à l'université de Tlemcen d'avoir accepté de présider le jury de ma thèse et pour sa gentillesse de me transmettre ses connaissances durant l'année théorique.*

*J'exprime toute ma gratitude à Monsieur Kaddoun, Professeur à l'Université de Sidi bel abbés d'avoir accepté de participer à ce jury. Il nous a honorés par sa présence.*

*Mes remerciements vont également à Madame sayah chokria, qui a accepté de participer à ce jury. Et je n'oublie pas sa disponibilité et son enthousiasme qui m'ont donné confiance pour persévérer dans cette voie,*

*Merci enfin à Madame A. Guen Bouazza d'avoir rendu possible cette thèse et s'être toujours montré Gentille et Agréable avec Ses judicieuses remarques, notamment tous ce qui en rapport avec les composants actifs*

*Je tiens également à remercier très sincèrement GHAFfour KHEIR DINE, Je le remercie également pour l'apport qu'il m'a apporté de son expérience et ses compétences scientifiques Soyez assuré, monsieur, de mon plus profond respect.*

*Je terminerai par remercier Mr Hamdoun avec qui j'ai découvert la proximité intellectuelle et le plaisir de l'échange est toujours présent.*

*J'adresse ma dernière pensée à mes proches qui constituent un soutien fondamental et à qui je témoigne toute mon affection.*

*Enfin, je remercie chaleureusement et sans "limite" ma très chère mère de m'avoir, soutenu, de m'avoir tant apporté et aussi pour tout ce qu'elle m'apportera encore et encore.*

*Ma gratitude va également vers mon épouse de m'avoir supporté, de m'avoir fait oublier les tracas de la vie*

## Table des matières

<b>INTRODUCTION GENERALE.....</b>	<b>18</b>
<b>CHAPITRE I.....</b>	<b>21</b>
<b>Les Matériaux Semi-conducteurs III-V.....</b>	<b>21</b>
I-1 INTRODUCTION:.....	22
I-2 DEFINITION DES SEMI-CONDUCTEURS III-V:.....	22
I-3 Les composés binaires, ternaires et quaternaires des Semi-conducteur III-V:.....	23
I-3-1 Les composés binaires:.....	23
I-3-2 Les composés ternaires et quaternaires :.....	24
I-4 Structure cristalline.....	25
I-5 Structure de bande.....	27
I-6 Champ de claquage.....	28
I-7 Densité de porteurs intrinsèques.....	28
I-8 Mobilité et vitesse des porteurs.....	29
I-9 Conductivité thermique.....	30
I-10 Propriétés physiques et électriques.....	31
I-11 Conclusion.....	31
<b>CHAPITRE II.....</b>	<b>33</b>
<b>Transport De Charge Dans Les Semi-conducteurs.....</b>	<b>33</b>
II-1 INTRODUCTION.....	34
II-2 La dynamique des électrons:.....	36
II-3 Longueurs caractéristiques.....	38
II-3-1 Longueur d'onde électronique de Fermi.....	38
II-3-2 Libre parcours moyen élastique et inélastique.....	39
II-4 Transport électronique.....	39
II-4-1 Quelques notions sur le transport.....	39
II-4-2 Définition de la mobilité.....	39
II-5 Transport classique, Modèle de Drude/Boltzman.....	40
II-6 Modèle de Boltzmann.....	42
II-7 Transport électronique en régime stationnaire.....	46
II-8 Transport électronique non-stationnaire.....	46

II-8-1 Description théorique .....	46
<b>CHAPITRE III .....</b>	<b>50</b>
<b>    Généralités sur les Modèles De Transport.....</b>	<b>50</b>
III-1 INTRODUCTION .....	51
III-2 Notion de fonction de distribution .....	51
III-3 Equation de transport de Boltzmann.....	52
III-4 Modèle Déterministe et Stochastique .....	55
III-4-1 Modèle hydrodynamique .....	55
III-4-2 Modèle de dérive-diffusion.....	58
<b>CHAPITRE IV .....</b>	<b>61</b>
<b>    Présentation de la méthode De Monte Carlo .....</b>	<b>61</b>
IV-2 Les techniques de Monte-Carlo et les méthodes d'échantillonnage .....	63
IV-2-1 Généralités.....	63
IV-2-2 Les mécanismes de diffusion.....	64
IV-3 Les probabilités d'interactions des porteurs durant leur mouvement	65
IV-3-1 Notions d'interactions électrons-phonons.....	66
IV-3-2 Interactions élastiques :.....	67
IV-3-3 Interactions inélastiques :.....	70
IV-3-4 Interaction avec les impuretés ionisées .....	74
IV-3-5 Ionisation par impact :.....	75
IV-3-6 Interactions prépondérantes dans les semi-conducteurs ternaires.....	76
IV-3-7 Interactions des électrons avec les centres coulombiens .....	76
IV-3-8 Influence de la position de l'électron sur la nature de l'interaction .....	77
IV-4 Les approche de type Monte-Carlo semi-classique.....	79
IV-5 Principe de la méthode.....	80
IV-5-1 Temps de vol libre.....	81
IV-5-2 Méthode du self scattering.....	82
IV-6 Tirage au sort du type d'interactions subies par le porteur à la fin du temps de vol libre .....	84
IV-7 La méthode Monte Carlo à champ constant .....	85
IV-7-1 Choix des angles de déviation .....	86
IV-7-2 Etapes de calcul .....	87
IV-8 Conclusion.....	89

## **CHAPITRE V .....90**

### **Les Composants Semi-conducteurs .....90**

V-1 INTRODUCTION.....	91
V-2 Transistors à effet de champ .....	91
V-3 Transistor à effet de champ à Jonction (JFET) .....	92
V-3-1 Historique .....	92
V-3-2 Principe de fonctionnement .....	94
V-3-3 Contraintes et domaines d'utilisation .....	96
V-4 Transistor à effet de champ à grille isolée (MOSFET).....	96
V-4-1 Historique .....	96
V-4-2 Principe de fonctionnement du MOSFET .....	97
V-4-3 Contraintes et domaines d'utilisation .....	99
V-5 Transistor à effet de champ à contact Schottky (MESFET).....	100
V-5-1 Historique .....	100
V-5-2 Structure générale (Cas du MESFET GaAs).....	101
V-5-3 Principe de fonctionnement.....	102
V-6 HEMT.....	104
V-6-1 Structure générale .....	104
V-6-2 Principe de fonctionnement.....	106

## **CHAPITRE VI ..... 108**

### **La Simulation Monte Carlo pour Les Composants**

#### **Submicronique.....108**

VI-1 INTRODUCTION.....	109
VI-2 Les méthodes de Monte Carlo.....	110
VI-3 Application des méthodes de Monte Carlo aux semi-conducteurs.....	111
VI-3-1 Transistors à effet de champ .....	112
VI-3-2 Different models de simulation .....	113
VI-3-3 Intérêts du modèle Monte Carlo .....	114
VI-3-4 Processus de simulation .....	115

<b>CHAPITRE VII .....</b>	<b>119</b>
<b>Applications .....</b>	<b>119</b>
VII-1 INTRODUCTION.....	120
VII-2 Les propriétés de transport en matériaux GaInP.....	120
VII-3 Diode $n^+ - n - n^+$ .....	123
VII-4 : DISPOSITIFS MESFETS .....	127
VII-4-1 MESFET SI (simple polarisation) .....	127
VII-4-2 MESFET GaInP et GaAs (simple polarisation) .....	132
VII-4-3 GaInP : pour différentes valeurs de $V_g$ .....	136
VII-5 Conclusion:.....	140
<b>Conclusion Générale.....</b>	<b>144</b>
<b>Références bibliographiques.....</b>	<b>149</b>

## LISTE DES FIGURES

Figure I- 1 Réseau cristallin dans les structures Diamant et Zinc-blende.....	21
Figure I- 2 zone de Brillouin d'un réseau cubique à face centrées. ....	22
Figure I- 3 structure de bande d'énergie de phosphide d'indium .....	23
Figure I- 4 Caractéristiques vitesse-champ électrique en régime de transport.....	24
Figure I- 5 Influence des propriétés des matériaux sur les performances en puissance aux fréquences micro-ondes des composants. ....	26
Figure II- 1 Trajectoire d'une particule de charge $q$ dans un champ électrique $F$ .....	33
Figure II- 2 Evolution de la distribution de Fermi-Dirac .....	36
Figure II- 3 Probabilités d'interaction des électrons en fonction de leur énergie dans GaAs.....	39
Figure II- 4 Caractéristiques vitesse-champ électrique en régime de transport Stationnaire à 77 k (simulation monté Carlo) .....	40
Figure II- 5 Schéma du phénomène de survitesse .....	43
Figure IV- 1 Illustration des différents mécanismes limitant la mobilité dans un transistor MOS.. ....	57
Figure IV- 2 La déviation d'un électron par un centre coulombien.....	70
Figure IV- 3 Description du mouvement .....	73
Figure IV- 4 Organigramme général de la méthode de Monte Carlo.....	73
Figure V- 1 Caractéristiques $i_D$ - $v_{DS}$ .....	81
Figure V- 2 (a) Polarisation d'un MOSFET (b) Caractéristiques d'un MOSFET .....	83
Figure V- 3 Mosfet Zone Resistive .....	84
Figure V- 4 Mosfet Zone de coude .....	84
Figure V- 5 Coupe schématique du transistor MESFET GaAs.....	87
Figure V- 6 Zone de charge d'espace (Z.C.E) dans un MESFET non polarisé.....	89
Figure V- 7 Zone de charge d'espace (Z.C.E) dans un MESFET non polarisé.....	89
Figure V- 8 Réseau typique des caractéristiques courant-tension d'un transistor FET .....	90
Figure V- 9 Couche schématique d'un transistor HEMT. ....	91
Figure VI- 1 Structure d'un transistor à effet de champ et fonctionnement d'un MESFET .....	97
Figure VI- 2 Hiérarchie des modèles de simulations pour les composants semi-conducteurs [20] ....	99
Figure VI- 3 Organigramme général de l'algorithme de la simulation des dispositifs .....	102
Figure VII- 1 Vitesse de dérive en fonction du champ électrique à 300K .....	122
Figure VII- 2 La vitesse des électrons de dérive en fonction Du temps pour différentes valeurs de champ.....	123
Figure VII- 3 Vitesse de dérive d'électron en fonction de distance .....	124
Figure VII- 4 Diode (Si) $n^+ - n - n^+$ .....	126
Figure VII- 5 Densités des électrons .....	127
Figure VII- 6 Potentiel électrostatique .....	127

Figure VII- 7	Champ électrique .....	128
Figure VII- 8	vitesse de dérive.....	128
Figure VII- 9	l'énergie moyenne.....	129
Figure VII- 10	MESFET (Si).....	129
Figure VII- 11	Densités des électrons, vitesse de dérive, potentiel électrostatique, l'énergie moyenne et le champ électrique dans une diode de Si ( $n^+ -n- n^+$ ) .....	134
Figure VII- 12	Densités des électrons (a), vitesse de dérive (b), le champ électrique (c), l'énergie moyenne(d) dans les dispositifs GaAs (à gauche) et le GaInP (à droite) .....	137
Figure VII- 13	vitesse de dérive (a), l'énergie moyenne (b) Dans les dispositifs GaAs (à gauche) et le GaInP .....	138
Figure VII- 14	Comparaison de la vitesse et l'énergie entre Si, GaInP et GaAs .....	139
Figure VII- 15	MESFET (GaInP).....	139
Figure VII- 16	Diagramme de bande de conduction le long de la direction de transport.....	140
Figure VII- 17	Le champ électrique moyen en fonction de la distance .....	141
Figure VII- 18	densité des électrons en fonction des profils de distance pour le Mesfet.....	142
Figure VII- 19	la Vitesse des électrons en fonction de distance.....	142
Figure VII- 20	Energie des électrons en fonction de distance .....	143

# 1. Sigles

B	Bulk, Substrat
BV	Bandes de valence
CESL	<i>Contact Edge Stop Layer</i> Couche d'arrêt à la gravure des contacts
CFC	Cubique à Faces Centrées
D	Drain
DD	Simulations Dérive-Diffusion
DFT	<i>Density Functional Theory,</i> Théorie de la densité fonctionnelle
Dk	Dimensions de l'espace réciproque associé aux simulations Kubo-Greenwood (2Dk ou 3Dk) et Monte Carlo (3Dk).
DOS	Density of States, densité d'états
e <sup>-</sup>	Électron
EFA	<i>Envelop Function Approximation,</i> Approximation de la fonction enveloppe
EMA	<i>Effective Mass Approximation,</i> Approximation de la masse effective
G	Grille
Ge	Germanium
ITRS	International Technology Roadmap for Semiconductors
LCBB	<i>Linear Combination of Bulk Bands</i> Calculs de structures de bandes 2D à partir de combinaisons linéaires de fonctions d'onde de Bloch du matériau massif.
LDA	Local-Density Approximation, Approximation de la densité locale
<i>lpm</i>	Libre parcours moyen
MC	Monte Carlo
MOS	Metal Oxyde Semiconductor
MOSFET	Metal Oxyde Semiconductor Field Effect Transistor, transistor à effet de champ.

NL	Non local
N <sub>canal</sub>	Dopage canal
N <sub>grille</sub>	Dopage de grille
O <sub>x</sub>	Oxide
PZB	Première Zone de Brillouin
S	Source
SCD	Système de Coordonnées du Dispositif
SCC	Système de Coordonnées du Cristal
<i>SOI MOSFET</i>	Silicon on Insulator MOSFET
Si	Silicium
SiGe	Alliage de Si et Ge
Si <sub>1-x</sub> Ge <sub>x</sub>	Alliage SiGe avec une fraction molaire x de Germanium
SiO <sub>2</sub>	Oxide de Silicium
TCAD	Technology Computer-Aided Design, design de technologie assisté par ordinateur
light holes,	bandes des trous légers
heavy holes,	bandes des trous lourds
<hkl> et [hkl]	direction cristallographique
{hkl}	direction cristallographique équivalente
(hkl)	plan normal à la direction cristallographique <hkl>

## 2. Notations

Nous portons à l'attention des lecteurs sur le fait que le symbole  $h$ , utilisé tout au long de ce manuscrit, correspond à la constante de Planck réduite (constante divisée par  $2\pi$ ).

$a$	[m]	Paramètre de maille du réseau cubique
$a_v$	[eV]	Potentiel de déformation hydrostatique des bandes de valence
$b_v$	[eV]	Potentiel de déformation uniaxial des bandes de valence
$\bar{C}/C_{ij}$	[Pa]	Tenseur d'élasticité / Composante du tenseur d'élasticité
$C_{gs}, C_{gd}$	[F].[m] <sup>-2</sup>	Capacités de grille par unité de surface
$C_{ox}$	[F].[m] <sup>-2</sup>	Capacité d'oxyde par unité de surface

$d_v$	[eV]	Potentiel de déformation de cisaillement des bandes de valence
$D$	$[m]^2.[s]$	Coefficient de diffusion
$\vec{E}$	[V].[m]	Champ électrique
$E(k)$	[eV]	Energie de bandes, structure de bandes
$E(\rho)$	[eV]	Energie fonctionnelle
$E_c$	[eV]	Champs électrique critique
$E_{coup}$	[eV]	Energie de coupure
$E_{eff}$	$[V].[m]^{-1}$	Champ effectif
$E_f$	[eV]	Energie de Fermi
$E_g$	[eV]	Energie de gap (bande interdite)
$E_c(k)$	[eV]	Energie des bandes de conduction
$E_v(k)$	[eV]	Energie des bandes de valence
$f_0(r, t)$		Fonction de distribution à l'équilibre de la méthode Monte Carlo au point $r$ au vecteur d'onde $k$ et à l'instant $t$ .
$f(r, k, t)$		Fonction de distribution de la méthode Monte Carlo au Point au vecteur d'onde et à l'instant
$f_w(r, k, t)$		Fonction de distribution de Wigner
$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right _{coll}$	$[s]^{-1}$	Intégrale de collision
$\vec{F}$	$[Kg].[m].[s]^{-2}$	Force électrique appliquée
$g(k), g(E)$	$[m]^{-3}, [eV]^{-1}$	Densité d'états
$G$	$[m]^{-3}$	Vecteur du réseau réciproque
$G_m$	$[A].[V]^{-1}$	Transconductance
	<b><math>1.054571628.10^{-34}</math></b>	
$h$	[J].[s]	Constante de Planck réduite (constante de Planck divisée par $2\pi$ ).
	<b><math>6.58211899.10^{-16}</math></b>	
	[eV].[s]	
$H$	[eV]	Hamiltonien
$H_e$	[eV]	Hamiltonien à un électron
$I_{lin}$	$[A].[m]^{-1}$	Courant de drain dans le régime linéaire par unité de Largeur
$I_{on}$	$[A].[m]^{-1}$	Courant de drain dans le régime de saturation par unité

		De largeur
$J(r,t)$	$[A].[m]^{-2}$	Densité de courant
$L$		Associé à la vallée de conduction sur le chemin Cristallographique $\langle 111 \rangle$
$L_g$	$[m]$	Longueur de grille
$L_A$	$[m]$	Largeur du dispositif étudié
$m_0$	$[Kg]$	Masse de l'électron libre
$m^*$	$[Kg]$	Masse effective de courbure
$m_t/m_l$	$[Kg]$	Masse effective de courbure transverse / longitudinale
$m_c^*$	$[Kg]$	Masse effective de conduction, aussi nommé masse de transport
$m_Q$	$[Kg]$	Masse de confinement
$M$	$[eV]$	Hamiltonien perturbatif des interactions de la particule avec la
$n$		Symbole associé aux électrons
$p$		Symbole associé aux trous
$n(r,t)/p(r,t)$	$[m]^{-3}$	Densité d'électrons / trous dans l'espace réciproque à l'instant
$n_{tot}$	$[m]^{-3}$	Densité totale des porteurs de charge
$N_c/N_v$	$[m]^{-3}$	Densité d'états effective des électrons / trous
$N_{ch}$	$[at.].[m]^{-3}$	Dopage canal (channel)
$P$	$[Kg].[m].[s]^{-1}$	Impulsion
$ q $	$[C]$	Charge élémentaire des électrons
	<b><math>1.60217653.10^{-19}</math></b>	
$Q_{inv}/Q_{dep}$	$[C]$	Charge d'inversion / de déplétion
$\vec{R}_B$	$[m]$	Vecteur du réseau de Bravais
$R_{ch}$	$[\Omega]$	Résistance intrinsèque au canal du transistor
$R_s, R_d$	$[\Omega]$	Résistance d'accès dans les zones de Source et Drain
$S$	$[s]^{-1}$	Taux de génération / recombinaison
$S(k, k')$	$[s]^{-1}$	Densité de probabilité de passage par unité de temps D'un état initial $k$ à l'état final $k'$
$S_k(E)$	$[m]^{-2}$	Surface isoénergie dans l'espace réciproque
$T_{ox}$	$[m]$	Epaisseur d'oxyde
$T_{ox,eff}$	$[m]$	Epaisseur d'oxyde effective

$v_{therm}$	[m].[s] <sup>-1</sup>	Vitesse thermique.
$T_i, T_e$	[eV]	Energie cinétique des électrons
$u_l$	[m].[s] <sup>-1</sup>	Vitesse longitudinal du son le long de la direction <100> du Si
$v_d( \vec{E} )$	[m].[s] <sup>-1</sup>	Vitesse de dérive
$v(k)$	[m].[s] <sup>-1</sup>	Vitesse des porteurs de charge
$v_{sat}$	[m].[s] <sup>-1</sup>	Vitesse de saturation
$V(r)$	[eV]	Potentiel ionique
$V_b$	[V]	Tensions appliquées au substrat.
$V_d$	[V]	Tensions appliquées au drain.
$V_g$	[V]	Tensions appliquées à la grille
$V_s$	[V]	Tensions appliquées à la source
$V_{dd}$	[V]	Tension d'alimentation
$V_{th}$	[V]	Tension de seuil
$V_{FB}$	[V]	Tension de bande plate, flat band
$V_{ox}(z)$	[V]	Barrière de potentiel additionnelle due à l'oxyde de grille
$V(z)$	[V]	Potentiel de confinement
$V_B$	[eV]	Energie additionnelle aux bandes de valence imitant la Barrière de potentiel à l'interface Si/SiO <sub>2</sub> dans L'approximation du matériau unique
$V_C$	[eV]	même définition que pour les bandes de conduction
$V_W(r, k)$	[V]	Potentiel de Wigner
$w(r, k)$	[eV]	Energie du gaz électronique
$W$	[m]	Largeur de Grille
$\Gamma(hk)$	[s] <sup>-1</sup>	Taux global d'interaction
$\Delta$		Associé à la vallée de conduction sur le chemin Cristallographique <100>
$\bar{\epsilon}$	[u. r.]	Tenseur de déformation
$\epsilon_{ii}$	[u. r.]	Composante uniaxiale du tenseur de déformation
$\epsilon_{ij}$	[u. r.]	Composante de cisaillement du tenseur de déformation
$\epsilon_0$	[Kg] <sup>-1</sup> . [m] <sup>-3</sup> . [A] <sup>2</sup> . [s] <sup>4</sup>	<b>8.85.10<sup>-12</sup></b> Constante diélectrique du vide.
$\epsilon_{Si}$	[u. r.]	<b>11.68</b> Constante diélectrique relative du Silicium
$\epsilon_{SiO_2}$	[u. r.]	<b>4.5</b> Constante diélectrique relative de l'oxyde de grille

$u_c$	$[m]^2.[V]^{-1}.[s]^{-1}$	Contribution à la mobilité effective des interactions coulombiennes
$u_{eff}$	$[m]^2.[V]^{-1}.[s]^{-1}$	Mobilité effective
$u_n$	$[m]^2.[V]^{-1}.[s]^{-1}$	Mobilité des porteurs de charge
$u_{ph}$	$[m]^2.[V]^{-1}.[s]^{-1}$	Contribution à la mobilité effective des interactions e--phonon
$u_{sr}$	$[m]^2.[V]^{-1}.[s]^{-1}$	Contribution à la mobilité effective de la rugosité de surface
$\xi$	[u. r.]	Constante de déplacement interne
$\Xi_d^{\Delta}, \Xi_d^L$	[eV]	Potentiel de déformation hydrostatique des bandes de Conduction
$\Xi_u^{\Delta}, \Xi_u^L$	[eV]	Potentiel de déformation de cisaillement des bandes de conduction
$\Xi_{eff}$	[eV]	Potentiel de déformation acoustique
$\Pi/\pi_{ij}$	$[Pa]^{-1}$	Tenseur de piezorésistance / composante du tenseur de piezorésistance
$p(r)$	$[C].[m]^3$	Densité de charge dans la théorie DFT
$\sigma/\bar{\sigma}$	[Pa]	Valeur / tenseur de contrainte
$\sigma_{ii}$	[Pa]	Composante uniaxiale du tenseur de contrainte
$\sigma_{ij}$	[Pa]	Composante de cisaillement du tenseur de contrainte
$\sigma_{vect}$	[Pa]	Tenseur de contrainte dans sa notation vectorielle
$\Sigma$	[eV]	Self-énergie
$\tau$	[s]	Temps de relaxation
$\phi_f$	[V]	Potentiel de Fermi
$\psi(r, \vec{k})$		Fonction d'onde de la particule
$\omega_{op}$	[s] <sup>-1</sup>	Pulsation du phonon optique polaire
$\Omega$	$[m]^3$	Volume d'une cellule élémentaire cristalline

*Introduction générale*

*La science est un jeu dont la règle du jeu consiste à  
trouver quelle est la règle du jeu*

François Cavanna

## INTRODUCTION GENERALE

Le développement de nouvelles technologies pour les applications de télécommunications, de radionavigations et radars et la croissance de l'industrie des Circuits Intégrés à semi-conducteurs, durant ces deux dernières décennies, ont été suivie en parallèle par une miniaturisation continue des transistors à des dimensions de plus en plus petites pour obtenir une densité d'intégration plus élevée, une vitesse du circuit plus rapide, et une puissance de dissipation plus petite.

Ces progrès ont conduit à des outils informatiques avec des performances beaucoup plus supérieures et des coûts réduits de façon surprenante. Pour réduire davantage les composants à des dimensions inférieures à 50 nanomètres, plusieurs effets physiques entrent en jeu, incluant des effets quantiques, des effets de canal court, ... etc. Les simulateurs bidimensionnels classiques ne prennent pas en compte ces phénomènes. Pour comprendre le fonctionnement physique de ces composants électroniques avec le plus de fidélité possible, il faut donc affiner ces outils de simulation et les adapter pour prendre en compte ces nouveaux phénomènes.

Pour que les coûts des réalisations technologiques de ces composants ne soient pas élevés, il est indispensable que la modélisation mathématique et la simulation numérique surmontent ces challenges technologiques. C'est dans cette optique que s'inscrit le cadre général de notre travail de thèse. On s'est fixé comme objectif de développer un simulateur tridimensionnel, convenable pour la simulation du flux de charges dans de tels petits composants.

Pour ces raisons, il s'est avéré nécessaire d'élaborer un modèle utilisable pour les transistors dont la couche active présente un profil de concentration variable dans le sens perpendiculaire à la surface. Ce modèle doit décrire le plus précisément possible le comportement des composants, permettre une meilleure

compréhension des phénomènes régissant leur fonctionnement et être utilisable pour l'optimisation de leurs performances. L'objet de nos travaux est de proposer un tel modèle pour les régimes de fonctionnement statique et dynamique petits signaux. La présentation de ce modèle s'effectue en trois chapitres principaux.

Le premier chapitre est délimité sur les matériaux semi-conducteurs III-V, dans ce chapitre, nous présentons les propriétés fondamentales des composés semi-conducteurs III-V zinc-blende, en particulier GaP, InP et GaInP : nous introduisons les différentes méthodes de calcul de la structure de bandes d'énergies dans les semi-conducteurs

Le second chapitre est dédié au transport de charges dans les semi-conducteurs, nous analysons le phénomène de transport dans les semi-conducteurs en présentant une approche analytique de l'équation de Boltzmann, appliquée à la dynamique des charges dans un semi-conducteur.

Le troisième chapitre, nous décrivons brièvement les différentes approches pour sa résolution, l'approche déterministe par des modèles de type hydrodynamique et drive diffusion, et notamment l'approche stochastique par des modèles particuliers de type Monte-Carlo.

Le quatrième chapitre est consacré à la présentation du simulateur de Monte Carlo, nous exposons les différentes étapes de la méthode de simulation de Monte Carlo appliquée à l'étude de la dynamique électronique microscopique dans les semi-conducteurs. Nous décrivons ensuite les éléments de base nécessaire comme la probabilité qui permet de déterminer la durée de vol libre des porteurs entre deux collisions sous l'influence des forces extérieures appliquée d'une part, et d'autre part, la description du comportement du porteur durant les collisions.

Au cinquième chapitre, nous rappelons les notions de base nécessaires à la compréhension des transistors à effets de champs et notamment le MESFET, nous introduisons enfin les principes de base de la modélisation et nous étudierons les

caractéristiques principales de ses composants en précisant leurs structures, leurs principes de fonctionnement dans les différentes régions, linéaire, sous linéaire et saturée.

Au sixième chapitre, nous présentons notre approche de simulation qui consiste à coupler la méthode Monte Carlo avec l'équation de Poisson, pour résoudre l'équation de transport électronique. Ensuite, la structure générale du simulateur de composants en trois dimensions, que nous avons développé, sera présentée.

Dans le dernier chapitre, nous montrerons quelques résultats de simulation obtenus par la méthode de Monte Carlo appliquée au composant submicroniques.

Finalement, la conclusion rappelle les principaux travaux réalisés au cours de notre thèse, et donne quelques perspectives et les possibilités d'extension des simulateurs réalisés.

# **CHAPITRE I**

## **LES MATERIAUX SEMI-CONDUCTEURS III-V**

**I-1 Introduction:**

L'étude des propriétés des matériaux, et en particulier de la structure de bandes, montre que les éléments les plus légers donnent des composés à large bande interdite, dont les propriétés se rapprochent de celles des isolants, et à structure de bande indirecte. Les composés incluant du bore, de l'aluminium, ou de l'azote, et le phosphore de gallium GaP entrent dans cette catégorie ; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide, qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs, ou pour l'optoélectronique où une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces. A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le thallium ou le bismuth donnent des composés à caractère métallique. On considérera donc essentiellement les composés à base de gallium (GaAs, GaSb), ou d'indium (InP, InAs, InSb), dont les propriétés sont les plus intéressantes.

La structure électronique des solides cristallins est basée sur l'hypothèse de la périodicité du cristal par translation du réseau primitif. Que devient la structure de bande si le cristal n'est plus périodique ? Soit qu'il contient des impuretés occupant au hasard les sites du réseau où qu'il soit un alliage dont on peut faire varier la concentration relative de ses constituants, il peut être binaire, ternaire, quaternaire suivant qu'il renferme deux, trois ou quatre éléments, la symétrie de translation n'est plus parfaite et le désordre est primordial. Les alliages ternaires semi-conducteurs des composés III-V qui apparaissent sous la forme  $AB_xC_{1-x}$  où  $x$  représente la concentration du composé AB et  $(1-x)$  celle du composé AC, nous ont conduit vers des applications optoélectroniques grâce à l'ajustement de plusieurs de leurs paramètres physiques en fonction de la fraction molaire  $x$ . [KITTEL83]

**I-2 Définition des semi-conducteurs III-V:**

Les matériaux III-V sont constitués des éléments des colonnes III et V de la classification périodique des éléments. (Tableau I- 1) regroupe un extrait de cette

classification (les chiffres en haut et en bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique). Ainsi, de nombreux composés binaires peuvent être réalisés

<i>IIIb</i>	<i>IVb</i>	<i>Vb</i>
13 Al 26,98	14 Si 28,09	15 P 30,97
31 Ga 69,74	32 Ge 72,59	33 As 74,92
49 In 114,82	50 Sn 118,69	51 Sb 121,75

Tableau I- 1 : extrait de la classification périodique des éléments. [ElFatimy07]

### I-3 Les composés binaires, ternaires et quaternaires des semi-conducteur III-V:

#### I-3-1 Les composés binaires:

Les semi-conducteurs binaires les plus courants sont les semi-conducteurs III-V, constitués d'éléments du groupe III (aluminium, gallium, indium, ...) et d'éléments du groupe V (azote, phosphore, arsenic, antimoine, ...). On compte par exemple dans cette famille l'arséniure de gallium (GaAs), le phosphore d'indium, l'arséniure d'indium (InAs) ou encore l'arséniure d'aluminium

Parmi tous les composés binaires possibles, tous n'ont pas le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés, et en particulier la structure de bandes montre que les éléments les plus légers donnent des composés dont laquelle la bande interdite est large et indirecte, et dans laquelle la masse effective des

électrons est élevée. Les composés contenant du bore, de l'aluminium ou de l'azote entrent dans cette catégorie [GERALD88]; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide, qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs ou pour l'optoélectronique où une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces. A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le thalium ou le bismuth donnent des composés à base de Galium (GaAs, GaSb) ou d'indium (InP, InAs, InSb) dont les propriétés sont les plus intéressantes. (Tableau I- 2) résume quelques paramètres pour différents matériaux de la famille III-V.

Composé III-V	Largeur de $E_g$ (ev)	$\mu$ cm <sup>2</sup> /VS)	$\alpha$ (A°)
AlSb	1,58	200	6,1355
BP	2,0		4,5380
GaN	3,36	380	a=3,189 (b=5,185)
GaP	2,26	110	5,4512
GaAs	1,42	8500	5,6533
GaSb	0,72	5000	6,0959
InP	1,35	4600	5,8686
InAs	0,36	33000	6,0584
InSb	0,17	80000	6,4794

Tableau I- 2 Propriété des principaux composés binaires III-V à 300 K [ELMOUFAK12]

### I-3-2 Les composés ternaires et quaternaires :

L'intérêt pratique des semi-conducteurs III-V est encore considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par substitution partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne. On sait par exemple

obtenir des alliages ternaires, ou quaternaires qui sont identifiés de la façon suivante :

 Ternaires : S'il y a substitution de 2 atomes sur l'un des sous réseaux, soit,  $A_xA'_{(1-x)}B$   $\implies$  Exemple:  $Ga_xIn_{(1-x)}P$ .

 Quaternaires 1+3 : S'il y a substitution de 3 atomes sur des sous réseaux soit :  $A_xA'_{(1-x)}A''_{(1-x-y)}B$   $\implies$  Exemple  $Ga_xIn_yAl_{(1-x-y)}As$ .

 Quaternaires 2+2 : S'il y a substitution de 2 atomes sur chacun des deux sous réseaux, soit  $A_xA'_{(1-x)}B_yB'_{(1-y)}$   $\implies$  Exemple :  
 $Ga_xIn_{(1-x)}P_yAs_{(1-y)}$

La plupart des solutions solides ainsi réalisées sont complètes, la loi de Vegard (relation linéaire entre le paramètre de réseau et la composition) est appliquée. On observe une évolution progressive et régulière des propriétés (la bande interdite et les paramètres cristallins) en fonction du taux de substitution.[CAPYY86]

Exemple:  $GaP$  et  $InP$   $\rightleftharpoons$   $(Ga,In)P$

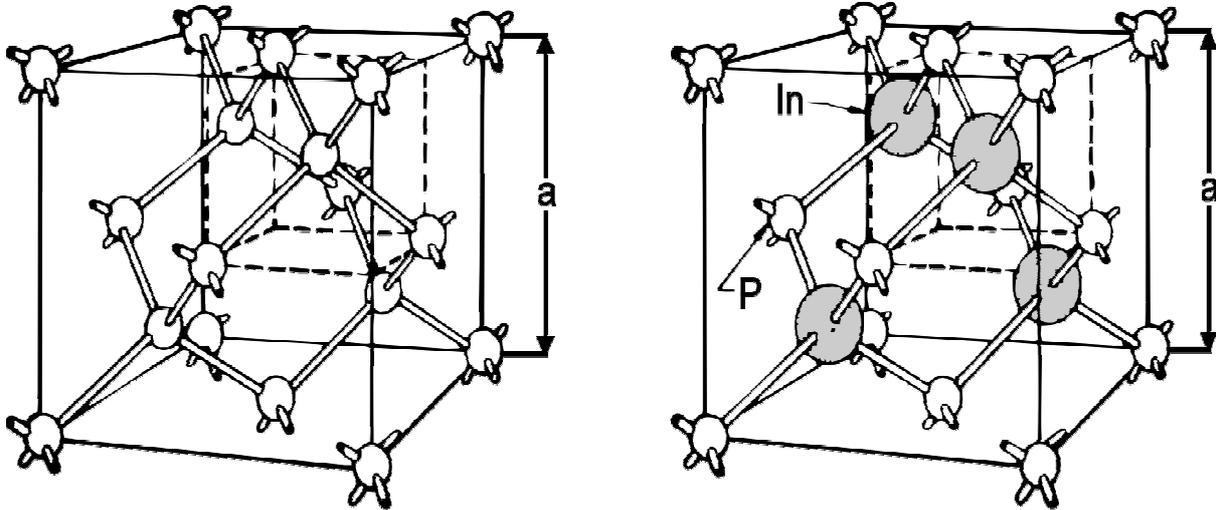
L'Indium se substitue au Gallium, donc pour 50% du Ga élément de la troisième colonne et 50% d'In élément de la cinquième colonne

On obtient  $Ga_{0.5}In_{0.5}P$ , tel-que x étant la composition en Ga « fraction molaire» :  $F(x) (Ga_x In_{(1-x)} P) = x F_{GaP} + (1-x) F_{InP}$

#### I-4 Structure cristalline

Les semi conducteurs III-V formés à partir d'Al, Ga, ou In d'une part, P, As, ou Sb d'autre part ont tous une structure de type zinc-blende. Leur réseau cristallin peut se décomposer en deux sous-réseaux cubiques à faces centrées interpénétrés, l'un étant constitué des atomes de l'élément III, l'autre des atomes de l'élément V Figure I- 1. Ces deux sous-réseaux sont décalés l'un par rapport à l'autre le long de la diagonale du cube, d'une quantité  $(a_0/4, a_0/4, a_0/4)$ ,  $a_0$  étant

le paramètre cristallin, c'est-à-dire la longueur de l'arête du cube élémentaire. La maille élémentaire, à partir de laquelle on peut reconstituer le cristal entier par un ensemble de translations, est formée par un atome de chaque type.



Diamant (C, Ge, Si...)

Zinc Blende(GaAs, InP...)

Figure I- 1 : Réseau cristallin dans les structures Diamant et Zinc-blende [PETER01], [GERAL88]

A partir du réseau cristallin, on définit le réseau réciproque, qui est le système de coordonnées [énergie - vecteur d'onde] dans lequel on représente les variations des fréquences de vibrations du réseau cristallin ou de l'énergie des états électroniques en fonction du vecteur d'onde  $\vec{K}$  caractérisant la propagation de l'onde considérée (de nature vibrationnelle ou électronique) [MURNAG44]. Le réseau réciproque associé à la structure cristalline de type zinc-blende est cubique centré. Sa maille élémentaire, qui correspond à la première zone de Brillouin est représentée sur la Figure I- 2. Elle présente un centre de symétrie  $\Gamma$  à l'origine ( $\vec{K} = 0$ ), et un certain nombre d'axes de symétrie : il existe trois axes équivalents  $\langle 100 \rangle$  coupant le bord de la zone de Brillouin aux points X, et quatre axes équivalents  $\langle 111 \rangle$ , avec les points correspondants L.

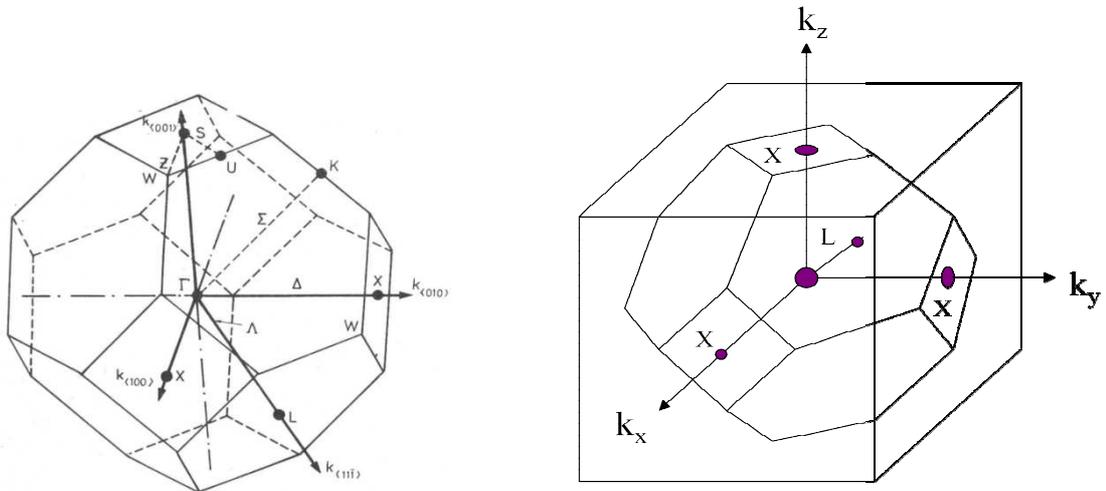


Figure I-2 : zone de Brillouin d'un réseau cubique à face centrées. [Henri07]

### I-5 Structure de bande

La description la plus significative des surfaces d'énergie offertes aux électrons s'effectue dans l'espace réciproque ou espace des vecteurs d'onde  $k$  [7]. On simplifie généralement cette description en considérant les variations de l'énergie  $E$  en fonction de  $k$  selon les directions de plus haute symétrie de cet espace. Dans ces directions, et 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

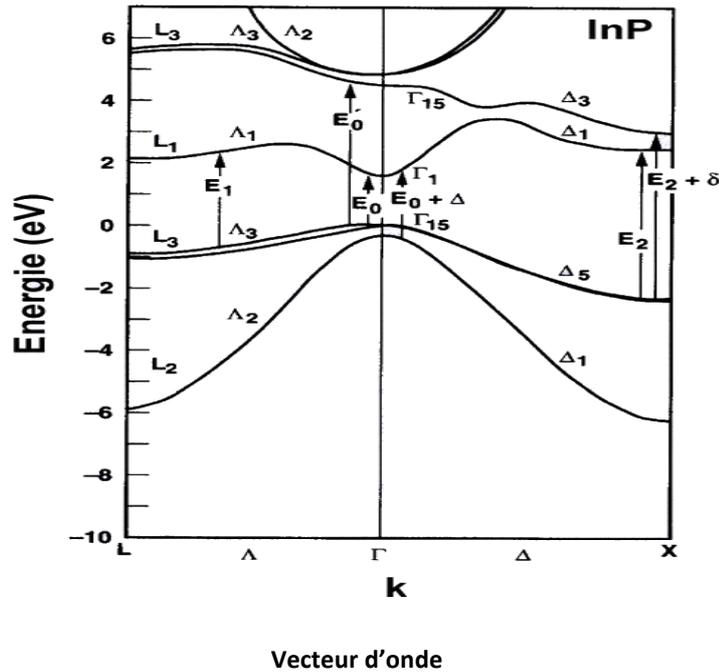


Figure I-3 structure de bande d'énergie de phosphide d'indium [DARGY94]

**I-6 Champ de claquage**

Le champ de claquage ou champ critique (noté  $E_c$  ; unité : [V/cm]) fixe la valeur de la tension maximale que peut supporter le composant. La valeur de ce champ de claquage est directement liée à la largeur de bande interdite. Plus le gap est important, plus la tension de polarisation du transistor peut être importante, ce qui est intéressant pour les applications de puissance. A noter aussi que le champ de claquage diminue lorsque la température augmente.

**I-7 Densité de porteurs intrinsèques**

Un semi-conducteur intrinsèque n'est jamais dégénéré de sorte que le produit «  $n.p = n_i$  », où  $n$  et  $p$  représentent respectivement la densité d'électrons dans la bande de conduction et la densité de trous dans la bande de valence.  $n_i$  est appelé densité des porteurs intrinsèques, c'est une caractéristique du semi-conducteur à une température donnée. Il en résulte que la densité de porteurs intrinsèques s'écrit :

$$n_i = \sqrt{N_c \cdot N_v} \cdot \exp\left(\frac{-E_g}{2K_B T}\right) = AT^3 \cdot \exp\left(\frac{-E_g}{2K_B T}\right) \tag{I-1}$$

Où  $A$  est une constante dépendante du matériau mais indépendante de la température,  $E_g$  est la valeur du gap à « 0°K », «  $K_B$  » est la constante de Boltzmann ( $1.38 \cdot 10^{-23}$  J/°K) et «  $T$  » la température en °K. Les quantités «  $N_c$  et  $N_v$  » sont les caractéristiques des densités d'états dans les bandes de conduction et de valence respectivement. La densité de porteurs intrinsèques est une fonction exponentielle de la température. Le facteur «  $T^3$  » est nettement moins important que le facteur «  $\exp(-E_g/2K_B T)$  ». La densité en porteurs intrinsèques est donc un paramètre important à prendre en considération pour des applications à haute température. [KIT98]

### I-8 Mobilité et vitesse des porteurs

La mobilité et la vitesse des porteurs représentent deux grandeurs physiques très intéressantes caractérisant les matériaux semi-conducteurs. la Figure I- 4 représente l'allure de la vitesse des électrons en fonction du champ électrique appliqué pour quelques semi-conducteurs (GaAs, InP, GaInAs). Pour les faibles champs électriques, nous constatons une proportionnalité entre l'augmentation de la vitesse des électrons et celui du champ. Pour les forts champs la vitesse présente une partie de résistance différentielle négative. Lorsque le champ électrique devient important, les interactions des porteurs avec les vibrations du réseau entraînent une diminution de la mobilité des électrons.

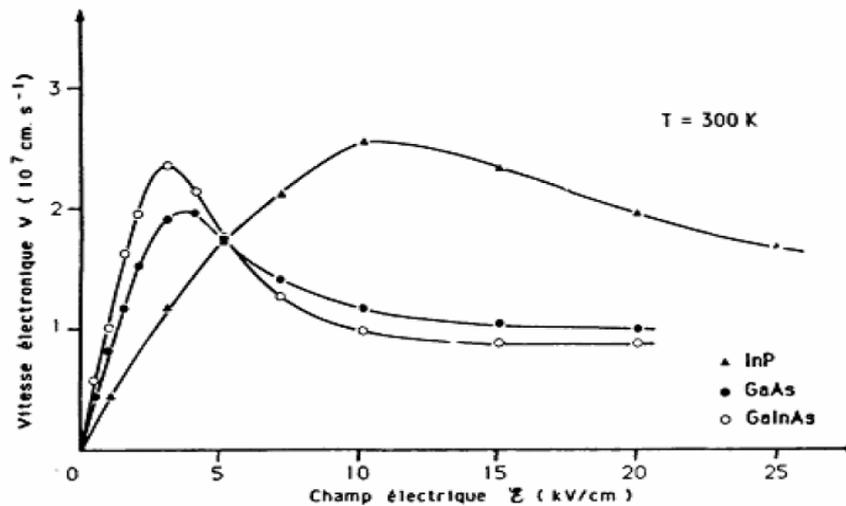


Figure I-4 Caractéristiques vitesse-champ électrique en régime de transport Stationnaire pour quelques semi-conducteurs à 300K° [BRU88]

Cette diminution de la mobilité se traduit par une variation non linéaire de la vitesse des électrons. Puisque la définition habituelle de la mobilité comme étant le rapport entre la vitesse électronique et le champ électrique.

$$V = \mu(E) \times E \tag{I-2}$$

Alors la mobilité des électrons n'est pas constante et varie fortement avec l'augmentation du champ électrique.

### I-9 Conductivité thermique

La conductivité thermique d'un matériau semi-conducteur traduit sa capacité à délivrer les calories. La chaleur non dissipée provoque une élévation de la température du composant qui va entraîner une chute de la mobilité des électrons, causant une diminution des performances électriques radio fréquence RF. Alors, une forte conductivité thermique est préférable pour des applications de puissance.

✚ L'expression de la conductivité thermique est donnée par la relation suivante:

$$K_{th} = L \times T \times \sigma \tag{I-3}$$

Où  $L$  : est le nombre de Lorentz ( $L = 2,45 \cdot 10^{-8} \text{ W} \cdot \Omega / ^\circ\text{K}$ ),  $T$  : est la température en  $^\circ\text{K}$ ,  $\sigma$  : est la conductivité électrique en  $\text{S/m}$ ,  $K_{\text{th}}$ : est la conductivité thermique en  $\text{W/m} \cdot ^\circ\text{K}$ .

 La résistance thermique  $R_{\text{th}}$  est inversement proportionnelle à la conductivité thermique.

### I-10 Propriétés physiques et électriques

Les propriétés physiques et électriques de matériau ternaire GaInP à la température ambiante ( $300\text{K}^\circ$ ) sont regroupées dans Tableau I- 3 suivant

Nombres d'atomes dans $1\text{cm}^3$	$4.46 \times 10^{22}$
Structure cristallique	Zinc-blende
Structure de la bande interdite $x < 0.5$	directe
Largeur de la bande interdite	1.84
Constante diélectrique	11.8
Densité $\rho(\text{kgm}^{-3})$	4470
Energie de phonon optique polaire	0.046
Potentiel de déformation acoustique (ev)	7.2
Affinité électronique	4.1
Concentration intrinsèque des porteurs/ $\text{cm}^3$	$1e^3$
Constante du réseau ( $\text{A}^\circ$ )	5.633
Température de fusion	
Mobilité des électrons ( $\text{cm}^2/\text{vs}$ )	4000

Tableau I- 3 Principales propriétés physiques et électroniques du GaInP

### I-11 Conclusion

Dans ce chapitre on a présenté les propriétés physiques des matériaux III-V, ainsi que les structures cristallines, les bandes d'énergies. L'utilisation des matériaux composés apporte de nombreux avantages en termes de propriétés des matériaux. En effet, le but de leur fabrication est de profiter des bonnes

propriétés de chaque matériau afin d'en former un qui sera mieux adapté à certaines applications. La combinaison de deux matériaux ou plus, permet donc d'améliorer les propriétés d'un matériau, est cela a fait l'objet de plusieurs étude et l'intérêt de plusieurs chercheurs.

Le schéma de la **Tableau I- 4** suivant résume et présente la relation liée entre quelques propriétés des matériaux semi-conducteurs et la puissance aux hautes fréquences des différentes filières de composants microélectroniques.

Propriétés du matériau	Performance du composant
Champ critique élevé.	Puissance élevée (forte densité de puissance).
Bande interdite directe.	Compatibilité aux applications optoélectroniques.
Conductivité thermique élevée.	Meilleur rendement.
Mobilité électronique élevée.	Fonctionnement possible à haute fréquence.
	Fonctionnement possible à température élevée

Tableau I- 4 Influence des propriétés des matériaux sur les performances en puissance aux fréquences micro-ondes des composants. [Sze81].

## **CHAPITRE II**

### **TRANSPORT DE CHARGE DANS LES SEMICONDUCTEURS**

### II-1 La dynamique des électrons:

Les électrons dans un cristal parfait peuvent être qualifiés en termes d'ondes de Bloch, dont les fonctions d'ondes peuvent être écrites comme suit :

$$\Psi_{nk}(r) = u_{nk}(r)e^{ik.r} \quad \text{II.1}$$

Où :

« r » est la position.

«  $\psi$  » est l'onde de Bloch.

« u » est une fonction périodique avec une périodicité identique à celle du cristal.

« k » est un nombre réel appelé vecteur d'onde de cristaux.

« e » est le nombre d'Euler.

« i » est l'unité imaginaire.

En d'autres termes, si on multiplie une onde plane par une fonction périodique, on obtient une onde de Bloch. [Yu2010].

La connaissance de la structure de bande d'un solide est le point de départ pour l'étude de toutes les propriétés électroniques, et la détermination théorique d'une structure de bande est toujours l'une des principaux problèmes ouverts de la physique du solide.

Considérant l'énergie croissante, les semi-conducteurs sont caractérisés par un gap d'énergies interdites  $E_g$  entre la dernière bande dont les états sont occupés par des électrons à la température zéro (bande de valence) et la première bande vide (bande de conduction).

La région de la structure de bande d'un semi-conducteur qui présente un intérêt quand le transport d'électrons est étudié est centrée autour de la bande d'énergie interdite et s'étend au-dessus de certains  $E_g$ , le minimum de la bande de conduction et au-dessous du sommet de la bande de valence. Dans une bande de

conduction on parle communément des électrons, tandis que dans une bande de valence les électrons manquants sont appelés trous.

À l'équilibre thermique, la bande de valence du semi-conducteur est entièrement occupée par des électrons, et la bande de conduction est entièrement vide. Ainsi, à l'instant  $t = 0$  un semi-conducteur est en fait un isolant

Si nous considérons maintenant une température au dessus de zéro, certains électrons vont quitter la bande de valence et d'occuper certains états de la bande de conduction. Dans un tel cas, les propriétés de transport du semi-conducteur sont dues à un nombre égal d'électrons et de trous.

La densité des électrons et des trous est contrôlée par les statistiques de Fermi-Dirac. Si, à une température donnée, la conduction électrique est dû essentiellement aux électrons, le semi-conducteur est appelé extrinsèque de type n, si la conduction est due aux trous, le semi-conducteur est dit extrinsèque de type p. Si, enfin, le nombre de porteurs dû à la présence d'impuretés est négligeable par rapport au nombre d'électrons qui sont excités thermiquement à partir de la bande de valence vers la bande de conduction, le semi-conducteur est dit intrinsèque [JORDI11].

Dans la région du maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction la fonction  $\varepsilon(k)$  peut être approximée par une fonction de  $k$  du second ordre et pour une situation de haute symétrie il réduit à

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{II.2}$$

En l'absence d'excitation, les porteurs de charge peuplent les bandes d'énergie en suivant une statistique de Fermi-Dirac. Dans l'InP massif, une très grande majorité des électrons sont en vallée  $\Gamma$ . En présence d'un champ électrique, cet équilibre est perturbé : les Porteurs sont accélérés par le champ

selon la relation fondamentale de la dynamique et subissent des interactions dues au réseau cristallin. Dans une approximation semi-classique, ce type de transport phonons est particulièrement bien décrit par l'équation de Boltzmann. Cette équation permet de connaître la distribution des porteurs dans l'espace des phases en fonction des forces extérieures appliquées au Semi-conducteur (champ électrique dans notre cas) et des interactions qu'ils subissent

Les mécanismes de relaxation pris en compte dans cette modélisation sont les interactions avec les phonons acoustiques (collisions élastiques) et optiques (collisions inélastiques). Les phonons optiques polaires provoquent des collisions anisotropes, intra-vallées, très probables dans les semi-conducteurs III-V. D'autres phonons optiques, non polaires, permettent des transitions inter-vallées.

## II-2 Longueurs caractéristiques

Dans la description des régimes de transport électronique, différentes longueurs caractéristiques interviennent. Elles permettent de définir l'apparition des différents régimes de conduction (diffusif, balistique) et de définir les limites de validité des différentes approches théoriques, à savoir soit une description quantique de la matière soit une description semi-classique de type Boltzmann.

### II-2-1 Longueur d'onde électronique de Fermi

Dans un système dégénéré type métal, la mer d'électrons est occupée jusqu'à l'énergie de Fermi  $E_f$ . Les électrons responsables de la conduction du courant ont une longueur d'onde proche de la longueur d'onde de Fermi  $\lambda_f$ . Elle permet à elle seule de caractériser le nombre de propriétés d'un métal comme la densité électronique, la vitesse des électrons de conduction. Nous avons :

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \Rightarrow E_f = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m^*} \Rightarrow v_f = \frac{\hbar k_f}{m^*} \quad \text{II.3}$$

Avec  $m^* = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$  : La masse effective de l'électron dans le cristal.

$k_f$  le vecteur d'onde de fermi ( $k_f = \frac{2\pi}{\lambda_f}$ )

$v_f$ : la vitesse de fermi.

### II-2-2 Libre parcours moyen élastique et inélastique

Dans un système désordonné et/ou soumis à l'agitation thermique, les électrons de conduction subissent des collisions sur leur trajectoire. Les principales causes sont :

- les impuretés statiques, elles provoquent des collisions élastiques, sans perte d'énergie, seule la direction de propagation est modifiée.
- les phonons, vibrations du réseau atomique activées par la température, ils provoquent des collisions inélastiques avec transfert d'énergie.

On définit pour ces différents types de collisions, deux temps caractéristiques  $\tau_e$  et  $\tau_i$  ainsi que des probabilités de collisions par unité de temps associées,  $P_{col-el}$  et  $P_{col-in}$  :

$\tau_e$  : Temps de collision élastique

Tel que  $P_{col-el}(dt) = \frac{dt}{\tau_e}$

$\tau_i$  : Temps de collision inélastique

Tel que  $P_{col-in}(dt) = \frac{dt}{\tau_i}$

On définit alors deux longueurs caractéristiques du transport, le libre parcours moyen élastique  $l_e = v_f \tau_e$  et le libre parcours moyen inélastique  $l_i = v_f \tau_i$ . Ces deux longueurs représentent la distance que parcourt balistiquement un électron avant de faire une collision élastique ou inélastique [Altshu81].

### II-3 Transport électronique

En fonction du rapport entre les longueurs caractéristiques définies précédemment, différents régimes de conduction prennent place. Afin de décrire de manière simple ces régimes, différents formalismes sont introduits.

#### II-3-1 Quelques notions sur le transport

La mobilité des porteurs dans le canal est un facteur clé pour les MESFETs et MOSFETs car elle détermine le courant de drain en régime linéaire et à l'état ON (du moins en partie) dans ces dispositifs. C'est la grandeur représentative du transport dans les dispositifs de la micro-électronique. Il est important de déterminer sa valeur, ainsi que sa dépendance avec le champ électrique effectif  $E_{\text{eff}}$  et/ou la densité de porteurs.

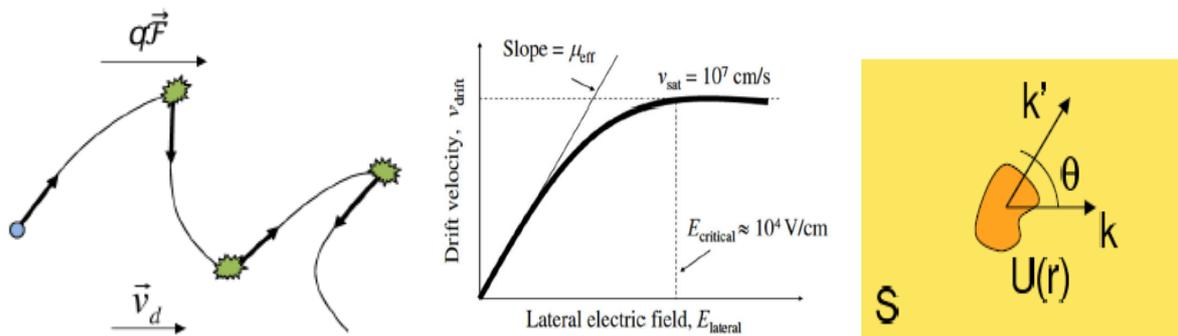


Figure II- 1 (a)

(b)

(c)

Figure II- 1: (a) Trajectoire d'une particule de charge  $q$  dans un champ électrique  $F$ . Les collisions sont isotropes et lui confèrent une vitesse moyenne  $V_d$ . (b) Relation entre la vitesse de dérive des porteurs  $V_{\text{drift}}$  et le champ électrique latéral  $E_{\text{lateral}}$  entre la source et le drain d'un transistor. A l'équilibre, i.e. pour  $E_{\text{lateral}} < E_{\text{critical}}$ , la vitesse est proportionnelle au champ. (c) Schéma de principe décrivant une collision dans le cas 2D : un électron incident est diffusé par un potentiel de diffusion  $U(r)$  dans un semi-conducteur de surface  $S$ . Le vecteur d'onde initial  $k$  et final  $k'$  forment un angle  $\theta$ . [Mikaël14]

De plus une bonne compréhension des différents mécanismes qui contribuent à limiter la mobilité est nécessaire pour maîtriser et améliorer celle-ci dans les dispositifs existants ou de nouvelles architectures, mais également pour l'inclure dans les modèles de simulation. Des efforts considérables sont étudiés aujourd'hui pour augmenter la mobilité des porteurs dans les transistors, principalement en changeant le matériau du canal et en exploitant l'effet des contraintes [Rim 2007].

### II-3-2 Définition de la mobilité

On définit la mobilité de conduction «  $\mu$  » comme le facteur de proportionnalité reliant la vitesse de dérive des porteurs (électrons ou trous)  $V_d$  au champ électrique appliqué «  $F$  » **Figure II- 1 (a)** (b)

(c). Dans les cas les plus simples, on a [Kittel 1998] :

$$\vec{v}_d = \frac{q\tau_m}{m} \vec{F} \quad \text{II. 4}$$

Soit

$$\mu = \frac{e\tau_m}{m} \quad \text{II. 5}$$

Où  $m$  est la masse de conduction, et  $\tau_m$  est le temps de relaxation du moment, qui représente le temps moyen entre deux collisions.

Dans un transistor, une couche d'inversion est créée dans le canal en surface par l'action d'un champ électrique vertical généré par la grille. La mobilité  $\mu_{\text{eff}}$  des porteurs en inversion est définie par la proportionnalité entre la vitesse de dérive des porteurs  $V_d$  et le champ électrique latéral  $E_{\text{lateral}}$  entre la source et le drain **Figure II- 1 (a)** (b) (c)

### II-4 Transport classique, Modèle de Drude/Boltzman

Le régime classique de conduction électronique est défini lorsque les conditions suivantes sont satisfaites:

- $\tau_i \ll \tau_e$  : Comme nous l'avons repéré auparavant les interférences entre ondes électroniques disparaissent, les électrons sont incohérents. Ils subissent les collisions comme des particules classiques.
- $l_i, l_e \ll L$  : Les électrons diffusent au sein du système en subissant un grand nombre de collisions.
- $l_e k_f \gg 1$  : Critère d'Ioffel-Reggel. Cette dernière condition signifie que le libre parcours moyen est beaucoup plus grand que la longueur d'onde de Fermi. Dans le cas contraire, des phénomènes importants de localisation

électronique apparaissent, une description quantique des électrons devient alors nécessaire.

### II-5 Modèle de Boltzmann

Une fois les limites de validité définies, nous pouvons établir un cadre décrivant le régime classique. Pour cela, une description semi-classique consiste à combiner le caractère quantique du solide, c'est à dire le fait qu'il possède une structure de bande avec une description classique de la dynamique électronique est introduite. Dans un potentiel cristallin périodique, les électrons sont représentés par des ondes de Bloch de vecteur d'onde  $k$ . On définit alors une vitesse de groupe de la manière suivante :

$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} = \frac{\hbar k}{m^*} \quad \text{II. 6}$$

Avec  $m^*$  : la masse effective de l'électron dans le cristal et  $P = \hbar k$  : l'impulsion.

Comme il n'y a pas de phénomènes d'interférences  $\tau_i \ll \tau_e$  la dynamique électronique entre chaque collision est décrite simplement par les lois classiques du mouvement [Guidoni97]

$$\frac{\partial \vec{P}}{\partial t} = \vec{F} \quad \vec{F} : \text{Forces extérieures appliquées à l'électron}$$

$$\Rightarrow \hbar \dot{k} = \vec{F} \Rightarrow m^* \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \vec{F}$$

L'électron dans un cristal suit la même dynamique qu'une particule dans le vide ayant pour masse : la masse effective du cristal  $m^*$  cette masse est différente de la masse réelle de l'électron  $m_e$ . Elle permet de prendre en compte l'influence du potentiel périodique cristallin.

Le modèle de Boltzmann consiste à décrire l'évolution de la répartition en énergie des électrons sous l'influence d'une force extérieure. A l'équilibre thermodynamique, sans force extérieure, les électrons obéissent à la statistique de Fermi-Dirac :

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{k_B T}\right)} \quad \text{II.7}$$

Avec  $f(E)$  : probabilité d'occupation de l'énergie  $E$ ,  $E_f$  : le niveau de Fermi ou le Potentiel chimique et  $k_B$  : la constante de Boltzman

Pour une température nulle, les électrons occupent tous les niveaux d'énergies jusqu'à  $E_f$  **Figure II- 2**. La distribution en énergie des électrons évolue sous l'application d'une force extérieure. Considérons l'application d'un champ électrique :  $\vec{E}$  ( $\vec{F} = -e\vec{E}$ ).

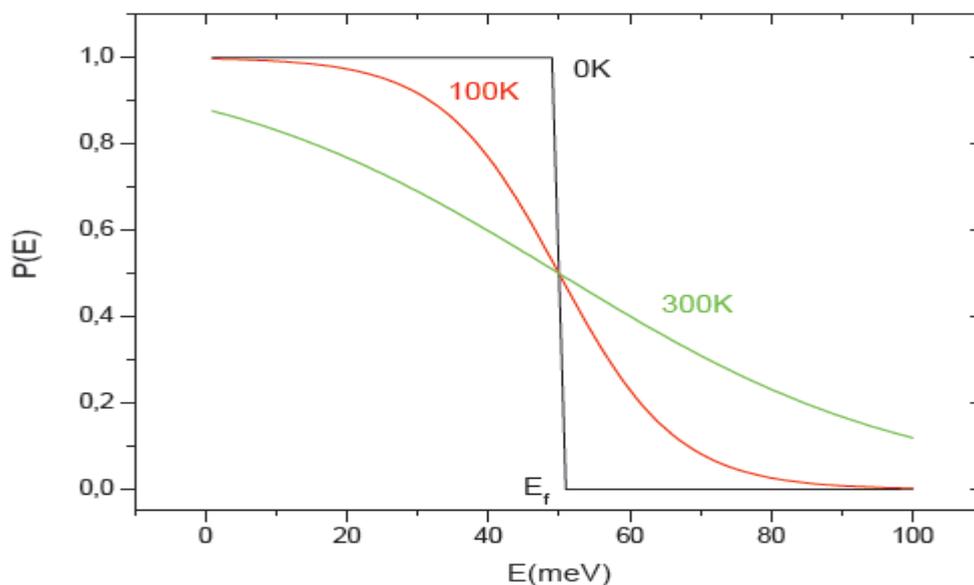


Figure II- 2 : Evolution de la distribution de Fermi-Dirac  
Pour 0K, 100K et 300K.  $E_f = 50\text{meV}$

Les électrons sont soumis à la fois aux collisions dans le cristal et au champ électrique. L'équation de la dynamique électronique s'écrit alors de la manière suivante.

$$\frac{\partial \vec{p}}{\partial t} = -\frac{\overline{p(t)}}{\tau} - e\vec{E} \quad \text{II.8}$$

En régime stationnaire, les électrons ont une vitesse de dérive  $\vec{v}_d$  déduite de l'équation II.8 telle que

$$\vec{v}_d = -e \frac{\vec{E}\tau}{m^*} \quad \text{II.9}$$

La valeur moyenne de la vitesse électronique est donc égale à  $\vec{v}_d$ . Pour déterminer l'évolution de la distribution en électron sous l'influence du champ électrique nous devons passer par la résolution rigoureuse de l'équation de Boltzmann [Ashcroft76]

$$\frac{df}{dt}_{col} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} + \vec{v}(\vec{k}) \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \quad \text{II.10}$$

### II-6 Transport électronique en régime stationnaire

Considérons un matériau semi-conducteur de type N, ayant donc un certain nombre d'électrons dans la bande de conduction. A l'équilibre à la température T, ces électrons sont animés d'un mouvement brownien; la vitesse moyenne qui en résulte est nulle. Lorsqu'on applique un champ électrique, ils sont accélérés et voient donc leur énergie augmentée, c'est-à-dire qu'ils montent dans la bande de conduction.

Cependant les "collisions" qu'ils subissent peuvent à la fois leur faire perdre de l'énergie (collisions inélastiques), et modifier la direction de leur vitesse, ce qui globalement ralentit leur mouvement parallèlement au champ électrique. Le régime de transport stationnaire est atteint quand il y a équilibre entre l'

accélération communiquée par le champ électrique et le "freinage" sous l'effet des collisions. La vitesse moyenne a alors une composante non nulle dans la direction du champ électrique : c'est la vitesse de dérive. L'énergie cinétique globale des porteurs dans un champ électrique provient donc de la superposition d'une composante ordonnée du mouvement, liée au champ, et d'une composante désordonnée correspondant à l'énergie thermique. Les valeurs relatives de ces deux composantes dépendent de la nature des collisions et du champ électrique présent, ces deux facteurs n'étant pas indépendants puisque, comme nous allons le voir, les caractéristiques des collisions dépendent de l'énergie des électrons.

Les collisions correspondent à des interactions que subissent les électrons soit avec les impuretés présentés dans le réseau cristallin (dopage), soit avec les différents types de phonons, optiques ou acoustiques.

Les interactions avec les impuretés sont élastiques, et ont pour seule conséquence de dévier la trajectoire de l'électron, ceci d'autant moins que son énergie est élevée; elles auront généralement peu d'influence sur le transport, sauf pour des matériaux très dopés.

Les interactions prépondérantes pour les électrons dans la vallée centrale  $\Gamma$  sont celles avec les phonons optiques polaires, de faible vecteur d'onde  $\vec{K}$ . Elles s'accompagnent de l'absorption ou de l'émission d'un phonon, et l'énergie d'électron varie d'une quantité égale à l'énergie du phonon. L'émission d'un phonon est un processus beaucoup plus probable que l'absorption des que l'énergie de l'électron est suffisante. Ces interactions étant de type coulombien, et les variations les plus faibles du vecteur d'onde de l'électron sont privilégiées, et celui-ci sera peu dévié. Les interactions avec les phonons optiques polaires sont donc inélastiques et anisotropes.

Dés que les électrons ont atteint une énergie suffisante pour pouvoir être transférés vers les vallées latérales de la bande de conduction, ce sont les interactions avec les phonons de grand vecteur d'onde, donc au bord de la zone de Brillouin, qui deviennent prépondérantes. Elles correspondent à un couplage par potentiel de déformation, elles sont inélastiques, et isotropes. Elles ont donc des conséquences importantes sur le transport puisqu'elles redistribuent les vitesses électroniques dans toutes les directions.[HESTO84]

Les interactions avec les phonons acoustiques du centre de la zone de Brillouin, qui ont une très faible énergie, sont pratiquement élastiques et sont isotropes.

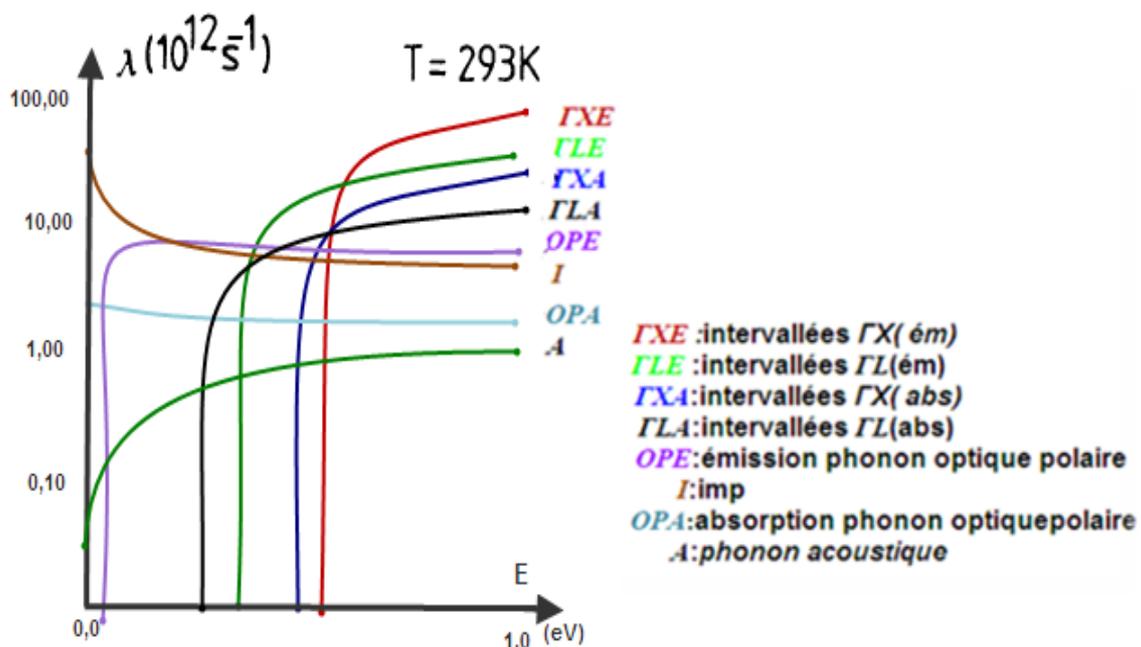


Figure II- 3 Probabilités d'interaction des électrons en fonction de leur énergie dans GaAs. [SHANK81]

La Figure II- 3 représente les différentes probabilités d'interaction à la température ambiante dans le GaAs.

On peut remarquer les seuils correspondant à l'énergie du phonon optique polaire, et à l'écart  $\Delta\epsilon_{\Gamma L}$  en énergie entre le minimum  $\Gamma$  de la bande de conduction et les vallées L.

Les propriétés que nous venons de décrire, jointes à l'augmentation importante de la masse effective des électrons lorsqu'ils passent dans les vallées latérales, font que la courbe représentant les variations de la vitesse électronique en fonction du champ électrique appliqué. **Erreur! Source du renvoi introuvable.** présente une partie de résistance différentielle négative, conduisant à des applications spécifiques (effet Gunn). Le champ correspondant au maximum de vitesse est appelé champ critique. Il est plus grand dans InP que dans GaAs dans la mesure où l'écart en énergie  $\Delta\epsilon_{rL}$  est plus important et les probabilités d'interaction avec les phonons optiques polaires plus élevées. Ces courbes montrent que si l'on conserve la définition habituelle de la mobilité comme étant le rapport entre la vitesse électronique et le champ électrique appliqué [SHANK81]:

$$\vec{V} = \mu\vec{E} \quad \text{II.11}$$

La mobilité n'est pas constante et varie fortement avec l'énergie des Electrons.

Il faut remarquer qu'à 300°K, la distribution de l'énergie thermique des électrons est telle que de nombreux électrons ont soudainement une énergie supérieure à l'énergie des phonons optiques polaires. Il n'en est pas de même à 77°K, et l'apparition de la possibilité d'émission des phonons optiques polaires quand les électrons ont atteint l'énergie nécessaire dans le champ électrique appliqué se traduit sur la courbe vitesse - champ par une rupture de pente, pour les matériaux peu dopés Figure II- 4 L'augmentation du dopage produit une diminution de la mobilité par interactions avec les impuretés [HEIBLUM85].

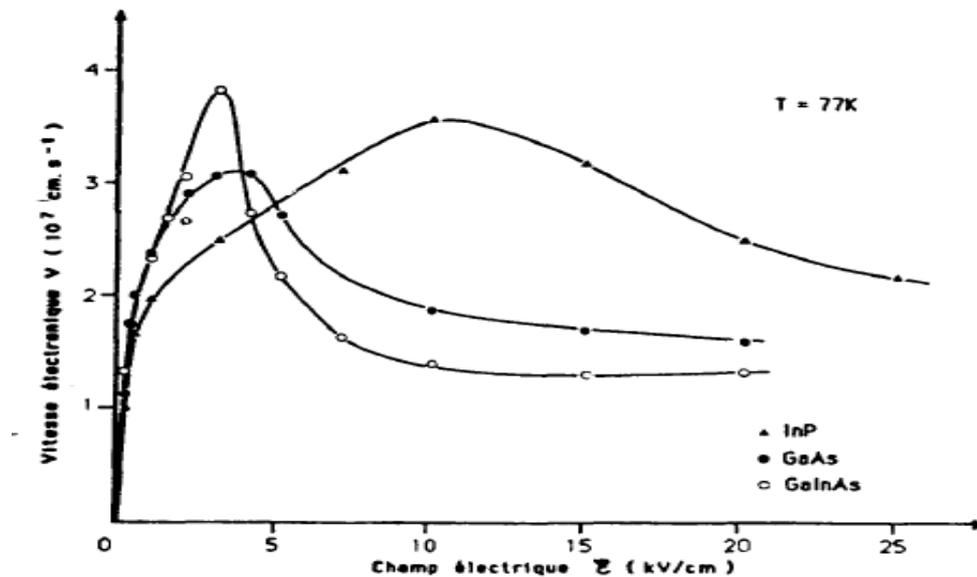


Figure II- 4 Caractéristiques vitesse-champ électrique en régime de transport Stationnaire à 77 k (simulation monté Carlo)

## II-7 Transport électronique non-stationnaire

### II-7-1 Description théorique

Le régime de transport stationnaire n'est atteint que lorsque les électrons ont subi un nombre suffisant d'interactions, c'est-à-dire lorsque la distance parcourue est grande devant le libre parcours moyen. Dans des structures submicroniques, il devient indispensable de prendre en compte les effets transitoires qui existent lorsque les électrons sont brusquement soumis à un échelon de champ électrique, qu'il soit temporel ou spatial. En effet, au début, peu d'interactions ont encore eu lieu alors que l'accélération dans le champ est effective. Il en résulte que les vitesses électroniques peuvent transitoirement être plus importantes que les vitesses en transport stationnaire : il s'agit du phénomène de survitesse. La courte durée avant toute collision correspond au régime de transport balistique.

Ces phénomènes sont régis par deux temps caractéristiques : le temps de relaxation du moment  $\tau_m$  qui caractérise la rapidité avec laquelle l'orientation du vecteur vitesse relaxe, et le temps de relaxation de l'énergie des électrons  $\tau_\epsilon$ . Ces

temps de relaxation dépendent de l'énergie des porteurs. La plupart des interactions sont isotropes et ont donc une action beaucoup plus importante sur l'orientation de la vitesse que sur l'énergie, l'énergie des phonons étant relativement faible par rapport à celle des électrons. Il en résulte que, généralement, le temps de relaxation du moment est beaucoup plus faible que celui de l'énergie. On peut proposer un modèle simplifié du phénomène de survitesse, en décrivant les équations de relaxation du moment et de l'énergie :

$$\frac{d(m^*\vec{V})}{dt} = e\vec{E} - \frac{m^*\vec{V}}{\tau_m} \quad \text{II.12}$$

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = e\vec{V} \cdot \vec{E} - \frac{\varepsilon - \varepsilon_{th}}{\tau_\varepsilon} \quad \text{II.13}$$

Supposons qu'à l'instant,  $t=0$  on applique un échelon de champ électrique d'amplitude supérieure au champ critique. Si ( $t < \tau_m$ ), on est dans le cas du régime balistique qui ne peut être décrit par les équations II-12 et II-13. Supposons donc que ( $t \gg \tau_m$ ) et que la vitesse est par conséquent en équilibre avec le champ appliqué. La première équation peut être considérée comme stationnaire c'est-à-dire que le terme «  $d/dt = 0$  », par conséquent la vitesse est donnée par l'équation suivante [S.LAVAL]

$$\vec{V} = (e\tau_m(\varepsilon)/m^*(\varepsilon))\vec{E} = \mu(\varepsilon)\vec{E} \quad \text{II.14}$$

Pour des temps suffisamment courts pour que l'énergie des porteurs ait peu augmenté ( $t \ll \tau_\varepsilon$ ), l'énergie des porteurs est voisine de l'énergie thermique  $\varepsilon_{th}$ , la mobilité est donc celle des porteurs dans le bas de la vallée  $\Gamma$  de la bande de conduction,

$\mu(\varepsilon) = \mu(\varepsilon_{th})$  soit une mobilité élevée. Par ailleurs, le champ  $\vec{E}$  étant intense, la vitesse  $\vec{V} = \mu(\varepsilon_{th})\vec{E}$  est donc importante. Pour des temps plus longs,

l'énergie des porteurs augmente, et lorsqu'ils ont atteint l'énergie de Transfer vers les vallées latérales, la mobilité décroît; on tend vers le régime de transport stationnaire Figure II- 5 avec

$$\vec{V} = \mu(\varepsilon_{th}) \vec{E}.$$

On voit donc que, dans la mesure où la mobilité initiale en champ faible est plus élevée que la mobilité en champ fort, un phénomène de survitesse peut être observé. Ceci est plus marqué dans les semi-conducteurs III-V que dans le Silicium, du fait de la structure de bande qui induit une diminution importante de la mobilité lorsque le champ électrique croît.

Ce phénomène de survitesse a été très étudié par des simulations numériques particulières de type Monte-Carlo, dans lesquelles le mouvement des particules est calculé en fonction du champ appliqué. Si on applique un créneau de champ électrique ce phénomène se produit sur des distances qui sont de l'ordre de quelques dixièmes de microns. Les vitesses maximales obtenues peuvent atteindre 6 à 8 fois la valeur de la vitesse stationnaire. Ceci doit être modulé par le fait que dans un dispositif réel, c'est le temps de transit des porteurs qui est le paramètre important

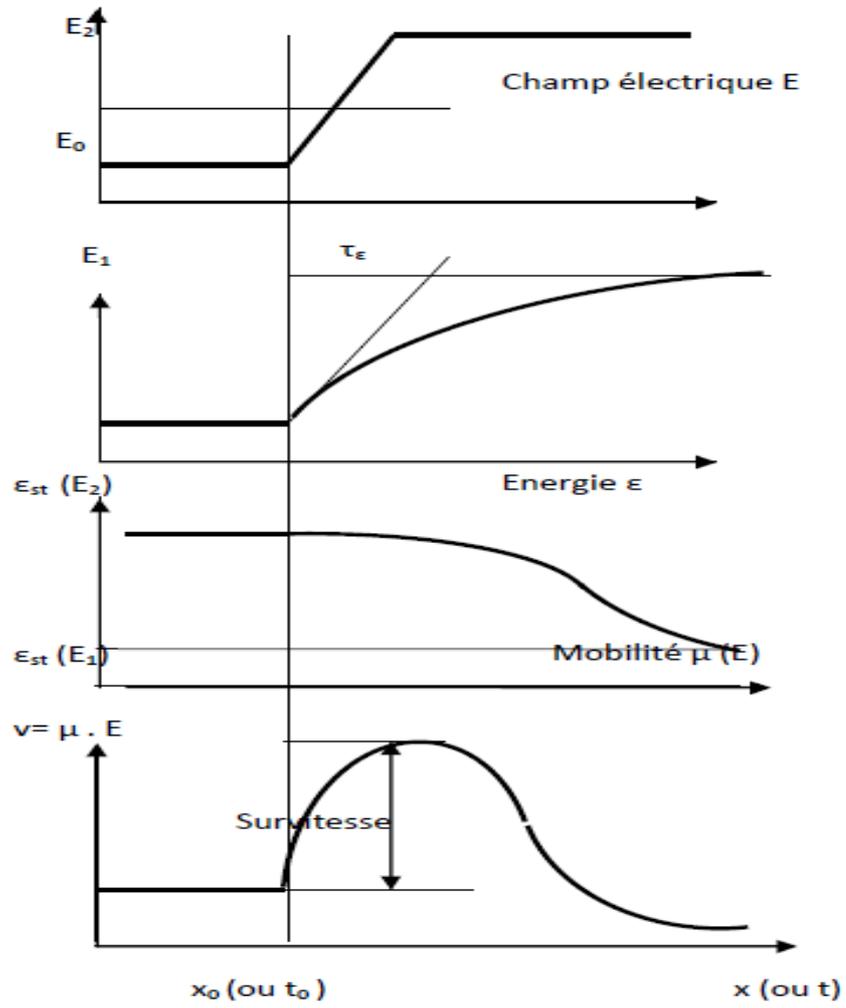


Figure II-5 : Schéma du phénomène de survitesse

## **CHAPITRE III**

### **GENERALITES SUR LES MODELES DE TRANSPORT**

### III-1 Introduction

La complexité du transport électronique dans les dispositifs à semi-conducteurs se traduit, a priori, par la grande diversité des modèles physiques utilisés pour le décrire. Tous ces modèles se distinguent les uns des autres essentiellement par la surenchère des phénomènes physiques qu'ils cherchent à approcher. Le point de départ de tous ces modèles est l'équation de transport de Boltzmann qui régit le phénomène de transport de charges dans un matériau semi-conducteur. Celle-ci a été décrite par L. Boltzmann en 1872 pour modéliser la cinétique des gaz. Sa principale caractéristique est la présence d'un opérateur de collision non linéaire et non local, qui est responsable des grandes difficultés mathématiques dans le traitement analytique et numérique de cette équation [Markowich89].

Ce chapitre est une introduction qui permet de présenter le cadre physique de ce travail de thèse. La première partie de ce chapitre est dédiée à la présentation de l'équation de transport de Boltzmann. La seconde partie est consacrée à une description sommaire des diverses interactions que les porteurs de charges peuvent subir dans leur milieu. Enfin en dernière partie, nous exposerons les différentes approches de résolution de l'équation de Boltzmann, notamment l'approche déterministe par des modèles de type hydrodynamique, et l'approche aléatoire par des modèles particuliers de type Monte-Carlo.

### III-2 Notion de fonction de distribution

L'étude classique du transport électronique consiste en la détermination de l'évolution temporelle de l'état des porteurs dans le dispositif. Les approches classiques reposent sur l'hypothèse d'une fonction de distribution  $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$  qui décrit complètement le système étudié [NEGOI98]. Ainsi, la grandeur  $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$  représente la probabilité de trouver à un instant  $t$ , un porteur positionné dans l'espace aux coordonnées  $\vec{r}$  et présentant un vecteur d'onde  $\vec{k}$ . La population de

porteurs est donc représentée par un gaz de porteurs 3D, dont la position et le moment sont parfaitement connus. La connaissance de la fonction de distribution permet alors d'accéder à toutes les grandeurs caractéristiques du système comme la concentration de porteurs, l'énergie des porteurs, la densité de courant ..., grandeurs utiles pour l'analyse du fonctionnement des composants de très petites dimensions.

### III-3 Equation de transport de Boltzmann

Le transport électronique dans un matériau semi-conducteur est régi par l'équation de Boltzmann qui établit l'évolution temporelle de la fonction de distribution. Elle s'exprime d'une façon générale sous la forme :

$$\begin{aligned} \partial f(\vec{r}, \vec{k}, t) / \partial t + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{k}, t) + \frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f(\vec{r}, \vec{k}, t) \\ = [\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t) / \partial t]_{coll} \quad \text{III. 1} \end{aligned}$$

Où

$\vec{F} = q\vec{E} + q\vec{v} \times \vec{B}$  : est la force extérieure appliquée avec  $\vec{E}$  et  $\vec{B}$  les champs extérieurs électrique et magnétique,

$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k})$  : Avec  $\varepsilon(\vec{k})$  la relation de dispersion de l'énergie et  $\hbar$  la constante de Planck réduite

$[\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t) / \partial t]_{coll}$  : Appelé intégrale de collision, caractérise l'effet des collisions de toute nature (impuretés, phonons, rugosité de surface ...) des porteurs avec le milieu. Dans tout la suite de cette étude nous considérons que le champ magnétique appliqué est nul  $\vec{B}=0$ .

Le premier terme de l'équation III.1 correspond à la variation de  $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$  en fonction du temps. Le deuxième terme prend en compte les variations en fonction de l'espace, directement reliées à la vitesse de groupe  $\vec{v}$ . Le troisième terme traduit l'effet de la force appliquée  $\vec{F}$  sur le moment  $\vec{k}$ .

➤ **Intégrale de collision**

L'intégrale de collision est définie par :

$$[\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t) / \partial t]_{coll} = \sum_{k', i} \left[ S_i(\vec{k}', \vec{k}) f(\vec{r}, \vec{k}', t) [1 - f(\vec{r}, \vec{k}, t)] - S_{ik, k'} f_{r, k, t} [1 - f_{r, k', t}] \right] \quad \text{III.2}$$

Où

$S_i(\vec{k}', \vec{k})$  : représente la probabilité de transition d'un état  $\vec{k}'$  vers un état  $\vec{k}$  par une interaction de nature  $i$ ,

$f(\vec{r}, \vec{k}', t)$  : est la probabilité d'occupation de l'état  $\vec{k}'$

$[1 - f(\vec{r}, \vec{k}, t)]$  : est la probabilité de non occupation d'un état  $\vec{k}$ . Ainsi pour un moment donné  $\vec{k}$ , la variation de  $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$  dû aux interactions est la somme des probabilités sur chacun des types d'interaction  $i$  et sur chacun des moments  $\vec{k}'$ , qu'un porteur dans un état  $\vec{k}'$  subisse une interaction de type  $i$  vers l'état  $\vec{k}$  moins la somme des probabilités qu'un porteur dans l'état  $\vec{k}$  subisse une interaction  $i$  vers un état  $\vec{k}'$  [Lepau196].

➤ **Génération de vol libre**

Dans la méthode de Monte Carlo, la dynamique du mouvement des particules est supposée se composer de vols libres terminés par des événements de diffusion instantanée, qui changent la dynamique et l'énergie de la particule. Pour simuler ce procédé, la densité de probabilité  $p(t)$  est nécessaire, dans ce qui est la probabilité conjointe  $p(t)\partial t$  que la particule arrivera à l'instant  $t$  sans diffusion après la collision précédente à  $t = 0$ , puis sont soumis à une collision dans un intervalle de temps  $\partial t$  autour de  $t$ . La probabilité de la diffusion dans cet intervalle  $\partial t$  autour du temps  $t$  peut s'écrire  $\lambda[k(t)]\partial t$ , où  $\lambda[k(t)]$  est le taux de diffusion de vecteur d'onde d'un électron ou trou.

Le taux de diffusion,  $\lambda[k(t)]$ , représente la somme des contributions de chaque mécanisme de diffusion individuelle, qui sont généralement calculés en utilisant la théorie des perturbations, comme décrit plus loin. La dépendance implicite de  $\lambda[k(t)]$  dans le temps reflète le changement dû à l'accélération de champs internes et externes [BOUAZ13]. Pour les électrons soumis à des champs électriques et magnétiques indépendant de temps, l'évolution temporelle de  $k$  entre les collisions est

$$k(t) = k(0) - \frac{e(E+v*B).t}{\hbar} \quad \text{III.3}$$

Où  $E$  est le champ électrique,  $v$  est la vitesse des électrons,  $B$  est la densité de flux magnétique. En termes de taux de diffusion,  $\lambda[k(t)]$ , la probabilité qu'une particule n'a pas subi de collision après un temps  $t$  est donnée par

$$\exp \left[ - \int_0^t \lambda[k(t')] \cdot \partial t' \right] \quad \text{III.4}$$

Ainsi, la probabilité de la diffusion dans l'intervalle de temps  $\partial t$  après un temps de vol libre  $t$  peut être écrite comme la probabilité.

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

#### ➤ **Domaine de validité**

Pour utiliser l'équation de transport de Boltzmann à bon escient, il est nécessaire de définir son domaine de validité. En effet, cette description semi-classique du transport repose sur l'hypothèse de séparation des échelles de temps et présente des limitations physiques. Les collisions entre particules sont considérées comme instantanées. Ceci implique l'hypothèse d'une durée de collision négligeable devant le temps séparant deux collisions (sinon, une même particule pourrait se retrouver sous l'influence simultanée de deux centres diffuseurs) ou autrement dit que seules les collisions binaires sont considérées.

La mécanique quantique n'est utilisée que pour décrire la structure de bandes d'énergie et les collisions, c'est-à-dire seulement pour décrire des phénomènes liés à des variations rapides de potentiel dans le temps ou dans l'espace. La nature ondulatoire des porteurs n'est donc pas prise en compte et ceux-ci sont considérés comme des particules, dont la position et le moment sont parfaitement définis, et dont le mouvement est régi par la mécanique classique de Newton. A ce jour, la méthode la plus précise pour résoudre l'équation de transport de Boltzmann ainsi qu'étudier le transport électronique dans les dispositifs de taille nanométrique est la méthode particulière de type Monte-Carlo. Le principe de cette méthode est exposé dans le paragraphe suivant.

### III-4 Modèle Déterministe et Stochastique

Un modèle est la mise ensemble de plusieurs hypothèses et système de calcul au sein d'un même et seul calcul pour étudier les résultats de ces calculs selon différents cas. Le fait de pouvoir faire varier les valeurs des hypothèses permet de connaître les résultats selon différentes vues.

Si l'on fait varier les hypothèses sur des valeurs déterminées (choisies), on a un modèle « déterministe ». Si on peut varier une ou plusieurs hypothèses de façon totalement aléatoire on a un modèle dit « stochastique ». Pour ce modèle on fait appel à des générateurs de variables aléatoires [Poupaud88].

#### III-4-1 Modèle hydrodynamique

Les équations constituant ce modèle déterministe de transport de charges dans les semi-conducteurs découlent directement à l'aide d'hypothèses simplificatrices de natures physique et mathématique sur l'équation de transport de Boltzmann [Markowich89].

Puisque le modèle hydrodynamique comme étant constitué de l'équation de Poisson (en toute rigueur, c'est une équation externe au modèle) et de trois

équations de conservation. On donne les expressions mathématiques de celles-ci, ainsi que leur interprétation physique [Lepaul96].

➤ **Équation de Poisson**

L'équation de Poisson établit un rapport entre les variations du potentiel électrostatique  $\phi$  et la densité de charge locale. Cette dernière est la somme des contributions de toutes les charges mobiles et fixes, incluant les électrons, les trous, et les impuretés ionisées.

$$\nabla(\varepsilon_0 \varepsilon_r \nabla \phi) = -q(N_D^+ - N_A^- - n + p) \quad \text{III.6}$$

Où  $\varepsilon_0$  et  $\varepsilon_r$  sont respectivement la permittivité du vide et la permittivité relative du matériau.

$q$  est la valeur absolue de la charge élémentaire de l'électron.

$N_D^+, N_A^-$  sont les densités des porteurs donneurs et accepteurs.

$n$  est la densité d'électrons libres, et  $p$  est la densité de trous libres. Le champ électrique est obtenu à partir du gradient du potentiel par la relation:

$$E = -\nabla \phi \quad \text{III.7}$$

➤ **Équation de conservation du courant**

Elle décrit la manière dont évolue la densité électronique suite aux processus de transport, de génération, et de recombinaison des porteurs. Pour les électrons, elle s'exprime par la relation suivante :

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \frac{1}{q} \nabla \cdot J = -(R - G) \quad \text{III.8}$$

$$\text{Avec } J = -qnv$$

$J$  représente la densité de courant d'électrons.

$v$  est la vitesse moyenne des électrons.

$R - G$  est le taux de recombinaison et de génération des porteurs. En pratique, divers mécanismes de recombinaison-génération sont possibles; la recombinaison directe bande-bande par des transitions de phonons, la capture et l'émission bande-piège, la recombinaison d'Auger, et l'ionisation par impact [Markowi89].

➤ **Équation de conservation du moment**

$$\frac{\partial(nm^*v)}{\partial t} + \nabla(nm^*v^2) = -qnE - \nabla(nK_B T_e) - \frac{(nm^*v)}{\tau_m} \quad \text{III.9}$$

Où  $m^*$  est la masse effective moyenne des électrons

$\tau_m$  Est le temps de relaxation de la quantité de mouvement moyenne des électrons. Le terme de gauche de l'équation de conservation du moment représente la différentielle totale de la quantité de mouvement des électrons, et le terme de droite est la somme des forces exercées sur les électrons. Le premier terme de cette somme représente la force de Coulomb.

Le deuxième terme qui écrit sous la forme  $\nabla(nK_B T_e)$ , est la force due aux variations de la pression électronique. Ecrit sous une autre forme  $K_B T_e \nabla n + n \nabla(K_B T_e)$ , la somme de deux forces apparaît: une force de diffusion de porteurs, et une force de diffusion thermique. Enfin, le dernier terme de la somme est équivalent à une force de frottement due aux interactions des porteurs avec le réseau cristallin. L'équation (III.6) peut être réécrite sous la forme suivante.

[Chai92],

$$\frac{\partial v}{\partial t} + (v \cdot \nabla)v = -\frac{qE}{m^*} - \frac{1}{nm^*} \nabla(nK_B T_e) - \frac{1}{\tau_m} \quad \text{III.10}$$

➤ **Équation de conservation de l'énergie**

$$\frac{\partial(nw)}{\partial t} + \nabla \cdot S - E \cdot J = -n \frac{w-w_0}{\tau_w} - (R - G)w \quad \text{III.11}$$

$$\text{Avec } S = Q - (w + K_B T_e) \frac{J}{q}$$

$\tau_w$  Est le temps de relaxation de l'énergie moyenne des électrons.

Le terme  $w_0 = 3/2K_B T_0$  est l'énergie moyenne à l'équilibre thermodynamique, avec  $T_0$  la température du réseau cristallin.

Le flux d'énergie thermique  $Q$  est donné par le produit d'un coefficient de conductibilité thermique  $\kappa$ , et du gradient de la température électronique:

$$Q = -k\nabla T_e \quad \text{III.12}$$

En développant le gradient du flux d'énergie  $S$ , et en supposant le terme de génération recombinaison nul, l'équation de conservation de l'énergie s'écrit:

$$\frac{\partial(nw)}{\partial t} + \nabla \cdot (nvw) = -qnE \cdot v - \nabla(nK_B T_e v) - n \frac{w-w_0}{\tau_w} - \nabla \cdot Q \quad \text{III.13}$$

La partie gauche de cette égalité représente la différentielle totale de l'énergie des électrons [Fortin96].

La partie droite correspond à la puissance reçue du champ électrique durant le déplacement des électrons, et à la puissance perdue d'une part sous l'effet des forces de pression électronique, d'autre part dans les interactions avec le réseau cristallin, et dans les échanges thermiques entre porteurs.

#### ➤ Équation du bilan énergétique

L'énergie moyenne des électrons  $w$  s'exprime comme la somme d'une énergie cinétique  $1/2m^*v^2$  prenant en compte le mouvement de dérive des électrons sous l'influence du champ électrique  $E$ , et d'une énergie thermique  $3/2K_B T_e$  traduisant le caractère aléatoire de ce mouvement.

$$w = \frac{1}{2} m^* v^2 + \frac{3}{2} K_B T_e \quad \text{III.14}$$

#### III-4-2 Modèle de dérive-diffusion

Quelques hypothèses simplificatrices, faites sur les équations précédentes, conduisent à deux variantes du modèle hydrodynamique : le modèle d'énergie-d'équilibre et le modèle de dérive-diffusion. Essayant de présenter les équations de ce dernier modèle. En effet, si on néglige le terme non linéaire de convection  $(v \cdot \nabla)v$  (terme du second ordre) dans l'équation de conservation du moment (III.10), on obtient le système d'équations d'énergie d'équilibre. Les équations de

dérive-diffusion sont déduites à partir de ce dernier modèle, en supposant en plus que la température électronique ne varie pas et qu'elle est égale à celle du réseau cristallin du semi-conducteur  $T_e = T_0$ . Ainsi, le gradient de  $T_e$  est nul, et l'équation de conservation d'énergie disparaît. Dans ce modèle, le transport de charge est dû à la combinaison de deux phénomènes:

- la dérive due au champ électrique appliqué au dispositif,
- la diffusion due à la disposition spatiale des porteurs.

Le modèle de dérive-diffusion se compose principalement de deux équations qui sont propres au modèle: l'équation de continuité de charge et l'équation du courant. L'équation de Poisson, en principe, ne fait pas partie du modèle. Elle sert seulement à calculer la force de dérive externe. Donc, elle est intégrée au modèle pour l'auto-consistance du problème [Hadji98]. Le système complet d'équations du modèle de dérive-diffusion est le suivant;

➤ **Équation de Poisson**

$$\nabla(\epsilon_0 \epsilon_r \nabla \phi) = q(N_D^+ - N_A^- - n + p) \quad \text{III.15}$$

➤ **Équation de conservation du courant**

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \frac{1}{q} \nabla \cdot \mathbf{J} = -(R - G) \quad \text{III.16}$$

➤ **Équation constitutive du courant**

En utilisant l'approximation des temps de relaxation, les coefficients de mobilité et de Diffusion, peuvent être reliés entre eux par la relation généralisée d'Einstein, et sont donnés par:

$$\mu = \frac{q\tau_m}{m^*} \quad \text{III.17}$$

et

$$D = \frac{K_B T_e}{q} \mu \quad \text{III.18}$$

A partir de l'équation de conservation du moment (III.10), on déduit la vitesse moyenne " $v$ " des électrons. En multipliant cette dernière par  $(-qn)$ , et en

introduisant les coefficients de mobilité et de diffusion, nous aboutissons à l'expression suivante de la densité de courant électronique:

$$J = q\mu nE + qD\nabla n \quad \text{III.19}$$

La densité de courant  $J$  est composée de deux termes; un courant de dérive proportionnel au champ électrique et un courant de diffusion proportionnel au gradient de la densité électronique.

## **CHAPITRE IV**

### **PRESENTATION DE LA METHODE DE MONTE CARLO**

### IV-1 Introduction

La simulation par la méthode de Monte Carlo est aujourd'hui l'une des techniques les plus utilisées pour étudier le fonctionnement physique des composants électroniques, offrant la possibilité de reproduire fidèlement les divers phénomènes microscopiques qui se produisent dans les matériaux semi-conducteurs.

La méthode de Monte Carlo permet de réaliser trois objectifs.

- ❖ elle facilite l'étude des phénomènes de mobilité ou de diffusion dans les matériaux, par la comparaison des résultats obtenus théoriquement avec les données expérimentales. Elle peut nous apporter des éléments utiles et nouveaux sur les mécanismes physiques qui déterminent la dynamique électronique dans un semi-conducteur.
- ❖ elle permet de faire une étude précise des variations de la vitesse de dérive et du coefficient de diffusion en régimes stationnaire et transitoire. Elle peut fournir les données de base nécessaires à la résolution numérique des composants à partir des équations de l'électrocinétique.
- ❖ elle permet la simulation directe de certains de ces composants et s'avèrent, en définitive, des méthodes d'approche plus précise, plus fiable et même parfois plus simple que les techniques numériques classiques. Ses qualités se définissent par la rapidité de l'exécution et la souplesse d'emploi dans les diverses applications.

La méthode de Monte Carlo est basée sur un processus de tirage au sort à partir de lois de probabilités calculées. Ces lois sont les probabilités d'interactions subies par les porteurs durant leur mouvement dans le semi-conducteur.

Il y a deux approches possibles pour simuler le comportement des électrons dans un semi-conducteur : Déterminer la fonction de répartition des électrons en résolvant l'équation de Boltzmann ; et suivre le comportement de chaque électron au cours du temps [Dollfus99].

## IV-2 Les techniques de Monte-Carlo et les méthodes d'échantillonnage

### IV-2-1 Généralités

Les techniques de Monte-Carlo sont des méthodes statistiques basées sur des tirages de nombres aléatoires suivant des lois de probabilité (ou densité de probabilité) qui décrivent les phénomènes physiques mis en jeu et permettent de simuler leur caractère aléatoire. Les méthodes de Monte-Carlo sont issues du calcul des probabilités qui trouve ses origines dans les jeux de hasard. La première théorie des probabilités à été faite par Blaise Pascal pour résoudre le problème des partis mais la théorie moderne à été fondée par [N.Komolgorov].

Les techniques de Monte-Carlo [Jam80] permettent de résoudre de façon numérique des problèmes physiques qui n'ont pas de solutions analytiques. En effet, s'il est impossible de faire des prédictions sur une grandeur physique, la densité de probabilité de cette grandeur elle est complètement déterministe, c'est-à-dire qu'on peut prédire quelle sera son évolution, au cours du temps par exemple. Les techniques de Monte-Carlo sont bien adaptées pour décrire les phénomènes d'interaction des particules avec la matière, puisque ceux-ci sont caractérisés par des sections efficaces d'interaction qui sont homogènes à des probabilités pour que les particules interagissent avec le milieu. La méthode de Monte-Carlo utilise l'échantillonnage des densités de probabilités par des tirages de nombres aléatoires pour simuler la génération d'une particule, l'interaction des particules avec la matière, etc....

La génération de nombres aléatoires se fait par le biais de séries mathématiques stochastiques, de grande période et ne présentant pas de corrélation entre les différents nombres aléatoires générés.

### IV-2-2 Les mécanismes de diffusion

Il existe plusieurs mécanismes de diffusion qui transfèrent les électrons ou trous d'un état initial de vecteur d'onde  $k$  à un état final  $k'$ . De plus, les transitions induites peuvent être intra-vallée ou inter-vallées, intra-sousbande ou inter-sousbandes.

Classiquement pour les porteurs dans le canal d'un transistor on distingue principalement Figure IV- 1(a)

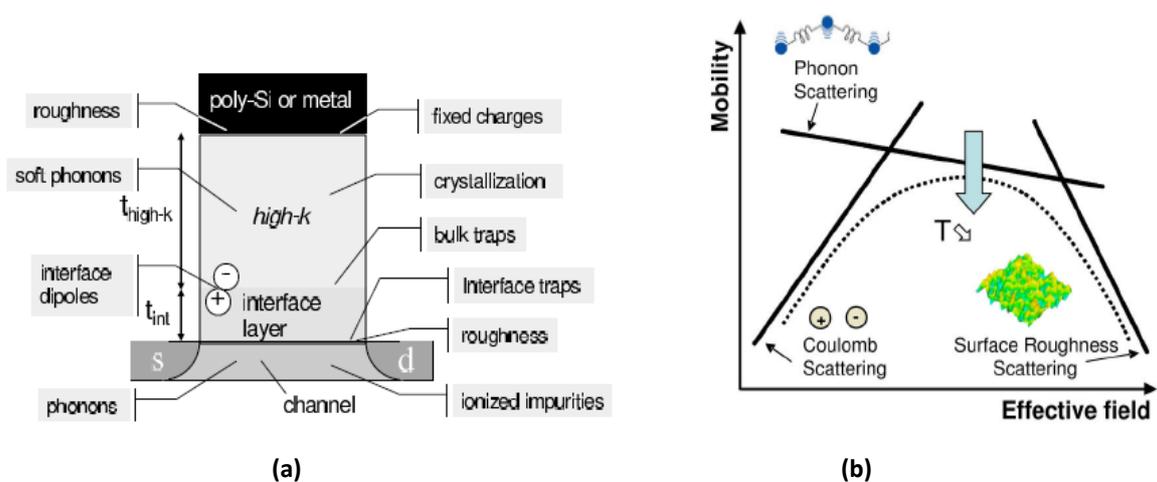


Figure IV- 1 (a) Illustration des différents mécanismes limitant la mobilité dans un transistor MOS. (b) Représentation schématique de la mobilité en fonction du champ électrique effectif  $E_{eff}$ , avec les trois principaux mécanismes limitant (d'après [Takagi 1994a]).

- ✚ les interactions avec les phonons acoustiques du silicium
- ✚ les interactions coulombiennes avec des charges (dopants, charges dans l'oxyde,...)
- ✚ les interactions avec la rugosité des interfaces (Si/oxyde principalement)
- ✚ les interactions avec les phonons optiques, responsables de la saturation de la vitesse des porteurs dans le matériau à fort champ électrique latéral [Hamaguchi 2001].

### IV-3 Les probabilités d'interactions des porteurs durant leur mouvement

Les particules durant leur mouvement (électrons ou trous) subissent différentes interactions. Le tableau suivant regroupe l'ensemble de ces collisions.

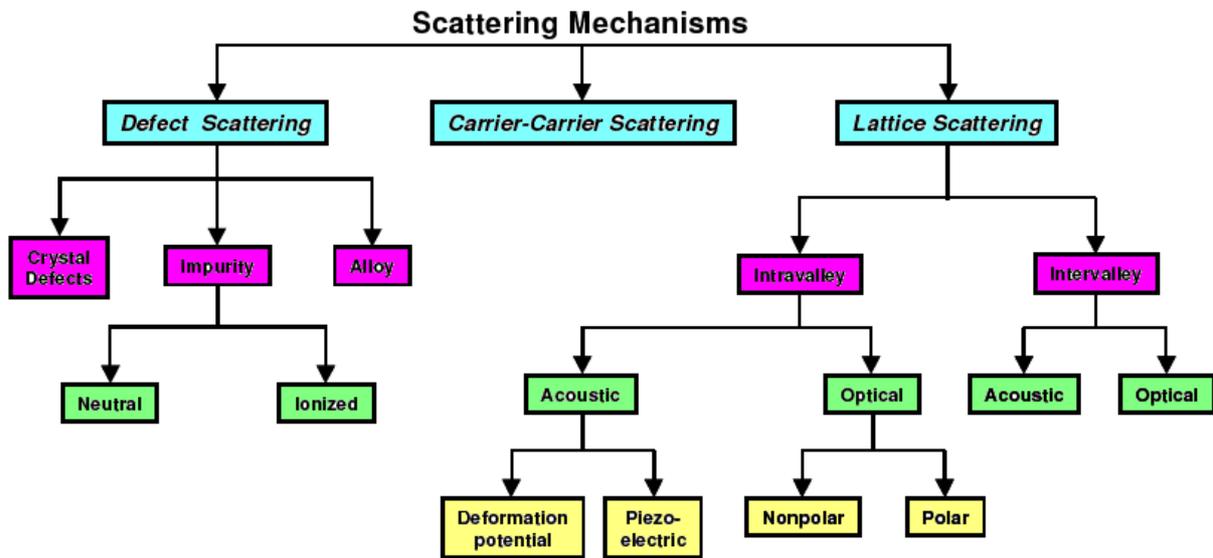


Tableau IV.1 les différents mécanismes d'interactions

### IV-3-1 Notions d'interactions électrons-phonons

Dans un matériau ; quand les électrons se déplacent, ils sont perturbés par des collisions sur les imperfections du réseau cristallin. Les perturbations les plus efficaces sont celles dues à la vibration du réseau donnant naissance aux collisions électrons-phonons.

L'analyse des collisions entre les électrons et les phonons, nous permet de connaître l'état de l'électron après le choc, et la probabilité (ou la fréquence) de collisions. L'électron possède au début, un vecteur d'onde  $\vec{k}$  et une énergie  $\varepsilon$ . Après collision, ces grandeurs deviennent  $\vec{k}'$  et  $\varepsilon'$ . Le phonon est caractérisé par son énergie  $\varepsilon_q = \hbar\omega_j(q)$  et son vecteur d'onde  $\vec{q}$

Les transitions  $\vec{k} \rightarrow \vec{k}'$  doivent vérifier les relations de conservation :

$$\varepsilon' = \varepsilon \pm \hbar\omega_j(q) \quad \text{IV.1}$$

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q} \quad \text{IV.2}$$

Ces transitions doivent être compatibles avec la structure des bandes d'énergie du matériau. Au cours de la collision, l'électron se déplace dans son diagramme de bandes. Il y a deux types de transitions :

- Les transitions intra-vallées : Elles concernent les phonons de faible vecteur d'onde qui occupent le centre de la zone de Brillouin. L'électron reste toujours dans la vallée où il se trouvait avant le choc.

- Les transitions inter-vallées : elles provoquent le passage de l'électron d'une vallée à une autre qui peut être équivalente à la première (transition  $X \rightleftharpoons X$  ou  $L \rightleftharpoons L$ ) ou non équivalente ( $\Gamma \rightleftharpoons X, \Gamma \rightleftharpoons L$  ou  $X \rightleftharpoons L$ ). Ces transitions nécessitent des phonons qui ont un grand vecteur d'onde dont le point représentatif est situé au bord de la zone de Brillouin. Chaque processus de collisions a une densité de probabilité  $S_j(k, k')$  qui caractérise la probabilité, par unité de temps, pour que le processus  $j$  fasse passer l'électron de l'état défini par

le vecteur d'onde  $\vec{k}$ , à un autre état défini par le vecteur d'onde  $\vec{k}'$ . La probabilité par unité de temps, pour avoir l'interaction j, est donnée par

$$\lambda_j(\vec{k}) = \int_{\substack{\text{sur tous} \\ \text{les états} \\ \text{k' possibles}}} S_j(\vec{k}, \vec{k}') d_3 k' \quad \text{IV. 3}$$

L'expression de  $S_j(\vec{k}, \vec{k}')$  dépend uniquement des modules des vecteurs d'ondes  $\vec{k}$  et  $\vec{k}'$ , et de l'angle  $\theta$  qui les sépare, car les vallées sont considérées isotropes.

La probabilité  $\lambda(k)$  pour qu'un électron, se trouvant dans l'état  $k$ , subisse une interaction par unité de temps, se calcule en intégrant sur tous les états finaux, la densité de probabilité  $S(\vec{k}, \vec{k}')$  du passage de l'état  $\vec{k}$  à l'état  $\vec{k}'$ :

$$\lambda(k) = \frac{V}{8\pi^3} \times 2\pi \times \int_0^\pi \left[ \int_0^\infty S(\vec{k}, \vec{k}') \times k'^2 dk' \right] \sin \beta. d\beta \quad \text{IV. 4}$$

Où  $\frac{V}{8\pi^3}$  désigne la densité d'état dans l'espace des moments, et le facteur  $2\pi$  traduit la symétrie de révolution autour de  $\vec{k}$ , de l'ensemble des états possibles.

Dans un premier temps, l'intégration se fait par rapport au module  $k'$ .

#### IV-3-2 Interactions élastiques :

Ces interactions n'influent pas de façon essentielle sur le comportement de l'électron. Elles sont néanmoins introduites pour obtenir une description aussi quantitative que possible, de la dynamique électronique

##### IV-3-2-1) Interaction acoustique :

Ces interactions sont élastiques et très importantes dans les vallées latérales. Leurs effets sont souvent masqués par les interactions inter-vallées qui prédominent en vallées latérales.

Elles se manifestent à énergie constante ; et quand un porteur subit ce type d'interactions, son module de vecteur d'onde reste constant.

La densité de probabilité s'écrit :

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \times B_{ac}(\vec{k}, \vec{k}') \times N_{ac} \times \delta(\varepsilon(k') - \varepsilon(k)) \quad \text{IV.5}$$

$$\text{Avec} \begin{cases} B_{ac}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\hbar}{2\rho \cdot s \cdot V} \times E_{ac}^2 \times |\vec{k} - \vec{k}'| \times G(\vec{k}, \vec{k}') \\ N_{ac} = \frac{1}{\exp(\hbar \cdot s \cdot |\vec{k} - \vec{k}'| / K_B \cdot T) - 1} \approx \frac{K_B \cdot T}{|\vec{k} - \vec{k}'| \cdot \hbar \cdot s} \end{cases} \quad \text{IV.6}$$

$G(\vec{k}, \vec{k}')$  Est l'intégrale de recouvrement en tenant compte de la non parabolicité des bandes d'énergie;  $\varepsilon_\infty, \varepsilon_s$  sont les permittivités diélectriques relatives dynamique et statique ; T est la température du réseau ;  $K_B$  est la constante de Boltzmann ;  $\hbar$  est la constante de Planck ; e est la charge de l'électron ;  $E_{ac}$  désigne le potentiel de déformation acoustique ; s est la vitesse du son ;  $\rho$  est la masse volumique du matériau.

L'intégration sur l'énergie donne :

$$\lambda_{ac}(\varepsilon) = \frac{K_B \cdot T \cdot E_{ac}^2 \cdot m^{*3/2}}{\pi \cdot \rho \cdot S^2 \cdot \hbar^4 \sqrt{2}} \times \delta^{1/2}(\varepsilon) \times \int_0^\pi (1 + \alpha \cdot \varepsilon \cos \beta)^2 \times \sin \beta \cdot d\beta \quad \text{IV.7}$$

Après une intégration; la probabilité d'interaction acoustique, par unité de temps, est finalement donnée par la relation :

$$\lambda_{ac}(\varepsilon) = \frac{K_B \cdot T \cdot E_{ac}^2 \cdot m^{*3/2}}{\pi \cdot \rho \cdot S^2 \cdot \hbar^4 \sqrt{2}} \times \delta^{1/2}(\varepsilon) \times \frac{3(1 + \alpha\varepsilon)^2 + (\alpha\varepsilon)^2}{(1 + 2\alpha\varepsilon)} \quad \text{IV.8}$$

Avec

$$\delta(\varepsilon) = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon) \text{ et } \delta'(\varepsilon) = \varepsilon'(1 + \alpha\varepsilon')$$

#### IV-3-2-2) Interaction piézoélectrique :

Ces interactions existent dans les cristaux piézoélectriques, mettant en jeu un phonon acoustique de faible longueur d'onde. Elles ont un effet négligeable sur

le comportement de l'électron car elles sont élastiques et ne provoquent aucune déviation.

La densité de probabilité relative au passage d'un état  $\vec{k}$  à un état  $\vec{k}'$  s'écrit :

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{e^2 K_B T P_{Pi}^2 \times G(\vec{k}, \vec{k}')}{4 \hbar \pi^2 \epsilon_o \epsilon_s |\vec{k} - \vec{k}'|^2} \times \delta(\epsilon - \epsilon') \quad \text{IV.9}$$

$P_{Pi}^2$  est le potentiel piézoélectrique qui est un coefficient sans dimension, et qui s'exprime en fonction des constantes piézoélectriques connues  $h_4, C_{11}, C_{12}$  et  $C_{44}$  par la relation :

$$P_{Pi}^2 = \frac{1}{35} \cdot h_{14}^2 \cdot \epsilon_o \epsilon_s \cdot \left( \frac{12}{C_l}, \frac{16}{C_t} \right) \quad \text{IV.10}$$

Où

$$C_l = \frac{3C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}}{5} \quad \text{IV.11}$$

$$C_t = \frac{C_{11} + C_{12} + 3C_{44}}{5} \quad \text{IV.12}$$

Après intégration sur l'énergie, l'expression de la probabilité d'interaction devient:

$$\lambda_{pi}(\epsilon) = \frac{e^2 K_B T P^2 m^{*1/2}}{\pi \hbar^2 4 \sqrt{2} \epsilon_o \epsilon_s (1 + 2\epsilon\alpha) \delta^{1/2}(\epsilon)} \times \int_0^\pi \frac{(1 + \alpha\epsilon + \alpha\epsilon \cos \beta)^2 \times \sin \beta \cdot d\beta}{1 - \cos \beta} \quad \text{IV.13}$$

Par rapport à l'énergie, on constate que l'interaction piézoélectrique est la plus improbable parmi toutes les interactions étudiées.

L'intégrale sur  $\beta$  présente une indétermination à l'origine. Cette difficulté est purement mathématique ; car  $\lambda_{pi}(\epsilon) \rightarrow \infty$  quand  $\beta \rightarrow 0$ . Pour contourner cette difficulté purement liée aux limites du modèle mathématique ; la borne inférieure est ramenée à une valeur suffisamment petite, pour que la perturbation

apportée par cette approximation soit inopérante, on prend en l'occurrence  $a=0.01$  radians. L'expression de la probabilité d'interaction s'écrit alors, après intégration (où  $P_{pi}^2$  est le potentiel piézoélectrique) :

$$\lambda_{pi}(\varepsilon) = \frac{e^2 K_B T P^2 (m^*)^{1/2}}{4\sqrt{2}\pi\hbar^2 \varepsilon_o \varepsilon_s} \cdot \frac{I}{(1 + 2\varepsilon\alpha)\delta(\varepsilon)^{1/2}} \quad \text{IV.14}$$

Avec

$$I = (1 + 2\alpha\varepsilon)^2 \ln\left(\frac{2}{1-\cos a}\right) - 2\alpha\varepsilon(1 + 2\alpha\varepsilon)(1 + \cos a) \frac{(\alpha\varepsilon)^2}{2} [4 - 1-\cos a] \quad \text{IV.15}$$

### IV-3-3 Interactions inélastiques :

Ces interactions sont dues essentiellement aux transitions inter-vallées, qui permettent le transfert des porteurs d'une vallée à une autre vallée équivalente ou non-équivalente ; elles sont accompagnées d'absorption ou d'émission d'un phonon inter-vallée dont la valeur dépend de la vallée de départ et de la vallée d'arrivée.

Une interaction inter-vallée ne peut avoir lieu que si l'énergie après absorption ou émission du phonon, est supérieure à l'énergie du fond de la vallée d'accueil ; les énergies étant repérées par rapport au bas de la vallée centrale  $\Gamma$ .

#### IV-3-3-1) Interaction optique polaire :

Ce sont des interactions très importantes dans toutes les vallées. L'énergie du phonon  $\hbar\omega$  est comparable à celle de l'électron, à température ambiante. Ce type d'interactions a un grand effet sur l'évolution de la mobilité, à faible champ électrique. Les seules énergies possibles après interaction sont donc [GALD92] :

$$\varepsilon' = \varepsilon \pm \hbar\omega_0$$

Au cours d'une interaction optique polaire, le passage d'un état  $k$  à un état  $k'$  est décrit par la densité de probabilité :

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \times B_0(\vec{k}, \vec{k}') \times \left( N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \times \delta[\varepsilon(k')] \\ \times \delta[\varepsilon(k') - \varepsilon(k) \pm \hbar\omega_0] \quad \text{IV.16}$$

Où

$$B_0(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi e^2 \hbar \omega_0}{4\pi \varepsilon_0 |\vec{k} - \vec{k}'|^2} \cdot \left( \frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right) \cdot G(\vec{k}, \vec{k}') \quad \text{IV.17}$$

Et

$$N_0 = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_0/K_B T) - 1} \quad \text{IV.18}$$

$N_0$  Est la fonction de répartition des phonons ;  $G(\vec{k}, \vec{k}')$  est l'intégrale de recouvrement en tenant compte de la non parabolicité des bandes d'énergie ;  $\varepsilon_\infty$  et  $\varepsilon_s$  : Sont les permittivités diélectriques relatives ; T est la température du réseau ;  $K_B$  est la constante de Boltzmann ;  $\hbar$  est la constante de Planck ; e est la charge de l'électron. Après les changements de variables

$$\varepsilon'(1 + \alpha\varepsilon') = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*}, \quad \delta(\varepsilon) = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon) \text{ et } \delta(\varepsilon') = \varepsilon'(1 + \alpha\varepsilon')$$

On intègre immédiatement sur  $\varepsilon'$ , compte tenu des propriétés de la fonction de Dirac, et Après intégration sur  $\beta$ ; la probabilité d'interaction optique polaire par unité de temps, est donnée par la relation suivante :

$$\lambda_{\text{op}}(\varepsilon) = \frac{e^2 (m^*)^{1/2} \omega_{\text{op}}}{4\sqrt{2}\pi \hbar \varepsilon_0} \cdot \left( \frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right) \cdot \frac{1 + 2\alpha\varepsilon'}{\sqrt{\gamma(\varepsilon)}} F(\varepsilon, \varepsilon') \quad \text{IV.19}$$

Avec

$$F(\varepsilon, \varepsilon') = \frac{1}{C} \langle A \cdot \ln \left| \frac{\delta^{1/2}(\varepsilon) + \delta^{1/2}(\varepsilon')}{\delta^{1/2}(\varepsilon) - \delta^{1/2}(\varepsilon')} \right| + B \rangle \quad \text{IV.20}$$

Et

$$A = \left[ 2(1 + \alpha\varepsilon) \times (1 + \alpha\varepsilon') + \alpha(\delta(\varepsilon) + \delta(\varepsilon')) \right]^2 \quad \text{IV.21}$$

$$B = -2\alpha[\delta(\varepsilon) \cdot \delta(\varepsilon')]^{1/2} \times \left[ 4(1 + \alpha\varepsilon)(1 + \alpha\varepsilon') + \alpha \times (\delta(\varepsilon) + \delta\varepsilon') \right] \quad \text{IV.22}$$

$$C = 4(1 + \alpha\varepsilon)(1 + \alpha\varepsilon') + (1 + 2\alpha\varepsilon)(1 + 2\alpha\varepsilon') \quad \text{IV.23}$$

#### IV-3-3-2) Interactions optiques inter-vallées équivalentes et non équivalentes

Dans ces interactions inélastiques, l'état initial et l'état final ne sont pas dans la même vallée, et la probabilité de transfert est proportionnelle au nombre des vallées équivalentes. Dès que les conditions sur l'énergie sont satisfaites, ces interactions jouent le rôle le plus important parmi toutes les autres interactions. Cela est dû à leur forte probabilité et à leurs conséquences sur le comportement de l'électron [KASZ79]. Ces interactions exigent que l'énergie après interaction, soit supérieure à l'énergie du fond de la vallée d'accueil

$$\varepsilon_i \pm \hbar\omega_{ij} + \Delta_i\Delta_j \geq 0 \quad \text{IV.24}$$

$\Delta_i$  : est l'écart d'énergie entre les bas de la vallée de départ  $\Gamma$  et de la vallée d'arrivée X.

$\Delta_j$  : est l'écart d'énergie entre les bas de la vallée de départ  $\Gamma$  et de la vallée d'arrivée L.

$\varepsilon_i$  : est l'énergie mesurée par rapport au bas de la vallée  $\Gamma$ .

L'électron transféré dans une vallée, subit les effets directs de l'interaction: variation de l'énergie et du vecteur d'onde, et toutes les discontinuités dues à la non-équivalence entre la vallée d'origine et la vallée d'arrivée : masse effective et coefficient de non parabolicité qui changent. Ce transfert provoque aussi une variation de l'énergie cinétique qui correspond à la différence de niveaux entre les deux vallées.

La densité de probabilité de passage de l'état  $k$  à l'état  $k'$ , permettant le transfert de la vallée  $i$  vers la vallée  $j$  équivalente ou non, s'écrit :

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

$$\text{Où } \begin{cases} B_{ij}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{Z_{ij} \Xi_{ij}^2 (1 + \alpha_i \varepsilon_i) (1 + \alpha_j \varepsilon_j)}{2\rho\omega_{ij}V(1 + 2\alpha_i \varepsilon_i) (1 + 2\alpha_j \varepsilon_j)} \\ N_{ij} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_{ij}/K_B T) - 1} \end{cases} \quad \text{IV.25}$$

$\hbar\omega_{ij}$  Est l'énergie du phonon échangé ;  $\Delta_i$  et  $\Delta_j$  sont les énergies relatives aux fonds des vallées  $i$  et  $j$  ;  $\varepsilon_i$  et  $\varepsilon_j$  sont les énergies relatives dans chaque vallée ;  $\alpha_i$  et  $\alpha_j$  sont les coefficients de non parabolicité des vallées ;  $Z_{ij}$  est le nombre de vallées d'arrivée de type  $j$  quand on part de la vallée  $i$  ;  $\Xi_{ij}$  est le potentiel de déformation inter-vallée entre la vallée  $i$  et la vallée  $j$  ;  $\rho$  est la masse volumique du matériau [FARAH01].

L'intégration sur tous les états  $\vec{k}'$  finaux nous conduit à la probabilité d'interaction par unité de temps et qui est donnée par

$$\lambda_{ij}(\varepsilon_i) = \frac{\Xi_{ij}^2 Z_{ij} (m_j^*)^{3/2}}{\sqrt{2}\pi\hbar^3 \rho\omega_{ij}} \cdot \frac{\delta_j(\varepsilon') (1 + \alpha_i \varepsilon_i) (1 + \alpha_j \varepsilon_j')}{(1 + 2\alpha_i \varepsilon_i)} \left[ N_{ij} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \quad \text{IV.26}$$

#### IV-3-3-3) Interaction optique non polaire :

Elles sont inélastiques, et leurs effets sur l'électron sont comparables à ceux causés par les interactions optiques inter-vallées équivalentes avec  $Z_{ij}=1$ . et elle est accompagnée d'une absorption ou d'une émission d'un phonon optique non

polaire. Le traitement de ce type d'interaction est alors le même que celui des interactions optiques polaires inter-vallées avec  $j=i$ .

#### IV-3-4 Interaction avec les impuretés ionisées

Le modèle choisi ne tient compte que d'interactions avec les impuretés totalement ionisées. La densité de probabilité relative au passage d'un état  $k$  à un état  $k'$ , au cours de cette interaction élastique, s'écrit :

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{32\pi^3 e^4 N_{imp}}{(4\pi\epsilon_0\epsilon_s)^2 \hbar V} \times \frac{G(\vec{k}, \vec{k}')}{(|\vec{k} - \vec{k}'| + \theta^2)^2} \times \delta(\epsilon(k') - \epsilon(k)) \quad \text{IV.27}$$

$N_{imp}$  est la concentration en impuretés.  $\theta$  est l'inverse de la distance d'écran ; elle est reliée à la concentration en impuretés par la relation :

$$\theta = e \sqrt{\frac{N_{imp}}{\epsilon_0 \epsilon_s K_B T}}$$

$G(\vec{k}, \vec{k}')$  est l'intégrale de recouvrement, en tenant compte de la non parabolicité des bandes d'énergie

A partir de l'équation (IV.3) qui est l'intégration sur tous les états  $\vec{k}'$ , on intègre sur l'énergie et l'on obtient la probabilité d'interaction en fonction de  $\epsilon$  :

$$\lambda(\epsilon) = \frac{e^4 N_{imp} \times m^{*3/2} \delta^{1/2}(\epsilon)}{\sqrt{2} \pi (\epsilon_0 \epsilon_s)^2 \cdot \hbar^4} \times \int_0^\pi \frac{(1 + \alpha\epsilon + \alpha\epsilon \cos \beta)^2}{(2k^2(1 - \cos \beta) + \theta^2)^2} \times \sin \beta \cdot d\beta \quad \text{IV.28}$$

Après intégration complète, la probabilité d'interaction avec les impuretés par unité de temps, est de la forme :

$$\lambda(\epsilon) = \frac{\sqrt{2} \pi N_D e^4 \epsilon^{-\frac{1}{2}}}{(4\pi\epsilon_0\epsilon_s)^2 m^{*1/2}} \cdot \frac{(1 + 2\alpha\epsilon)}{(1 + \alpha\epsilon)^{3/2}}$$

$N_D$  Est la concentration des impuretés

$$I = \frac{[1 + 2e_k^4(\theta/2K)^2]^2}{4(\theta/2K)^2[1 + (\theta/2K)^2] + e_k^4} e^2 [1 + 2e_k^4(\theta/2K)^2] \ln \left[ \frac{(\theta/2K)^2}{1 + (\theta/2K)^2} \right]$$

IV - 29

$$\text{Avec } \begin{cases} e_k = \left( \frac{\alpha \varepsilon}{1 + 2\alpha \varepsilon} \right)^{1/2} \\ \theta = e \sqrt{\frac{N_D}{\varepsilon_0 \varepsilon_s K_B T}} \\ \mathcal{E}(1 + \alpha \varepsilon) = \delta(\varepsilon) \end{cases}$$

#### IV-3-5 Ionisation par impact :

L'ionisation par impact (ou par choc) apparaît dans un matériau, pour des champs électriques intenses. En effet ; un électron qui dérive dans un solide sous l'effet d'un champ électrique, gagne de l'énergie sous forme cinétique et la transmet progressivement au cristal par le biais des nombreux chocs qu'il effectue avec les phonons du réseau. Ce processus assure la dissipation thermique de l'énergie potentielle perdue par les électrons. Cependant ; si le champ électrique est suffisamment intense, certains électrons pourront, au cours d'un vol libre, acquérir une énergie telle que leur impact sur un atome du réseau cristallin, aboutit à la rupture d'une liaison et à la création d'une paire électron-trou [SINGH93]. Ce processus, peut devenir cumulatif et conduire au phénomène d'avalanche. Cet effet est d'autant plus important que le gap du matériau est plus petit (l'énergie de seuil de l'ionisation par choc est approximativement égale à  $3/2 E_g$

#### IV-3-6 Interactions prépondérantes dans les semi-conducteurs ternaires

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 inter-vallées

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  $\vec{K} \rightarrow \vec{K}'$  avec échange de phonons de faible énergie. Ces transitions intra-vallées sont considérées comme quasiment élastiques aux températures étudiées.

#### IV-3-7 Interactions des électrons avec les centres coulombiens

Parmi les causes de perturbation de la trajectoire électronique ; il y a aussi les interactions coulombiennes sur les impuretés chargées électroniquement, qui jouent un rôle important dans les composés ternaire.

Ce problème est délicat à cause de la présence du phénomène d'écrantage des centres coulombiens par les porteurs libres. La Figure IV- 2 donne la déviation de l'électron ayant une vitesse initiale  $\vec{V}$ , par un centre coulombien de charge  $Q$ .

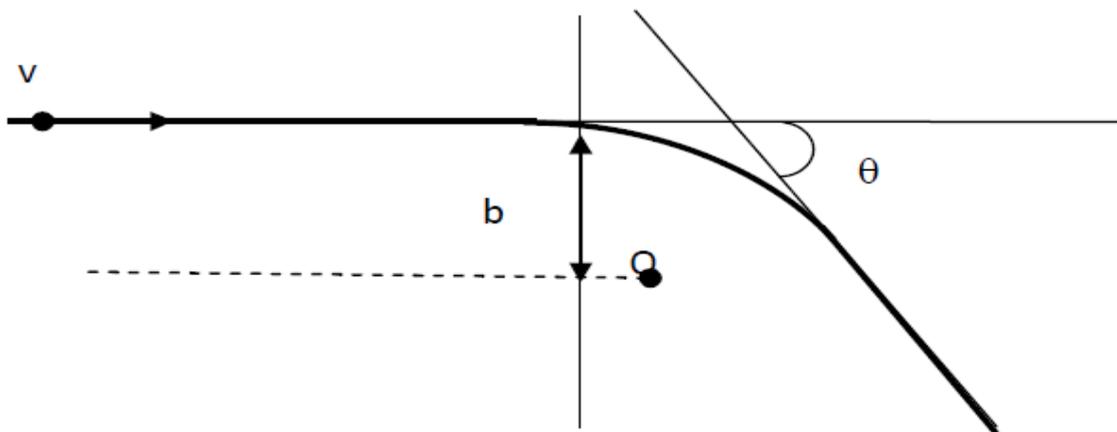


Figure IV- 2 : La déviation d'un électron par un centre coulombien

La direction du vecteur d'onde de l'électron, après le choc, devient complètement aléatoire.

Les collisions électrons-électrons, sont dans le groupe des diffusions coulombiennes. Elles sont donc d'une importance moindre car elles conservent l'énergie totale de la population électronique. Elles ont le rôle de redistribuer

l'énergie dans cette population. Elles agissent sur la forme de la fonction de distribution, ce qui a pour effet de changer l'interaction de la population avec les autres mécanismes. L'interaction électron-électron n'est importante que si la densité des électrons dépasse  $10^{18}\text{cm}^{-3}$ .

#### IV-3-8 Influence de la position de l'électron sur la nature de l'interaction

La nature, la probabilité et l'efficacité des processus d'interactions, dépendent de la position de l'électron dans son diagramme de bande.

- Dans la vallée  $\Gamma$ , à faible énergie :

Si l'énergie  $\varepsilon$  de l'électron est plus faible que l'énergie d'émission  $\hbar\omega_0$  du phonon optique polaire, les interactions acoustiques ou piézoélectriques prédomineront. Ce sont des collisions élastiques et isotropes. Elles rendent la direction du vecteur-vitesse des électrons, aléatoire. Elles sont d'une grande influence sur le transport de charges, sous l'action d'un champ électrique [HAMD06]. Leur probabilité totale est  $\lambda = 10^{12}\text{S}^{-1}$ . Dans le cas d'absorption d'un phonon, cette probabilité décroît rapidement avec la température. L'absorption des phonons optiques polaires (OPA) est possible avec une probabilité de  $10^{12}\text{S}^{-1}$ .

- Dans la vallée  $\Gamma$ , à plus forte énergie :

Lorsque l'énergie  $\varepsilon$  de l'électron est supérieure à  $\hbar\omega_0$  l'émission d'un phonon optique polaire est possible (OPE). Cette interaction a une probabilité de l'ordre de  $5 \cdot 10^{12}\text{S}^{-1}$ . Elle donne une déviation du vecteur-vitesse de l'électron, qui décroît quand l'énergie  $\varepsilon$  augmente. L'émission d'un phonon optique polaire devient le processus dominant quand l'énergie cinétique de l'électron dépasse ( $\hbar\omega_0$ ). Quand son énergie augmente et donc le module de sa vitesse augmente, l'électron est de moins en moins dévié de sa trajectoire. En dépit de la perte d'énergie due à l'émission de phonon, l'électron va se transporter de plus en plus vite dans la direction du champ électrique qui l'accélère. Cette particularité de

l'interaction optique polaire est une des raisons qui expliquent les valeurs élevées de la mobilité électronique dans ces semi-conducteurs.

- Les transferts d'électrons de la vallée  $\Gamma$  dans les vallées L ou X :

Quand l'électron possède une énergie supérieure à l'un des écarts inter-vallées  $\Delta E_{\Gamma X}$  ou  $\Delta E_{\Gamma L}$ , il peut être transféré vers les vallées supérieures de la bande de conduction (L ou X). La probabilité est très importante, au point où ces processus dominant à leur tour l'ensemble des collisions.

Les transferts inter-vallées mettent en jeu les phonons du bord de la zone de Brillouin, dont le vecteur d'onde  $K_0$  est grand devant celui de l'électron dans la vallée  $\Gamma$ . Les vecteurs  $\vec{k}'$  sont répartis sur un cercle de rayon  $K_0$ . Les transferts s'accompagnent d'une variation d'énergie ( $\hbar\nu$ ) qui s'ajoute à la transformation de l'énergie cinétique en énergie potentielle  $\Delta E_{\Gamma X}$  ou  $\Delta E_{\Gamma L}$ .

- Electrons dans les vallées supérieures :

La masse des électrons transférés dans L ou dans X, est plus grande que celle de la vallée  $\Gamma$ . Les interactions électron-phonon sont de trois types [FAWCE70]:

- Intervalles mettant en jeu des phonons acoustiques ou piézoélectriques, ou l'absorption d'un phonon optique polaire.

- Intervalles équivalentes qui consistent en un transfert d'une vallée X dans l'une des deux autres vallées équivalentes, ou d'une vallée L dans l'une des trois autres.

- Intervalles non équivalentes qui consistent en un transfert dans les vallées non équivalentes ( $\Gamma \rightleftharpoons X$ ,  $\Gamma \rightleftharpoons L$  ou  $L \rightleftharpoons X$ ).

Ces interactions sont isotropes et d'une probabilité élevée. Elles influent beaucoup sur le déplacement de l'électron dans un champ électrique. La croissance de la masse effective associée à ces propriétés, peuvent réduire la mobilité des électrons dans les vallées satellites.

#### IV-4 Les approche de type Monte-Carlo semi-classique

La méthode Monte-Carlo particulière résout de manière statistique l'équation de transport de Boltzmann. Pour cela, au lieu de calculer de façon déterministe l'évolution de la fonction de distribution, le mouvement de chacun des porteurs pris individuellement est calculé de façon probabiliste dans l'espace réel et dans l'espace des vecteurs d'onde. Ainsi, aucune hypothèse sur les grandeurs macroscopiques n'est faite puisque les porteurs sont suivis au niveau microscopique. Les principes de la méthode Monte-Carlo ayant été abondamment décrits dans la littérature, nous n'en rappelons que les grandes lignes. Le mouvement de chacun des porteurs est décrit en fonction du temps, dans les espaces réels et réciproques, comme une succession de temps de vols libres soumis Figure IV- 3 au seul effet du champ électrique local et interrompus par des interactions supposées instantanées. Ces interactions peuvent être dues aux imperfections du réseau cristallin (vibrations des atomes, présence d'impuretés) ou à la présence d'interface rugueuse (interface oxyde-silicium).

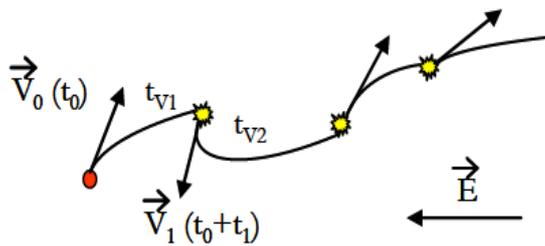


Figure IV- 3: Description du mouvement

Individuel de chaque porteur

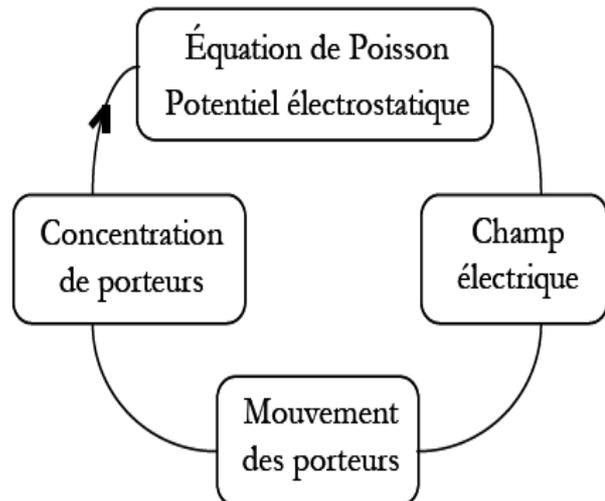


Figure IV- 4 Organigramme général de la méthode de Monte Carlo.

Le potentiel électrostatique, et le champ électrostatique, sont calculés par résolution de l'équation de Poisson dans un maillage, à intervalles de temps réguliers. Le calcul du mouvement des porteurs et de la distribution de champ électrostatique sont donc découplés temporellement. Ainsi, la résolution de l'équation de Poisson à chaque pas sur le temps permet d'assurer la cohérence entre le champ électrique appliqué et le mouvement des porteurs Individuel de chaque porteur Figure IV- 4

#### IV-5 Principe de la méthode

L'idée de base de la méthode consiste à simuler le mouvement dans le temps, un ou plusieurs porteurs dans l'espace des vecteurs d'ondes des points représentatifs de ces porteurs, tenant compte :

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

$$\frac{\partial \vec{k}}{\partial t} = \frac{q\vec{E}}{\hbar} \quad \text{IV. 30}$$

La connaissance de la bande d'énergie permet de calculer l'énergie du porteur, à chaque instant.

$$\mathcal{E}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad \text{IV. 31}$$

b) Des collisions subies par ces porteurs induisant des transitions brutales entre les états. Connaissant la position d'un porteur de charge dans l'espace des vecteurs d'onde  $\vec{k}$ , il est possible de la connaître dans l'espace géométrique réel ; et la connaissance de la structure de bande d'énergie  $\mathcal{E}(\vec{k})$  permet de calculer la vitesse des porteurs à chaque instant :

$$\vec{v} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\hbar \partial \vec{k}} \quad \text{IV.32}$$

Par intégration, nous calculons la position des porteurs, 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 trajectoire de chaque électron sera constituée par une suite de vols libres effectués sous l'influence de la force externe, puis des chocs sur les différents obstacles présentés par le milieu où évolue le porteur.

#### IV-5-1 Temps de vol libre

Le mouvement des particules est décrit comme étant une succession de vols libres (sous l'action d'un seul champ électrique); entrecoupée d'interactions instantanées

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

$$P_f(t) = \prod_i (1 - \lambda(k(t)) \partial t) \quad \text{IV.33}$$

En prenant  $t = \sum_i \partial t_i$  IV.34

On a alors :  $P_f(t) = \exp(-\sum_i(\lambda(k(t)) \partial t_i))$  IV. 35

Ou bien  $P_f(t) = \exp(-\int_0^t(\lambda(k(t')) \partial t')$  IV. 36

On déduit la probabilité pour que l'électron ait un vol libre pendant  $\partial t$  :

$$P(\Delta t) = \int_0^{\Delta t} \lambda(k(t)) \exp\left(-\int_0^t(\lambda(k(t')) \partial t')\right) \partial t \quad \text{IV. 37}$$

$$P(\Delta t) = 1 - \exp\left(-\int_0^{\Delta t} \lambda(k(t)) \partial t\right) \quad \text{IV. 38}$$

La relation (IV. 38) nous donne les durées de vol libre qui seront effectivement suivis d'un choc. La procédure adoptée initialement par Kurosawa pour déterminer les temps de libre parcours est de tirer au sort des nombres  $r$  à distribution uniforme entre 0 et 1 et de résoudre l'équation intégrale suivante :

$$\int_0^{\Delta t} \lambda(k(t)) \partial t = -\ln r \quad \text{IV. 39}$$

Dans le cas général l'expression de IV.38 est assez complexe et l'équation IV.39 n'est pas intégrable analytiquement. Pour simplifier l'expression IV. 8, Rees a suggéré d'ajouté à l'ensemble des mécanismes de collisions réelles, le processus du Self Scatterring.

#### IV-5-2 Méthode du self scattering

Cette méthode consiste à introduire une interaction fictive supplémentaire dite « Self Scattering  $\lambda_{sc}$  » qui est sans effet sur le mouvement de l'électron. La probabilité  $\lambda_{sc}$  est choisie de manière à ce que la probabilité totale d'interaction.

$$\Gamma = \lambda_{sc} + \sum_i \lambda_i \quad (\text{IV. 40})$$

Soit une constante (figure 15). Ceci fournit une expression particulièrement simple pour  $P(\Delta t)$ : probabilité pour que l'électron ait un vol libre pendant  $\Delta t$

$$P(\Delta t) = \Gamma e^{-\Gamma \Delta t} \quad \text{IV. 41}$$

Si  $r$  est un nombre aléatoire à distribution uniforme entre 0 et 1, on aura d'après (IV. 39):

$$\Delta t = -\frac{1}{\Gamma} \ln r \quad \text{IV. 42}$$

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  $\Gamma$  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  $\lambda_{sc}$ .

Etant donné que pour utiliser la relation (IV. 42), il faut se fixer à l'avance la valeur de  $\Gamma$  il est nécessaire de 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  $\Delta t$  déterminée, on calcule l'ensemble des probabilités des interactions susceptibles de se produire à l'instant considéré. Comme on a nécessairement par définition :

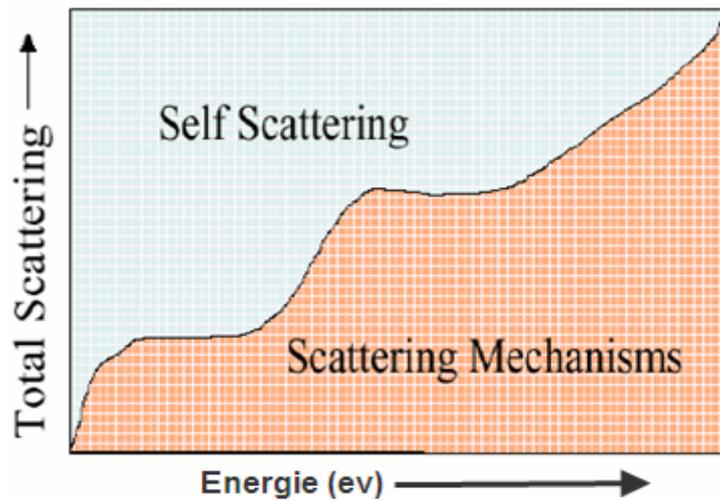
$$\sum_{i=0}^N \lambda_i(\vec{k}) = \Gamma \quad \text{IV. 43}$$

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  $\lambda_{sc}$ . Si c'est le cas, elle laissera le vecteur d'onde inchangé et le mouvement se poursuivra directement pour le  $\Delta t$  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  $\Gamma$  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.



*Probabilité totale d'interaction et self Scattering*

#### **IV-6 Tirage au sort du type d'interactions subies par le porteur à la fin du temps de vol libre**

On effectue un tirage au sort de l'interaction subie à la fin du vol libre grâce à celui d'une variable aléatoire uniforme et de la fonction de répartition de la probabilité d'interactions comme indiqué sur la Figure IV.5.

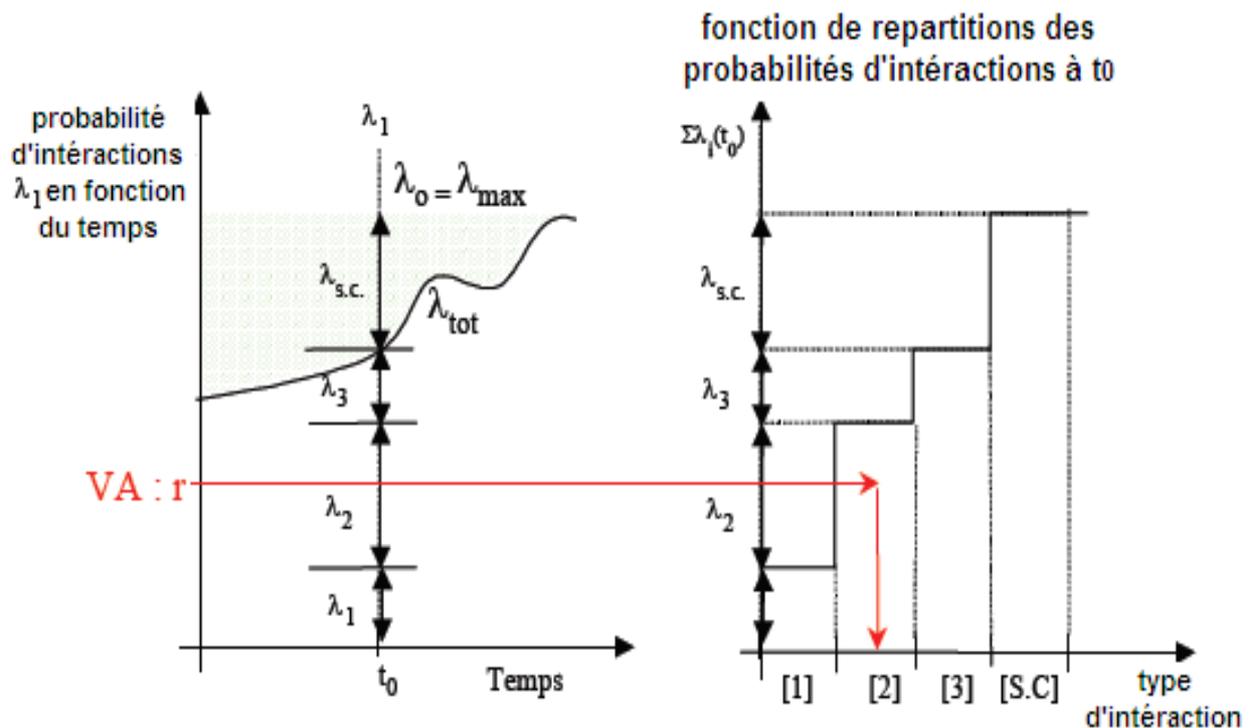


Figure IV.5 : Tirage au sort du type d'interactions.

#### IV-7 La méthode Monte Carlo à champ constant

Pour résoudre les équations de transport, la méthode Monte Carlo décompose la trajectoire d'une particule en un grand nombre de séquences (quelques milliers ou dizaines de milliers suivant les cas). Comme illustré en Figure, chaque séquence débute par un vol libre durant lequel la particule suit une trajectoire déterminée par le champ de force extérieur (loi de Newton). Ce vol libre est suivi d'une collision, ou interaction, du porteur avec son environnement. Pour générer de telles séquences aléatoires, il faut tirer au sort

- i. la durée du vol libre  $t_v$ ,
- ii. le type d'interaction subie en fin de vol libre ainsi que
- iii. son effet. Les lois de probabilité nécessaires, c'est-à-dire les différentes fréquences d'interaction possibles, sont déduites des lois de la physique.

Un grand nombre de particules est ainsi simulé, le mouvement d'ensemble donne les valeurs des caractéristiques macroscopiques : mobilité,

énergie moyenne... Les simulations sont d'autant plus précises que le nombre de particules est important ou que le temps simulé est grand.

#### IV-7-1 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  $\varepsilon$  et finale  $\varepsilon'$

C'est un changement d'orientation du vecteur d'onde figure IV.6 qui décrit la déviation subie par l'électron. Le vecteur d'onde  $\vec{K}'$  est repéré par rapport au vecteur d'onde initial  $\vec{K}$ , par un angle de déviation  $\beta$ .

L'angle de déviation du vecteur d'onde est déterminé par tirage au sort, suivant une loi de probabilité caractéristique de l'interaction. Pour cela, on tire deux nombres aléatoires  $r_1$  et  $r_2$  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 IV.7). Ces deux nombres sont tels que :

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

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

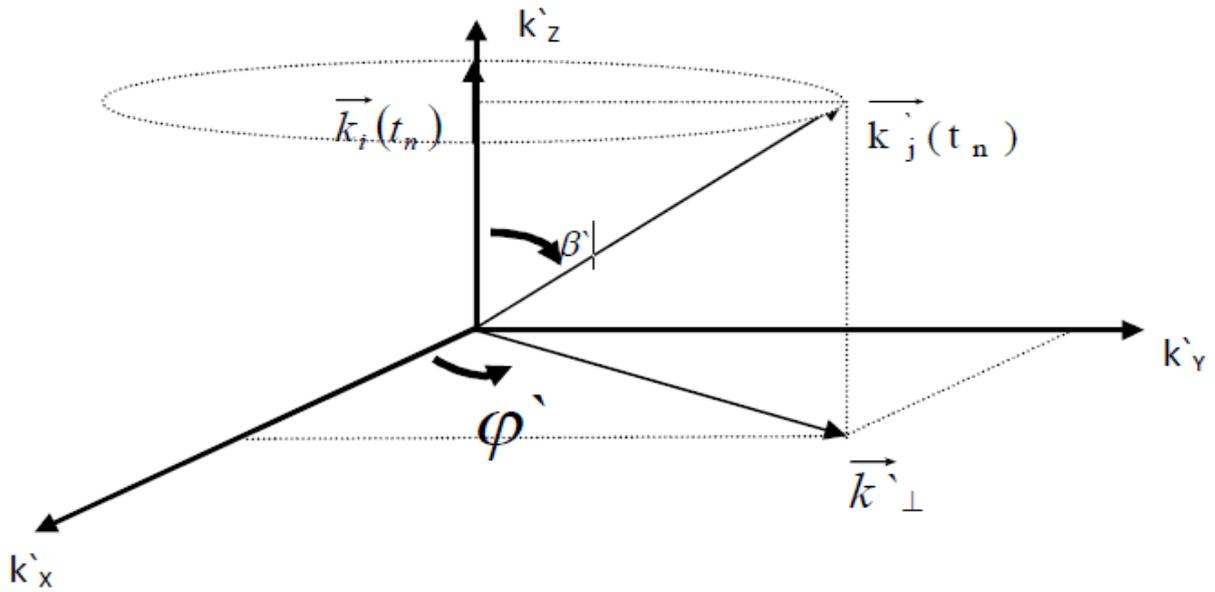


Figure IV.6 : Orientation du vecteur d'onde

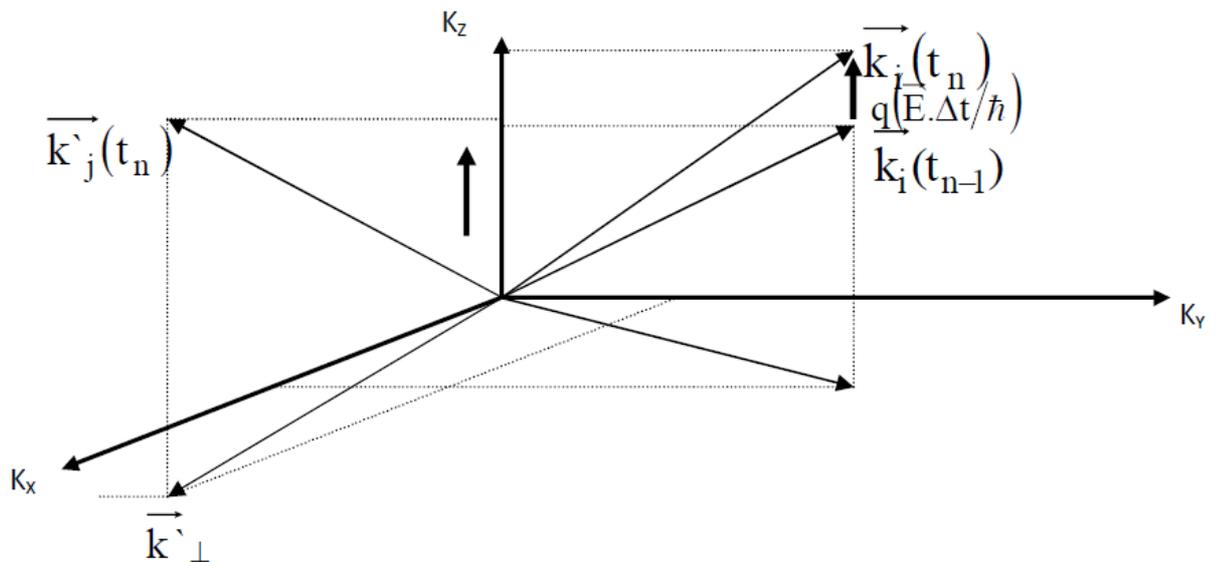


Figure IV.7: Angles de déviation

#### IV-7-2 Etapes de calcul

Pour permettre une meilleure compréhension de la méthode de Monte Carlo utilisée, nous présentons son organigramme sur la figure IV.9

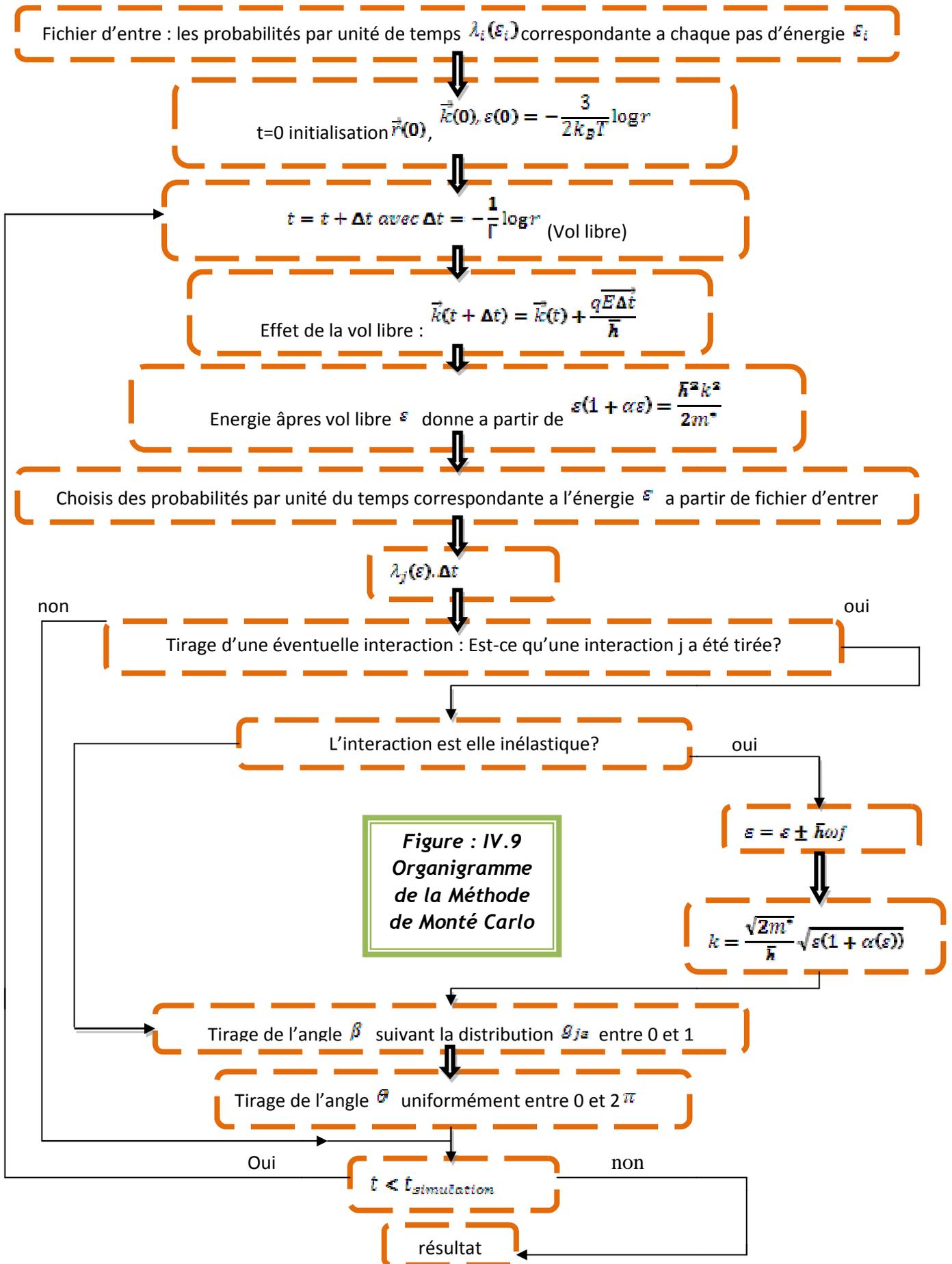


Figure : IV.9  
Organigramme  
de la Méthode  
de Monté Carlo

**IV-8 Conclusion**

L'avantage 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.

## **CHAPITRE V**

### **LES COMPOSANTS SEMI-CONDUCTEURS**

### V-1 Introduction

Les transistors constituent sans doute la plus large part de l'activité microélectronique moderne. Dans ce domaine, un très large effort s'est concentré sur les composants unipolaires, ce sont les composants qui reposent uniquement sur le transport d'un seul type de porteurs. Ces composants incluent les transistors à effet de champ sous leurs différentes formes, JFET, MESFET, MOSFET.

Le MESFET à base de GaAs a attiré une très grande attention en particulier dans les systèmes hautes fréquences et de puissances.

L'objectif est de présenter les différents transistors à effet de champ utilisés dans des conceptions hyperfréquences. Tout d'abord, nous proposerons une description géométrique et physique des transistors les plus utilisés actuellement. Nous présenterons donc successivement les JFET, MOSFET, MESFET et leurs dérivés les HEMT.

### V-2 Transistors à effet de champ

#### Généralités

Un transistor à effet de champ (FET pour Field Effect Transistor) est un dispositif semi-conducteur. Sa particularité est d'utiliser un champ électrique pour contrôler la forme et donc la conductivité d'un « canal » dans un matériau semi-conducteur. Il concurrence le transistor bipolaire dans de nombreux domaines d'applications, tels que l'électronique numérique.

Un transistor à effet de champ est un transistor unipolaire : son fonctionnement est basé sur l'action d'un champ électrique sur un canal composé d'un seul type de porteurs de charges mobiles. Ce canal est un semi-conducteur avec un excédent d'électrons (dopage de type N), ou de trous (dopage de type P). La présence d'un champ électrique peut autoriser la conduction électrique dans ce canal (transistor à enrichissement, ou enhancement) ou la réduire (transistor à appauvrissement, ou déplétion).

Par rapport à un transistor bipolaire (NPN ou PNP), il présente l'intérêt d'avoir une grande impédance d'entrée (supérieure au méga ohm), ce qui le rend intéressant dans certains montages (étage d'entrée d'un radiorécepteur, détecteur d'électricité statique...). Plus précisément, cette résistance d'entrée est la résistance de fuite de la jonction grille-source (GS) polarisée en inverse. La capacité d'entrée du transistor est faible (quelques picofarads). Cette résistance d'entrée élevée et cette faible capacité d'entrée donnent aux transistors à effet de champ des caractéristiques proches de celles des tubes à vide.

En réception radio, l'intérêt des transistors à effet de champ est :

- une meilleure sélectivité des circuits associés.
- un meilleur facteur de bruit (car la bande passante du circuit est réduite, du fait d'un amortissement moindre).

C'est pourquoi on les trouve souvent dans les schémas de préamplificateurs d'entrée, d'oscillateurs, de mélangeurs.

Aujourd'hui, les semi-conducteurs à large bande interdite sont les candidats idéaux pour réaliser un nouveau saut technologique. Nous pouvons citer les FET à Hétérostructure. En effet, les propriétés physiques (champ électrique de claquage, vitesse de saturation, conductivité thermique) des matériaux utilisés, (Ex:  $Ga_{1-x}Al_xAs$ ) en font de ces composants un bon choix pour un grand nombre d'applications de forte puissance et à haute température. Dans ce sens, les technologues ont développé des procédés de fabrication de plusieurs types de composants à effet de champs.

### **V-3 Transistor à effet de champ à Jonction (JFET)**

#### **V-3-1 Historique**

Le concept d'un semi-conducteurs à triode comme structure similaire au transistor à effet de champ à jonction (JFET) a été proposé, la première fois, par

Jules Lilienfeld dans trois révélations de brevet au alentour de 1925, suivis d'un brevet semblable par **Oskar Heil** en **1935**.

Le transistor JFET (Junction Field Effect Transistor) a été décrit par Schockley. Il est également connu sous le nom de SIT ( Static Induction Transistor). Il possède des avantages similaires au MOSFET, à savoir une grande impédance d'entrée et une aptitude à commuter rapidement. C'est un dispositif semi-conducteur unipolaire qui utilise un seul type de porteur n ( $v_{GS} < 0$ ), il repose sur un contrôle du courant de drain à l'aide d'un champ électrique générée par une polarisation entre grille et source [Bernal97].

Ce type de composant à semi-conducteur est basé sur l'existence d'un canal conducteur dont la conductance peut être modulée à l'aide d'une tension appliquée à la grille comme le montre la Figure V-1 [Brosse04]. La conduction entre drain et source s'effectue à travers le canal de type N entre les deux couches de type P connectées à la grille. Ce canal a une longueur L définie par les dimensions des diffusions ou des implantations P et une épaisseur  $2a$  modulée par les extensions  $x_n$  des zones de charge d'espace des jonctions PN.

Une tension  $v_{GS}$  négative appliquée sur la grille entraîne une augmentation de l'extension de zone d'espace réduisant ainsi la section du canal conducteur et augmentant la résistance de celui-ci. La tension  $v_{DS}$  positive appliquée sur le drain a pour effet d'accroître la polarisation en inverse des jonctions PN et, par conséquent, d'augmenter l'extension des zones de charge d'espace au voisinage du drain comme montré à la Figure V-1.

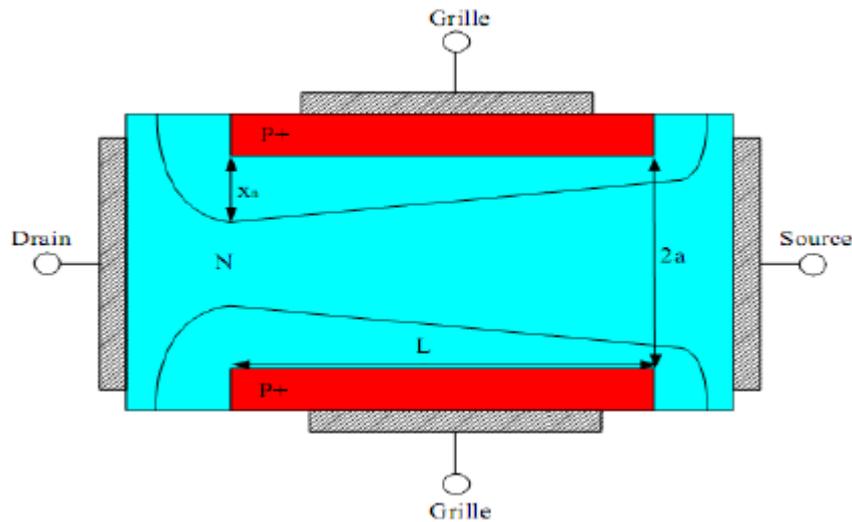
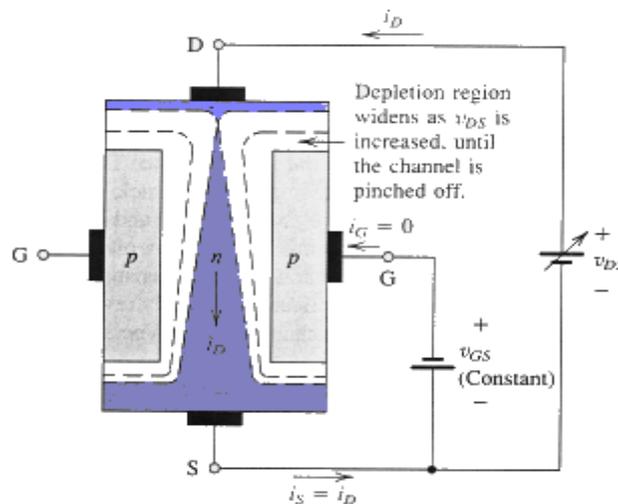


Figure V-1: Schéma de la structure du canal de JFET idéale [Youness11]

**V-3-2 Principe de fonctionnement**

On applique une faible tension  $V_{DS}$  positive entre drain et source, et une tension négative  $V_{GS}$  entre grille et source. Si  $V_{GS} = 0$ , il s'établit un courant dans le canal, circulant du drain vers la source. Si  $V_{GS} < 0$ , la jonction grille - canal est bloquée. La zone de charge de cette jonction vient réduire la section effective du canal. La résistance du canal augmente à mesure que l'on augmente  $|V_{GS}|$ . Le JFET se comporte alors comme une résistance dont la valeur est contrôlée par  $V_{GS}$ . Pour une tension  $V_{GS} = V_p$ , la zone de charge d'espace s'étend tout le canal et le courant ne circule plus dans le canal.  $V_p$  est la tension de seuil du JFET.



Si on augmente la tension  $V_{DS}$  à  $V_{GS} > V_P$ , le canal est parcouru par un courant  $i_d$ . Le passage de ce courant dans la résistance du canal provoque une chute de tension le long de celui-ci. Il en résulte que la tension Grille-canal varie tout au long du canal. Elle est maximale (en valeur absolue) côté drain. Nous pouvons exprimer la tension Grille - Drain (tension grille - canal au niveau du drain):

$$V_{GD} = V_{GS} + V_{SD} \tag{V-1}$$

Lorsque  $V_{GD} = V_P$ , le canal est pincé et le courant  $I_d$  ne dépend plus de la valeur de  $V_{DS}$ . On a alors:

$$V_{GD} = V_{GS} + V_{SD} = V_P \tag{V-2}$$

$$V_{DS} = V_{GS} - V_P$$

La valeur du courant drain correspondant à  $V_{GS} = 0$  est appelée  $I_{DSS}$ .

L'équation du courant drain dans la zone linéaire (canal pincé) s'écrit:

$$I_D \approx I_{DSS} (1 - V_{GS}/V_P)^2 \tag{V-3}$$

Dans la zone de fonctionnement résistif (canal non pincé), la valeur de la résistance drain -source Figure V- 2: peut s'écrire:

$$R_{DS} \approx -V_P / (2I_{DSS} (1 - V_{GS}/V_P))$$

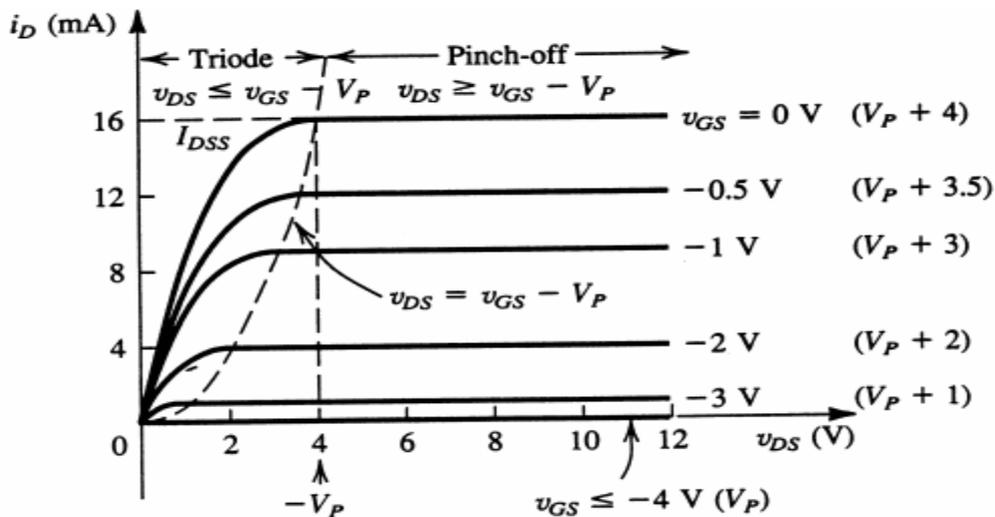


Figure V- 2: Caractéristiques  $i_D$ - $v_{DS}$

### V-3-3 Contraintes et domaines d'utilisation

La forte impédance d'entrée des JFET (plusieurs dizaines, voire centaines de mégohms) associée à un faible bruit, rend ces transistors particulièrement bien adaptés à l'amplification des faibles signaux sous forte impédance.

En commutation, ils présentent par rapport aux transistors bipolaires certains avantages, comme un gain en puissance plus élevé et une impédance d'entrée aux faibles fréquences beaucoup plus forte, ce qui permet de réaliser de grandes constantes de temps avec des capacités assez faibles (réalisation de monostables ou d'astables).

## V-4 Transistor à effet de champ à grille isolée (MOSFET)

### V-4-1 Historique

Au cours des quarante dernières années, nous avons été témoins d'une augmentation gigantesque dans l'industrie des semi-conducteurs et l'électronique grand public. Avec une démarche effrénée vers la miniaturisation de la taille du MOSFET qui ne cesse de diminuer impliquant non seulement la réduction des paramètres géométriques des dispositifs tels que la longueur du canal, l'épaisseur d'oxyde de grille..., mais aussi les paramètres électriques tels que la tension d'alimentation, la longueur minimale de canal, qui est une dimension cruciale, a été diminuée continuellement et de manière significative depuis la fabrication de MOSFET. La motivation derrière cette diminution a eu un intérêt croissant dans les dispositifs à haute vitesse et à une échelle très large de circuits intégrés. Actuellement, les longueurs de grille FET expérimentales ont été réduites jusqu'à 15 nm [G.BOUA12].

Un transistor à effet de champ à grille isolée plus couramment nommé MOSFET est un type de transistor à effet de champ. Comme tous les transistors, le MOSFET module le courant qui le traverse à l'aide d'un signal appliqué sur son électrode centrale nommée grille. Il trouve ses applications dans

les circuits intégrés numériques, en particulier avec la technologie CMOS, ainsi que dans l'électronique de puissance.

Ces transistors se divisent en deux catégories:

- les MOSFET à enrichissement. Ils sont les plus utilisés du fait de leur non conduction en l'absence de polarisation, de leur forte capacité d'intégration ainsi que pour leur fabrication plus aisée.
- les MOSFET à appauvrissement. Ceux-ci se caractérisent par un canal conducteur en l'absence de polarisation de grille ( $V_{GS} = 0$ ).

Le transistor est caractérisé par la charge de ses porteurs majoritaires qui détermine s'il est de type P ou N. Les symboles du MOSFET permettent de différencier son type et sa catégorie. Les lettres sur les trois électrodes correspondent au drain, à la source et à la grille.

#### V-4-2 Principe de fonctionnement du MOSFET

On procède au relevé des caractéristiques en utilisant le montage ci-après  
Figure V-3

(a) Polarisation d'un MOSFET. En fonctionnement normal la jonction grille canal est polarisée en inverse : le courant d'entrée  $I_G$  est très faible et le courant drain et source sont identiques Dans le réseau des caractéristiques de sortie  $I_D = f(V_{DS})$

Figure V-3

(a) Polarisation d'un MOSFET, on observe quatre zones différentes. Une zone linéaire dite résistive, un coude, une zone de saturation ( $I_D \approx \text{constant}$ ) et une zone d'avalanche.

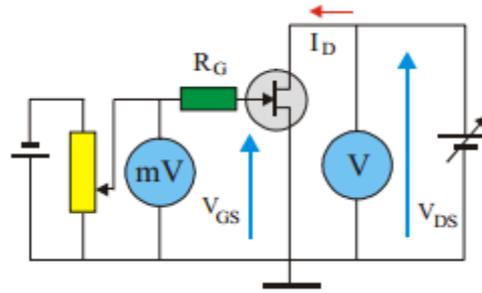
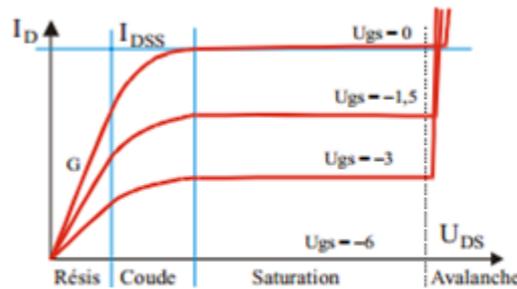


Figure V-3

(a) Polarisation d'un MOSFET [CHELBI.H]



(b) Caractéristiques d'un MOSFET

➤ **Zone résistive**

Dans une jonction polarisée en inverse Figure V- 4 existe une zone isolante (sans porteurs libres) dont l'épaisseur « e » est fonction de la tension inverse  $e \approx k\sqrt{V_{GS}}$ . Cette zone isolante qui correspond aux jonctions grille-canal et substrat-canal diminue la largeur effective du canal.

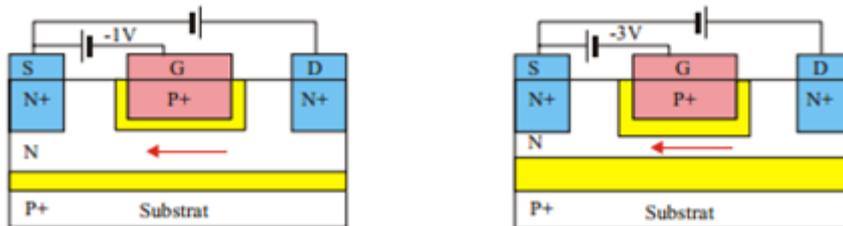


Figure V- 4 Schéma d'un mosfet [CHELBI.H]

Pour des faibles tensions de  $V_{DS}$ , le canal se comporte comme une résistance ohmique dont la valeur est en fonction de sa section et donc de la tension inverse entre la grille et la source. Le JFET est alors équivalent à une résistance commandée par une tension. Pour une valeur  $V_p$  suffisamment

négative de  $V_{GS}$ , la conduction s'annule. On dit que le canal est « pincé » et que  $V_p$  est la tension de pincement.

### ➤ Zone du coude

La largeur de la zone isolante est également influencée par la tension entre le drain et la source Figure V- 5. Du côté de la source sa largeur est  $e_1 = k\sqrt{V_{GS}}$ . Du côté du drain, elle est :  $e_2 = k\sqrt{V_{GD}}$ . Quand  $V_{DS}$  augmente, la valeur du courant drain résulte de deux phénomènes compétitifs : une croissance liée au caractère ohmique du canal et une diminution liée au pincement progressif de ce canal.

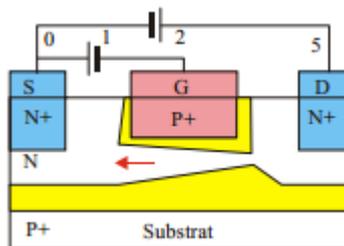


Figure V- 5[CHELBI.H]

### ➤ Zone de saturation

Dans cette zone tout accroissement de  $V_{DS}$  qui augmenterait le courant  $I_D$  augmente aussi le pincement. Quand le canal est pincé, la densité du courant augmente jusqu'à ce que les porteurs atteignent leur vitesse limite : le courant du drain reste constant et le transistor est dit saturé. La valeur maximum de  $I_D$  pour  $V_{GS} = 0$ , qui correspond au pincement du canal est notée  $I_{DSS}$ .

### ➤ Zone d'avalanche

Elle résulte d'un claquage inverse de la jonction drain-grille. Ce claquage est destructeur du dispositif si rien ne limite le courant du drain.

#### V-4-3 Contraintes et domaines d'utilisation

La grille étant isolée, la résistance d'entrée du transistor MOS est très élevée (de  $10^{11}\Omega$  à  $10^{15}\Omega$ ), et la capacité grille-source étant très faible, ces transistors sont extrêmement sensibles aux charges électrostatiques qui peuvent provoquer le claquage de la couche de silice. Il faut donc intégrer des dispositifs

de protection contre les surtensions (le plus souvent, deux diodes tête-bêche placées entre grille et source). En raison de leurs très petites dimensions, de leur faible consommation et de leur facilité d'intégration, le domaine privilégié d'emploi des transistors MOS est celui des circuits intégrés (mémoires, microprocesseurs, circuits logiques).

Certes, ces dispositifs sont encore moins rapides, Malgré que des progrès spectaculaires ont été effectués en vue de la miniaturisation des transistors MOS et plus particulièrement la diminution de la longueur du canal, ce qui a permis d'augmenter la densité d'intégration et la vitesse de fonctionnement des circuits mais cette réduction de dimensions à engendrer des phénomènes parasites (modification de la tension de seuil, augmentation du phénomène des porteurs chauds,...) qui détériorent les caractéristiques courant-tension. Toutefois, les technologues ont développé des nouvelles architectures en vue de conserver ces caractéristiques (Technologie SOI, NMOS, CMOS, VMOS, ...), par exemple les transistors de type VMOS (à grille particulière en forme de V) permettent des applications de puissance (plusieurs dizaines de watts) jusqu'à des fréquences très élevées (plusieurs milliers de mégahertz).

## **V-5 Transistor à effet de champ à contact Schottky (MESFET)**

### **V-5-1 Historique**

Le MESFET (Métal Semi-conducteur Field Effect Transistor) fut le premier composant à être fabriqué à partir d'un composé III-V. En 1966 Carver Mead proposa en premier lieu de remplacer le Silicium des premiers FET par un semi-conducteur III-V tel que l'Arséniure de Gallium (GaAs), puis réalisé par Hoop. Cette évolution au niveau matériau a permis l'utilisation des MESFET aux fréquences micro-ondes, et depuis cette date de nombreux travaux ont été effectués pour réaliser des transistors de plus en plus performants à base de matériau à grand gap. Les premiers résultats obtenus avec un MESFET au carbure de silicium (4H-SiC) datent de 1994.

### V-5-2 Structure générale (Cas du MESFET GaAs)

Le transistor MESFET GaAs est le plus ancien des transistors à effet de champ hyperfréquence et sa technologie est maintenant bien établie. La structure du MESFET sous sa forme la plus classique est schématisée dans la Figure V- 6. Cette structure est la plus simple parmi les différentes structures des transistors FET, elle est tout à fait comparable à celle du transistor JFET mais la jonction PN est remplacée par une barrière Schottky (métal- semi-conducteur). Il est construit sur un substrat en GaAs non dopé qui doit être le plus isolant possible. Celui-ci sert uniquement de support mécanique et possède une épaisseur de l'ordre de 100  $\mu\text{m}$ . Sur ce substrat, on dépose une couche active dopée «  $N_D$  », d'une épaisseur «  $a$  » de l'ordre de 0,1 à 0,3  $\mu\text{m}$ .

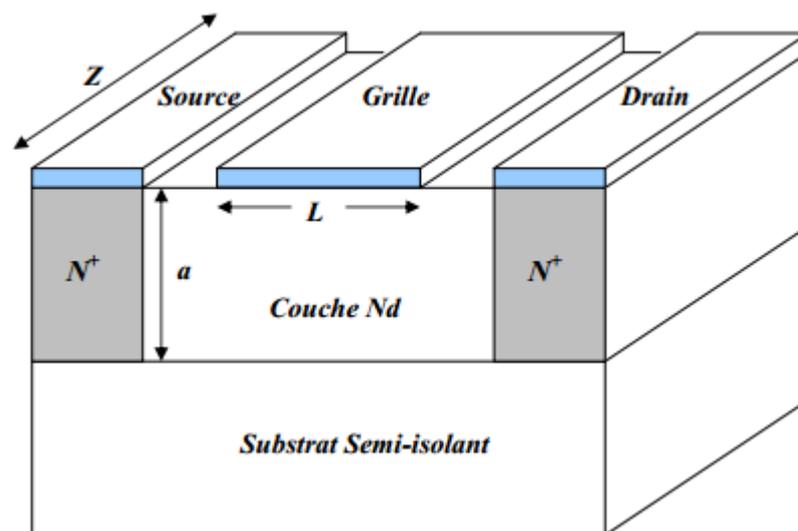


Figure V- 6 Coupe schématique du transistor MESFET GaAs [KHEMIS09]

Elle est déposée soit par épitaxie, soit par implantation ionique et constitue le canal conducteur du transistor. Elle doit comporter le moins possible d'impuretés et des défauts cristallins qui perturbent la circulation des électrons. De part et d'autre du canal, deux zones fortement dopées «  $N^+$  » sont ajoutées par implantation ionique ou par diffusion. Elles permettent le contact avec les électrodes métalliques de drain et de source. La résistance de la zone de contact

doit être la plus faible possible, afin de ne pas dégrader les performances du transistor. L'électrode de la grille doit formée avec le semi-conducteur du canal un contact redresseur de type Schottky (le travail de sortie du métal est supérieur à celui du semi-conducteur). Les électrodes métalliques de grille, de drain et de source sont déposées directement sur la structure. La largeur « Z » des électrodes est de quelques micromètres (de 20 à 300  $\mu\text{m}$ ) et la longueur de la grille « L » est de quelques dixièmes de micromètres (de 0,2 à 1  $\mu\text{m}$ ).

### V-5-3 Principe de fonctionnement

Dans le transistor à effet de champ à jonction « JFET », l'électrode de commande est constituée d'une jonction « P.N » latérale. Le principe de fonctionnement de ce composant repose essentiellement sur cette jonction, les électrons libres du semi-conducteur de type « N » au voisinage de la jonction migrent vers le type « P » laissant les atomes donneurs ionisés. Ces atomes forment à l'équilibre thermodynamique la zone de charge d'espace « ZCE » positive et un champ électrique «  $E_i$  » s'établit. Dans le transistor à effet de champ à barrière Schottky « MESFET », le processus mis en jeu est le même que précédemment mais au lieu de la jonction « PN », il ya une jonction métal semi-conducteur qui forme une diode de type Schottky.

Sans polarisation : il peut y avoir donc la zone de charge d'espace (c'est une zone de désertion) sur une certaine profondeur « h » dans un canal formé de semi-conducteur de type « N » dit canal conducteur Figure V- 7. La désertion est liée à différents paramètres tels que le matériau de la grille et les propriétés d'interface. Si on applique une tension extérieure négative «  $V_{GS}$  » sur l'électrode de grille, celle-ci engendre une augmentation du champ «  $E_i$  ». La zone de charge d'espace s'étend dans le canal

Conducteur : une diminution de la valeur de la commande «  $V_{GS}$  » entraîne une augmentation de l'épaisseur de la zone de charge d'espace de la jonction.

Cette variation engendre une diminution de la section du canal. Pour une tension «  $V_{GS} = V_p$  » (tension de pincement), la zone de charge d'espace occupe la totalité du canal. La résistance entre drain et source devient très élevée.

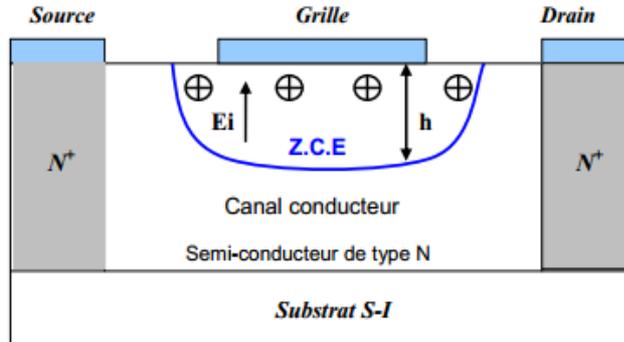


Figure V- 7 Zone de charge d'espace (Z.C.E) dans un MESFET non polarisé [KHEMIS09].

Si on applique une tension de drain positive «  $V_{DS} > 0$  » et une tension de grille négative ou nulle «  $V_{GS} \leq 0$  », on a un canal conducteur. Un courant «  $I_{DS}$  » circule entre le drain et la source. Si  $V_{ds}$  devient de plus en plus positive, le champ électrique à travers le canal augmente ainsi que la vitesse des électrons. La distribution de tension à travers le canal aura pour conséquence une différence de potentiel entre la grille et le canal sur la longueur de celui-ci. Ceci explique la différence observée pour la profondeur de la zone de désertion le long du canal, qui augmente vers le drain Figure V- 8. Si la tension  $V_{ds}$  atteint la valeur «  $V_{dsat}$  » (tension de saturation), le régime de saturation apparaît.

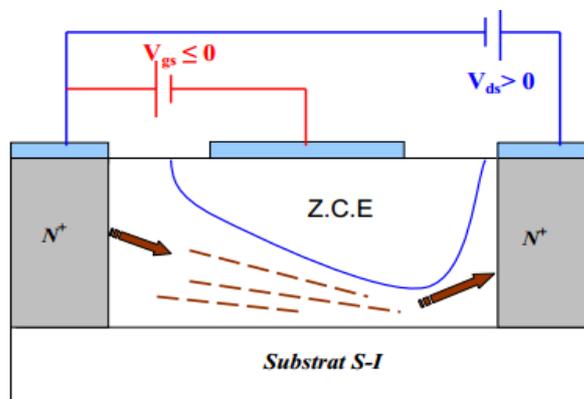


Figure V- 8 Zone de charge d'espace (Z.C.E) dans un MESFET non polarisé [KHEMIS09].

L'augmentation de la tension «  $V_{ds}$  » au-delà de «  $V_{dsat}$  » n'affecte pas l'évolution du courant de drain qui garde une valeur «  $I_{dsat}$  » relativement constante Figure V-9. Le modèle généralement utilisé pour décrire la saturation du courant «  $I_{DS}$  » dans les FETs est celui de la formation d'une zone de pincement dans le canal près du drain. Dans cette zone, la densité de porteurs est très faible. L'augmentation de la tension «  $V_{DS}$  » au-delà de «  $V_{Dsat}$  » fait déplacer le point de pincement dans le canal vers la source. Le courant est transporté par les porteurs qui circulent dans le canal entre la source et le point de pincement. Ces porteurs sont ensuite injectés dans la zone de charge d'espace où ils sont soumis à un champ électrique favorable qui les diffuse vers l'électrode de drain.

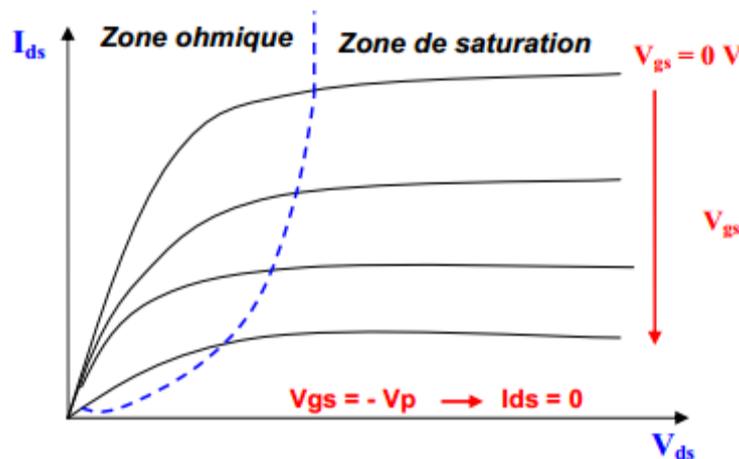


Figure V-9 Réseau typique des caractéristiques courant-tension d'un transistor FET [KHEMIS09].

## V-6 HEMT

### V-6-1 Structure générale

Le HEMT apparaît comme une évolution majeure du MESFET. En effet, pour contourner le problème du transport dans un matériau dopé, est arrivé le HEMT dans lequel le transport électronique s'effectue au voisinage d'une interface entre un matériau à grand gap fortement dopé et un matériau à petit gap non intentionnellement dopé. Cette interface est encore appelée "hétérojonction". La présence de cette hétérojonction permet d'obtenir une importante densité de porteurs dans le matériau intrinsèque où la mobilité et les vitesses électroniques sont plus élevées [CHEVALIER99].

Le but de la structure d'un transistor HEMT est de séparer les électrons libres de la couche du semi-conducteur contenant les atomes donneurs ionisés et de les faire circuler dans une couche du semi-conducteur non dopé. Cette dernière ne contenant pas d'atomes donneurs ionisés, permet d'obtenir une grande mobilité des porteurs.

Pour cela, un semi-conducteur à gap faible non dopé est mis en contact avec un semi-conducteur à grand gap fortement dopé. Il faut cependant que les deux semi-conducteurs mis en contact soit de tailles de maille cristalline assez proche. Le «  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$  » est un matériau qui convient bien aux hétérojonctions. En effet lors du contact du « InP à GaP », la variation de la constante de maille est inférieure à 0,2 % alors que le gap de la structure de bande augmente de 66%.

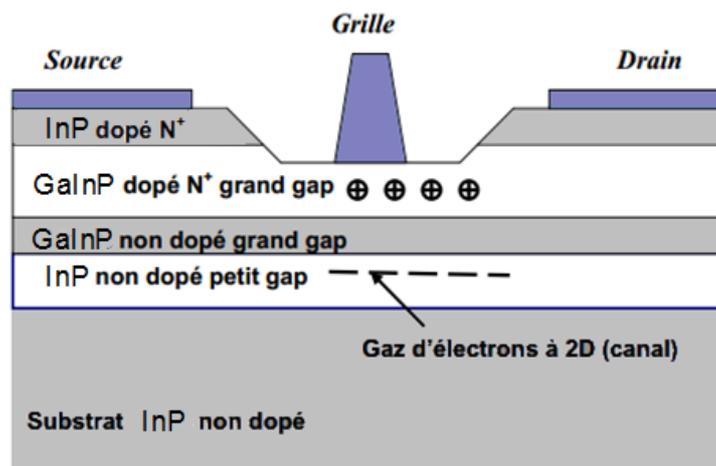


Figure V-10 Couche schématique d'un transistor HEMT [KHEMIS09]..

Le HEMT se compose, d'un empilement de plusieurs couches semi-conductrices Figure V-10. la première étape, une couche d'InP non dopé est déposée sur le substrat semi-isolant où le gaz d'électrons se forme. Ensuite, une couche GaInP est déposée ayant une épaisseur de l'ordre de 0,1  $\mu\text{m}$ . Seul la partie supérieure de cette couche est dopée en atomes donneurs. La partie inférieure non dopée de la couche à une épaisseur très fine de l'ordre de 5 nm. Une électrode de grille métallique est déposée à la surface de la couche d'GaInP,

La longueur de cette électrode est de quelques dixièmes de micromètres. Les contacts des électrodes de drain et de source se font sur une couche d'InP fortement dopée en atomes donneurs.

### V-6-2 Principe de fonctionnement

Le principe de base du transistor HEMT consiste à mettre à profit les propriétés de haute mobilité d'un gaz bidimensionnel d'électrons formé à l'interface d'une hétérojonction. L'idée de base est de séparer spatialement les électrons libres, des donneurs ionisés dont ils proviennent. Le canal actif est formé à l'interface de l'InP et du GaInP (entre deux matériaux à petites et larges bandes interdites). La couche donneuse n- GaInP fournit des électrons de conduction au canal. Ces électrons libres tombent dans le plus bas état d'énergie disponible du côté InP de l'hétérojonction. L'épaisseur de cette couche est de l'ordre de 100 Å. L'accumulation des électrons dans le canal InP et la présence des atomes donneurs ionisés dans la couche GaInP séparée du canal par l'espaceur crée un champ électrique transversal «  $E_T$  ». La dispersion des électrons dans la couche InP est empêchée par l'action du champ «  $E_T$  » qui ramène les électrons vers l'interface.

La bande de conduction est représenté sous forme d'un puits de potentiel dans lequel les électrons sont confinés. Ce système est connu sous le nom de gaz bidimensionnel d'électrons (gaz 2D). Les électrons se déplacent librement à l'interface de l'hétérojonction avec une énergie quantifiée selon la direction de la croissance. La présence d'une discontinuité de la bande de conduction «  $\Delta E_c$  » entre les deux matériaux GaInP et InP d'environ 0.237eV lorsque le taux d'aluminium  $x$  est de 30% forme une barrière de potentiel à l'interface de l'hétérojonction qui empêche le retour des électrons vers la couche donneuse. La présence de l'espaceur réduit l'interaction Coulombienne entre les électrons et les donneurs. L'épaisseur de cette couche est choisie de telle sorte que la mobilité soit optimale tout en ayant une densité relativement importante de porteurs. La

zone de confinement des électrons constitue le canal du transistor. Il est possible donc de contrôler la densité de ces porteurs par l'intermédiaire de la tension appliquée sur la grille. Lorsque la tension «  $V_{gs}$  » augmente, le puits de potentiel devient de plus en plus profond, permettant à un nombre plus grand d'électrons de diffuser dans le canal InP.

Comme pour les autres FETs, la tension  $V_{ds}$  crée un champ électrique dans le canal qui entraîne les électrons de la source vers le drain, formant ainsi un courant «  $I_{ds}$  » (drain-source). Pour des tensions de grille suffisamment négatives, la densité de porteurs dans le canal devient négligeable et aucun courant significatif ne circule entre la source et le drain.

Le HEMT est alors considéré bloqué (très peu de courant circule entre le drain et la source). L'évolution du courant «  $I_{ds}$  » en fonction de la tension «  $V_{ds}$  » et pour différentes valeurs de la tension de grille est sensiblement la même que pour le MESFET. De plus, un effet de saturation de courant intervient également pour le HEMT. Il provient essentiellement de la saturation de la vitesse des porteurs. Lorsque  $V_{ds}$  est suffisamment élevée ou la longueur géométrique de la grille est suffisamment courte, la composante longitudinale (dans la direction drain-source) du champ électrique dans la zone de quasi-pincement peut être suffisamment élevée pour que les porteurs atteignent leur vitesse de saturation. Le courant de saturation est dans ce cas un courant sous champ électrique avec une vitesse maximale.

**CHAPITRE VI**

**LA SIMULATION MONTE CARLO POUR LES COMPOSANTS  
SUBMICRONIQUE**

### VI-1 Introduction

La conception d'un composant électronique requiert de nombreuses réalisations technologiques, afin d'ajuster divers paramètres. La simulation numérique de tels dispositifs permet de s'affranchir des coûts importants engendrés par les multiples étapes, et de définir la structure optimale avant l'ultime réalisation. Toutefois, la méthode de Monte Carlo utilisée nécessite des temps de calculs parfois prohibitifs. Ainsi que des ressources mémoire relativement élevées. Nous proposons ici une parallélisation qui s'appuie sur les spécificités de chaque étape du processus, afin de conserver une charge de travail équilibrée sur l'ensemble des processeurs, sans faire appel à une procédure de rééquilibrage dynamique. Nous constatons que, lorsque les conditions (algorithme efficace pour la résolution de l'équation de Poisson, nombre « raisonnable » de processeurs) sont réunies, l'accélération mesurée est appréciable.

La difficulté de définir la structure optimale d'un composant adapté à une application spécifique réside dans le fait qu'un grand nombre de paramètres sont à prendre en compte. Essayer toutes les combinaisons ou presque nécessite de passer par autant de réalisations technologiques. Processus complexes. Longs et coûteux. Afin de réduire au minimum les coûts, les différentes configurations sont simulées numériquement par des méthodes appropriées. La méthode de Monte Carlo est l'une des rares méthodes offrant la possibilité de reproduire quasi fidèlement les divers phénomènes microscopiques résidant dans les matériaux semi-conducteurs. Pour cela, elle s'appuie directement sur les particules circulant dans la structure du composant, dont elle reproduit le comportement au cours du temps.

L'analyse du processus de simulation indique que l'utilisation du parallélisme peut remédier à ce problème, en distribuant les données ou les tâches sur un ensemble de processeurs. L'enjeu est non seulement de réduire le

temps de simulation d'un facteur appréciable, mais également de garder un équilibre dans la charge de travail attribuée à chaque processeur.

## VI-2 Les méthodes de Monte Carlo

Les méthodes de Monte Carlo tirent leur nom du fait qu'elles font appel à des nombres aléatoires pour résoudre un problème, et leur développement systématique date de 1944 [HAM 67]. Ce sont des méthodes de nature statistique, qui constituent un outil mathématique très général, dont le champ d'application est très vaste; les problèmes résolus sont, entre autres: intégration d'équation différentielle, mécanique des fluides, mathématiques financières ...

Pour chaque application, ou suivant la nature du problème envisagé, la méthode de Monte Carlo employée a ses propres caractéristiques; le « seul » point commun entre ces variantes est l'utilisation de nombres aléatoires pour décrire le caractère stochastique des phénomènes ou pour résoudre des problèmes plus complexes, ne pouvant être traités directement de manière efficace.

Les résultats obtenus par une méthode Monte Carlo sont exacts au sens statistique, c'est-à-dire qu'ils présentent une certaine incertitude qui diminue avec l'augmentation de la taille des échantillons considérés.

La forme actuelle de la méthode de Monte Carlo appliquée au transport de particules est due à Fermi, von Neumann et Ulam, qui l'ont développée pour le transport de neutrons [HAM 67]. Elle s'appuie sur la simulation du déplacement aléatoire de particules soumises à des lois de probabilités résultant de mécanismes microscopique. Cette méthode fait partie des algorithmes dits Particle-In-Cell (PIC), auxquels ont été adjoints des événements aléatoires, appelés collisions ou interactions. Lors d'un processus PIC, les particules simulées évoluent dans un milieu où règne un champ de forces, qui a une influence sur leur

mouvement. Ce milieu est discrétisé en cellules; à chacune d'elles, on affecte un nombre variable de particules et on associe un champ propre.

### VI-3 Application des méthodes de Monte Carlo aux semi-conducteurs

En utilisant la technique d'ensemble Monte Carlo EMC la simulation de chaque structure doit passer par les étapes suivant :

✚ Configurez la géométrie et la discrétisation schéma : deux paramètres jouant un rôle important dans le choix du pas de temps et la taille de la grille sont la fréquence de plasma et la longueur de Debye.

✚ affectation de charge : la charge de chaque particule est affectée à un point de maillage particulier. Comme il n'est pas possible de simuler tous les électrons présents dans un dispositif réel, chaque particule simulée représente un nuage d'électrons dans le but de courants d'estimation, chargé, et des distributions de champ. Pour toutes autres fins, chaque particule porte sa charge élémentaire  $e$ . La charge de dopage est également ajoutée à la maille en fonction de sa distribution.

✚ l'équation de Poisson : une solution potentielle est résolue pour déterminer le potentiel électrostatique au niveau des points de maillage. Dans le cadre de simulations CEM, une méthode des différences finies est généralement utilisée.

✚ Vols libres : Chaque particule, désormais traitée comme un électron individuel, subit la séquence MC norme de diffusions et vols libres, sous réserve de champ local préalablement déterminée à partir de la une solution de l'équation de Poisson. La séquence MC est arrêtée à des horaires fixes, lorsque le champ est ajusté suivant les étapes décrites ci-dessus. La description du problème est complétée par la mise en conditions initiales et aux limites. Les conditions initiales ne sont pas si importantes, car seul le résultat de l'état d'équilibre auto-cohérent est généralement retenu. Conditions aux limites sont la place cruciale, en particulier dans les dispositifs submicroniques, où les propriétés de contact

influencent considérablement l'ensemble du comportement du dispositif [GuenB14].

Avant d'aborder le processus de simulation en lui-même, il est nécessaire de présenter les dispositifs étudiés ainsi que les divers modèles applicables à leur simulation, et de montrer quel est l'intérêt d'utiliser une méthode de Monte Carlo.

### VI-3-1 Transistors à effet de champ

La géométrie de ces composants est représentée partie gauche de la Figure VI- 1 . Elle comporte essentiellement trois contacts déposés sur un « empilement » de plusieurs couches de matériaux semi-conducteurs plus ou moins dopés, ayant chacune un rôle bien défini; le tout repose sur un substrat isolant servant de « bases » mécanique au dispositif.

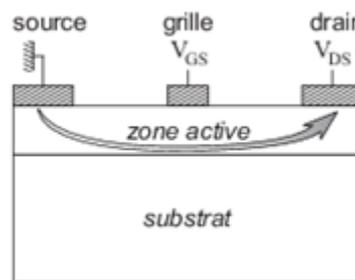


Figure VI- 1 Structure d'un transistor à effet de champ MEFET [FabienB]

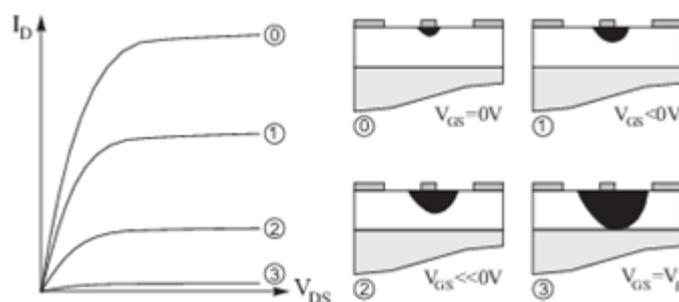


Figure VI- 2 fonctionnement d'un MEFET [FabienB]

Le principe de fonctionnement repose sur l'application d'un signal d'entrée sur la grille. Modulant la circulation des porteurs entre la source et le drain, déplacement qui a essentiellement lieu dans une couche appelée canal. Par exemple : Pour un transistor MESFET (MEtal-semiconductor Field Effect Transistory), dont la zone active comporte uniquement un canal, l'action du signal de grille crée une zone déserte sous ce contact et permet de faire varier la section du canal: cette variation influe directement sur l'évolution du courant mesuré en sortie la figure VI.2.

### **VI-3-2 Different models de simulation**

La simulation de dispositifs semi-conducteurs se situe entre la simulation de processus technologiques et la simulation de circuits, qui requiert les caractéristiques des composants mis en jeu, obtenues soit par mesures physiques après leur réalisation technologique. Soit à la suite de simulations de leur représentant numérique.

Les différentes techniques disponibles peuvent être classées par rapport à leur sophistication ou par rapport à la taille des dispositifs qu'elles sont capables de simuler correctement, selon l'ordre défini par la Figure VI- 3: elles vont du simple modèle analytique aux simulations du type Monte Carlo. Plus le modèle est à un rang élevé dans l'échelle, plus le rendu de la physique du composant est fidèle à la réalité.

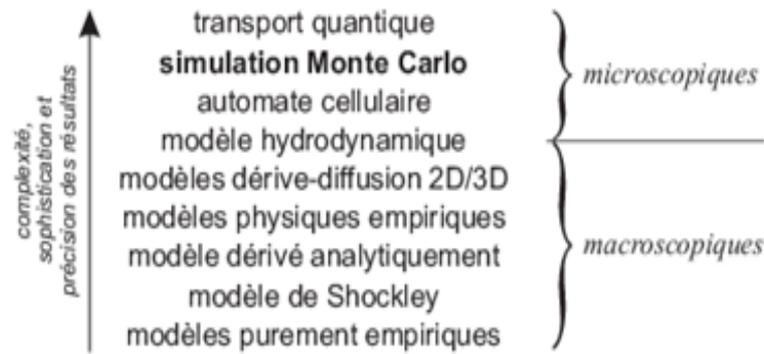


Figure VI- 3 Hiérarchie des modèles de simulations pour les composants semi-conducteurs

Nous nous intéressons essentiellement aux trois modèles les plus utilisés pour la définition des caractéristiques d'un dispositif semi-conducteur: les modèles dérive-diffusion, hydrodynamique et Monte Carlo.

### VI-3-3 Intérêts du modèle Monte Carlo

Les trois modèles considérés s'appuient tous sur l'équation de transport de Boltzmann, qui régit le transport de charges. Les modèles macroscopiques, que sont les modèles dérive-diffusion et hydrodynamique, résolvent directement des équations générales découlant de cette équation (équations de continuité et de densité du courant, par exemple).

Toutefois, bien que leur vitesse d'exécution soit satisfaisante, ces modèles macroscopiques présentent un inconvénient majeur par rapport aux modèles particuliers : ils ne rendent pas bien compte des phénomènes gouvernant le fonctionnement des composants, dès que leur taille passe sous la barre du micron (structures dites submicroniques). Dans ce cas, des champs électriques intenses règnent dans la structure et varient énormément sur de courtes distances, ce qui a des conséquences non négligeables sur le transport des porteurs. Or, ces effets non-stationnaires et non-homogènes ne sont pas pris en compte dans les modèles macroscopiques; selon les cas, les conséquences en sont une surestimation ou sous-estimation importante des résultats.

Ce que ne parviennent pas à montrer les méthodes macroscopiques, les modèles particuliers comme la simulation Monte Carlo le réalisent très bien. Par exemple, celle-ci fournit de manière « indirecte » une solution exacte de l'équation de Boltzmann, au sens statistique. Cependant, afin que les résultats soient les plus précis possibles, il est nécessaire de simuler un grand nombre d'échantillons; dans le cas de la simulation de particules, l'incertitude évolue avec l'inverse de la racine carrée du nombre de particules. Ainsi, la vision fine du fonctionnement des dispositifs, qui en résulte, se fait au prix de l'accroissement des besoins en mémoire et en puissance de calcul, et de temps d'exécution prohibitifs.

Le but de la simulation de composants semi-conducteurs par la méthode de Monte Carlo est d'obtenir, à l'aide de phénomènes microscopiques, à la fois les aspects physiques du fonctionnement des dispositifs, et les caractéristiques électriques macroscopiques, telles que, par exemple, le réseau de caractéristiques courant-tension.

#### **VI-3-4 Processus de simulation**

La méthode de simulation employée consiste à suivre, au cours du temps (pendant quelques dizaines de picosecondes  $10^{-12}$  s), les évolutions de particules représentatives de la population électronique (au nombre de quelques dizaines de milliers) dans les diverses couches de matériaux constituant le composant. L'histoire de chacune de ces particules est constituée de séquences de vol libre sous l'effet du champ électrique local, entrecoupées d'interactions de la particule avec le réseau cristallin; ces interactions sont des phénomènes aléatoires liés à la nature des matériaux semi-conducteurs, qui modifient la trajectoire des particules. Ce déplacement des particules, sous l'effet combiné vol libre-interactions, modifie la densité locale de charges, et, en conséquence, modifie les

champs électriques, qu'il est alors nécessaire de réactualiser régulièrement par la résolution de l'équation de Poisson.

#### VI-3-4-1) Equation de poisson et Champ de distribution

La simulation de dispositifs semi-conducteurs par des techniques Monte Carlo nécessite la solution de l'équation de Poisson pour obtenir la distribution spatiale du potentiel et de champ électrique. Simulations MC évitent un grand nombre de limitations qui affectent les techniques plus conventionnelles basées sur des équations dérive-diffusion, quand les dimensions submicroniques sont considérés. Cependant, une solution exacte de l'équation de Poisson doit être prévue, afin de garantir le traitement approprié de la dynamique de particules.

#### VI-3-4-2) Organigramme général de la simulation

L'intervalle d'observation est discrétisé en un grand nombre de pas de temps, de durée égale et très courte (de l'ordre du femto seconde  $10^{-15}$  s). L'algorithme de simulation est alors constitué d'une boucle sur le temps, où chaque itération comporte quatre étapes: dans la première (partie Monte Carlo), toutes les particules sont déplacées sous l'effet des champs électriques locaux, puis la densité de charge  $\rho(x, y)$  est calculée; la troisième étape (partie Poisson) consiste à déterminer le potentiels  $\varphi(x, y)$  par résolution de l'équation de Poisson

$$\Delta\varphi(x, y) = -\frac{\rho(x, y)}{\varepsilon}$$

Où  $\varepsilon$  Permittivité du matériau ; enfin, les champs électriques sont réactualisés par dérivation des potentiels obtenus:  $E(x, y) = -grad \varphi(x, y)$ . Nous présentons dans la Figure VI- 4 l'organigramme de ces quatre étapes à l'intérieur de la boucle temporelle, le tout constituant un simulateur autocohérent.

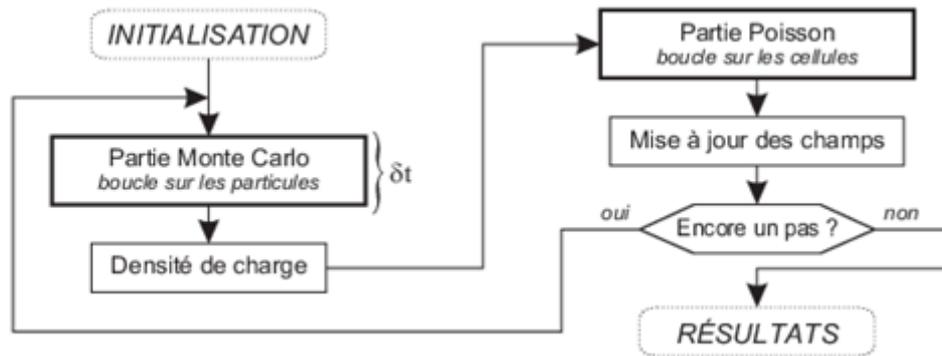


Figure VI- 4 Organigramme général de l'algorithme de la simulation des dispositifs

La partie Monte Carlo s'occupe donc de la dynamique de l'ensemble des particules (vols libres et effets des interactions) pendant la durée d'un pas de temps, qui correspond à une partie d'un vol libre effectif; à la suite de celle-ci, la probabilité d'apparition de chaque interaction est déterminée en fonction de l'état de la particule considérée, et le choix de l'éventuelle perturbation à appliquer est réalisé par le tirage d'un nombre aléatoire. Par ailleurs, il est nécessaire de tenir compte des limites géométriques liées à la structure du composant: lors de la rencontre avec une surface libre, les particules subissent une réflexion spéculaire, afin de rester confinées à l'intérieur de la structure; par contre elles peuvent en sortir aux niveaux des contacts. L'entrée de particules supplémentaires permet de garantir la neutralité électrique de zones situées sous les contacts source et drain, appelées zones ohmiques.

Quant à la partie Poisson, elle permet de mettre à jour les champs électriques en chaque point de la structure, à la fin de chaque pas. L'utilisation de la méthode des différences finies [PER83] implique une discrétisation géométrique, par le plaquage d'un maillage de cellules régulières et rectangulaires sur la structure du composant. En chaque point de ce maillage, l'équation de Poisson discrète relie la densité de charge  $\rho$  et le potentiel  $\varphi$  selon :

$$\varphi_{i+1,j} + \varphi_{i-1,j} + \alpha(\varphi_{i,j+1} + \varphi_{i,j-1}) - 2(1 + \alpha)\varphi_{i,j} = -\frac{dx^2}{\varepsilon_{i,j}}\rho_{i,j}$$

Avec  $\alpha = \left(\frac{dx}{dy}\right)^2$  dx et dy étant les dimensions d'une cellule. La densité est déterminée une fois toutes les particules assignées entièrement à la cellule la plus proche ou réparties entre les cellules voisines. La résolution du système ainsi défini peut être réalisée par des méthodes directes telles que FACR (Fourier Analysis and Cyclic Reduction), ou des processus itératifs tels que SOR (Successive Over-Relaxation ou multigrille [DES 98]).

**CHAPITRE VII**  
**APPLICATIONS**

### VII-1 Introduction

L'étude du transport d'électron en semi-conducteurs aux champs électriques élevés a atteint une étape importante en dernières années. De nos jours le modèle microscopique de transport basé sur la méthode de Monte Carlo semble être efficace et adéquat pour étudier les caractéristiques de transport électronique dans les matériaux et dispositifs semi-conducteur. En cette thèse nous traitons le transport d'électron en matériau d'InP et de GaInP qui peut être utilisé dans la conception et l'analyse de performance des dispositifs électroniques en diverse condition

En raison de mobilité élevée et de vitesse élevée de saturation, l'InP est devenu un matériel attrayant pour les dispositifs électroniques de performance supérieure parmi les semi-conducteurs III phosphates. Par conséquent l'étude du transport d'électron dans le groupe III phosphates est nécessaire. Le GaP possède un gap de bande indirect de 2,45 eV à la température ambiante tandis que l'InP et le GaInP ont des gaps de bandes directes environ 1,3 eV et 1,9 eV, respectivement.

Dans cette thèse, les propriétés de transport en matériaux du groupe III-phosphates dans la gamme appliquée de champ électrique de 0 à 60kV/cm seront discutées. les grandeurs physiques tel-que la densité des électrons, la vitesse de dérive, l'énergie moyenne, le champ électrique, et le potentiel électrostatique seront présentés et constaté pour les dispositifs DIODES et MESFET au profit des composants Si, GaAs et le GaInP où une comparaison des résultats est effectuée.

### VII-2 Les propriétés de transport en matériaux GaInP

L'alliage ternaire GaInP fait, à l'heure actuelle, l'objet de plusieurs investigations à cause de son avantage très intéressant dans l'électronique et l'optoélectronique. Le GaP, l'InP et leurs alliages, peuvent être décrite par le modèle qui considère trois vallées  $\Gamma$ , L et X quasi paraboliques, et qui est suffisant pour décrire le comportement électrique des composés. Pour calculer le transport

électronique dans ce ternaire, nous utilisons la méthode de simulation Monte Carlo en tenant compte à peu près de tous les mécanismes de diffusion dans les alliages

Les propriétés de transport des champs élevés dans ces matériaux sont dominées par les effets de structure de bande, c.-à-d., le transfert d'électron aux vallées satellites de la bande de conduction, qui mènent à un pic et à une diminution de la vitesse de dérive avec l'augmentation du champ électrique [Arabshahi08]. Ici, le pic de vitesse de dérive est caractérisé en termes d'expression analytique.

Dans le présent chapitre, nous allons présenter une série d'applications de la méthode de Monte Carlo pour la simulation de dispositifs spécifiques. Car les premiers pas vers le développement de dispositifs semi-conducteurs pour la microélectronique ont été fondés sur les semi-conducteurs (Si et Ge), GaAs et d'autres matériaux polaires ont été conçus par la suite.

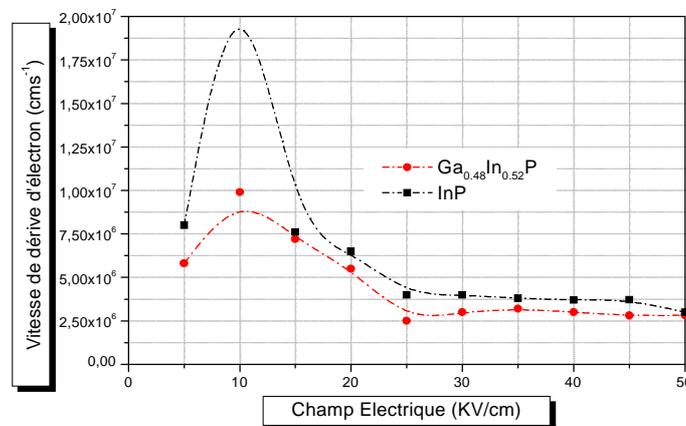


Figure VII- 1 Vitesse de dérive en fonction du champ électrique à 300K

Pour GaInP et InP Monte Carlo [MASSOU11]

La Figure VII- 1 montre la caractéristique vitesse-champ en matériaux InP et Ga<sub>0,50</sub>In<sub>0,50</sub>P à température ambiante, une concentration de dopage de  $10^{16} cm^{-3}$  avec un champ électrique appliqué sur l'un des axes cubiques. À partir

de la courbe (caractéristique de vitesse-champ), nous pouvons extraire les valeurs de pic pour l'InP et le  $Ga_{0,50}In_{0,50}P$  à environ  $2 \cdot 10^7 \text{ cms}^{-1}$  et  $1,15 \cdot 10^7 \text{ cms}^{-1}$  respectivement. Cette courbe vitesse-champ précisément présente une diminution de la vitesse d'électron, quand le champ électrique augmente au-dessus de la valeur- seuil. Cet effet est dû au transfert des électrons à partir de la vallée centrale  $\Gamma$  avec un état d'énergie bas et d'une mobilité élevée à une plus haute vallée avec l'état d'énergie élevée et d'une mobilité basse.

La Figure VII- 2 présente la réponse transitoire d'électrons dans un alliage GaInP, La survitesse initialement augmente plus rapidement avec l'augmentation de champ électrique en raison de la faible masse effective de la vallée gamma. Pour un champ électrique inférieur au champ critique ( $<10 \text{ kV/cm}$ ), l'effet de survitesse est inexistant (ou énormément faible) donc il n'est pas observable dans l'alliage GaInP

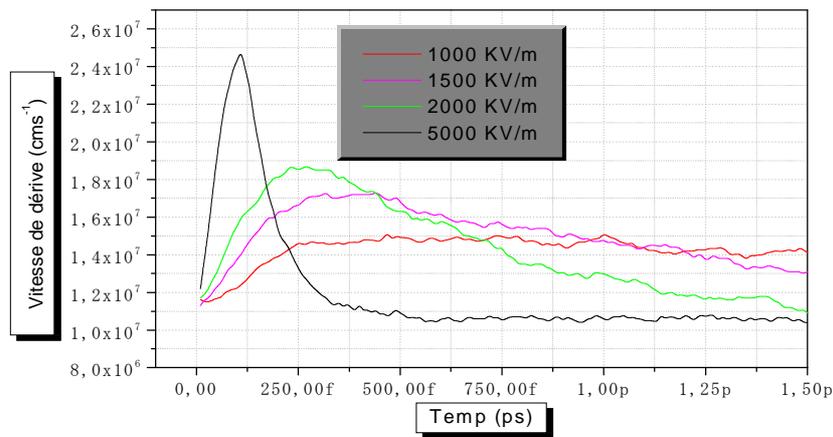


Figure VII- 2 La vitesse des électrons de dérive en fonction Du temps pour différentes valeurs de champ [MASSOU11]

A partir de 15 kV/cm jusqu'à 50 kV/cm, les vitesses commencent à présenter un pic. Ce pic, pour le champ 15kV/cm, est de  $1,7 \cdot 10^7 \text{ cms}^{-1}$  pour un temps de 315fs. Pour le champ 50kV/cm, la vitesse maximale est de  $2,45 \cdot 10^7 \text{ cms}^{-1}$  pour un temps de 108fs [MASSOU11].

La Figure VII- 3 illustre la vitesse moyenne des électrons dans GaInP en fonction de la distance. Nous constatons que, pour le champ appliqué de 1500 à 5000  $\text{kV}\cdot\text{m}^{-1}$ , la vitesse moyenne des électrons atteint des valeurs de survitesse très rapidement. Il est suggéré que dans GaInP la valeur  $1000 \text{ kV}\cdot\text{m}^{-1}$  est le champ critique pour l'apparition de survitesse. Comme mentionné ci-dessus,  $1000 \text{ kV}\cdot\text{m}^{-1}$  correspond également à un pic dans la caractéristique de vitesse-champ. Pour la valeur du champ électrique de  $50 \text{ kV}/\text{cm}$ , la vitesse atteint  $2.45 \times 10^7 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$  au bout de 108 fs avec une distance parcourus 67 nm.

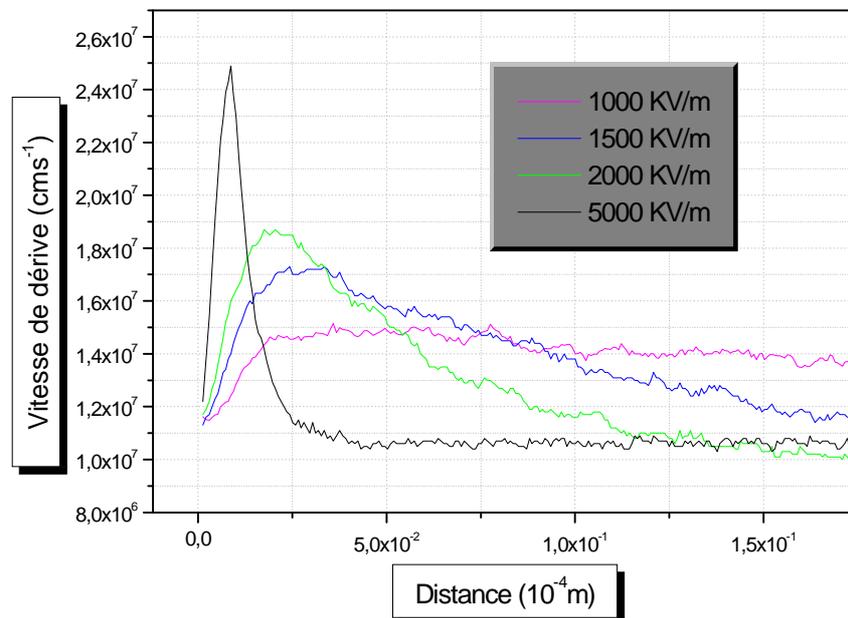


Figure VII- 3 Vitesse de dérive d'électron en fonction de distance [MASSOU11]

### VII-3 Diode $n^+ - n - n^+$ :

Nous commençons la présentation d'exemples spécifiques de simulation MC de dispositifs semi-conducteurs à partir d'une structure (diode). La simulation de ces structures est simple dans le sens où elle peut être réduite à une description d'une dimension. Néanmoins, la simulation peut nous apporter de nombreuses informations utiles sur les propriétés de transport des structures plus complexes.

La structure générale d'une diode  $n^+ - n - n^+$  est représentée sur la Figure VII- 4. Les régions fortement dopées agissent comme cathode et anode, Des homojonctions abruptes sont supposées pour plus de simplicité.

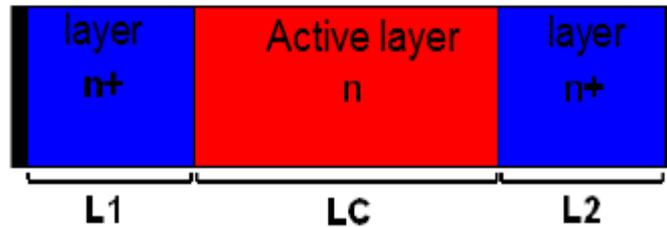


Figure VII- 4: Diode (Si)  $n^+ - n - n^+$

Donc une série de résultats MC spécifiques pour une diode submicronique (Si), avec une couche active ( $N_D = 2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ) de longueur 400 nm entouré par des régions dopées à  $N_D = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , sont présentées dans la figure ci dessous. La température du réseau est de 300 K et la tension d'anode  $V_a$  est de 1V. Plusieurs observations sont à remarqué. La densité des électrons libres

Figure VII- 5 montre que les électrons diffusent à partir des régions dopées dans la couche intrinsèque. Le dipôle de la charge sur les deux interfaces induit un champ qui s'oppose à cette tendance. Lorsqu'une tension est appliquée à la structure, le potentiel diminue à l'intérieur de la couche intrinsèque

Figure VII- 6

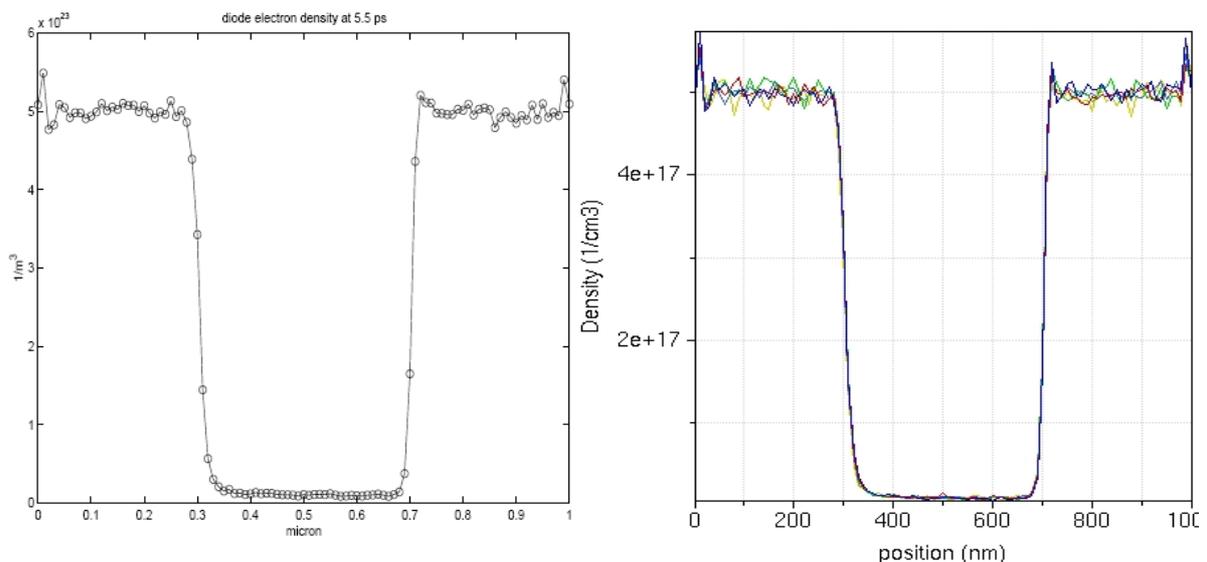


Figure VII- 5 Densités des électrons

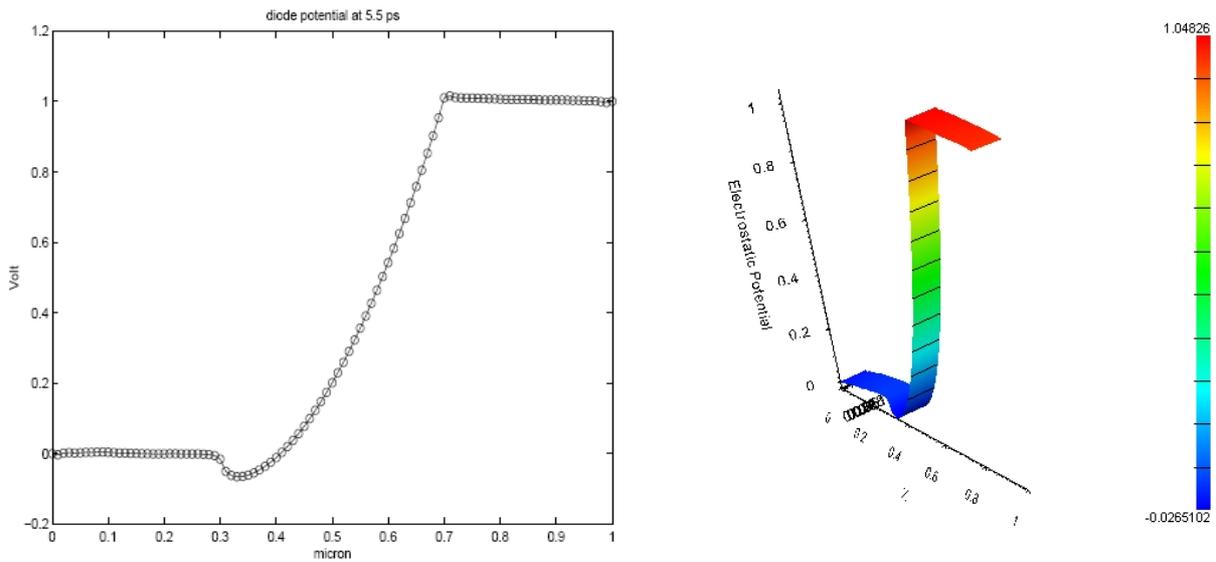


Figure VII- 6 Potentiel électrostatique

Un champ électrique très élevé est trouvé Figure VII- 7, à proximité de l'anode. Les Porteurs qui pénètrent dans la couche active surmonte la petite barrière de potentiel à la cathode sont accélérés quasi balistiquement à environ la moitié de la région intrinsèque. En conséquence, la vitesse moyenne des électrons (dans la direction x) augmente jusqu'à une valeur de l'ordre de  $10^7$  cm / sec.

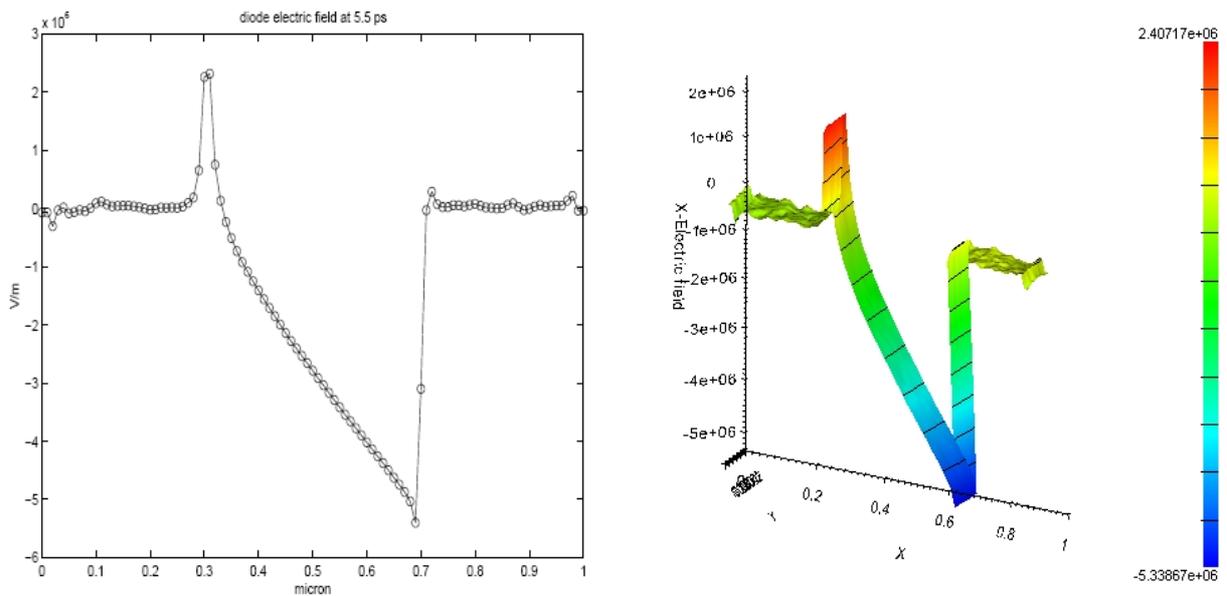


Figure VII- 7 Champ électrique

La diminution suivante Figure VII- 8 est due à un transfert d'électrons dans les vallées de satellite, et de la rétrodiffusion de la couche anode  $n^+$  (causée par la diffusion d'impuretés). Élévation de la température, produit une réduction de la vitesse maximale dans la couche active, en raison d'une diffusion renforcée. L'énergie moyenne des porteurs augmente lors du passage de la source à l'extrémité de drain du canal figure VII-9.

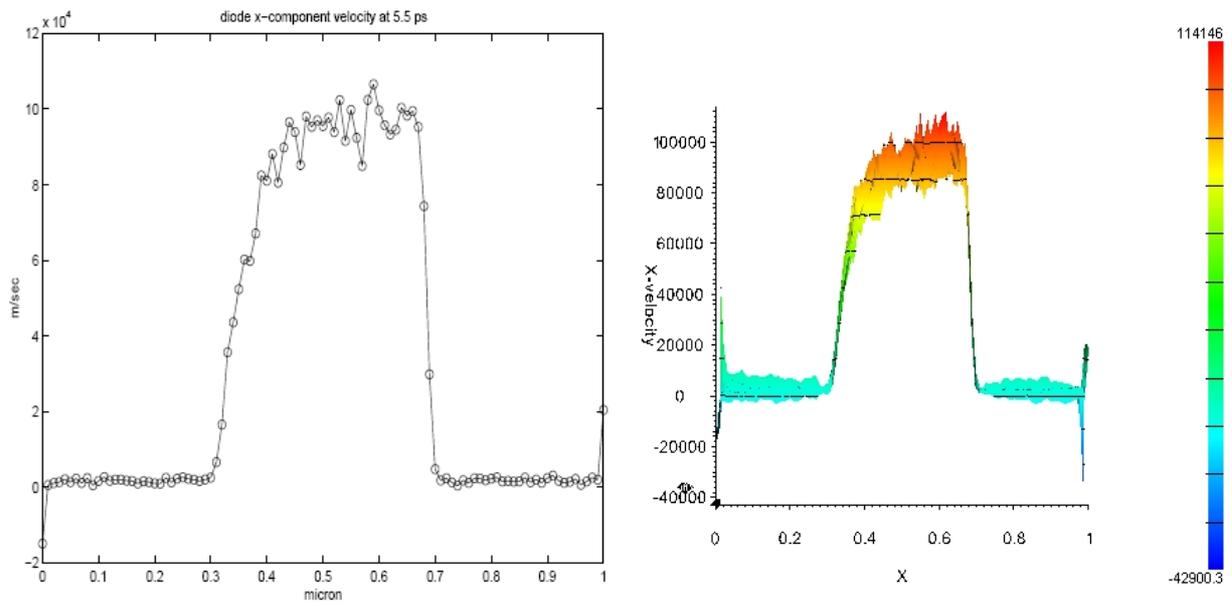


Figure VII- 8 vitesse de dérive

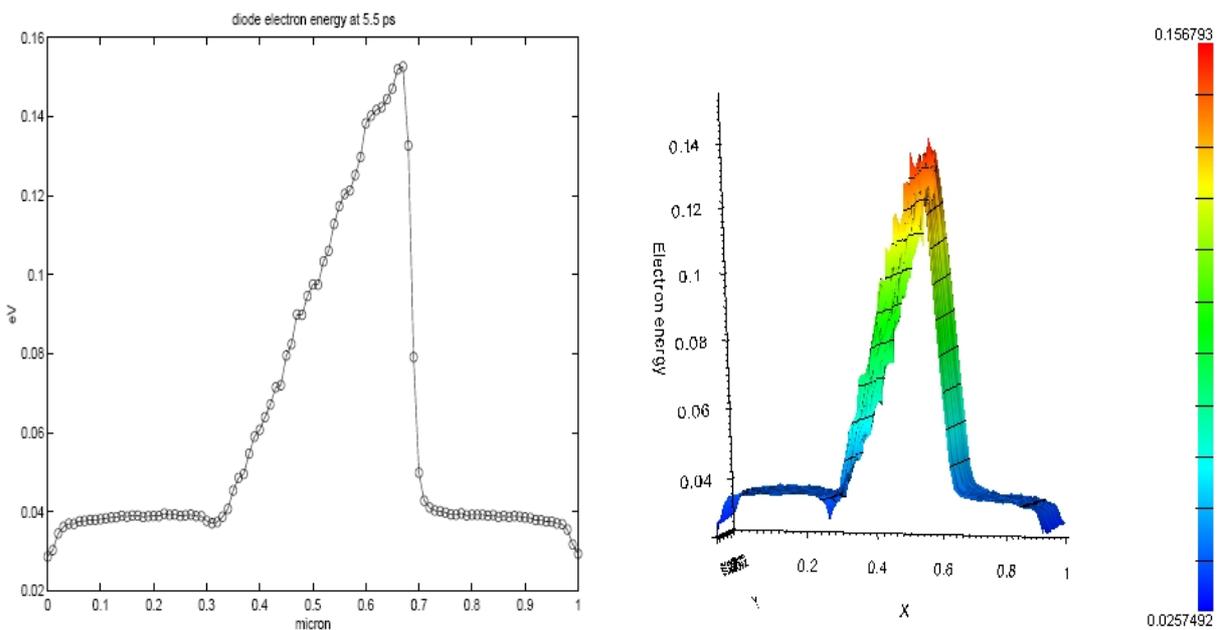


Figure VII-9 l'énergie moyenne

En comparant nos résultats à ceux du simulateur Multi-group-WENO [GAL05], [TOM93] et [SAYA10], nous pouvons dire qu'il existe une bonne concordance sur toute la gamme entière de distance  $x$

L'augmentation de la longueur de la couche active réduit également les vitesses des électrons, puisque le mouvement des porteurs se déplace de quasi-balistique à des conditions dominées par des collisions.

Un des points importants dans la simulation MC de structures submicroniques concerne le rôle des conditions aux limites. Dans la situation présentée dans les figures précédentes, le champ électrique diminue rapidement (dans une longueur de quelques centaines d'Å) que nous entrons dans la région dopée. Les Porteurs sont alors en équilibre thermique aux deux extrémités du domaine de la simulation.

#### VII-4 : DISPOSITIFS MESFETS

##### VII-4-1 MESFET SI (simple polarisation)

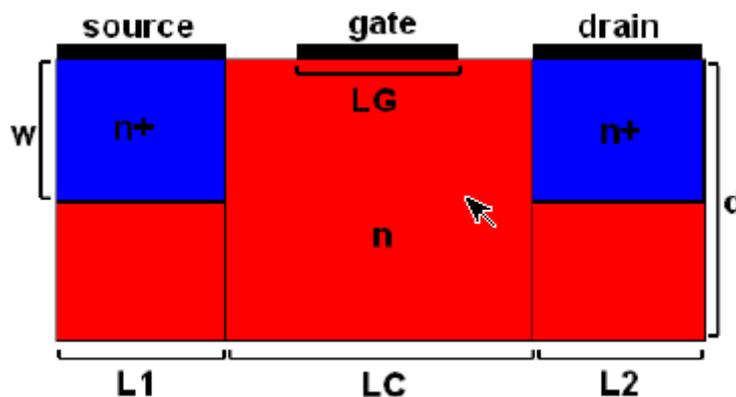


Figure VII- 10 MESFET (Si)

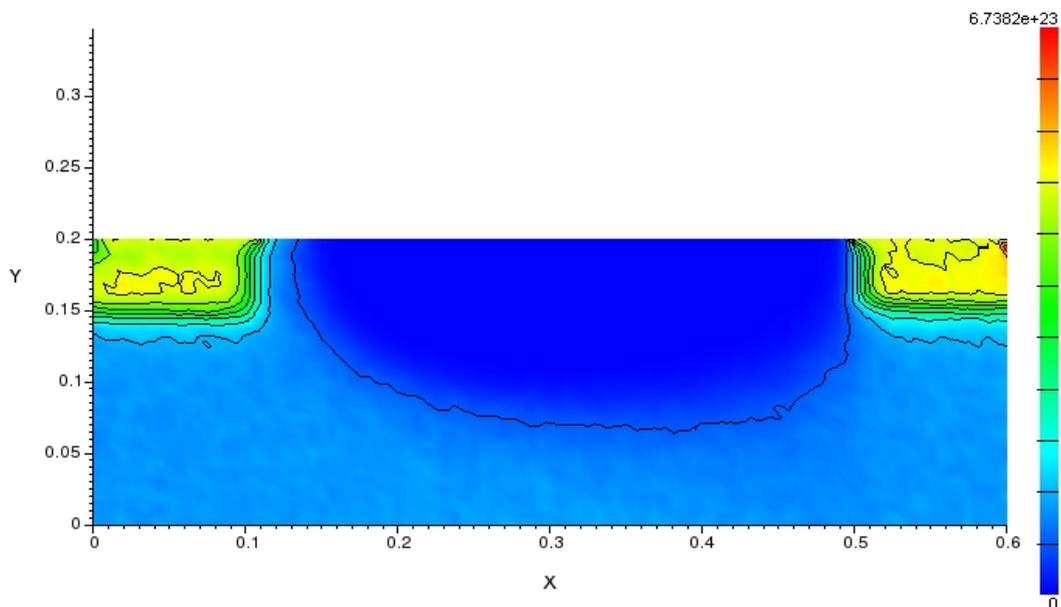
Le MESFET Si Figure VII- 10 a été pris comme un prototype pour l'illustration du simulateur de dispositifs Monté Carlo que nous avons développé. Le choix a été suggéré par le fait que le modèle physique est assez simple.

Les tensions de polarisation appliquées sont  $V_G = -0.1\text{v}$ ,  $V_D = 0.25\text{v}$ . Pour la concentration de dopage de drain est identique à celui de la source  $n^+ = N_D = N_S = 3.10^{23}\text{m}^{-3}$  par contre celle de la grille est  $n = 10^{23}\text{m}^{-3}$

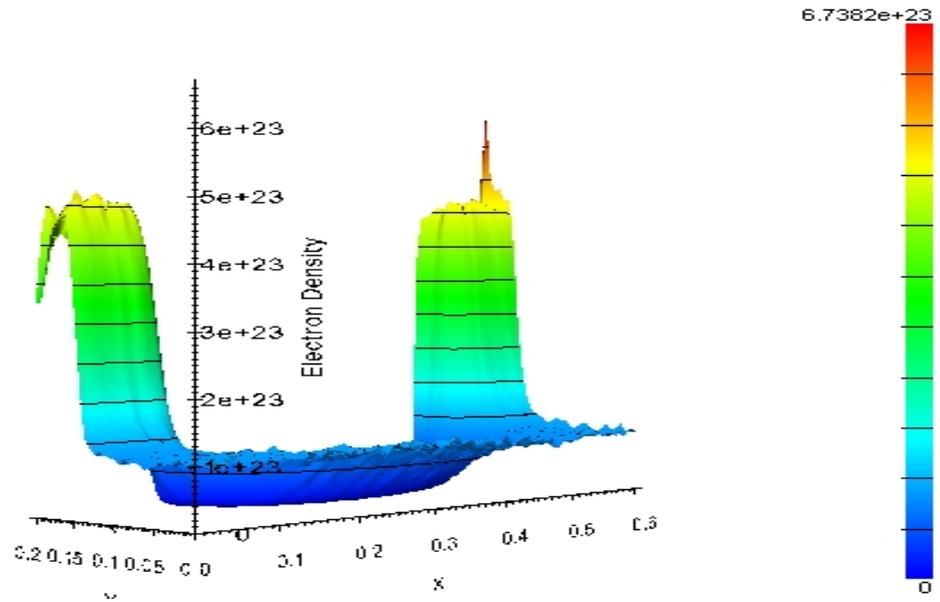
Les complications surviennent si on essaie de rendre compte correctement de la présence de contacts. Il devrait être déjà clair que la simulation des contacts ohmiques et d'injection est l'une des problèmes majeurs des simulations. La condition de la neutralité de charge (nombre de porteurs libres toujours égal à la charge fixe) sur la couche de la cellule adjacente aux contacts a été supposé de reproduire avec précision le contact ohmique idéal aux électrodes source et drain.

La barrière de Schottky sur la grille a été simulée en appliquant simplement sur la grille un potentiel égal à la hauteur de la barrière de cette interface métal-semi-conducteurs caractéristique. Bien que pas tout à fait satisfaisante, cette prescription a toujours été largement utilisé dans les simulations de périphériques

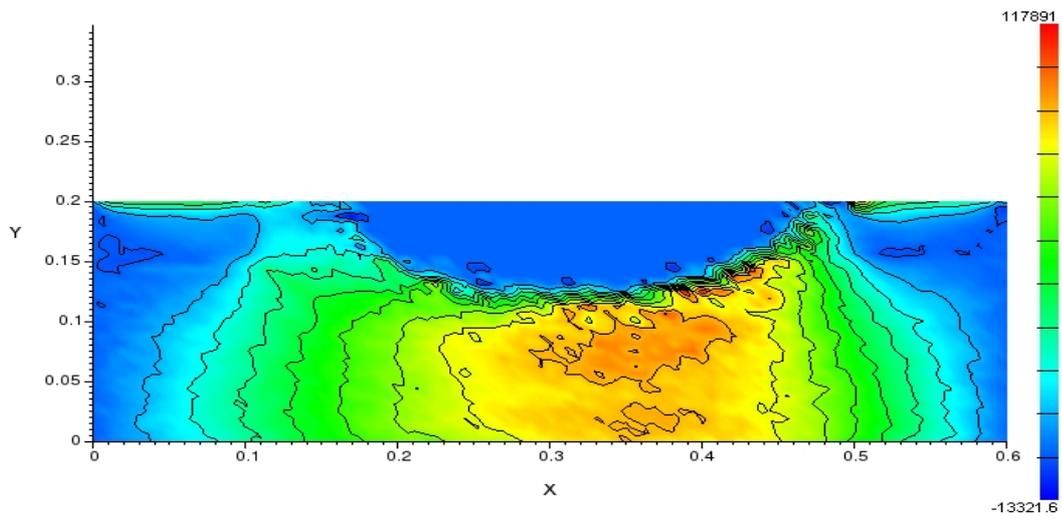
MC



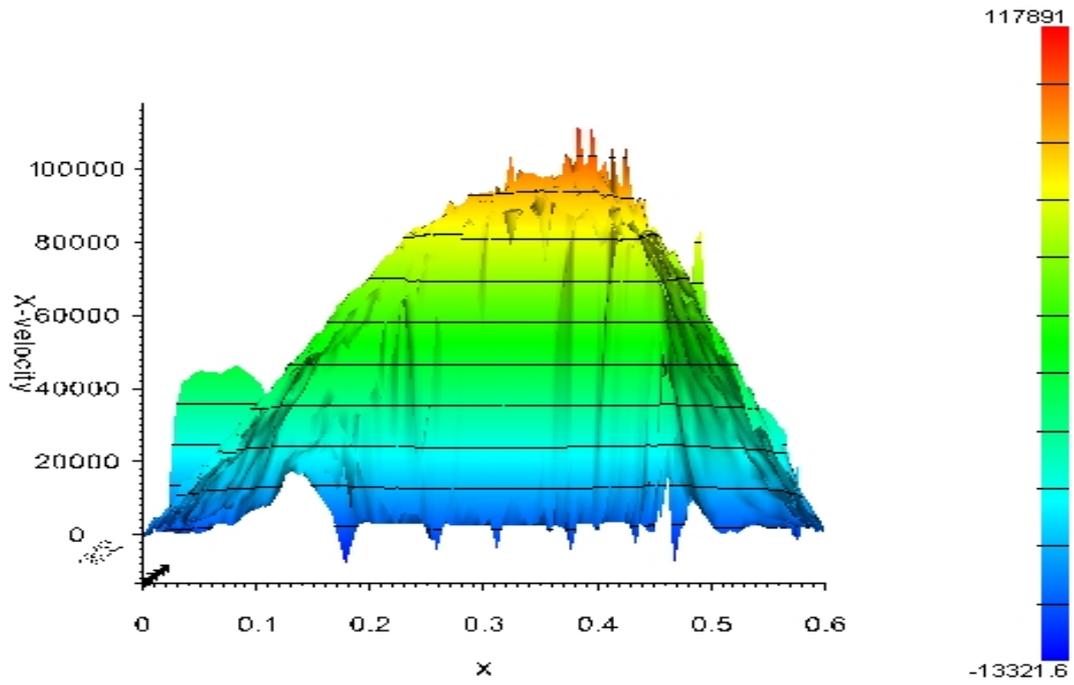
Densité des électrons en 2D



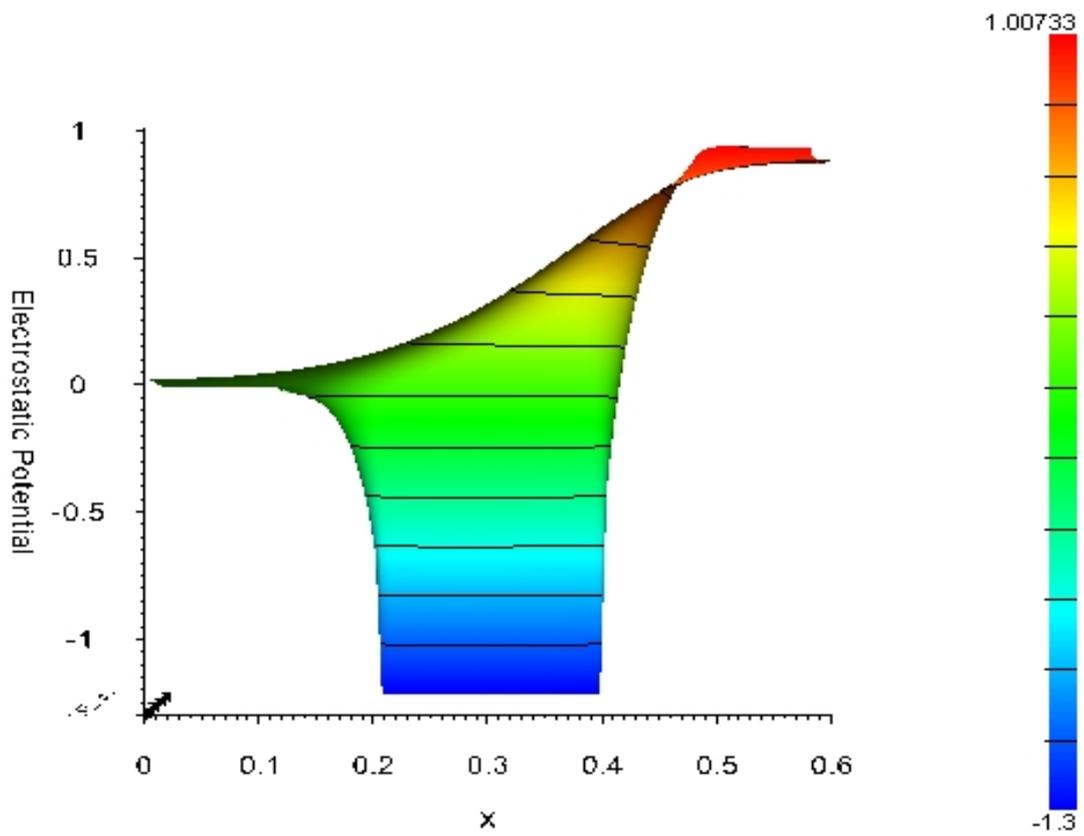
Densité des électrons en 3D



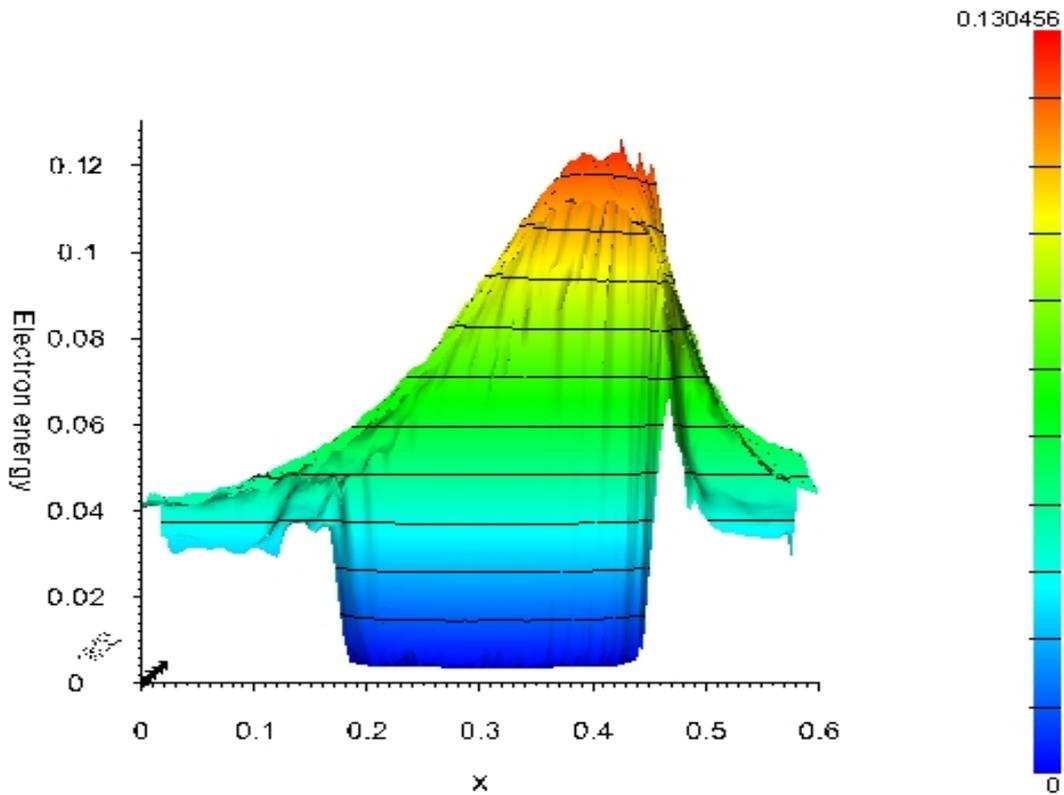
La vitesse de dérive des électrons en fonction de la distance 2D



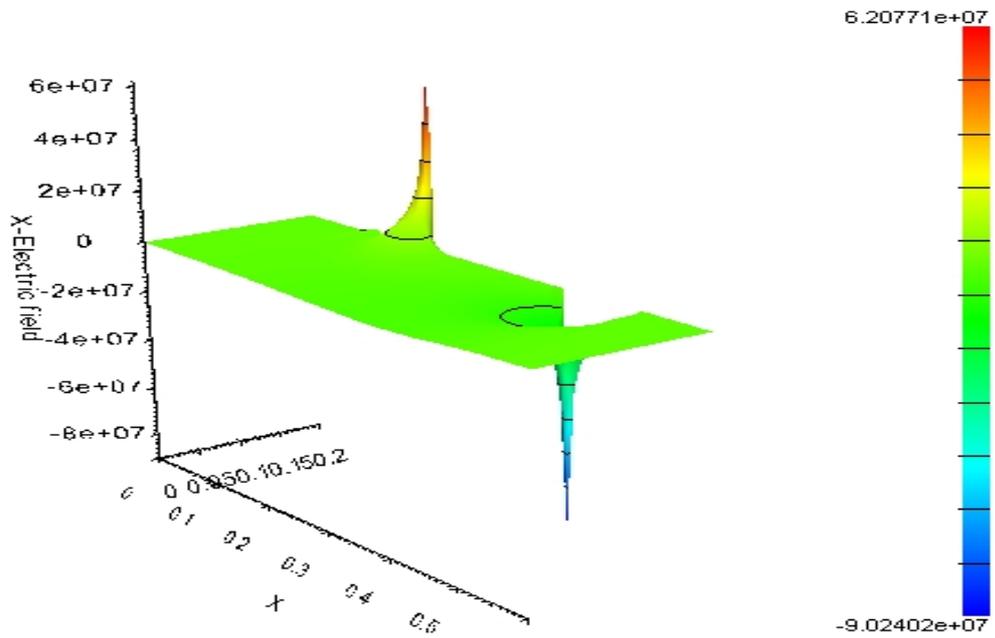
La vitesse de dérive des électrons en fonction de la distance 3D



Potentiel électrostatique en fonction de la distance x



Energie des électrons en fonction de la distance x



Champ électrique en fonction de la distance x

Figure VII- 11 Densités des électrons, vitesse de dérive, potentiel électrostatique, l'énergie moyenne et le champ électrique dans une diode de Si ( $n^+ - n - n^+$ )

Plusieurs simulations de MESFET ont été présentées après les travaux de Hockney al. Du point de vue physique, les différentes simulations peuvent être divisées en deux groupes, selon le modèle utilisé (deux ou trois modèle de la vallée, ou le diagramme de bande complète). Les mécanismes de diffusion sont également pris en compte, et comprennent des interactions intervalles non-équivalents ( $\Gamma \leftrightarrow X$  ou  $\Gamma \leftrightarrow L$  les deux model de vallée,  $\Gamma \leftrightarrow L$ ,  $L \leftrightarrow X$ ,  $\Gamma \leftrightarrow X$  pour les trois model de vallée), les interactions intervalles équivalents ( $\Gamma \leftrightarrow \Gamma$ ,  $L \leftrightarrow L$ ,  $X \leftrightarrow X$ ) et interaction optique polaire et des diffusions de phonons acoustiques.

Pour les deux premiers aspects de la Figure VII- 11 qui représentent la densité des électrons dans le MESFET Si, nous observons formellement une région de déplétion sous la grille due à l'application des tensions de drain, source et aux forts champs électriques qui repoussent les porteurs de charges de cette région. Pour ce qui est du troisième et quatrième aspect toujours de la même figure nous apercevons la composante longitudinale de la vitesse de dérive des électrons.

Dans la région active, les électrons sont accélérés par les forts champs électriques et gagnent de l'énergie, menant ses électrons à l'interface n-n<sup>+</sup> du drain à une énergie maximale. Au contact du drain, l'énergie moyenne continue à diminuer. Ceci est provoqué par le fait que les électrons perdent leurs énergies à cause de plusieurs phénomènes de diffusions. L'énergie moyenne des porteurs augmente lors du passage de la source à l'extrémité de drain du canal. Plupart des événements de diffusion de phonons se produit lors de la première moitié du canal.

#### VII-4-2 MESFET GaInP et GaAs (simple polarisation)

Dans ce paragraphe, nous présentons des résultats de la simulation des dispositifs GaInP à droite et le GaAs qui est à gauche) Figure VII-123, avec une longueur de grille 25nm entouré par des régions de dopage de source et drain ( $n^+ = 2 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$ ), la Figure VII-132 La température du réseau est de 300 K et en tenant

des tensions de polarisation simple comme suit  $V_d = 1\text{v}$ ,  $V_g = -0.1\text{v}$  et  $V_s = 0\text{v}$ .

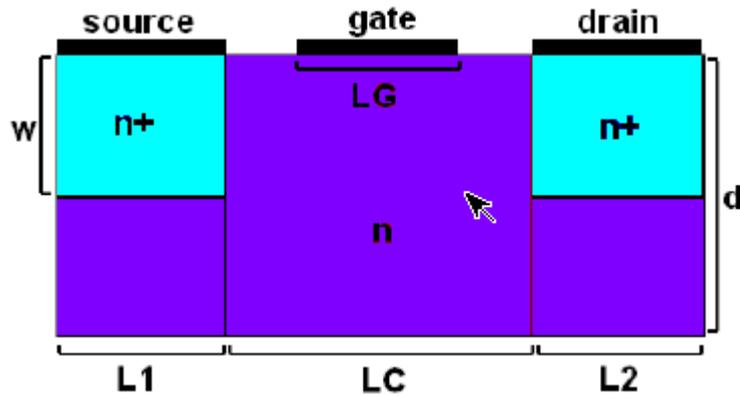
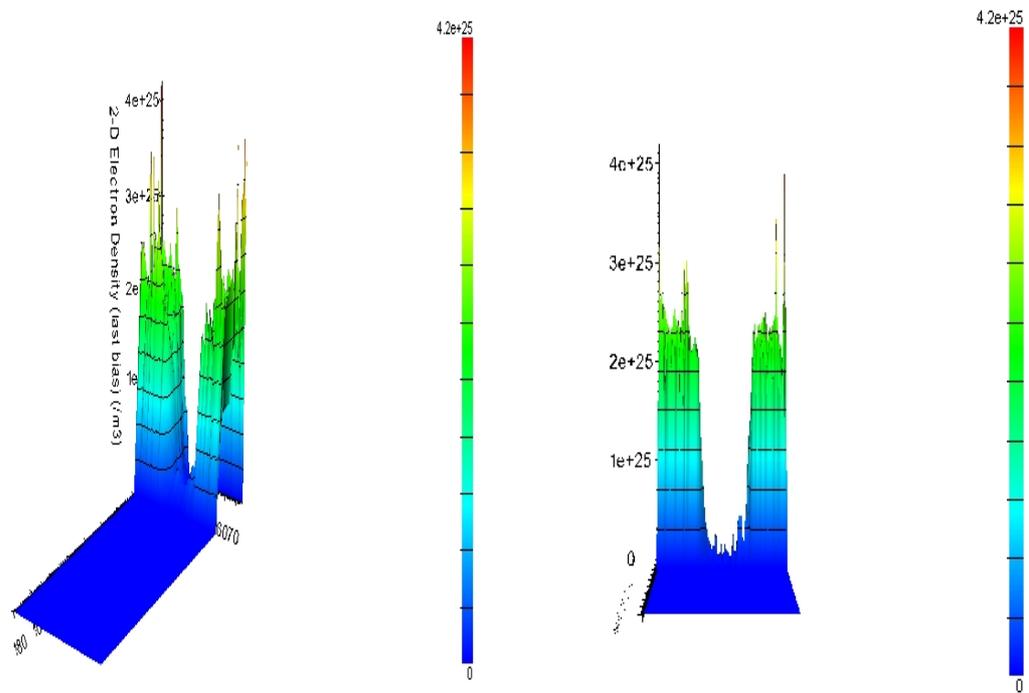


Figure VII- 142 Modèle d'un MESFET utilisé pour le GaInP et GaAs

La densité des électrons, la vitesse de dérive, l'énergie moyenne, le champ électrique se sont les principes de transport les plus important, illustrés dans la Figure VII- 1613 pendant un temps de 10 picosecondes. Nous pouvons dire que c'est le même comportement de la densité des électrons examiné dans le « Si » découle pour le « GaAs » et le « GaInP ».



- a- densités des électrons

Après une comparaison de la vitesse de dérive ainsi l'énergie moyenne des dispositifs étudiés auparavant et Comme il est bien illustré sur les Figures VII-(153-14-15) nous remarquons que le GaInP présente une vitesse et une énergie qui sont légèrement supérieur à celles du GaAs et ceci pour plusieurs longueurs de grilles nous observons facilement que l'augmentation de la longueur de la couche active réduit les vitesses des électrons ainsi que l'énergie moyenne, puisque le mouvement des porteurs se déplace de quasi-balistique à des conditions dominées par des collisions.

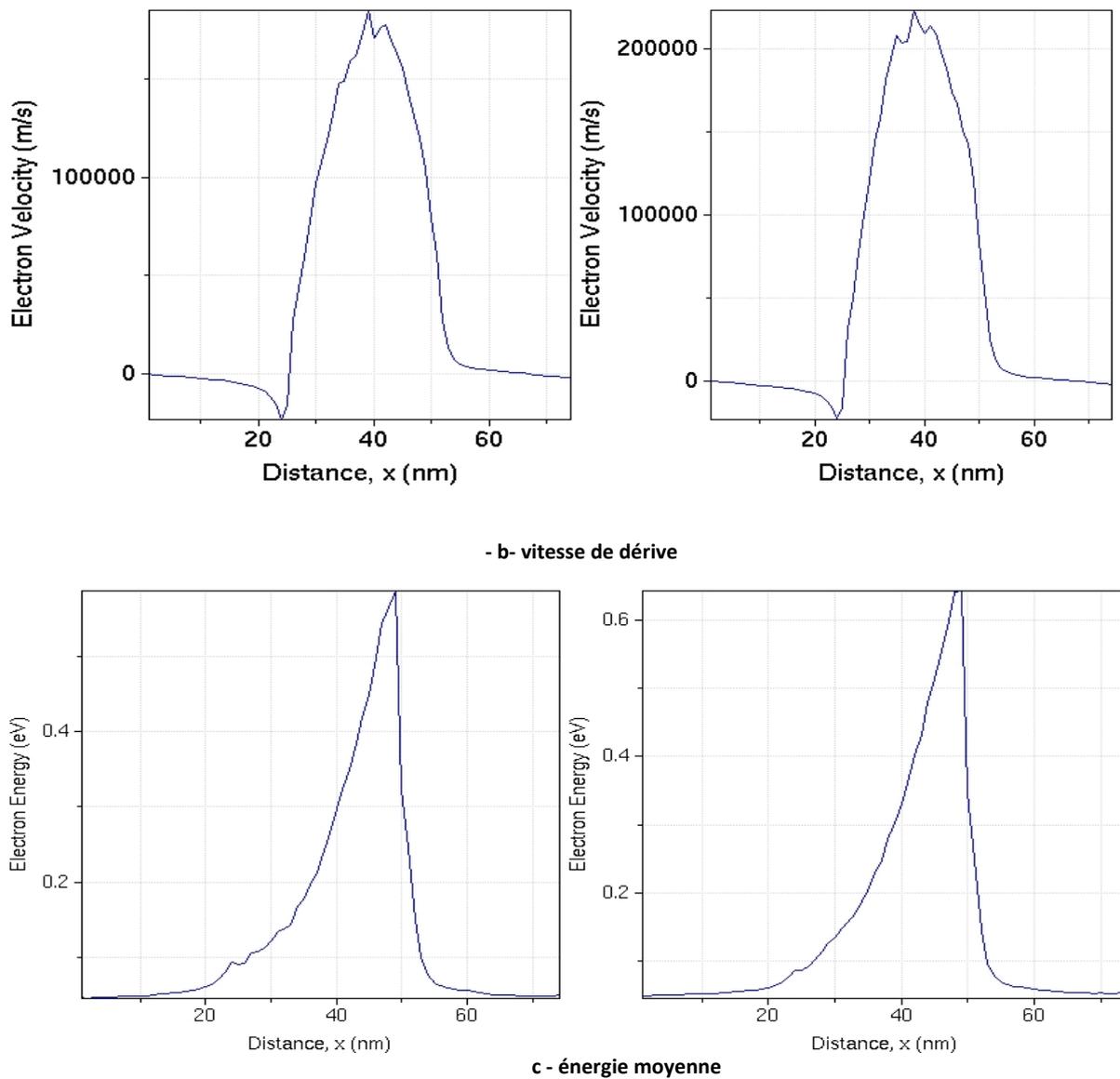
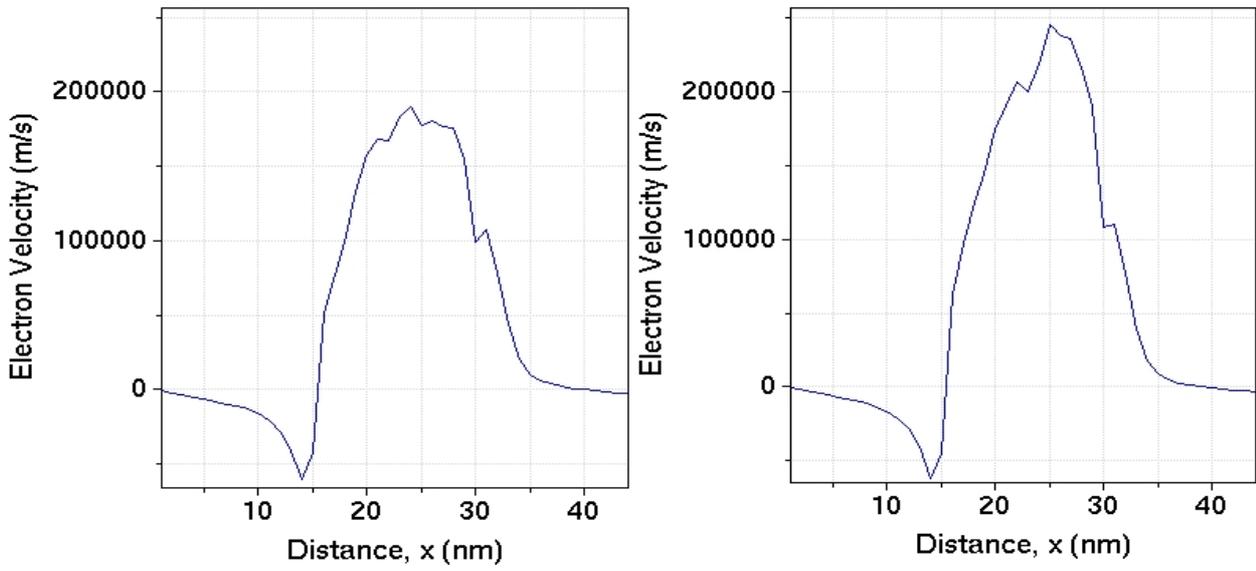
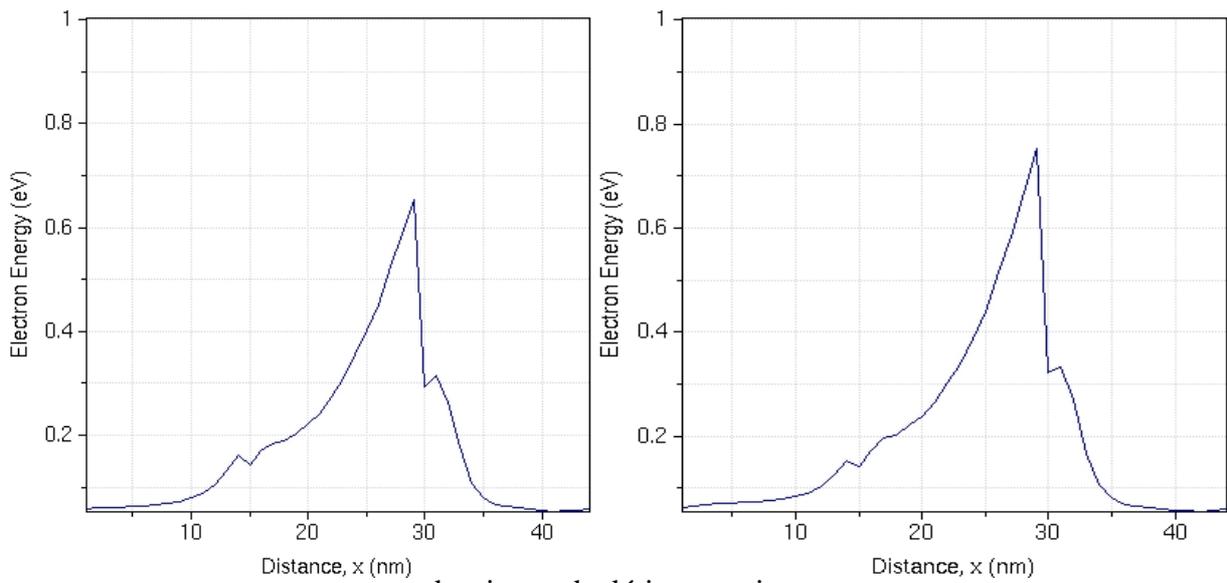


Figure VII- 163 : Densités des électrons (a), vitesse de dérive (b), , l'énergie moyenne(c) dans les dispositifs GaAs (à gauche) et le GaInP (à droite)

« Avec une longueur de grille 25nm »



- b- vitesse de dérive



- b- vitesse de dérive énergie moyenne

Figure VII- 174: vitesse de dérive (a), l'énergie moyenne (b) Dans les dispositifs GaAs (à gauche) et le GaInP

(À droite) « Avec une longueur de grille 20nm »

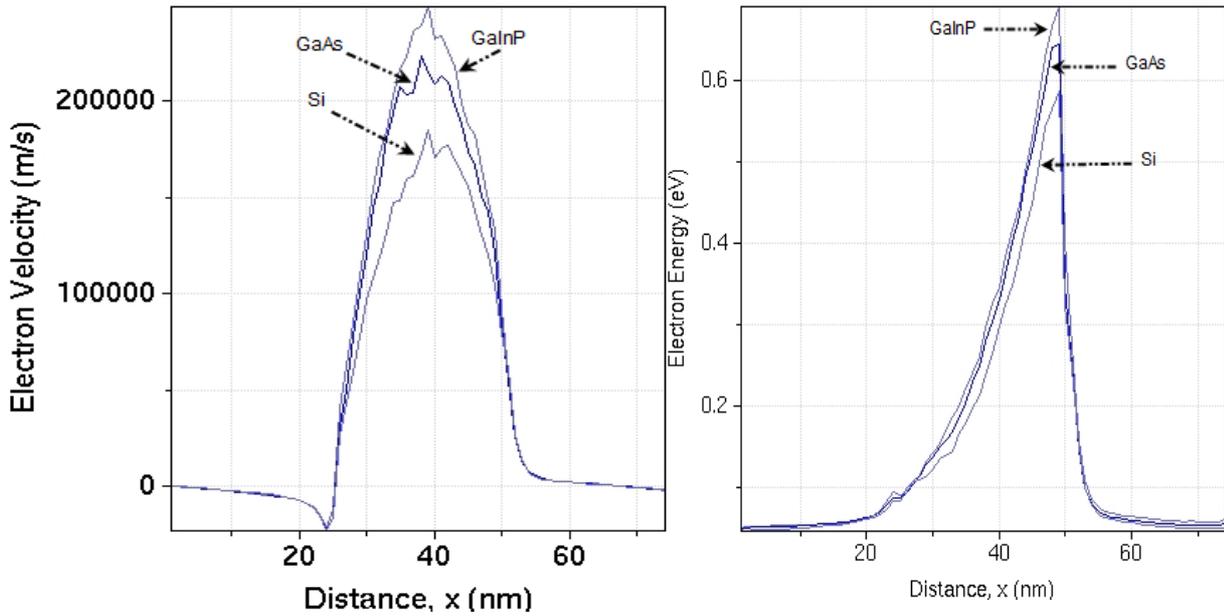


Figure VII- 185 Comparaison de la vitesse et l'énergie entre Si, GaInP et GaAs

« Avec une longueur de grille 15nm »

VII-4-3 GaInP : pour différentes valeurs de Vg

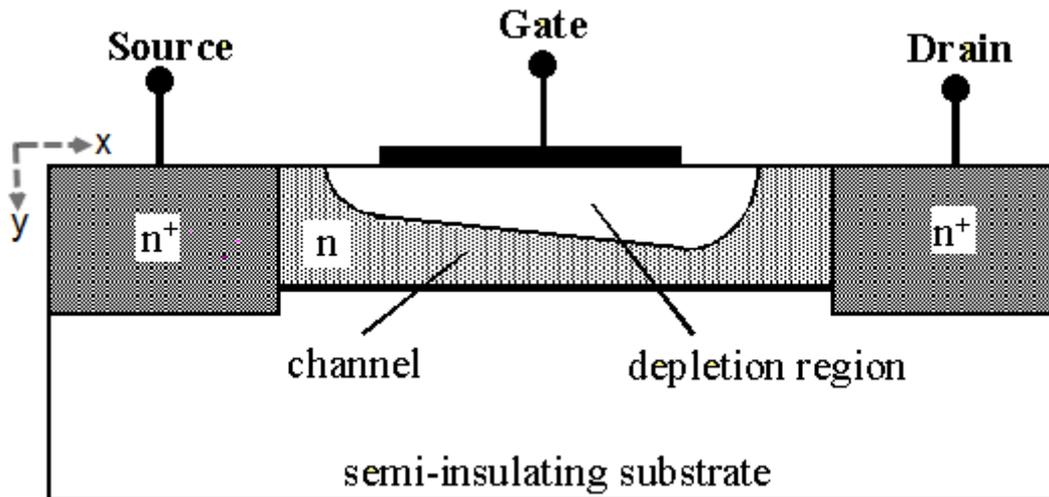


Figure VII- 196 MESFET (GaInP)

Les propriétés du canal MESFET (GaInP) ont été étudiées en utilisant Figure VII- 196 (Gate Length  $L_g = 25\text{nm}$ , la longueur de source / drain  $L(S/D) = 25\text{ nm}$ , l'épaisseur du canal  $T_c = 20\text{ nm}$ ). Les régions de source et de drain sont fortement dopées, et la grille est auto-alignée. Le modèle de transport utilisé dans la simulation est diffusif. Les profils de champ électrique  $E$ ,  $V$  la vitesse moyenne et

latérale concentration N en fonction de la distance (x) de la source sont représentés sur les figures (17 à 21)

Figure VII- 7: représente le schéma de la bande de conduction pour le dispositif MESFET InGaP de source / drain de dopage de  $2 \times 10^{25} \text{m}^{-3}$  et une couche active  $1 \times 10^{23} \text{m}^{-3}$   $L_g = 25 \text{nm}$  pour divers polarisations de grille ( $V_g = 0 \text{v} \sim -1 \text{v}$ ), obtenue par des simulations modèle-diffusive. Le tracé le plus bas montre le début de la source d'épuisement, où le haut-de-la-barrière est poussé près du bord de la source de la bande de conduction. La source ne peut pas fournir plus de charge si la tension de grille est encore accrue.

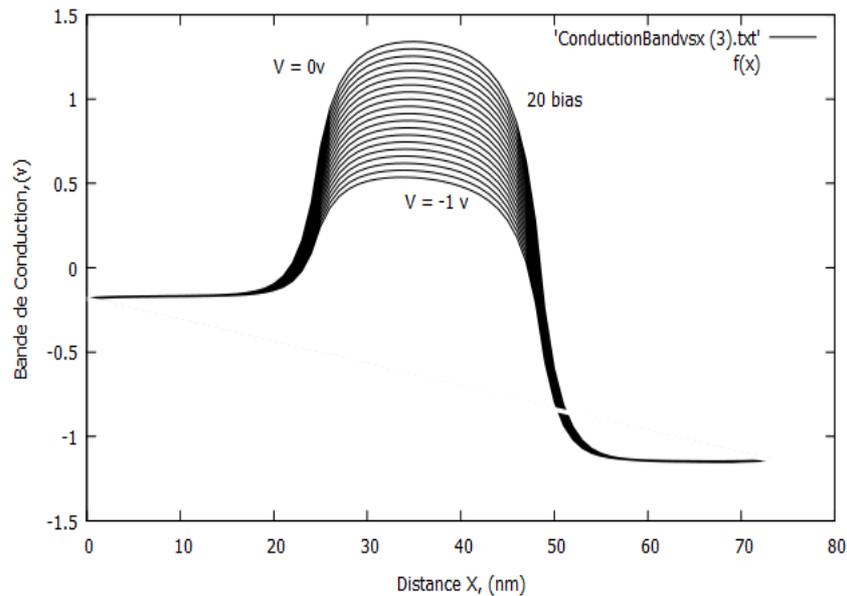


Figure VII- 17 Diagramme de bande de conduction le long de la direction de transport

Obtenu à partir d'une simulation de diffusion de dérive d'un MESFET GaInP

À canal court avec une polarisation de drain et diverses polarisation de grille pour

Un dopage source / drain  $N_{s/d} = 2 \times 10^{25} / \text{cm}^3$ .

D'autre part, GaInP MESFET ne possède pas un champ électrique intégré à l'intérieur de la région source cela est clairement illustré à la Figure VII- 8, et la densité d'électrons dans le cas présent est augmentée en raison du transport des porteurs qui est lent et donc l'accumulation des porteurs

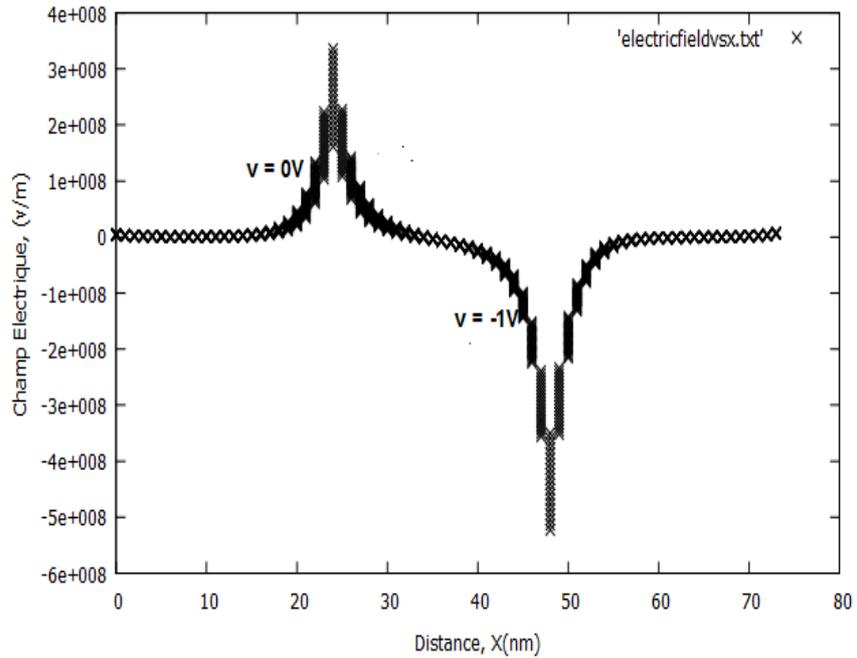


Figure VII- 18 Le champ électrique moyen en fonction de la distance

Figure VII- 19: indique deux régions de concentration qui varient rapidement. La première est entre la source et la grille et la seconde est entre la grille et le drain. On observe également que, la densité d'électrons se réduit à zéro le long de la grille. Il existe une région de barrière près de l'extrémité de source du canal. Cette barrière détermine la quantité d'électrons qui entrent dans le canal. Sa hauteur est modulée par la polarisation de grille

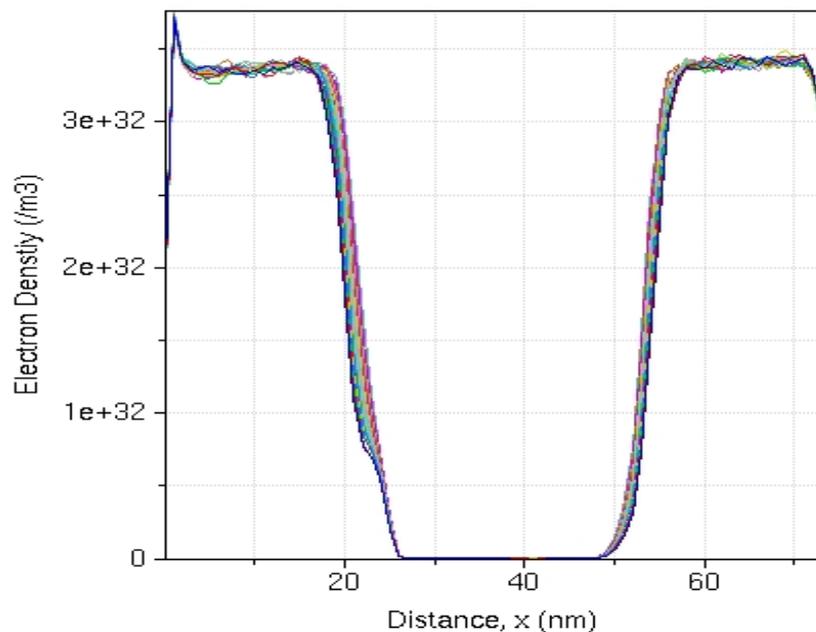


Figure VII- 19 densité des électrons en fonction des profils de distance pour le Mesfet

Dans la Figure VII- 20: aucun champ électrique n'est présent dans la source de la conception classique. La densité d'électrons correspondant est donc considérablement diminuée en raison de la présence d'une composante de vitesse de dérive entre la région de source et la couche active (canal). À proximité de drain la vitesse présente une forte diminution, en raison de l'accumulation des L-vallée électrons lents dans cette région.

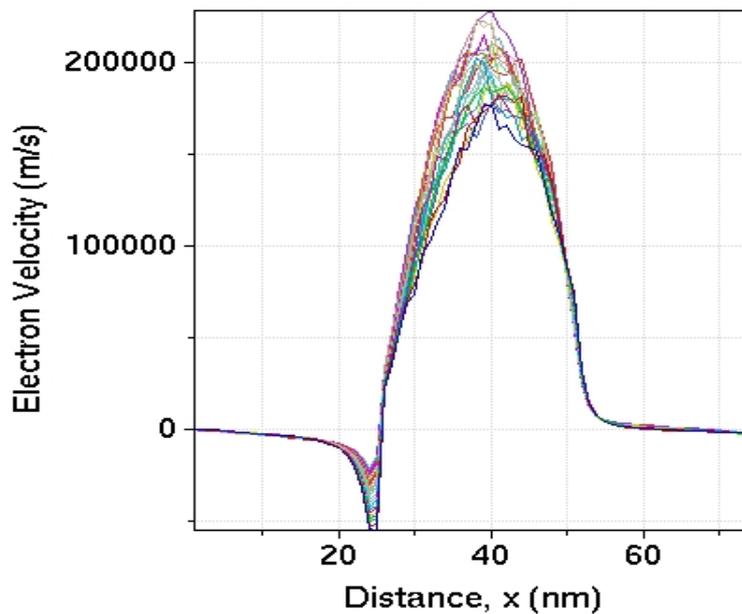


Figure VII- 20 la Vitesse des électrons en fonction de distance

Une accumulation importante d'électrons est également présente près de la source, causée par le débordement d'électrons à partir de la région dopée Figure VII- 20. Une telle concentration élevée équilibre la vitesse relativement faible d'électrons pour maintenir le courant large de drain du dispositif.

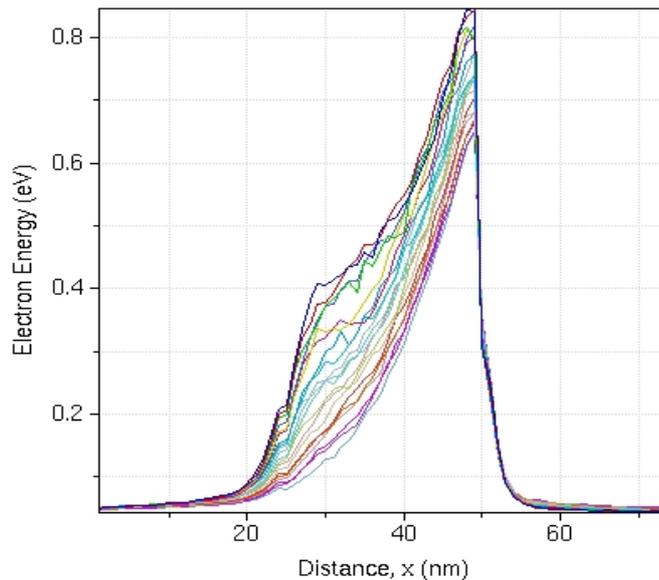


Figure VII- 20 Energie des électrons en fonction de distance

### VII-5 Conclusion:

Comme nous l'avons souligné tout au long de cette thèse, toutes les méthodes sont basées sur l'équation de transport de Boltzmann.

La Méthode Monté Carlo se trouve sur un niveau toujours plus élevé, car elle fournit (même dans des conditions non-homogènes, non stationnaires) une solution exacte de l'équation de Boltzmann. Elle décrit correctement les effets non locaux. Malheureusement, la complexité et le coût de chaque approche est inversement proportionnelle à l'amélioration du modèle physique dont-il est basé. L'utilisation d'une approche ou d'une autre dépend donc du dispositif spécifique à l'étude.

En conclusion, nous avons montré que la simulation Monte Carlo de

dispositifs semi-conducteurs a fait des progrès considérables au cours des dernières années, et est aujourd'hui un outil très précieux dans le domaine de la modélisation des dispositifs. En outre, la discussion présentée au paragraphe précédent indique que MC est la meilleure technique pour étudier des situations où les effets non stationnaires sont importants (comme par exemple dans les dispositifs submicroniques). Il est sûr de s'attendre à ce que, la tendance vers la miniaturisation des dispositifs continuera à l'avenir, et les simulateurs de MC étendent progressivement leur applicabilité.

Le succès de MC dans la modélisation du dispositif dépendra en définitive du compromis entre deux tendances, l'une à utiliser des modèles très sophistiqués physiques (qui conduisent à des préparations très coûteuses, mais des simulations très précises), l'autre à s'appuyer sur des modèles simplifiés, sacrifiant un peu de précision pour une réduction de la complexité et du coût de l'algorithme. Le long de cette ligne, il sera extrêmement utile de pouvoir combiner différentes méthodes, afin d'exploiter pleinement le potentiel de chaque approche.

Les simulateurs utilisant 3 modèles de la vallée sont certainement à privilégier, même si les différences entre les deux modèles ne sont importantes que dans la présence de champs électriques élevés ( $\geq 10$  KV/cm). Probablement plus importants sont les valeurs des constantes de couplage et la séparation de la vallée, qui influent fortement sur les propriétés de transport de GaInP et les résultats de la simulation.

Les détails de ce travail particulier et d'autres documents intéressants peuvent être trouvés dans les références

Comme une dernière remarque, nous espérons que cette thèse sera utile à toute l'équipe entrant dans le domaine de la simulation des Composants, et une incitation à ceux qui sont encore sceptique sur la capacité de la simulation MC pour faire face à des dispositifs réels.

## *Conclusion générale*

## CONCLUSION GENERALE

Cette thèse s'est donnée pour objectif d'élaborer un simulateur tridimensionnel des composants à semi-conducteur de tailles submicroniques. Nous avons utilisé une approche différente pour résoudre l'équation de transport de Boltzmann qui régit le phénomène de transport de charges dans un matériau semi-conducteur. Il s'agit de l'approche stochastique par le modèle de Monte-Carlo.

.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 survitesses 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 travaillé avec des températures de réseau comprises entre 100 et 900 . Nous avons montré que le comportement des porteurs est assez différent selon la température du réseau.

Dans le cadre de l'application de la Simulation Monte Carlo à la simulation des dispositifs, on a réalisé trois types de simulations unidimensionnel (cas des diodes), bidimensionnel et tridimensionnel (cas des transistors MESFET).

Les prédictions de notre simulateur sont maintenant tout à fait réalistes. La confrontation systématique entre théorie et expérience, menée tout au long du processus de réalisation d'un composant, permet d'inclure dans la simulation la géométrie réelle ainsi que la distribution des charges sur les surfaces. Ces données ont un impact déterminant sur les caractéristiques électriques et leur connaissance permet un excellent accord entre la simulation et les mesures.

Donc un des principaux avantages de ces méthodes basées sur la Monte Carlo est leur souplesse d'utilisation. Une fois le processus élémentaire de simulation est mis au point, les conditions d'utilisation de celui-ci peuvent être 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.

Cette méthode est actuellement la seule susceptible d'étudier les manifestations des porteurs chauds quelque soient les régimes de champ appliqué. Elle tient compte de façon complète, des formes de bandes d'énergie même complexes ; et c'est le cas particulier de l'étude des alliages ternaires et de

tous les détails de la dynamique microscopique avec des hypothèses simplificatrices réduites au minimum.

En contre partie, la méthode de Monte Carlo est attachée d'erreur statistique. Comme pour tout phénomène statistique, on peut améliorer la précision en augmentant la durée d'observation  $t$ .

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

La situation peut se compliquer singulièrement quand le matériau 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 et de collisions instantanées restent valides, la méthode de Monte Carlo montre sa supériorité lorsque les phénomènes se compliquent quelque peu. En effet ; elle permet de tenir compte facilement des non stationnarités spatiales ou temporelles que l'on veut étudier.

D'un point de vue physique, il sera nécessaire d'utiliser le diagramme d'énergie plus précis (full-band structure), pourra accroître l'exactitude de nos calculs pour les régimes en champs forts.

Une perspective de notre travail serait de faire une hybridation des deux approches de dérive-diffusion et de Monte-Carlo par le couplage des deux simulateurs réalisés pour pouvoir traiter correctement et en un temps réduit la nouvelle génération de composant électroniques. Dans cette approche hybride, on utilisera la méthode Monte-Carlo, à cause de sa précision physique, dans des endroits où apparaissent des phénomènes quantiques dus à la miniaturisation, tel que le canal court d'un MOSFET. Le modèle de dérive diffusion, plus rapide et plus

simplifié donc moins précis du point de vue physique, sera employé dans les autres parties du composant.

En effet, la technique de Monte-Carlo, bien que précise physiquement, a quelques limitations quand elle est appliquée à la simulation globale d'un composant. Elle peut devenir inefficace, en particulier dans les régions où le champ électrique est faible, alors que des modèles de composants basés sur la dérive-diffusion fonctionnent bien. Des avantages significatifs peuvent donc être prévisibles en combinant les deux méthodes, de telle sorte qu'on retient l'efficacité de calcul de la méthode de dérive-diffusion aussi bien que la précision physique de la technique de Monte-Carlo. Dans cette approche, Monte-Carlo est appliquée seulement dans les régions où elle est nécessaire, et les régions restantes sont décrites par les équations de dérive-diffusion avec des coefficients de transport locaux.

## **REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUE**

## REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [KITT83] Kittel, « *Physique de l'état solide* », Ed. Dunod Université (1983) 287,325
- [GERA88] Gerald Bastard, « *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures* », Les éditions de physique, Paris, (1988).
- [CAPY86] CAPPY. A, « *Propriétés physiques et performances potentielles des composants submicroniques à effet de champ : structures conventionnelles et à gaz d'électrons* », Thèse d'état, Université de Lille France. (1986).
- [MUR44] F. D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 30, 244 (1944).
- [KITT 98] KITTEL C., « *Physique de l'état solide* » - 7ème édition, Dunod, 1998.
- [ElFat07] A. El Fatimy. « *Détection et Emission Terahertz par les ondes de plasma dans des transistors HEMT à base d'hétérostructures GaN/AlGaN et InGaAs/InAlAs* », Thèse doctorat Montpellier II. **Juin 2007**
- [ELMO12] M.Elmourfakkir, « *Etude des propriétés optiques dans l'infrarouge lointain des hétérostructures à base de semi conducteurs Gaas/Algaas modèle de la fonction diélectrique* » Thèse d'état. Université Sidi Mohamed Ben Abdellah faculté des sciences Dhar El Mehraz Fès Maroc **2012**
- [PETER01] Peter Y.YU, Manuel Cardona. « *Fundamentals of semiconductors Physics and materials properties* », Springer (2001).
- [GERAL88] Gerald Bastard, « *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures* », Les éditions de physique, paris, (1988).
- [HENRIO7] Henri Alloul, « *physique des électrons dans les solides* », de l'école polytechnique – Septembre **2007**

- [DARGY94] Dargys A. and J. Kundrotas « *Handbook on Physical Properties of Ge, Si, GaAs and InP* », Vilnius, Science and Encyclopedia Publishers, **1994**
- [BRU.C88] BRU, C., « *Simulation par Monte Carlo* » Doctorat d'Etat, Orsay (**1988**)
- [M.Sze81] S. M. Sze, « *physic of semiconductor devices* », Ed. INC. J.Willy et Sons, New York **1981**.
- [Yu 2010] P. Y. Yu et M. Cardona, « *Fundamentals of semiconductors Physics and materials properties* », Graduate Texts in Physics. Springer, **2010**. (Cité en pages 24, 25, 33 et 161.)
- [JORDI11] « *Effets de la compensation du dopage sur les propriétés électriques du silicium et sur les performances photovoltaïques des cellules à base de silicium solaire purifié par voie métallurgique* » N° d'ordre 2011ISAL0111 Année **2011**
- [AITSH81] B. L. Altshuler, A.G. Aronov, and D.E. Khmelnitsky. « *Solid State* » *Comm.*, 39:619, **1981**.
- [RIM07] K. Rim. « *32 nm and beyond transistor enhancements Mobility enhancement* ». **2007**. IEDM short course
- [GUIDO97] Guidoni, L., C. Triché, P. Verkerk & G. Grynberg (**1997**), « *Quasiperiodic Optical Lattices* », in *Phys. Rev. Lett.* 79 (18), pp. 3363–3366.
- [Ashcr 76] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin. « *Solid States Physics* ». **1976**.
- [LUND00] M. Lundstrom. « *Fundamentals of carrier transport* », **2000**.
- [ZIMA 72] J.M. Ziman. « *Principles of the Theory of solids* ». **1972**.
- [HEST 84] HESTO, P.t Doctorat d'Etat, Orsay (**1984**).
- [HANK81] SHANK, C.V., FORK, R.L., GREENE, B.I., et al., *Appl. Phys. Lett.* 18 (**1981**) 104
- [S.LAVAL] S. LAVAL « *Electronique Fondamentale* », CNRS (URA 022), Bat. 220.University Paris Sud, F-91405 Orsay Cedex, France

- [MAR 89] P. A. Markowich, C. A. Ringhofer and C. Schmeiser: "*Semiconductor equations*", Springer-Verlag, Wien-New York, **1989**.
- [NEGO98] A. C. Negoï: "*Composant virtuel et ses processeurs de simulation*", Thèse de Doctorat en Microélectronique, ENSERG-INPG, Octobre **1998**.
- [LEPAU96] S. Lepaul: "*Contribution à la modélisation numérique des composants électroniques aux dimensions nanométriques*", Thèse de Doctorat, Université Paris 6, Novembre **1996**.
- [BOUAZ13] B. Bouazza, A. Guen-Bouazza, C. Sayah, N. E. Chabane-Sari « *Comparison of High Field Electron Transport in GaAs, InAs and In<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As* » *Journal of Modern Physics*, 2013, 4, 121-126, April 2013
- [BERNAL97] Luis Eduardo Zubieta Bernal, "*Characterization of double – layer capacitors for power electronics applications*", *Thèse de doctorat ,Département of Electrical and computer Engineering , Ottawa, Canada: University of Toronto, 1997, 172 p.*
- [BROSSEL04] P. Brosselard, "*Conception, Réalisation et Caractérisation d'interrupteurs (thyristors et JFETs) haute tension (5kV) en carbure de silicium* ", Thèse de doctorat CEGELY. Lyon:INSA de Lyon, 2004, 181P
- [YOUNE11] Youness HAMIEH, « *Caractérisation et modélisation du transistor JFET en SiC à haute température* », L'Institut National des sciences Appliquées de Lyon mai 2011
- [G.BOUA12] Benyounes Bouazza, Ahlam Guen Numerical Simulation of a Nanoscale DG N-MOSFET Using SILVACO Software, *International Journal of Science and Advanced Technology* (ISSN 2221-8386) Volume 2 No 6 June 2012

- [CHELBI.H] CHELBI Hassen, « Electronique Générale Les Transistors à Effet de Champ, TRANSISTORS à JONCTION (JFET) », ISET Nabeul
- [KHEMIS09] KHEMISS SADEDDINE, « *MODELISATION NON LINEAIRE DES COMPOSANTS A EFFET DE CHAMP* » UNIVERSITE MENTOURI – CONSTANTINE –Thèse de doctorat juillet 2009
- [CHEVALIER99] Pascal CHEVALIER, « *Transistors HEMT sur matériaux III-V* », février 1999
- [MCHAI92] K-M. Chai, P. A. Mawby and A. McCowen :M. Fortin, G. Yang, and Y. Perréal : "*Simulation of the hydrodynamic model of semiconductor devices by a finite element method*", *Compel*. vol. 15, N°.3, 1996.
- [Y.HADJ98] D. Hadji, Y. Maréchal, and J. Zimmermann : "*Three Dimensional Semiconductor Device Simulation by Finite Elements Method Coupled to Monte Carlo method*", Conf. COMPUMAG, Rio de Janeiro, Brazil, November 3-6, 1997. Paru dans IEEE. Trans. Magnetics, vol. 34. N°. 5, pp. 2525-2528, September 1998.
- [Dollfu 99] P. Dollfus, « *Etudes théoriques de structures pour l'électronique rapide et contribution au développement d'un simulateur particulaire Monte Carlo* » Habilitation à Diriger les Recherches, Université Paris-Sud, 1999.
- [Komo 87] *History of monte carlo* Andrey Nikolaevich Kolmogorov 1903 – 1987
- [LUNDS00] M. Lundstrom. « *Fundamentals of carrier transport* ». Cambridge University Press, second edition, 2000.
- [C.SAYA10] Choukria. Sayah « *Etudes des effets du champ Electromagnétique sur les propriétés des composés III-V par la Méthode de Monte Carlo et l'équation de poissons couplées* » Université Abou-Bakr Belkaïd-Tlemcen Faculté de Technologie Thèse de doctorat 2010.

- [HAMAG01] C. Hamaguchi. « *Basic semiconductor physics* ». Springer - Verlag, **2001**.
- [Takagi94] S. Takagi, A. Toriumi, M. Iwase, and H. Tango. « *On the universality of inversion layer mobility in Si MOSFET's : Part I – Effects of substrate impurity concentration* ». 41:2357, **1994**.
- [Mikaël14] C. Mikaël « *Caractérisation Électrique et Modélisation du Transport dans les Dispositifs CMOS Avancés* » Soutenue publiquement mars 2014,
- [HAM67] Hammersley J.M, Handscomb D.C, *les methodes de monte carlo*, monographies Dunod, Paris, 1967
- [MASS11] Massoum.N, « *Simulation des phénomènes de transport électronique dans les dispositifs microélectroniques par la méthode de Monte Carlo Application au matériau Ga<sub>0.5</sub>In<sub>0.5</sub>P* ». Université Abou-Bakr Belkaïd-Tlemcen Faculté de Technologie. Thèse de Magister 2011
- [GuenB14] A. Guen-Bouazza, C. Sayah, B. Bouazza, N. E. CHABANE-SARI « *Comparison of electron transport properties in submicrometer InAs, InP and GaAs n+-i-n+ diode using ensemble Monte Carlo simulation* ». *J. Mater. Environ. Sci.* 5 (Y) (2014) ISSN : 2028-2508, May 2014
- [FabienB] Fabien Banse, Jean Luc Dekeyser, Renault Fauquembergue, « *parallelization d'une méthode de Monte carlo pour la simulation de composants semi-conducteurs* », laboratoire d'informatique fondamentale de lille.
- [PER83] Pernisek M. « *Simulation bidimensionnelle de composants submicroniques. Application à l'étude de transistor à modulation d'injection* », Université des sciences et Techniques de lille, juin 1983

- [DES 98] Dessenne FR, « étude theorique et optimisation de transistors à effet de champ la filière InP et de la filière GaN », Université des sciences et technologies de Lille, Thèse de doctorat février 1998

## **ANNEXES**

## ANNEXE I.A Développement des modèles de Dérive-Diffusion à partir des moments de l'équation de Boltzmann

Nous développons dans cette section les modèles de Dérive-Diffusion à partir de la méthode des moments de l'équation de transport de Boltzmann.

Les références énumérées dans la suite sont reliées à la liste des références du chapitre I auquel cette annexe se rapporte.

En régime stationnaire, l'équation de Boltzmann s'exprime de la manière suivante:

$$\left[ \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}(\vec{r})}{h} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \right] f(\vec{r}, \vec{k}, t) = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} + s(\vec{r}, \vec{k}, t) \quad \text{Eq-I.A.1}$$

Le modèle de Dérive-Diffusion est issu de la méthode des moments. Cette méthode consiste à calculer, à partir de l'équation de Boltzmann, les équations de conservation de:

- la densité moyenne des porteurs.
- la densité moyenne des moments.

En intégrant sur la première zone de Brillouin l'équation de Boltzmann, multipliée par la fonction  $h(k)$ , s'exprime comme suit,

$$\int_B h(\mathbf{k}) \cdot \left[ \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} f + \frac{\vec{F}(\vec{r})}{h} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{k}} f \right] d\mathbf{k}^3 \quad \text{Eq-I.A.2}$$

$h(k)$  vaut [73]:

- 1 (moment d'ordre 0) pour la conservation des porteurs.
  - $h(k)$  (moment d'ordre 1) pour la conservation de la vitesse.
- Le calcul du moment d'ordre 0, après quelques manipulations mathématiques [73], donne l'équation de conservation des porteurs de charge:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{n}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{|q|} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n - s_n(\mathbf{r}, t) = 0 \quad \text{Eq-I.A.3}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{p}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{|q|} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p - s_p(\mathbf{r}, t) = 0 \quad \text{Eq-I.A.4}$$

$\mathbf{n}(\mathbf{r}, t)$  et  $\mathbf{p}(\mathbf{r}, t)$  représentent la densité des électrons et des trous.

$\vec{J}$  Correspond à la densité de courant, telle que

$\vec{J} = -q \mathbf{n} \vec{v} \cdot \mathbf{s}(\mathbf{r}, t)$ . Est liée aux taux de génération et recombinaison.

Sans génération ni recombinaison, la variation temporelle de la charge est égale à la divergence du flux de courant.

- Lors du calcul du moment d'ordre 1, l'intégrale de collision est simplifiée par l'approximation du temps de relaxation [73]:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} = -\frac{f-f_0}{\langle \tau_m \rangle} \quad \text{Eq-I.A.5}$$

où

$$\frac{1}{\langle \tau_m \rangle} = \frac{\int_B \hbar k \cdot f(k) \cdot \tau_m(k) dk^3}{\int_B \hbar k \cdot f(k) \cdot dk^3} \quad \text{Eq-I.A.6}$$

$f_0$  : est la distribution à l'équilibre.  $\frac{1}{\langle \tau_m \rangle}$  est la fréquence moyenne d'interaction du moment pondérée par la fonction de distribution liée à la vitesse.

Finalement, le calcul donne l'expression suivante:

$$2\vec{\nabla} \cdot \vec{W} + n\vec{F} = -\frac{1}{\langle \tau_m \rangle} \vec{p} \quad \text{Eq-I.A.7}$$

$\vec{p} = nm_c^* \vec{v}$  où est l'impulsion et  $w = \frac{1}{2} n \langle \hbar k v \rangle$  est une énergie

$m_c^*$  est la masse effective de conduction.

Enfin, en développant le gradient de l'équation Eq-I.A.7 en fonction de l'agitation thermique [61], puis, en remplaçant l'expression de l'impulsion:

$\vec{p} = -\frac{m_c^* \vec{j}}{qn}$ , nous retrouvons les expressions du modèle Dérive-Diffusion:

$$\vec{J}_n(r, t) = |q| D_n \vec{\nabla} n(r, t) + |q| n(r, t) \mu_n \vec{E} \quad \text{Eq-I.A.8}$$

$$\vec{J}_p(r, t) = |q| D_p \vec{\nabla} n(r, t) + |q| p(r, t) \mu_p \vec{E} \quad \text{Eq-I.A.9}$$

$$D_n = \frac{kT}{|q|} \mu_n, \quad D_p = \frac{kT}{|q|} \mu_p \quad \text{Eq-I.A.10}$$

D représente le coefficient de diffusion.  $\mu$  Correspond à la mobilité. La mobilité effective lie la vitesse de dérive,  $v_d$  qui correspond à la vitesse moyenne des porteurs de charge, à la valeur du champ électrique :  $v_d = \mu E$ . Dans les expressions du modèle de dérive-diffusion, elle se rattache au modèle de Drude. Enfin dans le cadre de simulations de transport dans les dispositifs électroniques,

l'ensemble des équations Eq-I.A.3, Eq-I.A.4, Eq-I.A.8 et Eq-I.A.9 est couplé à l'équation de Poisson:

$$\nabla(\epsilon_r |\vec{E}|) |q| = (p(r, t) - n(r, t) + N_d + N_a) \quad \text{Eq-I.A.11}$$

$N_d$  Et  $N_a$  correspondent aux dopages respectifs en ions donneurs et accepteurs d'électrons et  $\epsilon_r$  est la constante diélectrique relative du semi-conducteur étudié.

### **ANNEXE I.B Principes de fonctionnement d'un simulateur Monte Carlo**

Les évènements simulés par la méthode du Monte Carlo, restent proches des phénomènes physiques fondamentaux, puisqu'elle résout l'équation maîtresse du transport de Boltzmann dans sa globalité. L'approche semi-classique des simulateurs Monte Carlo permet une bonne description des propriétés de transport hors-équilibre thermodynamique des dispositifs à l'échelle nanométrique.

Depuis quelques années, les simulateurs Monte Carlo sont devenus des outils de référence dans l'étude du transport dans ces dispositifs. De plus, les simulations Monte Carlo servent de référence dans la calibration des méthodes des moments de l'équation de Boltzmann, plus efficaces en temps de calcul (Dérive-Diffusion, Hydrodynamique, ...).

Les références énumérées dans la suite sont reliées à la liste des références du chapitre I auquel cette annexe se rapporte.

la méthode Monte Carlo est constituée de trois principales fonctions:

- le transport de particules.
- la collecte de statistiques.
- la résolution auto-cohérente de l'équation de Poisson.

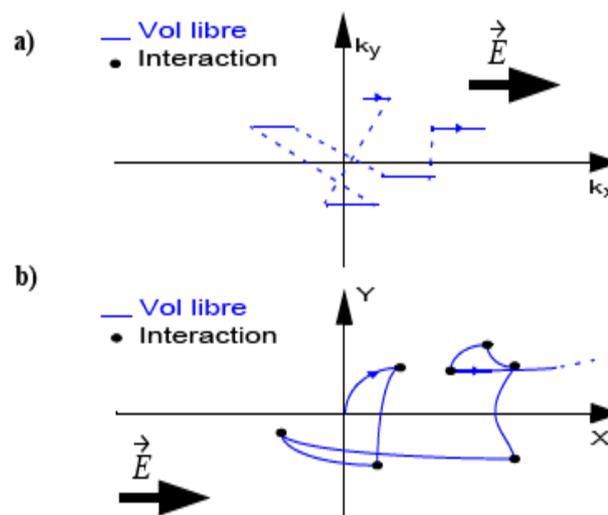
Nous complétons la description de ces principales fonctions dans cette annexe.

#### **I.B.1. Transport des particules dans la méthode Monte Carlo**

La simulation du transport par Monte Carlo dans un dispositif électronique s'effectue à l'aide de particules. L'ensemble des coordonnées des particules se

réfère à l'espace réel  $(x,y,z)$  ainsi qu'à l'espace des vecteurs d'onde  $(k_x, k_y, k_z)$ . Les particules suivent une trajectoire, constituée d'une succession de chemins, appelés vols libres, interrompus par les interactions de la particule avec son environnement. Ces interactions sont liées aux intégrales de collision (voir Section I.4.1.1.).

La Figure I.B.1 représente la trajectoire d'une particule dans l'espace réciproque (Figure I.B.1 a)) ainsi que dans l'espace réel (Figure I.B.1 b)).



**Figure I.B.1:** Principes de la méthode Monte Carlo dans un espace à deux dimensions. **a)** Trajectoire représentative d'une particule dans l'espace des vecteurs d'onde. Dans cet exemple, la particule est soumise à une force orientée le long de l'axe  $x$ ; **b)** Trajectoire d'une particule dans un espace à 2 dimensions  $x$ - $y$ . Les fragments paraboliques constituent les vols libres des électrons. Les points noirs représentent les interactions subies par la particule. D'après [56].

Le transport des porteurs de charge sur les vols libres est régi par les lois semi-classiques :

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = q\vec{F} \quad \text{Eq-I.B.1}$$

$$\hbar \frac{d\vec{r}}{dt} = \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}) \quad \text{Eq-I.B.2}$$

Les interactions de l'électron peuvent provenir de perturbations liées au réseau cristallin (phonons, impuretés), ou encore, de la géométrie du dispositif étudié (rugosité de surface pour les MOSFETs). La diffusion des porteurs de charge est reliée à la probabilité d'interaction globale par l'expression suivante :

$$\left. \frac{dn}{dt} \right|_{coll} = \Gamma(\mathbf{hk})n \quad \text{Eq-I.B.3}$$

Où le taux global d'interaction est calculé en sommant sur l'ensemble des interactions  $m$  du porteur de charge avec son environnement:

$$\Gamma(\mathbf{hk}) = \sum_m \frac{1}{\tau_m(\mathbf{hk})} \quad \text{Eq-I.B.4}$$

Ce taux global d'interaction englobe l'interaction fictive *self-scattering*. A l'issue de cet évènement, l'électron ne subit aucune modification de trajectoire et de vecteur d'onde.

Il est de nouveau important de noter que les structures de bandes sont des éléments clefs des simulations Monte Carlo dans la description des énergies et des vitesses disponibles par les électrons.

Le calcul des taux d'interaction des particules avec leur environnement dépend aussi de la structure de bandes (voir équation Eq-I.36 du chapitre I).

Pour simuler un vol libre, 4 nombres, tirés aléatoirement, sont nécessaires. Le fonctionnement de la méthode est résumé par les principales étapes suivantes et illustré par la Figure I.B.2:

i. La durée de vol libre correspond à l'intervalle de temps entre deux collisions. La première étape consiste à tirer au sort un temps de vol libre à l'aide du nombre aléatoire  $r_1$  ( $0 < r_1 < 1$ ):

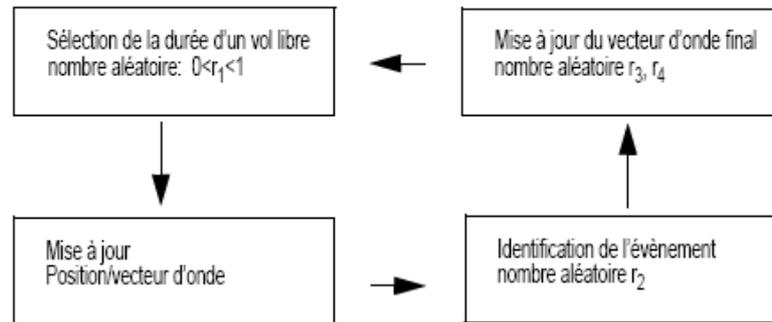
$$\Delta t = -\frac{1}{\Gamma(\mathbf{hk})} \ln(r_1) \quad \text{Eq-I.B.5}$$

ii. La localisation dans l'espace des phases (la position dans l'espace réel et le vecteur d'onde) est régulièrement mise à jour jusqu'à la fin du vol libre.

iii. Identification de l'évènement suivant à partir d'un nombre aléatoire  $r_2$  ( $0 < r_2 < 1$ ):

$$\frac{\sum_{l=1}^l \frac{1}{\tau_m(\mathbf{hk})}}{\Gamma} \leq r_2 \leq \frac{\sum_{l=1}^{l+1} \frac{1}{\tau_m(\mathbf{hk})}}{\Gamma} \quad l = 1, 2, 3 \dots p + 1 \quad \text{Eq-I.B.6}$$

où  $l$  est l'interaction que subit le porteur et  $p$  est le nombre total d'interactions. Cette identification prend en compte l'interaction *self-scattering*.



**Figure I.B.2:** Principe de fonctionnement d'un Monte Carlo pour le calcul de la trajectoire des porteurs de charge

iv. Après l'interaction, une nouvelle énergie et un nouveau vecteur d'onde sont déterminés pour la particule. Ainsi, la vitesse, dépendant du vecteur d'onde, évolue avec la collision. Deux autres nombres aléatoires  $r_3$ ,  $r_4$  intègrent le processus déterminant le vecteur d'onde final de l'électron.

### I.B.2. Collecte de statistiques et résolution de l'équation de Poisson

Lorsque les temps de vol libre et les interactions sont calculés, plusieurs étapes de calcul sont réalisées par le simulateur Monte Carlo:

- i) Les statistiques des porteurs de charge sont collectées (vitesse de groupe, énergie moyenne, ...) dans chaque maille du dispositif. Une estimation du courant de drain est effectuée.
- ii) Résolution de l'équation de Poisson avec la distribution de porteurs de charge dans la structure du dispositif. Le potentiel et le champ électrique en sont déduits. Le simulateur utilise ce potentiel électrique lors du prochain intervalle de simulation.

On recommence l'enchaînement des opérations avec les nouvelles positions et le nouveau potentiel. La simulation est finie lorsque la convergence est atteinte, c'est à dire, une fois que l'erreur statistique sur le courant de drain est inférieure à une barre d'erreur satisfaisante (valeur fournie par l'utilisateur).

La collecte des statistiques et la résolution de l'équation de Poisson s'effectuent par intervalle de temps régulier. De manière intrinsèque, l'approche statistique de ces simulateurs Monte Carlo génère un bruitage dans les résultats obtenus.

### I.B.3. Convergence en fonction du régime

L'utilisation des simulations Monte Carlo nous permet une bonne estimation des courants à fort champ. C'est sous ces conditions de polarisation que les simulations Monte Carlo sont les plus efficaces. De plus, la convergence souhaitée est atteinte plus rapidement que dans un régime à faible champ pour une même précision. Dans le cas des simulations à faible champ, la vitesse de dérive représente une petite fraction de la vitesse thermique, l'estimation de est alors fortement influencée par le bruit statistique (variance) provenant de  $v_{therm}$ . Cependant, selon la loi des grands nombres, plus le nombre de particules pris en compte dans la simulation et donc la durée des simulations est élevée, plus le bruit statistique est réduit.

Il est à noter que dans les simulations à flux incident, l'incertitude en fonction du nombre de vols libres décroît comme. Dans le cadre des Monte Carlo d'ensemble, la précision peut également être affinée en augmentant le nombre de particules simulées parallèlement. Une précision suffisante ne peut être atteinte qu'au prix de longues simulations de deux ordres de grandeur par rapport aux simulations Dérive-Diffusion.

### ANNEXE III.C Notions des effets de transport hors-équilibre

Nous exposons dans cette section, les notions élémentaires des effets de transport non-stationnaire et quasi-balistique présents dans les dispositifs MOSFETs à canaux ultra-courts.

#### III.C.1. Effet de transport non-stationnaire

Cette contribution au transport se révèle lorsque des variations rapides du champ électrique sont présentes dans le dispositif. Cette condition accompagne la réduction d'échelle des dispositifs électroniques. Par conséquent, de fortes courbures de bande résultent de cette variation du potentiel électrique. Si la variation rapide du champ est temporelle, les électrons acquièrent rapidement un excédent d'énergie par rapport à l'énergie d'équilibre thermique. Cet excédent n'est pas absorbé instantanément par les phonons optiques. Ainsi, les effets non-stationnaires apparaissent lorsque le gain d'énergie dans le temps, induit par le champ, est supérieur à la puissance que peut dissiper le réseau par l'intermédiaire des phonons intervallées.

$$\frac{\partial E}{\partial t} > \frac{\hbar\omega}{\tau_w} \quad \text{Eq-III.C.1}$$

où  $E$  est l'énergie du gaz électronique, l'énergie moyenne des phonons et le temps caractéristique qu'il faut pour absorber un excès d'énergie du gaz électronique. Dans le cadre du transport non stationnaire, il faut différencier deux temps de relaxation:

- un temps de relaxation moyen de l'énergie (présent dans la relation Eq-III.C.1). C'est le temps de réponse du gaz électronique pour ajuster son énergie. Ce temps est représentatif des interactions inélastiques qui émettent ou absorbent de l'énergie.
- un temps de relaxation moyen de la vitesse. C'est le temps de réponse du gaz électronique pour ajuster sa vitesse.

Cependant, la vitesse et l'énergie sont corrélées. La relaxation complète du système en vitesse  $\tau_w$  est donc aussi liée au temps de relaxation  $\tau_w$ .

Par ailleurs, ce phénomène temporel se traduit aussi spatialement. Les effets non stationnaires peuvent apparaître lorsque le champ varie rapidement dans l'espace. Dans ce cas, les grandeurs pertinentes sont les longueurs de relaxation de la vitesse  $L_m$  et de l'énergie  $L_w$ . Celles-ci se définissent en fonction de la vitesse thermique  $v_{therm}$  :

$$L_m = v_{therm} \tau_w = 1.10^5 \left( \frac{m}{s} \right) \times \frac{\mu_0 m_c^*}{q} \quad \text{Eq-III.C.2}$$

$$L_w = v_{therm} \tau_w$$

$\tau_w$  et  $\tau_m$  sont respectivement les taux de relaxation moyens de l'énergie et de la vitesse.

$m_c^*$  est la masse de conduction et correspond à la mobilité du matériau massif en fonction du dopage.

### III.C.2. Effet de transport quasi-balistique

Ce cas apparaît lorsque toutes les interactions (élastiques et inélastiques) sont en nombre insuffisant. Le libre parcours moyen  $l_{mp}$  entre deux collisions s'exprime selon l'expression suivante:

$$l_{mp} = v_{therm} \tau_w \quad \text{Eq-III.C.3}$$

où  $v_{therm}$  est la vitesse thermique.  $\tau$  est le temps de relaxation entre deux collisions.

### Stages et Communications:

1. **N. MASSOUM, B. BOUAZZA, A. GUEN BOUAZZA, H. TAHIR, C. SAYAH** « *Electronic Transport Studies of Bulk GaP, InP and Ga<sub>0.5</sub>In<sub>0.5</sub>P Based on an Ensemble Monte Carlo Calculation Including Three-valley Band Structure Model.* September 06-10, **2011** Sousse, Tunisia.
2. **H. TAHIR, B. BOUAZZA, A. GUEN BOUAZZA, N. MASSOUM, C. SAYAH, N.E** « *Electronic Transport Studies of Bulk Hg<sub>0.7</sub>Cd<sub>0.3</sub>Te based on an Ensemble Monte Carlo Calculation Including Three-valley Band Structure Model.* Septembre 06-10, **2011** Sousse, Tunisie.
3. **N. MASSOUM, B. BOUAZZA, H. TAHIR, C. SAYAH** “ *Electronic Simulation of the phenomenon of Transport in the Devices Micro-Electronic by the Monte Carlo Method In materials*” August 22-23, **2012** paris France
4. **N. MASSOUM, B. BOUAZZA, H. TAHIR, C. SAYAH** “ *Semi classical three-valley Monte Carlo simulation analysis of steady-state and transient electron transport within bulk*” August 22-23, **2012** paris France
5. **H.M.TAHIR, B. BOUAZZA, N. MASSOUM, A. BOUAZZA C. SAYAH.** “ *Electronic Transport Studies Of Bulk HgCdTe based on an Ensemble Monte Carlo Calculation Including Three Valley Band Structure Model*” **Energy Procedia ScienceDirect**
6. Un stage au Laboratoire de Physique des Matériaux, Sfax, Tunisie. Septembre 2011

### Publications:

1. **Nourdine Massoum\*, Ahlem Guen Bouazza\*, Benyounes Bouazza\*, Chokria Sayah\*\*** “ *Physics and Simulation of Diffusive Transport in Nanoscale Transistors MESFET Device Ga<sub>0.49</sub>In<sub>0.51</sub>P Using Monte Carlo Method of Electronic Transport*” Nourdine Massoum et al Int. Journal of Engineering Research and Applications ISSN : 2248-9622, Vol. 4, Issue 4( Version 6), April **2014**, pp.44-47.
2. **N. Massoum, B. Bouazza Ahlem, H.Tahir, C. Sayah, Guen Bouazza** « *Effect of Doping Concentration and Temperature on Phenomenon of Electron Transport in Material* » **International Review of Mechanical Engineering (IREME)** Vol. 6, N. 7 ISSN 1970 – 8734 November **2012**.
3. **N. Massoum, B. Bouazza, H. Tahir, C. Sayah, A. Guen Bouazza** « *Semi classical three-valley Monte Carlo simulation analysis of steady-state and transient electron transport within bulk*” World Academy of Science, Engineering and Technology Vol:6 **2012**-10-28

4. **Hichem Mohamed Tahir\***, **Bouazza B**, **Maassoume N**, **Bouazza A** and **Sayah C** “*The Study and Simulation of the Electron Transport Phenomena on Bulk Hg<sub>1-x</sub>Cdx Te Based on an Ensemble Monte Carlo Method*” Material Science & Engineering Tahir, J Material Sci Eng 2013, S:11
5. **Hichem Mohammed Tahir**, **Benyounes Bouazza** and **Noredine Massoum** “*Band Structure and Electron Transport of Bulk Based on an Ensemble Monte Carlo Calculation* » Journal of Environmental Science and Engineering B1 (2012) 1291-1296 Formerly part of Journal of Environmental Science and Engineering, ISSN 1934-8932

## Physics and Simulation of Diffusive Transport in Nanoscale Transistors MESFET Device $\text{Ga}_{0.49}\text{In}_{0.51}\text{P}$ Using Monte Carlo Method of Electronic Transport

Nouridine Massoum\*, Ahlem Guen Bouazza\*, Benyounes Bouazza\*, Chokria Sayah\*\*

\*Laboratory Materials and Renewable Energies, Faculty of Engineering, University Abou Bakr-Belkaid of Tlemcen, BP 119 13000 Tlemcen, Algeria.

\*\*University Centre of Ain Temouchent, Road Sidi Bellabes, BP 284 Ain Tmouchent (46000). Algeria

### ABSTRACT

The field of microelectronics has made surprising advances in the last decade, mainly pushed by the enormous progress in semiconductor technology. Such a reduction of dimensions allows the fabrication of chips with more than one million components. In addition, it opens the way to new physical phenomena, which were not present in traditional structures. In this context, the Monte Carlo simulation has particular significance. This approach allowed conceiving applicable model for GaInP MESFET operating in the turn-one or pinch-off region, and valid for the short-channel and the long-channel GaInP MESFET, in which the two-dimensional potential distribution contributed by the depletion layer under the gate is obtained by conventional 1D approximation

**Keywords** -Monte Carlo simulation, transient electron transport, MESFET device,

### I. INTRODUCTION

Since the introduction of the field-effect transistors, MESFET technology has seen a tremendous increase in processing capability due to scaling. The scaling trend Predicted by Gordon Moore has been accurate for more than 30 years [1]. The formidable progress of semiconductor technology in the last decade has allowed transistors such as the MESFET to operate in the regime where diffusive transport and quantum effects start playing a significant role in determining device and circuit performance.

The main advantage of III-V's over SI is their high intrinsic mobility, which amounts to high speed and lower delay [2]. The effective mass of electrons is much lower in III-V's as compared to Si, which results in a high injection velocity. This low effective mass, however, also results in a low density-of-states, which affects the semiconductor capacitance and drive current. This is frequently referred to as the density-of-states bottleneck [3]. Several other issues need to be resolved for III-V's to contend as commercially viable technology.

The diffusion model is used to study the role of phonon scattering on the on-state characteristics of MESFET channel devices. Finally, the role of the Surface roughness scattering and its implementation within Monte Carlo is discussed [4].

Recent progress in electron beam lithography and molecular beam epitaxial growth technology has brought critical dimensions of a field-effect transistor down to 100 nm. The enhanced DC and microwave characteristics of GaInP Metal-Semiconductor Field Effect Transistors (MESFETs) are direct consequences of efforts to decrease the gate length [5]. In this study, we describe how the device characteristics of sub-100 nm gate GaInP Metal-Semiconductor Field Effect Transistors (MESFETs) are affected by short channel effect (gate aspect ratio effect) due to very low gate aspect ratio, by velocity overshoot due to near ballistic electrons, and by overshoot degradation due to short-channel tunneling of carriers [6].

### II. MATHEMATICAL MODEL

Several simulations of MESFET's have been presented after the work of Hockney's et al. [7]. From the physical point of view, the various simulations can be divided into two groups, depending on the GaInP model used (two or three valley model, or the full band diagram). The scattering mechanisms are also taken from these models, and include non-equivalent intervalley ( $\Gamma \leftrightarrow X$  or  $L$  for the two valley model,  $\Gamma \leftrightarrow L$ ,  $L \leftrightarrow X$ ,  $\Gamma \leftrightarrow X$  for the three valley model), equivalent intervalley ( $L \leftrightarrow L$  in the first case,  $L \leftrightarrow L$ , and  $X \leftrightarrow X$  in the second), polar optic and acoustic phonon scatterings [8]. For traditional semiconductor device

modeling, the predominant model corresponds to solutions of the so-called drift-diffusion equations, which are ‘local’ in terms of the driving forces (electric fields and spatial gradients in the carrier density), i.e. the current at a particular point in space only depends on the instantaneous electric fields and concentration gradient at that point. The complete drift-diffusion model is based on the following set of equations [9]:

Current equations:

$$J_n = qn(x)\mu_n E(x) + qD_n \frac{dn}{dx}$$

$$J_p = qn(x)\mu_p E(x) - qD_p \frac{dn}{dx}$$

Continuity equations:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot J_n + U_n$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot J_p + U_p$$

Poisson’s equation:

$$\nabla \cdot (\epsilon \nabla V) = -(p - n + N_D^+ + N_A^-)$$

Where  $U_n$  and  $U_p$  are the generation-recombination rates.

The continuity equations are the conservation laws for the carriers. A numerical scheme which solves the continuity equations should

- Conserve the total number of particles inside the device being simulated.
- Respect local positive definite nature of carrier density. Negative density is unphysical.
- Respect monotony of the solution (i.e. it should not introduce spurious space oscillations).

### III. RESULTATS AND DISCUSSIONS

The properties of channel MESFET were studied using (Gate Length  $L_G=25\text{nm}$ , Source/Drain length  $L_{S/D}=25\text{nm}$ , Thickness Channel  $T_C=20\text{nm}$ ). There the source and drain regions are heavily doped, and the gate is self-aligned (channel length equal to gate length 25nm in this case). The Transport model used in simulation is diffusive. The profiles of electric field  $E$ , average lateral velocity  $V$  and concentration  $N$  as a function of distance  $x$  from the source are presented in figure (1~ 5).

Fig1: shows the conduction band diagram for the device InGaP MESFET with Source/Drain doping  $2 \times 10^{25}/\text{cm}^3$  and  $L_G=25\text{nm}$  for various gate biases ( $V_G = -1 \sim 0\text{V}$ ), obtained with drift-diffusion simulations. The lowest plot shows the onset of source exhaustion, where the top-of-the-barrier is

pushed close to the source conduction band edge. The source cannot supply more charge if the gate voltage is further increased.

On the other hand, GaInP Mesfet has not a built-in electric field within the emitter region this is clearly shown in Fig 2, and the electron density in this case is increased due to slow transport of carriers and thus carrier accumulation.

Fig3: indicates two rapidly varying concentration regions. The first is between the source and gate and the second is between the gate and drain. It is also observed that, the electron density reduces to zero along the gate. There is a barrier region near the source end of the channel. This barrier determines the amount of electrons entering the channel. Its height is modulated by the gate bias

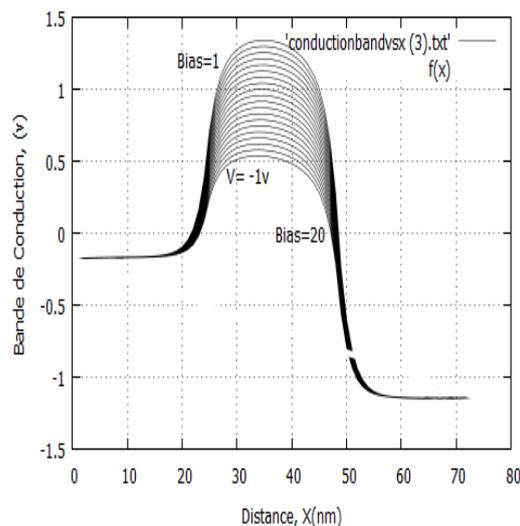


Figure 1 - Conduction band diagram along the transport direction obtained from drift diffusion simulations of a GaInP channel MESFET at high drain bias and various gate bias for source/drain doping of  $N_{S/D} = 2 \times 10^{25} / \text{cm}^3$ .

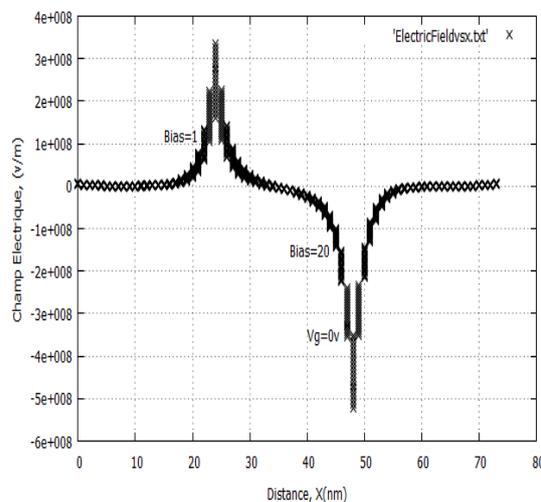


Figure 2 - Average electrical fields along the axis.

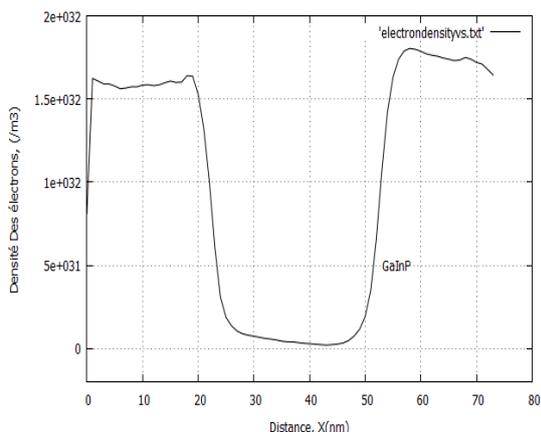


Figure 3 - electron density versus distance profiles for Mesfet

In the Fig4: no electric field is present in the emitter of the conventional design. The corresponding electron density is therefore dramatically decreased due to the presence of a drift velocity component in this region of the emitter. Near the drain the velocity exhibits a sharp decrease, due to the accumulation of L-valley slow electrons in that region. A large electron accumulation is also present near the source, caused by the electron Spillover from the doped region. Such high concentration balances the rather small electron velocity to sustain the large drain current of the device.

Fig5: exhibits the transient response of electrons in GaInP alloy, so it's noted that the velocity overshoot initially increases faster with increasing electric field due to the low effective mass of the gamma valley. For an electric field below the critical field ( $<10 \text{ kV/cm}$ ), the effect of overshoot is very little or not quite observable in the alloy GaInP

From  $15 \text{ kV/cm}$  to  $50 \text{ kV/cm}$ , the velocities begin to exhibit a peak. This peak for the  $15 \text{ kV/cm}$  field is  $1.7 \times 10^7 \text{ cms}^{-1}$  for a time  $315 \text{ fs}$ . Whereas that for  $50 \text{ kV/cm}$  field, the maximum speed is  $2.45 \times 10^7 \text{ cms}^{-1}$  for a time of  $108 \text{ fs}$

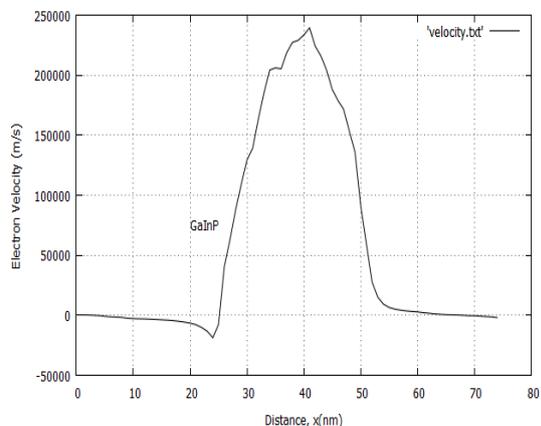
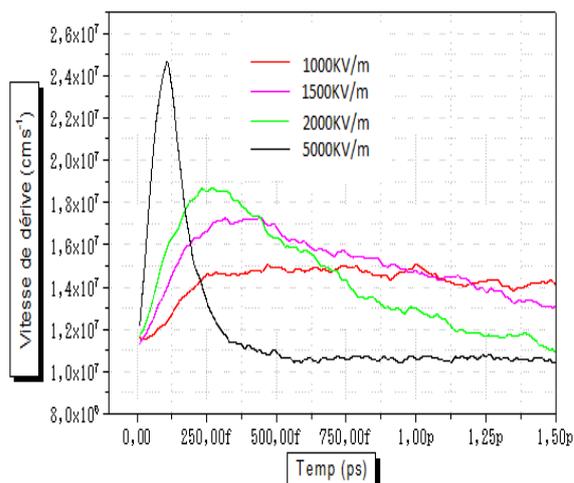


Figure 4 - Electron drift velocity as a function of distance



Figures 5 - Electrons drift velocity as a function of time for various field values

#### IV. CONCLUSION

In conclusion of the previous discussion, we would say that simulators using 3 valley models are certainly to be preferred, even if the differences between the two models are only important in the presence of very high electric fields ( $\geq 10 \text{ KV/cm}$ ). Probably more important are the values of the coupling constants and valley separation, which strongly influence the transport properties of GaInP and the results of the simulation.

It has also been possible to analyze the current control mechanisms. In particular, by switching-off the intervalley transfer in the simulation, it has been found that the gate voltage controls the current through the modulation of the depletion layer depth as well as of the electron velocity. Details of this particular work and of other interesting papers can be found in the References

#### REFERENCES

- [1] Zhibin Ren, Nanoscale Mosfets Physics Simulation and Design, Purdue University, p211, 2001.
- [2] Himadri Sekhar Pal, Device Physics Studies Of III-V and Silicon Mosfet For Digital Logic, Purdue University West Lafayette, Indiana Graduate School Form 20 (Revised 6/09), 127, December 2010.
- [3] Farzin Assad, Computational and Experimental Study of Transport In Advanced Silicon Devices, Purdue University, 174, December 1999.
- [4] Jung-Hoon Rhew, physics and simulation of Quasi-Ballistic Transport in Nanoscale Transistors, Purdue University, p144, 2003.
- [5] Gerhard Klimeck, Electron-Phonon and Electron-Electron Interactions in Quantum

- Transport, January, 1994 School of Electrical Engineering Purdue University West Lafayette, Indiana 47907-1285.
- [6] Supriyo Datta, Nanoscale device modeling the Green's function method School of Electrical and Computer Engineering, Purdue University, West Lafayette, In 47907-1285, U.S.A.(Received 24 July 2000), Superlattices and Microstructures, Vol. 28, No. 4, 2000.
- [7] Haiyan Jiang, Boundary treatments in non-equilibrium Green's function (NEGF) methods for quantum transport in nano-MOSFETs, received and revised form 10 March 2008 Peking University, Beijing 100871, China.
- [8] Ruud V. lutters, Hot-electron transport in the spin-valve transistor 2001 Twente University Press.
- [9] Monte Carlo Device Simulations Dragica Vasileska Arizona State University, Tempe AZ 2010, Volume 44, no. 2.
- [10] Jung-Hui Tsai, InGaP/InGaAs Doped-Channel Direct-Coupled Field-Effect tansistors Logic with Low Supply Voltage National Kaohsiung Normal University, Kaohsiung 802, Taiwan.
- [11] Jacoboni, Carlo, Lugli, Paolo, The Monte Carlo Methode for Semiconducteur Device Simulation, p356, 1989.
- [12] M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur, Handbook Series On Semiconductor Parameters, 205p, (1999).

# Effect of Doping Concentration and Temperature on Phenomenon of Electron Transport in Material Ga<sub>0.38</sub>In<sub>0.62</sub>P

N. Massoum, B. Bouazza, H. Tahir, A. C. Sayah, Guen Bouazza

**Abstract** – This paper presents a study of the performance of Electronic transport phenomena. The models describe the dependence of velocity electron on doping concentration, temperature, and electric field. The results show that Ga<sub>0.38</sub>In<sub>0.62</sub>P materials velocity almost degraded with increasing the doping concentration, temperature, and electric field. Our simulation results have also shown that the electron velocity in GaInP is less sensitive to temperature than in other III-V semiconductors like InAs, InP and GaAs. So GaP and GaInP devices are expected be more tolerant to self-heating and high ambient temperature device modeling. Our steady-state velocity-field characteristics are in fair agreement with other recent calculation. **Copyright © 2012 Praise Worthy Prize S.r.l. - All rights reserved.**

**Keywords:** Monte Carlo Simulation, Steady-State Electron Transport, Transient Electron Transport, Alloy Scattering

## I. Introduction

The Monte Carlo technique has proved valuable for studying non-equilibrium carrier transport in a range of semiconductor materials and devices [1]-[4]. However, carrier transport modeling has only recently begun to receive sustained attention, now that the growth of compounds and alloys is able to produce viable material for the electronics industry [5]-[6]. This paper presents the results of Monte Carlo simulations of electron transport in bulk Ga<sub>0.38</sub>In<sub>0.62</sub>P at different temperature and various electrons concentrations. The simulations have been carried out using a non-parabolic ellipsoidal valley model to describe transport in the conduction band.

In order to calculate the electron drift velocity for large electric fields, consideration of conduction band satellite valleys is necessary. The first-principle band structure of zinc-blend Ga<sub>0.38</sub>In<sub>0.62</sub>P predicts a direct band gap located at the  $\Gamma$  point as if  $x \leq 0.60$  and lowest-energy conduction band satellite valleys at the X point and L point. In our Monte Carlo simulation, the  $\Gamma$  valley, the three equivalents X valleys and the four equivalents valleys L are represented by ellipsoidal, non-parabolic dispersion relationships of the following form [7]-[9]:

$$E(k)[1 + \alpha_i E(k)] = \frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{k_x^2 + k_y^2}{m_{\perp}^*} + \frac{k_z^2}{m_{\parallel}^*} \right] \quad (1)$$

where,  $m_{\perp}^*$  and  $m_{\parallel}^*$  are the transverse and longitudinal effective masses at the band edge and  $\alpha_i$  is the non-parabolicity coefficient of i-th valley.

The material parameters of interest for use in an ensemble Monte Carlo simulation are presented in Table I for bulk Ga<sub>0.38</sub>In<sub>0.62</sub>P.

These parameters were obtained either directly, from the literature [10]-[11], from a  $k_p^*$  calculation of the band structures of this material [12], or in many cases from suitable interpolations of the parameters for the constituent binary compounds, InP, and GaP. The form factors used in calculating the band structures were derived by interpolating the form factors for the constituent binary compounds.

TABLE I  
MATERIAL PARAMETERS FOR Ga<sub>0.38</sub>In<sub>0.62</sub>P

Parameters	Value and units
Optical phonon energy (eV)	0.0464 <sup>[b]</sup>
Density	4.47g/cm <sup>3</sup> <sup>[b]</sup>
Dielectric constants:	
Low frequency, $\epsilon_0$	11.75 <sup>[a]</sup>
High frequency, $\epsilon_{\infty}$	9.34 <sup>[b]</sup>
Energy gap	1.92 eV <sup>[a]</sup>
Effective masse:	
$\Gamma$ valley	0.105
L valley	0.242
X valley	0.61
Heavy hole	0.48 <sup>[a]</sup>
Light hole	0.14 <sup>[a]</sup>
Split-off hole	0.226 <sup>[a]</sup>
Valley separation energies:	
$\Delta\Gamma_L$	0.125eV
$\Delta\Gamma_X$	0.125eV
Sound velocity	4.33 × 10 <sup>5</sup> cm/s <sup>[b]</sup>
$\bar{u} = \sqrt{1/3u_x^2 + 2/3u_l^2}$	
Longitudinal	5.49 × 10 <sup>5</sup> cm/s <sup>[b]</sup>
Transverse	3.62 × 10 <sup>5</sup> cm/s <sup>[b]</sup>
Split-off energy	0.105 eV <sup>[a]</sup>

<sup>a</sup> Reference [10]

<sup>b</sup> Reference [11]

<sup>c</sup> From k-p program

## II. Results and Discussions

Electronic transport is studied using the ensemble Monte Carlo simulation. The band structures of the materials under study are approximated with an analytical formulation using the non-parabolic spherical valleys. The calculation is made for electric fields ranging from  $5 \times 10^5$  to  $5 \times 10^6$  V/m for  $x = 0.38$ . For each simulation, the motions of twenty thousand electron particles are examined. The Monte Carlo model includes polar Optical interaction, acoustic phonon, ionized impurity and non-polar inter-valley phonon scattering which are the most important mechanisms that affect on the electron motion in the material[13].

Electron drift velocity as a function of electric field is important in determining the performance of high-speed and microwave semiconductor devices. Here we show the results of temperature dependence of the steady-state velocity-field characteristics and valley occupancy in bulk InP and  $\text{Ga}_{0.38}\text{In}_{0.62}\text{P}$  materials.

Fig. 1 shows the simulated velocity-field characteristics at 300 K, with a background doping concentration of  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . The velocity-field curves typically present a decrease of the electron velocity, when the electric fields increase above the threshold value. This effect is due to the transfer of electrons from central  $\Gamma$  valley with low energy state and high mobility to higher valley with high energy state and low mobility. The simulations suggest that the peak drift velocity for zinc-blende InP is  $2.15 \times 10^7 \text{ cms}^{-1}$  while that for  $\text{Ga}_{0.38}\text{In}_{0.62}\text{P}$  is about  $1.1 \times 10^7 \text{ cms}^{-1}$ . At higher electric fields, intervalley optical phonon emission dominates, causing the drift velocity to saturate at around  $0.37 \times 10^7 \text{ cms}^{-1}$ .

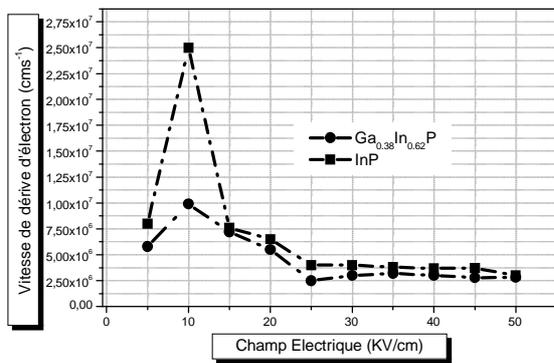


Fig. 1. Calculated steady-state electron drift velocity in bulk Zinblende InP and  $\text{Ga}_{0.38}\text{In}_{0.62}\text{P}$  at room temperature with a background doping Concentration of  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$

The average energy of electron as a function of applied electric field is depicted in Fig. 2 it is clear that initially the energy curve shows a monotonic increase with the increase of high external field. Then the increase becomes slow energy above a certain value of electric field corresponding to the critical value. This feature is a consequence of electron transfer from the  $\Gamma$  valley to the

L and X valleys. The energy is initially mounted due to the contribution of the dominant acoustic scattering mechanism until it reaches a certain threshold value about  $10 \text{ kV / cm}$  for  $\text{Ga}_{0.38}\text{In}_{0.62}\text{P}$ . This increase is due to the quasi-elastic acoustic scattering and ionized impurity scattering. The Inter-valley transfer phase is due to the combined effect of a low effective mass of the  $\Gamma$  valley, with little separating the valleys satellite.

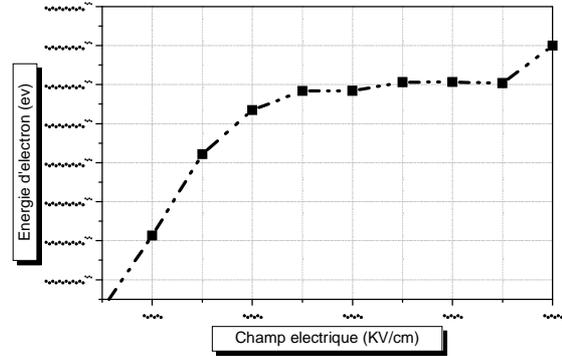


Fig. 2. Average electron kinetic energy as a function of applied electric field in bulk  $\text{Ga}_{0.38}\text{In}_{0.62}\text{P}$  using the non-parabolic band Model

Fig. 3 shows the calculated electron drift velocity as a function of electric field strength for temperatures of 100, 300 and 400 K.

The decrease in drift mobility with temperature at low fields is due to increased intravalley polar optical phonon scattering whereas the decrease in velocity at higher Fields is due to increased intra and intervalley scattering. It can be seen from the figure that the peak velocity also decreases and moves to higher electric field as the temperature is increased. This is due to the general increase of total scattering rate with temperature, which suppresses the electron energy and reduces the population of the satellite valleys. This latter effect is apparent from the fact that the electron population in the central  $\Gamma$  valley increases with temperature as shown in Fig. 2.

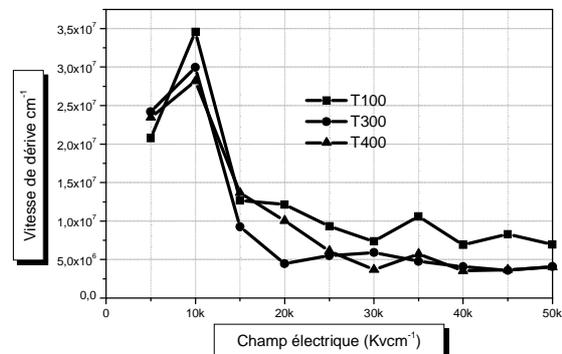


Fig. 3. drift velocity as a function of electric field at various lattice temperatures for  $\text{Ga}_{0.38}\text{In}_{0.62}\text{P}$

Fig. 4 shows how the velocity-field characteristic of Ga<sub>0.38</sub>In<sub>0.62</sub>P material changes with impurity concentration at 300 K. It is clear that with increasing donor concentration, there are reduction in the average peak drift velocity and the threshold field because of increasing scattering rate events. As revealed by the results, the trend expected from increased ionized impurity scattering is in good general agreement with recent calculations by other investigations.

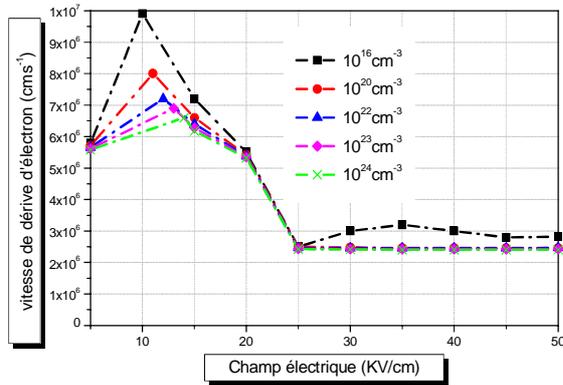


Fig. 4. drift velocity as a function of electric field at 300K for Ga<sub>0.38</sub>In<sub>0.62</sub>P for Several doping concentration

### III. Conclusion

Electron transport at different temperatures in bulk zinc-blende Ga<sub>0.38</sub>In<sub>0.62</sub>P has been simulated using an ensemble Monte Carlo simulation. Using valley models to describe the electronic band structure, calculated velocity-field characteristics show that the intervalley transitions in high electric fields play an important role in these materials. The intervalley transitions lead to a large negative differential conductance. Saturation drift velocities of about  $1 \times 10^5 \text{ ms}^{-1}$  match recent measurements on low-doped bulk samples. We can conclude that the temperature influences on the velocity in the lower field. Finally the effect of temperature is alternated for the fields high. Note that the curves converge asymptotically when we reached high fields.

### References

[1] S.Adachi, Physical properties of III-V Semiconductor Compounds, InP, InAs, GaAs, GaP,AlAs and AlGaAs Wiley, New York, 1992.  
 [2] M. Allali, C. B. Sorensen, E. Veje, and P. Tidemand-Petersson, *Phys. Rev. B* 48, 4398 (1993).  
 [3] S. J. Lee, L. Y. Juravel, J. C. Wooley, and A. J. Spring, *Phys. Rev. B* 21, 659 (1980).  
 [4] B. E. Foutz, L. F. Eastman, U. V. Bhapkar, and M. Shur, *Appl. Phys. Lett.* 70, 2849 (1997).  
 [5] C. Moglestue, Monte Carlo Simulation of Semiconductor Devices 1993 pub. Chapman and Hall.  
 [6] C. Jacoboni and P. Lugli, The Monte Carlo Method for semiconductor and Device Simulation. Springer-Verlag. 1989 pub.  
 [7] C. Moglestue, Monte Carlo Simulations of Semiconductor

Devices (Chapman and Hall, 1993).  
 [8] C. Jacoboni and P. Lugli, The Monte Carlo Method for Semiconductor and Device Simulation (Springer-Verlag, 1989).  
 [9] U. V. Bhapkar and M. S. Shur, *J. Appl. Phys.* 82, 1649 (1997).  
 [10] C. T. H. F. Liedenbaum, A. Valster, A. L. G. J. Severens, and G. W. t'Hoof, *Appl. Phys. Lett.* 57, 2698 (1990).  
 [11] Landolt-Bornstein, Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, edited by O.Madelung (Springer, New York, 1982, Group III, Vol. 17a)  
 [12] F. H. Pollak, C. W. Higginbotham, and M. Cardona, *J. Phys. Soc. Jpn.* 21, Supplement, 20 (1966).  
 [13] S. Khedim, B. Benyoucef, Nasr E. Chabane Sari. Les calculs Monte Carlo de l'énergie et la vitesse de dérive dans ZnS, ZnSe, ZnTe. *Revue internationale de génie civil - Juillet 2012 (Vol. 3 N. 4)*

### Authors' information



**Massoum Noredine**, Algérie 24/07/1971, Third year PhD, I am a graduate of magister in microelectronic, obtained on 03/03/2010 by Abu Bakr Belkaïd University-Tlemcen Faculty of Technology Department of Electrical Engineering, Electronics BP 119 Tlemcen Algeria 13300.

Training at the Laboratory of Materials Physics, Sfax, Tunisia. September 2011. I am preparing a thesis for graduation doctor whose theme is: "Modelling the transport of charge carriers in the active devices MESFET MOSFET based Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>P by the Monte Carlo method".

E-mail: [chakir.massoum@gmail.com](mailto:chakir.massoum@gmail.com)



## The Study and Simulation of the Electron Transport Phenomena on Bulk $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ Based on an Ensemble Monte Carlo Method

Hichem Mohamed Tahir\*, Bouazza B, Maassoume N, Bouazza A and Sayah C

Department of Electrical Engineering and Electronics, Faculty of Technology, Abu-Bekr Belkaid University–Tlemcen, Tlemcen, Algeria

### Abstract

In this paper a comparative study of the electronic transport phenomenon in the semiconductor II-VI alloy HgCdTe is presented. In this study we have adopted Monte Carlo simulation. The model of the method used in this work takes into account the valleys, L and X of the conduction band, in which considered isotropic but not parabolic. This model provides a detailed description of the electronic dynamic and the electrons behavior at high electrical fields and high temperatures in these materials in each considered valleys. Furthermore, he permits two main functions: the calculation of the scatterings rates taken into consideration and the determination of the instantaneous quantities such as speed, energy etc. The obtained results, compared on many experimental reference frames, are satisfactory.

**Keywords:** Monte Carlo simulation; Steady-state electron transport; Transient electron transport; Alloy scattering; Velocity overshoot; Critical field; Interactions;  $\text{Hg}_{0.7}\text{Cd}_{0.3}\text{Te}$  alloy

### Introduction

Mercury cadmium telluride (HgCdTe) is the material system of choice to fabricate high performance photovoltaic and avalanche detectors over the entire infrared spectral region [1]. Several groups have reported an exponential gain curve and extremely low multiplication noise in electron injected HgCdTe Avalanche Photodetectors (APDs) at temperatures in the range of 77 K to 260 K for a variety of cutoff wavelengths in the MWIR and LWIR bands [2,3]. These exceptional characteristics of HgCdTe APDs are indicative of the exclusive impact ionization of the electrons and of dead-space effects that tend to introduce order in the random impact ionization process, i.e., a history-dependent gain mechanism [4,5]. The electron impact ionization process in HgCdTe becomes important at relatively small electric fields due to the high mobility of electrons and their low impact ionization threshold energy. The high gain at low bias and the low noise factor make HgCdTe APDs particularly well suited for several applications, including night vision, nondestructive control and medical imaging, multicolor focal-plane arrays (FPAs) for astronomy, and photon counting. Despite this interest, a complete description of the transport properties of HgCdTe alloys is still lacking, especially in the high-field regime. The low field mobility has been the only transport parameter that has been the object of extensive theoretical [6] and experimental [7,8] investigations. The electron drift velocity characteristic in CdTe as a function of temperature and electric field was measured by the transient-charge technique by Canali et al. [9] Borsari and coworkers [10] performed Monte Carlo calculations of electron transport in CdTe to investigate the negative differential mobility of this material, which was attributed to the randomizing effect of intervalley scattering rather than to the population of lower-mobility valleys [10].

The current demand growth of new components capable of operating at high power, high frequency, high temperatures and convergence towards miniaturization has led to the development of new fields of nanotechnology based on II-VI semiconductor. Interest in nanostructures based on II-VI semiconductor narrow gap containing mercury (such as superlattices HgTe / CdTe) was due to their advantages over alloys with cadmium telluride Mercury (MCT: HgCdTe). The ternary alloy  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  is a semiconductor band-gap direct; in our work we are interested in the ternary compound

$\text{Hg}_{0.7}\text{Cd}_{0.3}\text{Te}$ . The results obtained are very satisfactory; they are compared with experimental results, and are in good agreement. These results are very promising and open new perspectives for the realization of solar cells and applications in the field of sensors.

### Model Description

The most important input to Monte Carlo transport simulation is the electronic structure of the material to be studied [11]. The electronic structures of the binary compounds CdTe and HgTe have been computed by using the Nonlocal Empirical Pseudo Potential Method (NL-EPM), while the ternary alloy HgCdTe has been studied by using NL-EPM within a disorder-corrected Virtual Crystal Approximation (VCA). The computed electronic structures, which take into account spin-orbit interactions, accurately replicate the available experimental data and ab initio information. Figure 1 shows the NL-EPM electronic structure of HgCdTe. The presence of secondary valleys at the L point (intervalley separation energy 1.37 eV) can be noticed. Besides the electronic structure, the carrier-phonon interaction at high energies is the critical piece of information to be evaluated in order to study the carrier dynamics at high fields and impact-ionization-related phenomena. Empirical fits to low-energy transport data are still used to determine the electron-phonon coupling constants, and these values are used for simulation beyond their expected range of validity. The lack of reliable information on the carrier-phonon interaction has always affected the ability to treat the impact ionization process. Scarce information is available on the electron-phonon deformation potentials in HgCdTe. Chattopadhyay and [12] suggested a theoretical

\*Corresponding author: Hichem Mohamed Tahir, Department of Electrical Engineering and Electronics, Faculty of Technology, Abu-Bekr Belkaid University–Tlemcen, Tlemcen, Algeria, Tel: 00213 92068737; E-mail: [Tahir.hichem@hotmail.com](mailto:Tahir.hichem@hotmail.com), [chakib.13@hotmail.com](mailto:chakib.13@hotmail.com)

Received November 01, 2012; Accepted December 27, 2012; Published January 04, 2013

Citation: Tahir HM, Bouazza B, Maassoume N, Bouazza A, Sayah C (2013) The Study and Simulation of the Electron Transport Phenomena on Bulk  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  Based on an Ensemble Monte Carlo Method. J Material Sci Eng S11:002. doi:10.4172/2169-0022.S11-002

Copyright: © 2013 Tahir HM, et al. This is an open-access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author and source are credited.

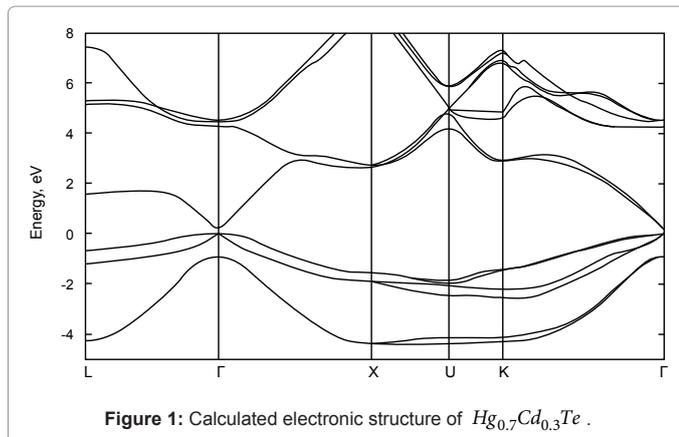


Figure 1: Calculated electronic structure of  $Hg_{0.7}Cd_{0.3}Te$ .

value of 9.5 eV for the electron acoustic deformation potential in HgCdTe, adopting the value reported by Rode for CdTe [13]. To the authors' knowledge, no information is available for the whole deformation potential coefficients.

The electronic transport is always described by models based on the resolution of the Boltzmann equation who characterizes the modification of the particles state caused by various actions. Thus, including the charges transport in semiconductors, the Monte Carlo method is a statistical method, as a popular and effective mathematical tool for the study and analysis of the physical phenomena.

In this work we have to use a three valleys model of the conduction band,  $\Gamma$ , L, X considered isotropic but not parabolic. Our model is developed considering the deformation potential of each considered valley, the energy gap structures, and the main scattering mechanisms in details. The concentrations of electrons in L and X valleys relative on the minimum  $\Gamma$  are:

$$n_{\Gamma} = 2 \left( \frac{2\pi m_{\Gamma}^* K T}{h^2} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{E_p}{K T}\right)$$

$$\frac{n_L}{n_{\Gamma}} = \left( \frac{m_e^L}{m_{\Gamma}^*} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\Delta E_{\Gamma L}}{K T}\right)$$

$$\frac{n_X}{n_{\Gamma}} \left( \frac{m_e^X}{m_{\Gamma}^*} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\Delta E_{\Gamma X}}{K T}\right) A = \pi r^2$$

Where  $E_{\Gamma L}$  and  $E_{\Gamma X}$  are the separation energies between  $\Gamma$ -L and  $\Gamma$ -X respectively.

## Results

The number of electrons simulated is 20,000 electrons subject to different values of the electric field under different temperatures. The implementation of this model is made by taking the following steps: for each electron simulated, we associate with initial position and an initial wave vector, and using the process "self scattering"; we introduce a fictitious scattering which aims to establish a time distribution.

The Monte Carlo model adopted in this work is used for calculating and retrieval features of electronic transport in the HgCdTe alloy in the

transitional and stationary regime. The calculation is made for electric fields ranging from 0 to 50 KV for different values of temperature.

The average velocity is one of the key parameters to describe the behaviour of a compound. In our study we focus on the modulus of the velocity and the drift velocity is an average velocity of the course. Indeed, the electrons under the influence of thermal energy will have a random way, and therefore they have no path. But when subjected to an electric field their way is more random and the distance travelled is not zero.

After a collision the electron will have a zero velocity component in the direction parallel to the electric field, but the effect of thermal agitation that the electron back to speed, the electrons move in the opposite direction of the field.

In figure 2, we note that the drift velocity increases with the electric field and then it reaches a saturation value equal to  $6.16 \cdot 10^7$  Cm/S, which corresponds to a critical electric field is 1.2 kV/cm. Thereafter, the drift velocity decreases with the field until it reaches a value of  $1.08 \cdot \frac{10^7 Cm}{S}$  from an electric field equal to 14 kV/cm.

In figure 3, when the carriers are subjected to an electric field they will gain energy. We identify two phases, the energy of the three module valleys  $\Gamma$ , L and X. Once the electric field is applied, the energy of the carriers increases very rapidly to a maximum of energy which is 190 meV. After a very short period of time (about  $10^{-14}$ S), we see that the energy becomes constant.

In figure 4, we present the curves for different drift

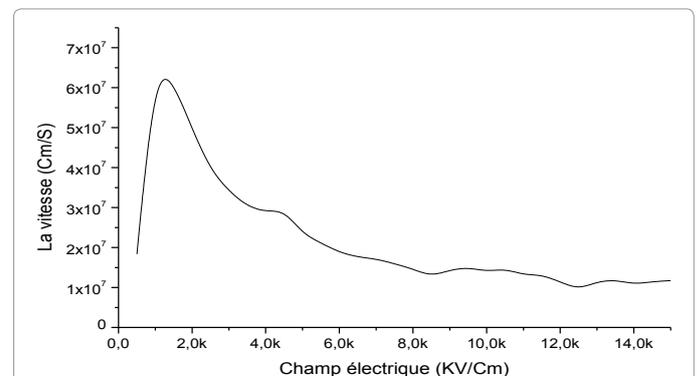


Figure 2: The average velocity in the HgCdTe bulk at 300K for different values of the applied electrical field (Stationary regime).

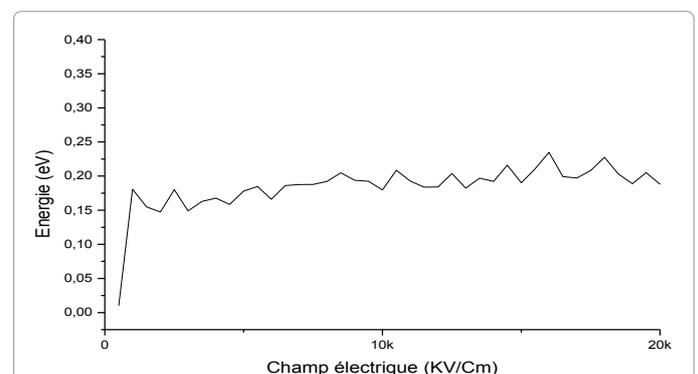


Figure 3: The average energy in the HgCdTe bulk at 300K for different values of the applied electrical field (stationary regime).

velocities in electric fields with time at 300 K. We note that the velocity exhibits a maximum for the strong fields. This is due mainly to the wide variation of angular momentum and energy relaxation as a function of electron energy, so the transient over shoot in velocity is typically observed when the applied electric field is quite high contribution to the critical field; the electrons can reach a maximum energy as the time is small compared to the energy relaxation.

Figure 4 shows the shape of the electron drift velocity versus time for an electric field of 20 kV, and a concentration of  $1e^{20} Cm^{-3}$  at 300 kV. This curve has four phases:

- For  $t < 0.2ps$  the velocity increases linearly with time.
- For  $0.2ps < t < 0.3ps$  the velocity continues to grow but more slowly. There is a maximum of  $1.910^7 Cm/s$  well above the stationary value corresponding to the applied field, so there is a phenomenon of over speed.
- Between 0.3 and 2ps, the velocity decreases rapidly to the steady state.
- In the last phase ( $t > 0.9, \frac{10^7 Cm}{s}$ ), velocity remains unchanged, it is equal to the steady velocity.

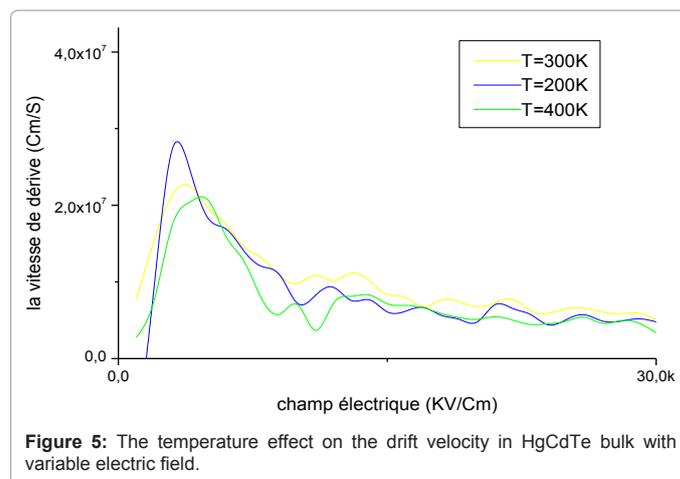
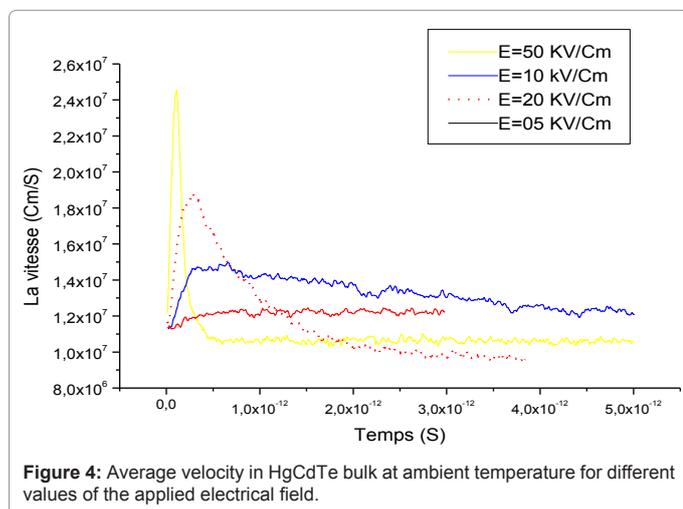
When the electrons are subjected to fields largely varying in time, a phenomenon of over-speed appears. This phenomenon was often studied by many authors, which did not fail to underline the practical interest of this phenomenon, in particular on the level of the submicronic components.

Figure 5 shows the variation of the drift velocity, energy carriers and the population in the three valleys  $\Gamma$ , L and X with the applied electric field for three different temperatures of the network ( $T=200$  K,  $T=300$  K and  $T=400$  K), for a mole fraction of  $x=0.3$  HgCdTe alloy studied.

At high temperatures, the thermal energy increases, the disorder in the material increases, which implies that collisions at temperature  $T=200$  K with the lattice vibrations are less important than temperature  $T=300$  K and  $T=400$  K, by carriers that are subject to thermal agitation disrupts this low and less movement of the carriers.

## Conclusion

Research in modeling devices are focused on developing analytical descriptions of the physical devices. In this study we addressed a number



of issues related to the phenomenon of electron transport carriers in semiconductors II-VI and more precisely in the ternary alloy HgCdTe. We essentially used the program Monte Carlo simulation to describe the functioning of this complex system from the elementary laws governing the movement of electrons. The principle of this approach is to simulate the behavior of electrons in the conduction band using the statistical method of Monte Carlo.

The transient electron transport in the HgCdTe alloy was studied. The characteristics and properties of the material obtained by this model, compared on many experimental reference frames, are satisfactory and they inform us about electronic dynamics as well as the behaviour electric high and low fields and high temperatures of these materials. Furthermore, this results proves the usefulness of this technique as an excellent tool for analysis and simulation of electronic transport phenomena in the semiconductor material, unless the query what is the good definition of physical parameters material which are sometimes poorly understood.

## Acknowledgment

The authors would like to thank Dr. B.Bouazza and Dr. C.Sayah for many useful discussions on the velocity measurement experiment and various aspects of Monte Carlo simulation. Funding for this work was provided at Abou Bekr Belkaid University of Tlemcen in Algeria.

## References

1. Rogalski A (2005) HgCdTe infrared detector material: history, status and outlook. Rep Prog Phys 68: 2267-2336.
2. Kinch MA, Beck JD, Wan CF, Ma F, Campbell J (2004) HgCdTe electron avalanche photodiodes. J Electron Mater 33: 630-639.
3. Derelle S, Bernhardt S, Haidar R, Deschamps J, Primot J, et al. (2009) Experimental Performance and Monte Carlo Modeling of Long Wavelength Infrared Mercury Cadmium Telluride Avalanche Photodiodes. J Electron Mater 38: 1628-1636.
4. Yuan P, Anselm KA, Hu C, Nie H, Lenox C, et al. (1999) A New Look at Impact Ionization—Part II: Gain and Noise in Short Avalanche Photodiodes. IEEE T Electron Dev 46: 1632-1639.
5. McIntyre RJ (1999) A new look at impact ionization-Part I: A theory of gain, noise, breakdown probability, and frequency response. IEEE T Electron Dev 46: 1623-1631.
6. Yoo SD, Kwack KD (1997) Theoretical calculation of electron mobility in HgCdTe. J Appl Phys 81: 719-725.
7. Scott W (1972) Electron Mobility in  $Hg_{1-x}Cd_xTe$ . J Appl Phys 43: 1055-1062.
8. Bartoli FJ, Meyer JR, Hoffman CA, Allen RE (1983) Electron mobility in low-temperature  $Hg_{1-x}Cd_xTe$  under high-intensity CO<sub>2</sub> laser excitation. Phys Rev B 27: 2248-2263.

9. Canali C, Martini M, Ottaviani G (1971) Transport Properties of CdTe. Phys Rev B 4: 422-431.
10. Borsari V, Jacoboni C (1972) Monte Carlo Calculations on Electron Transport in CdTe. Phys Status Solidi B 54: 649-662.
11. Penna M, Marnetto A, Bertazzi F, Bellotti E, Goano M (2009) Empirical Pseudopotential and Full-Brillouin-Zone k-p Electronic Structure of CdTe, HgTe, and  $Hg_{1-x}Cd_xTe$ . J Electron Mater 38: 1717-1725.
12. Chattopadhyay D, Nag BR (1974) Mobility of electrons in  $Hg_{1-x}Cd_xTe$ . J Appl Phys 45: 1463-1465.
13. Rode DL (1970) Electron Mobility in II-VI Semiconductors. Phys Rev B 2: 4036-4044.

**Citation:** Tahir HM, Bouazza B, Maassoume N, Bouazza A, Sayah C (2013) The Study and Simulation of the Electron Transport Phenomena on Bulk  $Hg_{1-x}Cd_xTe$  Based on an Ensemble Monte Carlo Method. J Material Sci Eng S11:002. doi:10.4172/2169-0022.S11-002

### Submit your next manuscript and get advantages of OMICS Group submissions

#### Unique features:

- User friendly/feasible website-translation of your paper to 50 world's leading languages
- Audio Version of published paper
- Digital articles to share and explore

#### Special features:

- 250 Open Access Journals
- 20,000 editorial team
- 21 days rapid review process
- Quality and quick editorial, review and publication processing
- Indexing at PubMed (partial), Scopus, DOAJ, EBSCO, Index Copernicus and Google Scholar etc
- Sharing Option: Social Networking Enabled
- Authors, Reviewers and Editors rewarded with online Scientific Credits
- Better discount for your subsequent articles

Submit your manuscript at: <http://www.omicsgroup.org/journals/submission>



# Band Structure and Electron Transport of Bulk Based on an Ensemble Monte Carlo Calculation

Hichem Mohammed Tahir, Benyounes Bouazza and Noredine Massoum

*Department of Electrical Engineering and Electronics, Faculty of Technology, Abu-Bekr Belkaïd University, Tlemcen 13000, Algeria*

Received: May 3, 2012 / Accepted: November 17, 2012 / Published: December 20, 2012.

**Abstract:** The current demand growth of new components capable of operating at high power, high frequency, high temperatures and convergence towards miniaturization has led to the development of new fields of nanotechnology based on II-VI semiconductor. Interest in nanostructures based on II-VI semiconductor narrow gap containing mercury (such as super lattices HgTe/CdTe) was due to their advantages over alloys with cadmium telluride Mercury (MCT: HgCdTe). The ternary alloy is a semiconductor band-gap direct, in that work the main interest is about the ternary compound. The results obtained are very satisfactory; they are compared with experimental results, and are in good agreement. These results are very promising and open new perspectives for the realization of solar cells and applications in the field of sensors.

**Keywords:** Monte Carlo simulation, steady-state electron transport, transient electron transport, alloy scattering.

## 1. Introduction

Mercury cadmium telluride (HgCdTe) is the material system of choice to fabricate high performance photovoltaic and avalanche detectors over the entire infrared spectral region [1]. Several groups have reported an exponential gain curve and extremely low multiplication noise in electron injected HgCdTe APDs (avalanche photodetectors) at temperatures in the range of 77 K to 260 K for a variety of cutoff wavelengths in the MWIR and LWIR bands [2, 3]. These exceptional characteristics of HgCdTe APDs are indicative of the exclusive impact ionization of the electrons and of dead-space effects that tend to introduce order in the random impact ionization process, i.e., a history-dependent gain mechanism [4, 5]. The electron impact ionization process in HgCdTe becomes important at relatively small electric fields due to the high mobility of electrons and their low impact ionization threshold energy. The high gain at low bias and the low noise

factor make HgCdTe APDs particularly well suited for several applications, including night vision, nondestructive control and medical imaging, multicolor FPAs (focal-plane arrays) for astronomy, and photon counting. Despite this interest, a complete description of the transport properties of HgCdTe alloys is still lacking, especially in the high-field regime. The low field mobility has been the only transport parameter that has been the object of extensive theoretical [6] and experimental [7, 8] investigations. The electron drift velocity characteristic in CdTe as a function of temperature and electric field was measured by the transient-charge technique by Canali et al. [9]. Borsari and coworkers [10] performed Monte Carlo calculations of electron transport in CdTe to investigate the negative differential mobility of this material, which was attributed to the randomizing effect of inter-valley scattering rather than to the population of lower-mobility valleys [10].

## 2. Model Description

The most important input to Monte Carlo transport

---

**Corresponding author:** Hichem Mohammed Tahir, Ph.D. Student, main research field: electronic engineering. E-mail: chakib.13@hotmail.com.

simulation is the electronic structure of the material to be studied [11]. The electronic structures of the binary compounds CdTe and HgTe have been computed by using the nonlocal empirical pseudo potential method (NL-EPM), while the ternary alloy HgCdTe has been studied by using NL-EPM within a disorder-corrected VCA (virtual crystal approximation). The computed electronic structures, which take into account spin-orbit interactions, accurately replicate the available experimental data and ab initio information. Fig. 5 presents the NL-EPM electronic structure of HgCdTe. The presence of secondary valleys at the L point (intervalley separation energy 1.37 eV) can be noticed. Besides the electronic structure, the carrier–phonon interaction at high energies is the critical piece of information to be evaluated in order to study the carrier dynamics at high fields and impact-ionization-related phenomena. Empirical fits to low-energy transport data are still used to determine the electron–phonon coupling constants, and these values are used for simulation beyond their expected range of validity. The lack of reliable information on the carrier–phonon interaction has always affected the ability to treat the impact ionization process. Scarce information is available on the electron–phonon deformation potentials in HgCdTe. Chattopadhyay and Ref. [12] suggested a theoretical value of 9.5 eV for the electron acoustic deformation potential in HgCdTe, adopting the value reported by Rode for

CdTe [13]. To the authors’ knowledge, no information is available for the hole deformation potential coefficients.

The electronic transport is always described by models based on the resolution of the Boltzmann equation who characterizes the modification of the particles state caused by various actions. Thus, including the charges transport in semiconductors, the Monte Carlo method is a statistical method, as a popular and effective mathematical tool for the study and analysis of the physical phenomena.

In this work, a three valleys model of the conduction band,  $\Gamma$ ,  $L$ ,  $X$  considered isotropic is used but not parabolic. The model used here is developed considering the deformation potential of each considered valley, the energy gap structures, and the main scattering mechanisms in details. The concentrations of electrons in  $L$  and  $X$  valleys relative on the minimum  $\Gamma$  are:

$$n_{\Gamma} = 2 \left( \frac{2\pi m_{\Gamma}^* K T}{\hbar^2} \right)^{3/2} \exp(E_p / K T)$$

$$\frac{n_L}{n_{\Gamma}} = \left( \frac{m_e^L}{m_{\Gamma}^*} \right)^{3/2} \exp - \left( \frac{\Delta E_{\Gamma L}}{K T} \right)$$

$$\frac{n_X}{n_{\Gamma}} = \left( \frac{m_e^X}{m_{\Gamma}^*} \right)^{3/2} \exp - \left( \frac{\Delta E_{\Gamma X}}{K T} \right)$$

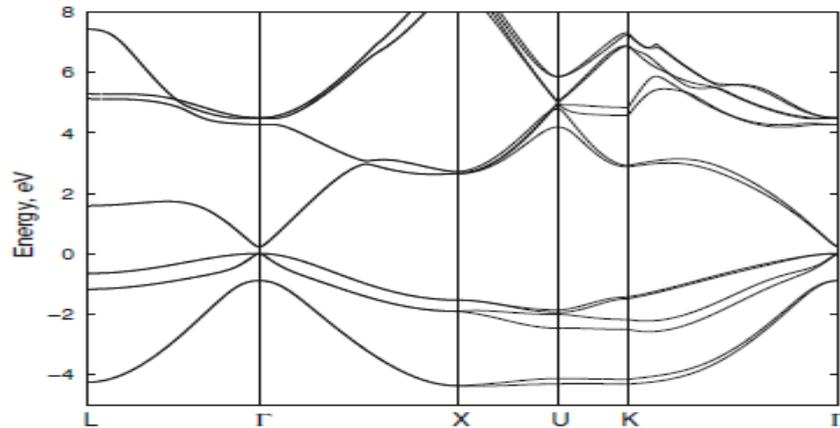


Fig. 1 Calculated electronic structure of HgCdTe.

where,  $E_{\Gamma L}$  and  $E_{\Gamma X}$  are the separation energies between  $\Gamma$ -L and  $\Gamma$ -X respectively.

### 3. Results

The number of electrons simulated is 20,000 electrons subject to different values of the electric field under different temperatures. The implementation of this model is made by taking the following steps: for each electron simulated, it is associated with initial position and an initial wave vector, and using the process “self scattering”; it introduce a fictitious scattering which aims to establish a time distribution.

The Monte Carlo model adopted in this work is used for calculating and retrieval features of electronic transport in the HgCdTe alloy in the transitional and stationary regime. The calculation is made for electric fields ranging from 0 KV to 50 KV for different values of temperature.

The average velocity is one of the key parameters to describe the behavior of a compound. In our study, the authors focus on themodulus of the velocity and the drift velocity is an average velocity of the course. Indeed, the electrons under the influence of thermal energy will have a random way, and therefore they

have no path. But when subjected to an electric field, their way is more random and the distance travel led is not zero.

After a collision, the electron will have a zerove locity component in the direction parallel to the electric field, but the effect of thermal agitation that the electron back to speed, the electrons move in the opposite direction of the field.

In Fig. 2, the authors note that the drift velocity increases with the electric field and then it reaches a saturation value equal to  $6.16 \cdot 10^7 \text{cm/S}$ , which corresponds to a critical electric field is 1.2 kV/cm. thereafter, the drift velocity decreases with the field until it reaches a value of  $1.08 \times \frac{10^7 \text{Cm}}{\text{S}}$  from an electric field equal to 14 kV/cm.

In Fig. 3, when the carriers are subjected to an electric field they will gain energy, which can be identified into two phases, the energy of the three module valleys  $\Gamma$ , L and X. Once the electric field is applied, the energy of the Carriers increases very rapidly to a maximum of energy which is 190meV. After a very short period of time (about  $10^{-14}\text{S}$  ), the energy becomes constant.

Fig. 4 presents the shape of the electron drift

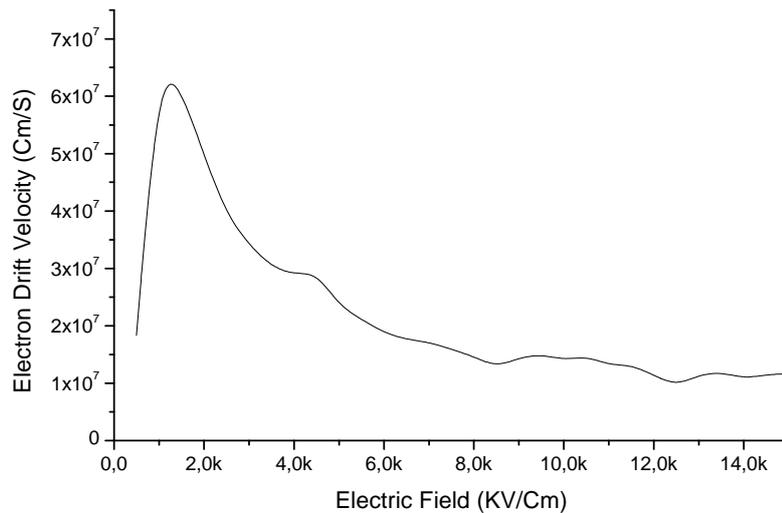


Fig. 2 The average velocity in the HgCdTe bulk at 300 K for different values of the applied electrical field (Stationary regime).

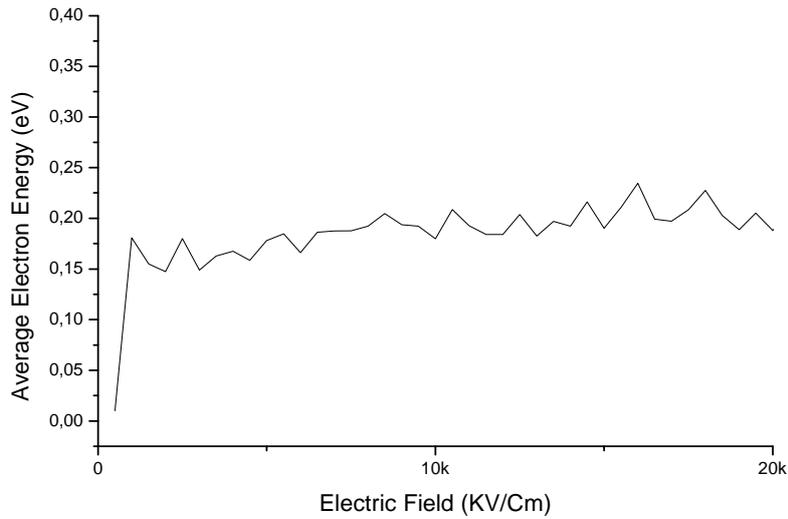


Fig. 3 The average energy in the HgCdTe bulk at 300 K for different values of the applied electrical field (stationary regime).

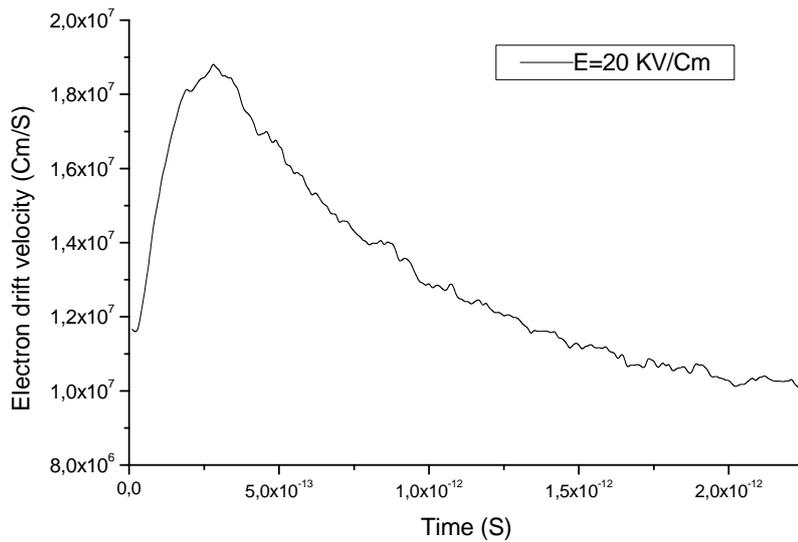


Fig. 4 Average velocity in HgCdTe bulk at ambient temperature in transitional regime for electrical field applied equal to 20 KV/cm.

velocity versus time for an electric field of 20 kV, and a concentration of at 300 kV. This curve has four phases:

For  $t < 0.2 \text{ } \mu\text{S}$ , the velocity increases linearly with time.

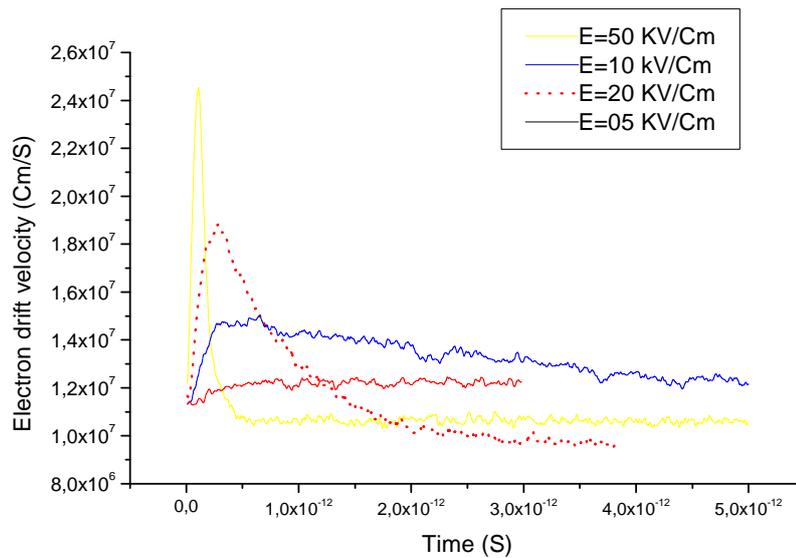
For  $0.2 \text{ } \mu\text{S} < t < 0.3 \text{ } \mu\text{S}$ , the velocity continues to grow but more slowly. There is a maximum of  $1.9 \cdot 10^7 \text{ Cm/S}$  well above the stationary value corresponding to the applied field, so there is a

phenomenon of over speed.

Between 0.3 and 2  $\mu\text{s}$ , the velocity decreases rapidly to the steady state.

In the last phase ( $t > 2 \text{ } \mu\text{S}$ ) the velocity remains unchanged, it is equal to the steady velocity  $0.9 \cdot \frac{10^7 \text{ Cm}}{\text{s}}$ .

When the electrons are subjected to fields largely varying in time, a phenomenon of over-speed appears. This phenomenon was often studied by many authors,



**Fig. 5** Average velocity in HgCdTe bulk at ambient temperature for different values of the applied electrical field.

which did not fail to underline the practical interest of this phenomenon, in particular on the level of the submicronic components.

Fig. 5 presents the curves for different drift velocities in electric fields with time at 300 K. In this case, the main note is that the velocity exhibits a maximum for the strong fields. This is due mainly to the wide variation of angular momentum and energy relaxation as a function of electron energy, so the transient overshoot in velocity is typically observed when the applied electric field is quite high. Contribution to the critical field, the electrons can reach a maximum energy as the time is small compared to the energy relaxation.

#### 4. Conclusions

Research in modeling devices is focused on developing analytical descriptions of the physical devices. In this study, it addressed a number of issues related to the phenomenon of electron transport carriers in semiconductors II-VI and more precisely in the ternary alloy HgCdTe. It is essentially used the program Monte Carlo simulation to describe the functioning of this complex system from the elementary laws governing the movement of electrons.

The principle of this approach is to simulate the behavior of electrons in the conduction band using the statistical method of Monte Carlo.

The transient electron transport in the HgCdTe alloy was studied. The characteristics and properties of the material obtained by this model, compared on many experimental reference frames, are satisfactory and they give information about electronic dynamics as well as the behaviour electric high and low fields and high temperatures of these materials. Furthermore, this results proves the usefulness of this technique as an excellent tool for analysis and simulation of electronic transport phenomena in the semiconductor material, unless the query what is the good definition of physical parameters material which are sometimes poorly understood.

#### Acknowledgments

The authors would like to thank Dr. B. Bouazza and Dr. C. Sayah for many useful discussions on the velocity measurement experiment and various aspects of Monte Carlo simulation. Funding for this work was provided at Abou Bekr Belkaid University of Tlemcen in Algeria.

## References

- [1] A. Rogalski, Full-Band Monte Carlo Simulation of HgCdTe APDs, *Rep Prog Phys* 6 (8) (2005) 22-65.
- [2] M.A. Kinch, J.D. Beck, C.F. Wan, J. Campbell, Ultra-low noise mid-wave infrared InAs–GaSb strain layer superlattice avalanche photodiode, *Electron Mater* 3 (3) (2004) 6-30.
- [3] S. Derelle, S. Bernhardt, R.Ha. Dar, J. Deschamps, J. Primot, Experimental performances and Monte Carlo modelling of LWIR HgCdTe avalanche photodiodes, *Electron Mater* 3 (81) (2009) 6-28.
- [4] P. Yuan, K.A. Anselm, C. Hu, H. Nie, C. Lenox A.L.H.B.G. Streetman, et al., Theory of high field carrier transport and impact ionization in wurtziteGaN, Part II: Application to avalanche photodetectors, *IEEE Trans Electron Dev* 4 (6) (1999) 16-32.
- [5] R.J. McIntyre, Theory of micro plasma fluctuations and noise in silicon diode in avalanche break down, *IEEE Trans Electron Dev* ED 4 (6) (1999) 16-23.
- [6] S.D. Yoo, K.D. Kwack, Crystallinity of inorganic films grown by atomic layer deposition: Overview and general trends, *J. Appl. Phys.* 8 (1) (1997) 719.
- [7] W. Scott, Electron mobility in Hg<sub>0.78</sub>Cd<sub>0.22</sub>Te alloy, *J. Appl. Phys.* 4 (3) (1972) 10-55.
- [8] F.J. Bartoli, J.R. Meyer, C.A. Hoffman, R.E. Allen, Photo-Hall determination of acceptor densities in n-type HgCdTe, *J. Appl. Phys.* B 2 (7) (1983) 22-48.
- [9] C. Canali, M. Martini, G. Ottaviani, Hole mobility and Poole-Frenkel effect in CdTe, *Phys. Rev. B* 4 (1971) 4-22.
- [10] V. Borsari, C. Jacoboni, Monte Carlo Calculations on Electron Transport in CdTe, *Phys. Stat. Sol. B* 54 (1972) 6-49.
- [11] M.A. Penna, F. Marnetto, E. Bertazzi Bellotti, M. Goano, An accurate dual-expansion-point full-Brillouin-zone k-p model for wurtzite semiconductors, *J. Electron Mater* 3 (8) (2009) 17-17.
- [12] D. Chattopadhyay, B.R. Nag, Transport coefficients and thermoelectric figure of merit of n-Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te, *J. Appl. Phys.* 4 (5) (1974) 14-63.
- [13] D.L. Rode, Thermoelectric figure of merit of II–VI semiconductor nanowires, *Phys. Rev. B* 2 (1970) 40-36.

## ملخص

وقد كان الدافع وراء التقدم في صناعة الدوائر المتكاملة في السنوات الأخيرة من التصغير المستمر من الترانزستورات. مع تخفيض أبعاد هذه العناصر إلى 0.1 ميكرون أو أقل، آثار فيزيائية جديدة دخلت حيز التنفيذ بحيث برامج المحاكات ذات البعدين لم تأخذها بعين الاعتبار. في الواقع البعد الثالث في اللعب بما أن الأبعاد العرضية والطولية من المكونات هي من نفس الترتيب من حيث الحجم. لوصف عمل هذه المكونات مع زيادة الدقة، يجب علينا صقل أدوات المحاكاة وتكييفها لمراعاة هذه الظواهر. الإطار العام لهذا العمل هو من هذا المنظور. في هذه الأطروحة، قمنا بتطوير جهاز محاكاة لدراسة المكونات التي أبعادها هي أقل من 0.1 ميكرون. وقد تم تطوير هذه الأداة من خلال الجمع بين معادلة بولتزمان لنقل الإلكترونات مع معادلة بواسون في قرار ثلاثية الأبعاد (D3). ويستند لدينا برنامج المحاكاة على نهج العشوائية لمحاكاة ديناميكية الجزيئات من خلال طريقة مونت كارلو. هذه الأداة هو مساهمة كبيرة في النمذجة من المكونات، ويمكن أن تكون مفيدة حتى خارج سياق أجزاء صغيرة. في نهاية المطاف قد يكون متحدًا في محاكاة تضم مزيجًا من نماذج من مونت كارلو ونموذج دريف ديفيزيون

## Résumé

Le progrès de l'industrie des circuits intégrés, durant ces dernières années, a été poussé par une miniaturisation continue des transistors. Avec la réduction des composants à des dimensions de 0.1 micron et moins, de nouveaux effets physiques entrent en jeu que les simulateurs standard en deux dimensions (2D) ne considèrent pas. En fait la troisième dimension entre en jeu car les dimensions transversales et longitudinales des composants sont du même ordre de grandeur. Pour décrire le fonctionnement de tels composants avec plus de fidélité, il faut donc affiner les outils de simulation et les adapter afin de prendre en compte ces phénomènes. Le cadre général de ce travail s'inscrit dans cette optique. Au cours de cette thèse, on a développé un simulateur distinct pour étudier les composants submicroniques. Cette outil a été développé, en combinant l'équation de transport de Boltzmann avec l'équation de Poisson dans une résolution tridimensionnelle (3D) et autonome. Notre simulateur est basé sur une approche stochastique consistant en la simulation dynamique des particules par la méthode de Monte-Carlo. Cette outil constitue une contribution importante à la modélisation des composants, et peut être utile même hors du contexte des petits composants. Éventuellement, il peut être unis dans un simulateur hybride combinant les modèles de Monte-Carlo et de dérive diffusion.

## Abstract

The progress of industry integrated circuits in recent years has been pushed by continuous miniaturization of transistors. With the reduction of components of dimensions 0.1 micron and less, new physical effects come into play standard simulators in two dimensions (2D) did not see. In fact the third dimension comes into play since the transverse and longitudinal dimensions of the components are of the same order of magnitude. To describe the operation of such components with greater fidelity, we must refine simulation tools and adapt them to take account of these phenomena. The general framework of this work is in this perspective. In this thesis, we developed a simulator to study distinct submicron components. This tool was developed by combining the Boltzmann transport equation with the Poisson equation in a three dimensional resolution (3D) and autonomous. Our simulator is based on a stochastic approach to dynamic simulation of the particles by the method of Monte-Carlo. This tool is a significant contribution to the modeling of components, and can be useful even outside the context of small parts. Eventually, it may be united in a hybrid simulator combining models of Monte Carlo and drift diffusion.