

N° d'ordre :

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE & POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR & DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE DJILLALI LIABES
FACULTE DES SCIENCES EXACTES
SIDI BEL ABBÈS

THESE DE DOCTORAT

Présentée par

TALHA NORA

Spécialité : Physique

Option : Physique des matériaux

Intitulée

*Modélisation et caractérisation des phénomènes de transport électronique dans
les semiconducteurs par la méthode de Monte Carlo:
Cas des composés 6H-SiC et GaAs*

Soutenue le 01 / 12 / 2016

Devant le jury composé de :

Président :	BASSOU Ghaouti	Pr	Université de Sidi Bel-Abbès
Examineurs :	ABBAR Boucif	Pr	Université de Sidi Bel-Abbès
	BOUAZZA Benyounes	Pr	Université de Tlemcen
	BELGOUMENE Berrezoug	Pr	Université de Saïda
	BEGHDAD Mohammed	MCA	Université de Mostaganem
Directeur de thèse :	KADOUN Abd-Ed-Daïm	Pr	Université de Sidi Bel-Abbès

Année universitaire 2016/2017

Dédicaces

*Grâce Allah le tout
puissant, j'ai pu
réaliser ce modeste
travail que je dédie à :*

À mes très chers parents

À mes sœurs et frères

*À tous ceux qui ont apportés
Leur contribution pour la
réalisation de ce travail.*

Remerciements

*Avant tout, je remercie **ALLAH** le tout puissant de m'avoir donné la force, la volonté et le courage pour réussir un tel travail. Ce travail a été effectué au sein du Laboratoire de Microscopie, Microanalyse de la matière et de Spectroscopie Moléculaire (L2MSM), Faculté des Sciences – Université Djillali Liabes*

*Je voudrais en premier lieu adresser mon profond sentiment de reconnaissance à mon directeur de thèse **M.A. KADOUN**, professeur à l'université Djilali Liabès de Sidi Bel-Abbès, pour son suivi, ses encouragements et sa compréhension et pour m'avoir fait bénéficier de ses compétences scientifiques, Qu'il trouve ici l'expression de mon profond respect, de ses qualités humaines et ses discussions fructueuses durant toute la période de réalisation de ce travail. J'ai eu beaucoup de plaisir de travailler avec lui.*

*Je tiens à remercier très vivement Monsieur **Bassou Ghaouti**, professeur à l'université Sidi Bel-Abbès, d'avoir accepté de présider le Jury de cette thèse.*

*Je remercie également Monsieur **Abbar Boucif**, professeur à l'Université Sidi Bel-Abbès, pour avoir accepté d'être membre de jury.*

*Je remercie également Monsieur **Bouazza Benyounes**, professeur à l'Université **Tlemcen**, pour avoir accepté d'être membre de jury.*

*J'exprime de même mes remerciements Monsieur **Beghdad Mohammed**, maître de conférences à l'université de Mostaganem d'avoir accepté d'être examinateur.*

*Mes remerciements s'adressent aussi à Monsieur **Belgoumene Berrezoug**, professeur à l'Université Saïda, pour avoir accepté d'être membre de jury.*

Enfin, j'adresse mes remerciements à tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce projet en particulier tous les membres de laboratoire (L2MSM) université Djillali Liabès de Sidi Bel-Abbès.

Listes des figures

Figure I. 1 : L'espace des phases.....	09-
Figure I. 2 : Particules avant et après ionisation.....	28-
Figure II. 1: transport de charge dans les semi-conducteurs.....	33-
Figure II. 2: Mouvement d'un électron dans l'espace des vecteurs et l'espace réel.....	36-
Figure II. 3: Probabilité totale d'interaction et Self Scattering.....	40-
Figure II. 4: La procédure de choix de l'interaction.....	41-
Figure II. 5: Evolution du vecteur d'onde au moment de la collision.....	43-
Figure II. 6: Organigramme de la méthode de Monte Carlo.....	49-
Figure II. 7: Présentation de la méthode Monte Carlo.....	50-
Figure III. 1: Cellule tétraédrique du SiC.....	56-
Figure III. 2: Représentation des polytypes 2H, 3C, 4H et 6H.....	57-
Figure III. 3 : les structures des principaux polytypes du SiC	59-
Figure III. 4 : Comparaison de quelques propriétés physiques de semiconducteurs	61-
Figure III. 5 : La maille élémentaire de la structure Zinc-blende.....	65-
Figure III. 6: Les zones de Brillouin des deux structures: a) wurtzite et b) zinc blende.....	66-
Figure III.7 : Structure de bande électronique du GaAs.....	76-
Figure III. 8 : structure de bande électronique du 6H-SiC.....	76-
Figure IV. 1: les interactions acoustiques en fonction de l'énergie pour des températures de 100, 300 et 500K (modèles trois et cinq vallées).....	93-
Figure IV. 2: les interactions avec les impuretés ((a)modèle trois vallées, (b) modèle cinq vallées) en fonction de l'énergie pour 6H-SiC à des températures de 100, 300 et 500K.....	94-
Figure IV. 3: Interactions intervalles d'absorptions (a) et émissions (b) en fonction de l'énergie pour 6H-SiC à températures 100 K, 300K et 500 K (modèle trois vallées).....	97-
Figure IV. 4: Interactions intervalles d'absorption (a) et émission (b) en fonction de l'énergie pour 6H-SiC à températures 100 K (modèle cinq vallées).....	98-
Figure IV. 5: Interactions intervalles d'absorption (a) et émission (b) en fonction de l'énergie pour 6H-SiC à températures 300 K (modèle cinq vallées).....	99-
Figure IV. 6: Interactions intervalles d'absorption (a) et émission (b) en fonction de l'énergie pour 6H-SiC à température 500K (modèle cinq vallées).....	100-
Figure IV. 7: Interactions intravallées d'absorption (a) et émissions(b) en fonction de l'énergie	

pour 6H-SiC à des températures 100 K, 300 K et 500 K. (modèle trois vallées).....	102-
Figure IV. 8: Interactions intravallées d'absorption (a) et émissions(b) en fonction de l'énergie pour le 6H-SiC à des températures 100K, 300 K et 500K (modèle cinq vallées).....	103-
Figure IV. 9 : les interactions optiques polaires absorptions et émissions en fonction de l'énergie pour le 6H-SiC à des températures 100K, 300K et 500K ((a)modèle trois vallées, (b) modèle cinq vallées).....	104-
Figure IV. 10: Vitesse de dérive des électrons en fonction du champ électrique ((a)modèle trois vallées, (b) modèle cinq vallées).....	111-
Figure IV. 11 : Energie moyenne des électrons en fonction du champ électrique ((a)modèle trois vallées, (b) modèle cinq vallées).....	113-
Figure IV. 12 : Population des vallées en fonction du champ électrique T=300K ((a)modèle trois vallées, (b) modèle cinq vallées).....	115-
Figure IV. 13 : Vitesse de dérive des électrons en fonction du champ dans le 6H-SiC pour divers dopage ((a) modèle trois valles, (b) modèle cinq vallées).....	116-
Figure IV. 14: Vitesse de dérive en fonction du champ dans le 6H-SiC pour divers températures ((a) modèle trois vallées, (b) modèle cinq vallées).....	118-
Figure IV. 15: Variations de la mobilité en fonction du champ électrique dans le 6H-SiC pour divers température ((a) modèle trois vallées, (b) modèle cinq vallées).....	121-
Figure IV. 16: Réponse transitoire en vitesse (a) et en énergie (b) à des impulsions de champ électrique (T=100 K) dans le 6H-SiC (modèle trois vallées et cinq vallées).....	122-
Figure IV. 17: Réponse transitoire en vitesse (a) et en énergie(b) à des impulsions de champ électrique (T=300 K) dans le 6H-SiC (modèle trois et cinq vallées).....	123-
Figure IV. 18 : Réponse transitoire en vitesse(a) et en énergie (b) à des impulsions de champ électrique (T=500 K) dans le 6H-SiC (modèle trois et cinq vallées).....	130-
Figure IV. 19: les interactions acoustiques en fonction de l'énergie pour le GaAs (modèle trois et cinq vallées) pour T=300K.....	130-
Figure IV. 20: les interactions piézoélectriques en fonction de l'énergie pour le GaAs (modèle trois et cinq vallées) pour T=300 K.....	131-
Figure IV. 21: les interactions avec les impuretés en fonction de l'énergie pour le GaAs (modèle trois et cinq vallées) pour T=300 K.....	132-
Figure IV. 22 : Interactions optiques polaires dans GaAs à températures 300 K (modèle trois et cinq vallées).....	133-
Figure IV. 23: Interactions intervallées d'absorptions (a) et émission(b) pour GaAs (modèle cinq vallées) en fonction de l'énergie.....	134-

Figure IV. 24: Interactions intervalées d'absorption (a) et émission (b) pour GaAs (modèle trois vallées) en fonction de l'énergie.....	-135-
Figure IV. 25: Interactions intravallées d'absorption (a) et émission (b) pour GaAs (modèle trois vallées) en fonction de l'énergie.....	-136-
Figure IV. 26: Vitesse de dérive (a) et l'énergie moyenne des électrons (b) en fonction du champ électrique (1kV/cm-100kV/cm).....	-139-
Figure IV. 27 : Population des vallées en fonction du champ électrique pour T=300K ((a)modèle trois vallées), ((b) modèle cinq vallées).....	-142-
Figure IV. 28: Evolution de la vitesse (a) et l'énergie moyenne(b) en fonction du temps dans le GaAs Pour différents champs ($N_D = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$).....	-144-
Figure IV. 29 : Population des vallées en fonction du champ électrique pour T=300K ((a)modèle trois vallées), ((b) modèle cinq vallées).....	-146-
Figure IV. 30: Evolution de la vitesse (a) et l'énergie moyenne(b) en fonction du temps dans le GaAs Pour différent champs ($N_D = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) pour le modèle trois vallées.....	-149-
Figure IV. 31: Evolution de la vitesse (a) et l'énergie moyenne(b) en fonction du temps dans le GaAs Pour différent champs ($N_D = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) pour le modèle cinq vallées.....	-150-

Liste des tableaux

Tableau III.1 : les séquences d'empilement des bicouches SiC pour différents polytypes.....	58-
Tableau III. 2 : propriétés électriques de différents semi-conducteurs.....	60-
Tableau III.3 : les différentes propriétés électriques et physiques du GaAs.....	64-
Tableau III. 4 :Les paramètres relatifs des deux matériaux 6H-SiC, GaAs.....	78-
Tableau III .5 : Valeurs d'énergie des gaps du 6H- SiC, GaAs.....	78-
Tableau III. 6 : Valeurs des coefficients de non parabolicité, les valeurs des écarts énergétiques et le nombre des vallées équivalents pour 6H-SiC, GaAs.....	79-
Tableau III. 7 : Les différentes valeurs de la masse effectives pour 6H-SiC, GaAs.....	80-
Tableau IV. 1 : Données extraites de la structure de bande du 6H-SiC	89-
Tableau IV.2 : Données extraites de la structure de bande du GaAs	128-

Conclusion.....	-28-
Références Bibliographiques.....	-29-

Chapitre II : La Méthode de Monte Carlo

Introduction.....	-30-
I. La Méthode de Monte Carlo.....	-30-
I.1. Définition	-30-
I.2. Génération d'un nombre aléatoire.....	-31-
a) Définition conceptuelle.....	-31-
b) Définition empirique.....	-31-
I.3. Principe de la méthode Monte Carlo.....	-32-
I.4. Les différents éléments de la simulation.....	-34-
I.5. Mouvement des électrons.....	-35-
I.6. Calcul du temps de vol libre.....	-36-
I.7. Méthode du Self Scattering.....	-39-
II. Choix du mécanisme d'interaction.....	-41-
II.1. Choix de l'angle de déviation.....	-41-
II.1.1 Interaction avec les impuretés.....	-44-
II.1.2 Interaction avec les phonons acoustiques.....	-44-
II.1.3 Interaction avec les phonons optiques polaires.....	-45-
II.1.4 Interaction avec les phonons intervallées.....	-45-
II.1.5 Interaction avec les phonons optiques non polaires.....	-45-
III. Mise en œuvre de la méthode de simulation.....	-45-
III.1. Description du logiciel.....	-48-
III.2 Récapitulatif.....	-50-
Références bibliographiques.....	-51-

Chapitre III : Généralités sur les propriétés physiques des semi-conducteurs (SiC, GaAs)

Introduction.....	-53-
I. carbure de silicium (SiC).....	-55-
I. 1 Historique.....	-55-
I. 2. Structure du carbure de silicium.....	-56-
I.2.1. Le polytypisme dans le de silicium.....	-56-

I. 2.1.1 Carbure du Silicium cubique.....	-58-
I.2.1.2 Carbure du Silicium hexagonale.....	-58-
a. Structure cristalline du polytype 4H-SiC	-58-
b. Structure Cristalline du polytype 6H-SiC.....	-58-
I. 3. Propriétés et applications du SiC.....	-59-
I.3. 1. Propriétés électriques.....	-59-
I. 3. 2. Propriétés optiques.....	-59-
I.3.3. Propriétés thermiques.....	-59-
I.3. 4. Propriétés mécaniques.....	-60-
I. 4. Applications.....	-61-
I.4.1. Applications hautes températures.....	-61-
I.4.2. Applications dans l'électronique de puissance.....	-62-
I.4.3. Applications micro-ondes.....	-62-
II. Arséniure de Gallium.....	-63-
II.1. Définition.....	-64-
II.2. Propriétés électriques et physiques.....	-64-
II. 3. Structure cristalline.....	-64-
III. Les méthodes de calcul de la structure de bande dans les matériaux semiconducteurs.....	-67-
III.1. Diveres méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger.....	-68-
III. 2. Hypothèses simplification pour le calcul de la structure de bande.....	-69-
III. 2.1. Les approximations des bases.....	-69-
III. 2.1.1. L'approximation de Born Oppenheimer.....	-69-
III. 2.1.2. L'Approximation de Hartree-Fock.....	-71-
III. 3. Les méthodes de calcul de la structure de bande.....	-72-
III. 3. 1. La méthode de liaisons fortes.....	-72-
III. 3. 2. La méthode cellulaire.....	-72-
III.3. 3. La méthode des ondes planes augmentée (APW).....	-73-
III. 3. 4. La méthode des ondes planes orthogonalisées (OPW).....	-73-
III. 3. 5. La méthode des pseudo-potentiels.....	-74-
III. 4. Structure des bandes du 6H-SiC, GaAs.....	-75-
IV. Les paramètres physiques des deux matériaux 6H-SiC, GaAs.....	-78-
IV.1 Les paramètres relatifs des deux matériaux.....	-78-
IV. 2. Les paramètres relatifs à la structure de bandes.....	-78-
IV.2.1 .L'énergie du gap	-78-

IV.2.2. Coefficient de non parabolicité	-79-
IV.2.3. Les masses effectives.....	-79-
IV.2.3.1. Masses effectives de conductivité.....	-80-
IV.2.3.2. Masse effective de la densité d'états.....	-80-
Conclusion.....	-81-
Références bibliographiques.....	-82-
Chapitre IV :	Résultats et discussion
Introduction.....	-85-
I. filières des composés IV-IV (6H-SiC).....	-87-
I. 1. Probabilités d'interactions en fonction de l'énergie et l'effet de la température sur les interactions	-91-
I. 1. 1. Interactions élastiques.....	-91-
Interactions acoustiques.....	-92-
Interactions avec les impuretés.....	-92-
I. 1. 2. Interaction inélastiques.....	-95-
Interactions intervallées d'absorption et d'émission.....	-95-
a. Modèles trois vallées	-95-
b. Modèles cinq vallées.....	-96-
Interactions intravallées.....	-101-
I.1.3. Interactions optiques polaires	-101-
Bilan sur les interactions.....	-105-
I.2. Transport en régime stationnaire.....	-107-
I.2.1. Les évolutions de la vitesse de dérive et de l'énergie moyenne avec l'amplitude du champ électrique appliqué.....	-107-
I.2.2. Influence de la température sur la vitesse en fonction du champ électrique.....	-101-
I.2.3. Influence de la température sur l'énergie en fonction du champ électrique.....	-113-
I.2.4. Coefficient de repopulation stationnaire.....	-112-
I.2.5. Influence du dopage.....	-114-
I.2.6. Influence de la température.....	-114-
I.2.7. L'influence du champ électrique sur la mobilité des porteurs.....	-117-
I. 3. Transport en régime non stationnaire.....	-120-
I. 4. Quelques conclusions.....	-124-
Concernant la comparaison entre les deux modèles pour 6H-SiC.....	-124-
Concernant le phénomène de transport des électrons dans 6H-SiC	-125-

II filières des composés III-V (GaAs).....	-126-
II. 1. Les probabilités d'interactions en fonction de l'énergie.....	-129-
II.1.1 Interactions acoustiques.....	-130-
II.1.2. Interactions piézoélectriques	-130-
II.1.3. Interactions avec les impuretés.....	-131-
II.1.4. Interactions optiques polaires.....	-132-
II.1.5. Interactions intervallées.....	-133-
II.1.5.1. Interactions inter-vallées d'absorptions et d'émissions.....	-133-
II.1.5.2. Interactions intravallées d'absorptions et d'émissions.....	-135-
II.2 Transport en régime stationnaire.....	-137-
II.2.1 Résultats à faible et moyen champ électrique.....	-138-
II.2.2 Résultats à champ électrique élevé.....	-140-
a) Vitesse de dérive.....	-140-
b) Energie des électrons en fonction du champ électrique appliqué.....	-141-
c) Influence de la température sur l'énergie.....	-143-
d) Coefficient de repopulations stationnaires.....	-145-
II. 3. Transport en régime non stationnaire.....	-147-
II.4. Quelques conclusions concernant cette étude sur GaAs	-151-
II.5. Conclusion.....	-152-
Références bibliographiques.....	-154-
Conclusion générale	-156-
Résumé.....	-158-
Abstract.....	-159-
الملخص	-160-

Introduction Générale

Le monde des semi-conducteurs est dominé, en termes de marché, par le silicium. Ce dernier a été l'un des premiers matériaux utilisés (avec le germanium) pour fabriquer des composants électroniques. Cependant, les semi-conducteurs binaires représentent actuellement une classe importante de matériaux dans divers domaines technologiques.

Certains semi-conducteurs permettent d'étendre l'utilisation des dispositifs électroniques dans le domaine des hautes températures, du fait de leur large bande interdite (gap), et les fortes puissances, du fait du fort champ électrique de claquage. Parmi ces matériaux, le carbure de silicium (SiC) a fait l'objet d'une attention particulière de la part de la communauté scientifique. L'appartenance à cette famille lui confère des potentialités très convoitées dans l'électronique de hautes puissances, de températures et de fréquences. Les propriétés physiques très attrayantes de ce matériau (gap deux fois plus important que celui du GaAs, composé binaire le plus étudié), sont associées à une conductivité thermique approximativement dix fois plus forte que celle du GaAs à 300 K. De plus, la vitesse de saturation des électrons à fort champ électrique est de l'ordre de $2 \cdot 10^7$ cm/s pour le carbure de silicium, ce qui est bien supérieur à la vitesse de saturation du GaAs et du Si ($1 \cdot 10^7$ cm/s).

La théorie et l'expérience montrent que les dispositifs en carbure de silicium (SiC) ont apporté des améliorations exceptionnelles par leur rapidité de commutation avec un minimum de perte surtout à des températures supérieures à $200\text{ }^\circ\text{C}$ alors que le silicium n'est plus utilisable.

L'étude théorique des propriétés du transport électronique dans les matériaux semi-conducteurs a fait et continue de faire l'objet d'intenses recherches. Le transport électronique dans un cristal est très différent du transport dans le vide, où la trajectoire des électrons n'est pas perturbée car ils ne subissent pas d'interaction, alors que dans un cristal, le transport dépend fortement de la structure de bandes dans laquelle les électrons évoluent. Ils subissent plusieurs types de collisions que nous allons préciser dans le quatrième chapitre. Pour étudier le transport électronique dans un semi-conducteur, on doit passer par la résolution de l'équation de **Boltzmann**. Cette résolution s'avérant très difficile analytiquement, on a donc souvent recours à l'utilisation de méthodes numériques.

Parmi les modèles microscopiques les plus complets et les plus utilisés, figurent les simulations basées sur les méthodes de **Monte Carlo**. Ces simulations permettent d'étudier finement le comportement des électrons à l'intérieur du semi-conducteur, ainsi que les différents types d'interactions qu'ils y subissent. Les résultats obtenus par cette simulation sont très satisfaisants et sont comparés avec d'autres résultats expérimentaux et théoriques existant dans la littérature.

En toute rigueur, ce type de calcul nécessite d'introduire toute la structure de bande (modèle « full band »), surtout quand le champ électrique appliqué est très fort. Cependant, ceci s'avère très fastidieux et demande un temps de calcul important, pénalisant les approches préparatoires de simulation qui sont devenues de nos jours, nécessaires avant toute démarche expérimentale. L'alternative est de prendre en considération un nombre restreint de vallées de la structure de bande. Le but de ce travail est d'optimiser le nombre de ces vallées, prises en compte dans le programme de simulation, afin d'obtenir les résultats les plus précis possibles, tout en améliorant l'efficacité du calcul pour les champs électriques intenses.

Pour cela, nous avons effectué une étude comparative impliquant deux modèles à trois et cinq vallées respectives, appliqués d'abord à un représentant de la famille de composés binaires IV-IV, en l'occurrence le 6H-SiC, ensuite à un représentant (le plus connu) de la famille des III-V, le GaAs. Le premier est à large gap et à champ de claquage très élevé, le second de gap moyen et de champ de claquage relativement faible. Nous abordons les caractéristiques de vitesse et d'énergie des porteurs de charge avec quelques confrontations à des résultats expérimentaux et théoriques de modèles full band disponibles dans la littérature scientifique et ce, dans le but de tester le degré de précision de nos modèles, selon le domaine de champ électrique envisagé. Les deux régimes, transitoire et stationnaire, sont considérés.

Nous avons scindé notre thèse en quatre chapitres précédés d'une brève introduction et finissant par une conclusion générale qui fait le point sur les résultats obtenus.

Le premier chapitre est consacré à l'étude des phénomènes de transport dans les semi-conducteurs, et donne une approche analytique de l'équation de Boltzmann. Nous avons mentionné les différentes interactions que les porteurs de charge sont susceptibles de subir durant leur évolution dans les cristaux, ainsi que les paramètres de diffusion après chaque interaction.

Le deuxième chapitre est dédié à la présentation des techniques de Monte Carlo utilisées dans l'étude microscopique de la dynamique électronique dans les semi-conducteurs.

Le début du chapitre présente l'historique de cette méthode. Par la suite, nous donnons le principe général de cette méthode pour le transport électronique en décrivant les probabilités qui permettent de calculer la durée de vol libre en utilisant la méthode Self Scattering. On expliquera aussi comment le choix des interactions et l'angle de déviation sont obtenus. On donne également les équations qui régissent le mouvement des électrons en l'absence d'interactions.

Le troisième chapitre est consacré à l'étude des principales propriétés des matériaux semi-conducteurs SiC et GaAs. Nous abordons ce chapitre par une présentation générale de ces matériaux, ensuite nous définissons leur réseau cristallin, leur réseau réciproque ainsi que leur structure de bandes d'énergie. Nous terminons par fournir aussi les paramètres physiques des deux matériaux.

Le quatrième chapitre est destiné à l'exploitation des différents résultats obtenus par notre simulation. Dans un premier temps, nous présentons l'évolution des différents types d'interactions en fonction de l'énergie. Ensuite on présente les caractéristiques du transport électronique dans les matériaux 6H-SiC et GaAs en utilisant respectivement deux modèles à *trois et cinq vallées*, dans les deux régimes où la vitesse de dérive est le paramètre le plus important. Dans le régime stationnaire, la vitesse de dérive est donnée en fonction du champ électrique, alors que dans le régime transitoire (non stationnaire), elle est donnée en fonction du temps. Les résultats obtenus seront comparés avec d'autres résultats existants dans la littérature. Enfin, les conclusions qui nous semblent les plus pertinentes sont tirées de cette étude comparative.

Chapitre 1

Introduction

La théorie classique du transport électronique dans les semi-conducteurs, considère le système des porteurs libres en équilibre avec le réseau cristallin comme formant un gaz parfait. Par la suite est venue se greffer la physique statistique avec le concept de fonction de distribution, et finalement la théorie quantique décrivant les interactions avec le réseau.

Il en résulte finalement un formalisme semi-classique où trajectoires et champs sont traités classiquement et les interactions par la mécanique quantique. L'équation permettant de formaliser le transport est l'équation de Boltzmann.

I. Le modèle de Drude

La découverte de l'électron en 1897 par J.J.Thomson eut un impact immédiat sur les théories de la structure de la matière et suggéra un mécanisme évident de la conductivité dans les métaux. Trois ans après la découverte de Thomson, Drude développa sa théorie de la conduction électrique et thermique dans les métaux en appliquant la théorie cinétique des gaz aux électrons libres présents dans ces matériaux. Ce modèle suppose que les électrons sont libres, et qu'en l'absence de champ appliqué et de gradient thermique ils se déplacent de manière aléatoire dans le solide. Ainsi, le courant global est nul. Lors de l'application d'un champ électrique, les électrons sont accélérés suivant la force électrique $\vec{F} = -e\vec{E}$.

Dans le cas d'un système sans friction, les électrons sont accélérés indéfiniment, mais dans un solide réel, ils diffusent lors des collisions avec tous les défauts du cristal, avec les phonons et avec les autres électrons.

I. 1. Hypothèses de la théorie [1, 2]

- ❖ L'on applique la théorie cinétique des gaz aux électrons.
- ❖ Les électrons ont une vitesse thermique \vec{v}_0 , avec bien sûr

$$\langle \vec{v}_0 \rangle = \mathbf{0} \text{ et } \left\langle \left\| \vec{v}_0 \right\|^2 \right\rangle > 0 \quad (\text{I.1})$$

- ❖ Des collisions avec le réseau cristallin vont rééquilibrer la vitesse à la vitesse thermique après un temps τ de parcours libre. Ce temps est appelé le temps de relaxation ou de diffusion ou “*scattering time*”.

En général, la valeur de τ sera mesurée ou calculée, elle dépendra du niveau de dopage, de la présence de défauts, de la température, etc.

- ❖ Après chaque collision, l'électron perd complètement la "mémoire" de la vitesse précédente.
- ❖ Les collisions sont instantanées. La probabilité d'une collision entre les instants t et $t + dt$ est égale à $\frac{dt}{\tau}$.

I. 2. Conductivité électrique

Comme l'avait fait Drude au début de ce siècle, il n'est pas nécessaire de tenir compte de phénomènes quantiques pour comprendre qualitativement l'origine physique de la résistivité électrique. Drude, en effet, considérait les électrons comme des particules classiques.

En l'absence de tout champ électrique, les électrons ont donc des vitesses dont les directions sont réparties aléatoirement dans l'espace, comme pour les molécules d'un gaz, et dont la valeur moyenne est nulle.

Sous l'action d'un champ électrique \vec{E} appliqué au temps $t = 0$, un électron de masse effective m^* et de charge $-e$, aura un vecteur vitesse \vec{v} et sera accéléré, selon la loi classique [3,1]:

$$m^* \cdot \frac{d\vec{v}}{dt} = -e\vec{E} \quad (\text{I.2})$$

Tous les électrons du gaz acquièrent donc une composante de vitesse v_e que l'on appelle *vitesse d'entraînement*, correspondant à un mouvement uniformément accéléré dans la direction opposée au champ appliqué.

$$\langle \vec{v} \rangle = v_e = -\frac{e\tau}{m^*} \vec{E} = -\mu_e \vec{E} \quad (\text{I.3})$$

Où $\mu_e = e\tau/m^*$ est la *mobilité* qui représente l'aptitude des porteurs de charge à se déplacer dans un matériau sous l'action d'un champ électrique.

Une méthode simple permettant d'obtenir les résultats du modèle de Drude consiste à introduire dans l'équation de la dynamique (I.2) un terme de frottement visqueux traduisant le freinage des électrons par collisions :

$$m^* \frac{dv}{dt} = -eE - m^* \frac{v}{\tau} \quad (\text{I.4})$$

La solution de l'équation (I.4) en régime stationnaire ($\frac{dv}{dt} = 0$), donne le résultat trouvé en (I.3).

Le vecteur densité de courant \vec{j}_e qui résulte de ce déplacement ordonné d'électrons est $\vec{j}_e = -nev\vec{v}_e$, si n est la concentration en électrons de conduction.

En utilisant l'équation (I.3), on peut écrire :

$$\vec{j}_e = \sigma_e \vec{E} \quad (\text{I.5})$$

Avec

$$\sigma_e = ne^2\tau / m^* \quad (\text{I.6})$$

C'est la loi d'Ohm; σ_n est la conductivité des électrons

Le modèle de Drude souffre de défauts importants, notamment il ne permet pas d'expliquer la dépendance en température de la conductivité d'un métal normal (c'est-à-dire non supraconducteur).

Les défauts du modèle de Drude sont essentiellement liés au fait que les électrons y sont traités comme un gaz classique. Entre deux collisions successives, les électrons sont considérés comme libres, à l'exception de leur confinement au sein de l'échantillon.

La périodicité de l'arrangement des ions, qui donne lieu à la structure de bandes du métal, n'est donc pas prise en compte. De plus, la nature physique des mécanismes de collision décrits par le temps de relaxation n'est pas correctement élucidée.

Pour remédier à ces défauts, il est nécessaire de tenir compte du caractère quantique du gaz d'électrons et de la structure de bandes du métal, et de décrire convenablement les

processus de collision. C'est l'objet de la théorie semi-classique du transport fondée sur l'équation de Boltzmann [4].

II. Traitement semi-classique du transport

La théorie du transport traite du lien entre les courants et les forces qui les créent ; les formulations utilisées dans le calcul des propriétés de transport relèvent essentiellement de la mécanique classique dans la mesure où l'on considère les électrons ou les trous comme des particules possédant des positions et des moments cristallins bien définis, à l'exception du temps due à la collision, que l'on suppose négligeable devant le temps entre collisions.

On voit que l'on a affaire à un système tout à fait analogue à un gaz parfait classique [4].

Le traitement semi-classique de transport nécessite les conditions physiques suivantes :

- ❖ Les interactions ou les corrélations entre particules doivent être faibles.
- ❖ Il faut tout d'abord que la répartition des niveaux d'énergie soit continue ou que la différence entre niveaux voisins soit beaucoup plus faible que quelque $k_B T$.
- ❖ Le temps moyen entre les interactions de collision, doit être grand par rapport à \hbar / E , (E l'énergie de l'état de la particule) de façon que l'énergie de l'état soit bien définie.
- ❖ La variation spatiale des champs appliqués doit être faible sur une distance égale au libre parcours.
- ❖ La variation temporelle des champs doit être négligeable pendant le temps d'une collision.

II. 1. Présentation de l'équation de Boltzmann

A l'équilibre, les porteurs de charge peuplent les bandes d'énergie en suivant une statistique de Fermi-Dirac. En présence d'un champ électrique, cet équilibre est perturbé : Les porteurs sont accélérés par le champ selon la relation fondamentale de la dynamique. Cependant, ils appartiennent à un réseau cristallin, et y subissent des interactions.

Dans le réseau réciproque, ces phénomènes limitant le transport sont régis 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.

II.1 .1. Généralités sur l'équation de Boltzmann

Soit $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ la fonction de distribution des électrons dans le semi-conducteur. Cette fonction que l'on appelle également fonction de répartition, est définie comme étant le nombre de particules de vecteur d'onde $\vec{k} + d\vec{k}$ près, situées en $\vec{r} + d\vec{r}$ près au temps t .

En d'autres termes, le nombre de particules situées dans le volume $(\vec{r}, d^3\vec{r})$ ayant le vecteur d'onde $(\vec{k}, d^3\vec{k})$ au temps t s'écrit [4]:

$$dN(\vec{r}, \vec{k}, t) = f(\vec{r}, \vec{k}, t) d^3\vec{k} d^3\vec{r} \quad (\text{I.7})$$

De même, la densité de particules se trouvant en \vec{r} au temps t est donnée par l'expression:

$$n(\vec{r}, t) = \int f(\vec{r}, \vec{k}, t) d^3\vec{k} \quad (\text{I.8})$$

Dans le cadre d'une étude du comportement électronique des porteurs de charges, si la fonction de distribution est la clef de voûte du problème, elle n'en reste pas moins sa plus grande inconnue.

Aussi fait-elle l'objet de nombreuses méthodes de calcul numérique (dérive-diffusion, hydrodynamique, Monte Carlo, résolution directe de l'équation de Boltzmann) cherchant à approcher la solution de l'équation décrivant l'évolution de la fonction de distribution et par là même le transport électronique: l'équation de Boltzmann.

Puisque cette équation régit le transport électronique, nous allons l'explicitier. Pour ce faire, nous considérons un gaz de porteurs de charges soumis à un champ électrique \vec{E} . Ces porteurs se mouvant dans un réseau cristallin, ils interagissent avec celui-ci et subissent par conséquent, en plus de la force électrique, diverses collisions [4]:

La variation dans le temps de la fonction de distribution est due à la fois à l'action du champ électrique \vec{E} sur les porteurs et aux effets des collisions.

Pour comprendre ce qu'il se passe, aidons-nous de la figure I.1 schématisant l'espace des phases. En l'absence de collisions [figure I.1 (a)], l'ensemble des porteurs contenus dans la cellule de volume $d^3\vec{r}d^3\vec{k}$ à l'instant t se retrouvent dans la cellule de volume $d^3\vec{r}'d^3\vec{k}'$ à l'instant $t + dt$.

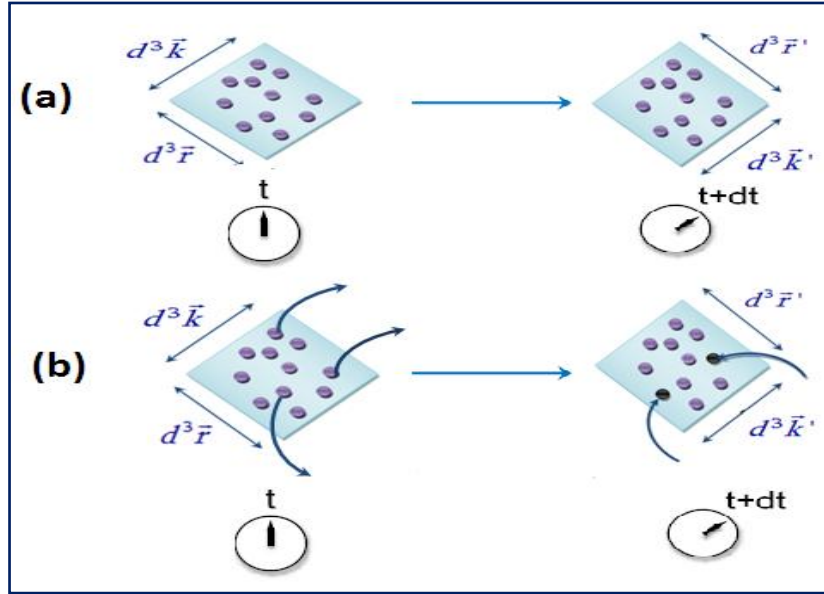


Figure I. 1 : Si l'on ne prend pas en compte les collisions (a), l'ensemble des porteurs situés dans la cellule de départ de volume $d^3\vec{r}d^3\vec{k}$ à l'instant t se retrouvent à l'instant $t+dt$ dans la cellule d'arrivée de volume $d^3\vec{r}'d^3\vec{k}'$. Ce n'est plus le cas lorsque l'on prend en compte les collisions (b) puisque celles-ci peuvent, pendant l'intervalle de temps dt , dérouter des porteurs de la cellule de départ (bleus) et amener des porteurs "étrangers" (noirs) dans la cellule d'arrivée.

Les vecteurs \vec{r} et \vec{r}' ainsi que \vec{k} et \vec{k}' sont liés par les relations :

$$\vec{r}' = \vec{r} + d\vec{r} = \vec{r} + \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} dt \tag{I.9}$$

$$\vec{k}' = \vec{k} + d\vec{k} = \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} dt \tag{I.10}$$

L'assertion précédente se traduit par :

$$f\left(\vec{r} + \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} dt, \vec{k} + \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} dt, t + dt\right) d^3 \vec{r}' d^3 \vec{k}' - f(\vec{r}, \vec{k}, t) d^3 \vec{r} d^3 \vec{k} = 0 \quad (\text{I.11})$$

En développant cette expression au premier ordre, il vient que :

$$\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} + \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} \cdot \frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial \vec{r}} + \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} \cdot \frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial \vec{k}} = 0 \quad (\text{I.12})$$

Avec:

$$\frac{\partial}{\partial \vec{r}} = \vec{\nabla}_r \quad \text{et} \quad \frac{\partial}{\partial \vec{k}} = \vec{\nabla}_k \quad (\text{I.13})$$

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial t} = \vec{v} \quad \text{et} \quad \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} = \frac{1}{\hbar} \vec{F} \quad (\text{I.14})$$

En remplaçant ces grandeurs dans l'équation (I.12), on obtient l'équation de Boltzmann pour le cas sans collisions, donnée par :

$$\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} + \vec{v} \vec{\nabla}_r f(\vec{r}, \vec{k}, t) + \frac{\vec{F}}{\hbar} \vec{\nabla}_k f(\vec{r}, \vec{k}, t) = 0 \quad (\text{I.15})$$

Prenons maintenant en compte des collisions [figure I.1 (b)]. Dans ce cas, il peut arriver que des particules initialement contenues dans la cellule de volume $d^3 \vec{r} d^3 \vec{k}$ n'arrivent pas à bon port ou que des particules ne se trouvant pas dans cette cellule à l'instant t soient présentes à l'instant $t + dt$ dans la cellule de volume $d^3 \vec{r}' d^3 \vec{k}'$.

Le nombres de particules au départ et à l'arrivée peuvent alors différer, et il convient de réécrire l'équation (I.15) correctement.

On obtient alors l'équation de Boltzmann pour la fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$:

$$\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} + \vec{v} \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{k}, t) + \frac{\vec{F}}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f(\vec{r}, \vec{k}, t) = \left(\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} \right)_{coll} \quad (\text{I.16})$$

Où

$$\vec{F}(\vec{r}, t) = e \left[\vec{E}(\vec{r}, t) + \vec{v} \wedge \vec{B}(\vec{r}, t) \right] : \text{C'est la force de Lorentz.}$$

$\left(\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} \right)_{coll}$: Appelé intégrale de collision, caractérise l'effet des collisions de toute nature (impuretés, phonons...) des porteurs avec le milieu.

Les électrons sont des fermions, donc la fonction de distribution globale est celle de Fermi-Dirac:

$$f_0(\varepsilon_k) = \left[1 + \exp \frac{\varepsilon_k - \mu}{kT} \right]^{-1} \quad (\text{I.17})$$

Avec μ , le potentiel chimique (ou niveau de Fermi).

II.1. 2. L'intégrale de collision

La détermination de l'intégrale de collision issue du terme $\left(\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} \right)_{coll}$ constitue une difficulté majeure dans la résolution de l'équation de Boltzmann. Il s'agit de déterminer à l'instant t et à la position \vec{r} les probabilités d'interactions qui provoquent le passage d'un état initial de vecteur d'onde \vec{k} vers un autre état \vec{k}' ainsi que de celles permettant de passer d'un état \vec{k}' vers l'état \vec{k} [5].

En tenant compte de ces deux possibilités et en sommant sur toutes les transitions possibles, on peut écrire l'intégrale de collision sous la forme suivante:

$$\left(\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} \right)_{coll} = \sum_{k', i} \left[S_i(\vec{k}', \vec{k}) f(\vec{r}, \vec{k}', t) [1 - f(\vec{r}, \vec{k}, t)] - S_i(\vec{k}, \vec{k}') f(\vec{r}, \vec{k}, t) [1 - f(\vec{r}, \vec{k}', t)] \right] \quad (\text{I.18})$$

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}' et $[1 - f(\vec{r}, \vec{k}, t)]$ 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}' .

II.1.3. Equation de Boltzmann dans l'approximation du temps de relaxation

Du fait de sa forme intégral-différentielle, une résolution analytique de cette équation est tout simplement utopique, à part dans un nombre extrêmement restreint de cas particuliers.

Une possibilité permettant de simplifier considérablement la résolution de l'équation de Boltzmann, consiste alors à utiliser l'approximation du temps de relaxation.

Il s'agit de supposer que le seul effet des collisions sur la distribution des porteurs est la restauration d'une situation d'équilibre local décrite par la fonction de distribution $f^{(0)}(\vec{r}, \vec{k}, t)$ [6].

$$f^{(0)}(\vec{r}, \vec{k}, t) = \left[1 + \exp \frac{\varepsilon_k - \mu(\vec{r}, t)}{K_B T} \right]^{-1} \quad (\text{I.19})$$

Cette relaxation de la fonction de distribution est supposée se faire de façon exponentielle, de sorte que l'on définit un temps de relaxation τ vérifiant la relation :

$$\left(\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} \right)_{coll} = - \frac{f(\vec{r}, \vec{k}, t) - f^{(0)}(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\tau(k)} \quad (\text{I.20})$$

Le temps de relaxation $\tau(k)$ dépend du vecteur d'onde \vec{k} (ou de l'énergie ε_k); cette dépendance est liée aux mécanismes de collisions.

II.2. Mécanismes de collisions

La dynamique d'un électron se déplaçant dans un réseau cristallin est influencée par les forces extérieures telles que le champ électrique mais aussi le potentiel coulombien engendré par les ions du réseau.

D'après la théorie de Bloch et l'approximation de l'électron indépendant, un électron se trouvant dans un réseau d'ions parfaitement périodique ne subit aucune collision.

Cependant, une perturbation du potentiel périodique de quelque manière que ce soit est pour l'électron une source de collisions à même de modifier sa vitesse et son énergie.

Les différents types de collisions peuvent être classés en deux grands groupes :

- ❖ Les collisions avec les impuretés et les défauts :

Les impuretés et les défauts cristallographiques tels que les joints de grains, les dopants, les lacunes, les dislocations, etc. Correspondent à des altérations localisées de la périodicité du réseau cristallin. De fait, ils forment des centres de diffusion locaux loin desquels les probabilités de transitions électroniques deviennent négligeables.

- ❖ Les collisions avec le réseau cristallin :

Même si un réseau cristallin parfaitement périodique ne comportait aucun défaut localisé tels que ceux précédemment énoncés, cela n'impliquerait pas pour autant l'absence totale de processus de collision. En effet, sous l'effet de la température, les ions occupant les nœuds du réseau s'agitent et vibrent, provoquant une déformation du réseau cristallin et par conséquent des variations quasi-instantanées du potentiel électrique en tout point du réseau.

En ce sens, les collisions avec le réseau cristallin ne sont pas localisées, contrairement aux collisions avec les impuretés.

Remarquons que dans les composés binaires ou ternaires, les différents nœuds du réseau sont occupés par des ions de charges différentes qui en oscillant, ajoutent une composante piézoélectrique aux effets de la déformation sur le potentiel électrique.

II. 2. 1. Calcul des probabilités d'interaction des porteurs avec le réseau et les défauts du réseau

Lorsqu'un électron se déplace dans un cristal, il peut entrer en interaction avec les charges électriques présentes, atome d'impureté ou autre porteurs, au cours de ces interactions le vecteur d'onde de l'électron passe de l'état \vec{k} à l'état \vec{k}' la probabilité d'interaction $\lambda(k)$ par unité de temps s'obtient en intégrant la densité de probabilité de $S(\vec{k}, \vec{k}')$ de passage de l'état \vec{k} à un état \vec{k}' .

Si β est l'angle entre \vec{k} et \vec{k}' , cette probabilité s'écrit :

$$\lambda(k) = 2\pi \frac{V}{8\pi^3} \int_0^\pi \left[\int_0^\infty S(\vec{k}, \vec{k}') \cdot k'^2 dk' \right] \sin \beta d\beta \quad (\text{I.21})$$

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

Dans un premier temps, l'intégration se fait par rapport au module k' ; grâce aux relations entre vecteur d'onde et énergie.

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon) \quad \text{et} \quad \frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} = \varepsilon'(1 + \alpha\varepsilon') \quad (\text{I.22})$$

(Où α désigne le coefficient de non parabolicité)

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

$$\lambda(k) = c_\varepsilon \int_0^\pi P_\varepsilon(\beta') d\beta' \quad (\text{I.23})$$

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

Ensuite, il s'agit de résoudre l'intégration suivante (l'équation (I.21)), en fonction du paramètre r tiré au hasard, entre 0 et 1; pour obtenir un angle de déviation β suivant la distribution $p_\varepsilon(\beta)$.

$$\int_0^\beta p_\varepsilon(\beta') d\beta' = r \int_0^\pi p_\varepsilon(\beta') d\beta \quad (\text{I.24})$$

II.2.2. Description générale des interactions 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 ε . Après collision, ces grandeurs deviennent \vec{k}' et ε' .

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 [7]:

$$\begin{cases} \varepsilon' = \varepsilon \pm \hbar\omega_j(q) \\ \vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q} \end{cases} \quad (\text{I.25})$$

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 intravallées: 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 intervallées: Par exemple, si on considère 3 vallées (Γ , X et L), ces transitions provoquent le passage de l'électron d'une vallée à une autre qui peut être équivalente à la première transition ($X \rightarrow X$ ou $L \rightarrow L$) ou non équivalent ($\Gamma \rightarrow X$, $\Gamma \rightarrow L$ ou $X \rightarrow L$). 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 $S_j(\vec{k}, \vec{k}')$ 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 :

$$\lambda(\vec{k}) = \int_{\substack{\text{sur tous les états} \\ \text{k' possibles}}} S_j(\vec{k}, \vec{k}') . d^3 k' \quad (\text{I.26})$$

II. 2. 3. 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.

II. 2. 3. 1. Interactions acoustiques

Ces interactions sont élastiques et très importantes dans les vallées latérales. Leurs effets sont souvent masqués par les interactions intervallées 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 [8].

La densité de probabilité s'écrit :

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} . B_{ac}(\vec{k}, \vec{k}') . N_{ac} . \delta(\varepsilon(k') - \varepsilon(k)) \quad (\text{I.27})$$

$$\text{Avec } \begin{cases} B_{ac}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\hbar}{2\rho sV} E_{ac}^2 |\vec{k}' - \vec{k}| G(\vec{k}, \vec{k}') \\ N_a = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar S \cdot |\vec{k} - \vec{k}'|}{k_B T}\right) - 1} \approx \frac{k_B T}{\hbar S \cdot |\vec{k} - \vec{k}'|} = \frac{k_B T}{\hbar \omega_q} \end{cases} \quad (\text{I.28})$$

$G(\vec{k}, \vec{k}')$ est toujours la même relation; 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; ρ est la masse volumique du matériau.

L'intégration sur l'énergie donne :

$$\lambda_{ac}(\varepsilon) = \frac{k_B T \Xi_a^2 m^{*3/2}}{\rho S^2 \hbar^4 \pi \sqrt{2}} \delta^{1/2}(\varepsilon) \int_0^\pi (1 + \alpha\varepsilon + \alpha\varepsilon \cos \beta)^2 \sin \beta d\beta \quad (\text{I.29})$$

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

$$\lambda_{ac}(\varepsilon) = \frac{k_B T \Xi_a^2 (2m)^{*3/2} \delta^{1/2}(\varepsilon)}{2\pi \rho S^2 \hbar^4} \cdot \frac{[(1 + \alpha\varepsilon)^2 + (\alpha\varepsilon)^2 / 3]}{1 + 2\alpha\varepsilon} \quad (\text{I.30})$$

$$\text{Avec } \quad \delta(\varepsilon) = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon) \quad \text{et} \quad \delta(\varepsilon') = \varepsilon'(1 + \alpha\varepsilon'). \quad (\text{I.31})$$

L'expression (I.29) fait apparaître la fonction de distribution de l'angle β . Après tirage au sort d'un réel r compris entre 0 et 1 l'angle β s'obtient en résolvant l'équation :

$$r \times \int_0^{\pi} (1 + \alpha\varepsilon + \alpha\varepsilon \cos \beta)^2 \sin \beta . d\beta = \int_0^{\beta} (1 + \alpha\varepsilon + \alpha\varepsilon \cos \beta')^2 \sin \beta' . d\beta' \quad (\text{I.32})$$

On trouve alors:

$$\left[\cos \beta = \frac{\left((1 + 2\alpha\varepsilon)^3 \times (1 - r) + r \right)^{1/3} - 1}{\alpha\varepsilon} - 1 \right] \quad (\text{I.33})$$

La plupart du temps $\alpha\varepsilon$ est négligeable devant 1.

II.2.3.2. Interactions piézoélectriques

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 [9].

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

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{e^2 . k_B T . P_{pi}^2 . G(\vec{k}, \vec{k}')}{4\pi^2 \varepsilon_0 \varepsilon_S \hbar |\vec{k} - \vec{k}'|^2} \delta(\varepsilon(k) - \varepsilon(k')) \quad (\text{I.34})$$

P_{pi}^2 est le potentiel piézoélectrique qui est un coefficient sans dimension, et qui s'exprime en fonction des constantes piézoélectriques connues C_{11} , C_{12} , C_{44} et h_{14} par la relation :

$$P_{pi}^2 = h_{14}^2 \cdot \varepsilon_0 \varepsilon_S \frac{1}{35} \left(\frac{12}{c_l} + \frac{16}{c_t} \right) \quad \text{Où} \quad \begin{cases} c_l = \frac{3c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44}}{5} \\ c_t = \frac{c_{11} - c_{12} + 3c_{44}}{5} \end{cases} \quad (\text{I.35})$$

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

$$\lambda(k) = \frac{e^2 . k_B T . P^2 . (m^*)^{1/2}}{4\sqrt{2}\pi\varepsilon_0\varepsilon_S \hbar^2 (1 + 2\alpha\varepsilon) \delta(\varepsilon)^{1/2}} \int_0^{\pi} \frac{(1 + \alpha\varepsilon + \alpha\varepsilon . \cos \beta)^2 \sin \beta d\beta}{1 - \cos \beta} \quad (\text{I.36})$$

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

L'intégrale sur β présente une indétermination à l'origine. Cette difficulté est purement mathématique; car $\lambda(\varepsilon) \rightarrow \infty$ 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:

$$\lambda_{pi}(\varepsilon) = \frac{e^2 \cdot k_B T \cdot P_{pi}^2 \cdot (m^*)^{1/2}}{4\sqrt{2} \cdot \pi \cdot \hbar^2 \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_S \cdot \delta(\varepsilon)^{1/2}} \times \frac{I}{(1 + 2\alpha\varepsilon)} \quad (\text{I.37})$$

Avec :

$$I = (1 + 2\alpha\varepsilon)^2 \ln\left(\frac{2}{1 - \cos a}\right) - 2\alpha\varepsilon(1 + 2\alpha\varepsilon)(1 + \cos a) + \frac{\alpha^2 \varepsilon^2}{2} (4 - (1 - \cos a)^2) \quad (\text{I.38})$$

L'équation (I.36) met en évidence la fonction de distribution de l'angle β . Après avoir tiré un nombre réel r compris entre 0 et 1, l'angle de déviation β est obtenu en

$$r = \frac{1}{I} \int_a^\beta \frac{(1 + \alpha\varepsilon + \alpha\varepsilon \cdot \cos \beta')^2}{1 - \cos \beta'} \sin \beta' d\beta' \quad (\text{I.39})$$

Et l'on obtient alors:

$$\begin{aligned} & \frac{\alpha^2 \varepsilon^2}{2} [(1 - \cos \beta)^2 - (1 - \cos a)^2] - 2\alpha\varepsilon(1 + 2\alpha\varepsilon)[(1 - \cos \beta) - (1 - \cos a)] \\ & + (1 + 2\alpha\varepsilon)^2 \times \ln\left(\frac{1 - \cos \beta}{1 - \cos a}\right) - r \times I = 0 \end{aligned} \quad (\text{I.40})$$

C'est une équation qui n'admet pas de solution analytique simple. Elle est résolue numériquement par une méthode de dichotomie initialisée à la valeur la plus probable $\beta=a$.

II. 2. 3. 3. Interaction avec les impuretés ionisées

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

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

L'interaction avec les impuretés est une interaction élastique dont la probabilité est indépendante de la concentration en impuretés; celle-ci n'intervient que dans l'expression de la distribution de l'angle β de déviation qui se réduit à une fonction de Dirac $\delta(\beta)$.

Pour une concentration en impuretés $N_D=0$; l'effet de l'interaction est alors nul. Cette distribution tend à être uniforme quand le dopage est élevé, contribuant dans ce cas à diminuer d'autant plus la vitesse moyenne de l'électron [10].

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

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

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{32\pi^3 e^4 N_D}{(4\pi\epsilon_0\epsilon_s)^2 \hbar V} \frac{G(\vec{k}, \vec{k}')}{\left(|\vec{k} - \vec{k}'| + \theta^2\right)^2} \delta(\epsilon(k') - \epsilon(k)) \quad (\text{I.41})$$

Dans cette expression N_D est la concentration en impureté et θ est l'inverse de la distance d'écran. Elle est liée à la concentration en impuretés par :

$$\theta^2 = \frac{e^2 N_D}{\epsilon_0 \epsilon_s k_B T} \quad (\text{I.42})$$

Après intégration sur l'énergie, la probabilité d'interaction s'écrit :

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{e^4 N_D m^{*3/2} \delta(\varepsilon)^{1/2}}{\sqrt{2\pi} (\varepsilon_0 \varepsilon_s)^2 \hbar^4} \int_0^\pi \frac{(1 + \alpha\varepsilon + \alpha\varepsilon \cos \beta)^2}{(2k^2 (1 - \cos \beta) + \theta^2)^2} \sin \beta d\beta \quad (\text{I.43})$$

Qui devient après intégration complète:

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{e^2 N_D m^{*1/2} k_B T}{4\sqrt{2\pi} \varepsilon_0 \varepsilon_s \hbar^2} \cdot \frac{1 + 2\alpha\varepsilon}{\delta(\varepsilon)^{1/2}} \quad (\text{I.44})$$

II. 2. 4. Interactions inélastiques

Ces interactions sont dues essentiellement aux transitions intervallées, qui permettent le transfert des porteurs d'une vallée à une autre vallée équivalente ou non-équivalente; elles sont accompagnées d'absorption ou d'émission d'un phonon intervallée dont la valeur dépend de la vallée de départ et de la vallée d'arrivée [10].

Une interaction intervallée 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.

II. 2. 4. 1. Interaction optique polaire

Ce sont des interactions très importantes dans toutes les vallées. L'énergie du phonon $\hbar\omega_0$ 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 :

$$\varepsilon' = \varepsilon \pm \hbar\omega_0 \quad (\text{I.45})$$

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

$$S_0(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot B_0(\vec{k}, \vec{k}') \cdot \left[N_0 + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right] \cdot \delta(\varepsilon(k') - \varepsilon(k) \pm \hbar\omega_0) \quad (\text{I.46})$$

$$\begin{cases} B_0(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi e^2 \hbar \omega_0}{4\pi \epsilon_0 |\vec{k} - \vec{k}'|^2} \cdot \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) G(\vec{k}, \vec{k}') \\ N_0 = [\exp(\hbar \omega_0 / k_B T) - 1]^{-1} \end{cases} \quad (\text{I.47})$$

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. ϵ_s et ϵ_∞ 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 :

$$\epsilon'(1 + \alpha \epsilon') = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad \delta(\epsilon) = \epsilon(1 + \alpha \epsilon) \quad \text{et} \quad \delta(\epsilon') = \epsilon'(1 + \alpha \epsilon') \quad (\text{I.48})$$

On intègre immédiatement sur ϵ' compte tenu des propriétés de la fonction de Dirac, et l'on trouve :

$$\begin{aligned} \lambda(\epsilon) &= \frac{e^2 m^{*1/2} \omega_0}{\sqrt{2} \hbar 4\pi \epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \frac{\sqrt{\delta(\epsilon)}}{1 + 2\alpha \epsilon} \cdot \left[N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \\ &\times \int_0^\pi \frac{(\sqrt{1 + \alpha \epsilon} \sqrt{1 + \alpha \epsilon'} + \alpha \sqrt{\epsilon \epsilon'} \cos \beta)^2}{\delta(\epsilon) + \delta(\epsilon') - 2 \cos \beta \sqrt{\delta(\epsilon') \cdot \delta(\epsilon)}} \sin \beta d\beta \end{aligned} \quad (\text{I.49})$$

Après intégration sur l'angle β on trouve les résultats suivants

$$\text{Où} \quad \left[\lambda(\epsilon) = \frac{e^2 m^{*1/2} \omega_0}{\sqrt{2} \hbar 4\pi \epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \cdot \frac{1 + 2\alpha \epsilon'}{\sqrt{\gamma(\epsilon)}} \cdot F(\epsilon, \epsilon') \cdot \left[N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \right] \quad (\text{I.50})$$

$$F(\epsilon, \epsilon') = \frac{1}{C} \left(A \cdot \ln \left| \frac{\gamma^{1/2}(\epsilon) + \gamma^{1/2}(\epsilon')}{\gamma^{1/2}(\epsilon) - \gamma^{1/2}(\epsilon')} \right| + B \right) \quad (\text{I.51})$$

Avec

$$\begin{cases} A = [2.(1+\alpha\varepsilon).(1+\alpha\varepsilon') + \alpha(\gamma(\varepsilon) + \gamma(\varepsilon'))]^2 \\ B = -2\alpha\sqrt{\gamma(\varepsilon).\gamma(\varepsilon')}.[4(1+\alpha\varepsilon).(1+\alpha\varepsilon') + \alpha(\gamma(\varepsilon) + \gamma(\varepsilon'))] \\ C = 4(1+\alpha\varepsilon).(1+\alpha\varepsilon').(1+2\alpha\varepsilon).(1+2\alpha\varepsilon') \end{cases} \quad (\text{I.52})$$

L'équation (I.49) fait apparaître la fonction $p_\varepsilon(\beta)$ de la distribution de l'angle β qui peut s'écrire :

$$P_\varepsilon(\beta) = \frac{(\sqrt{1+\alpha.\varepsilon}\sqrt{1+\alpha.\varepsilon'} + \alpha\sqrt{\varepsilon\varepsilon'}\cos\beta)^2}{\delta(\varepsilon) + \delta(\varepsilon') - 2\cos\beta\sqrt{\delta(\varepsilon).\delta(\varepsilon')}} \cdot \sin\beta \quad (\text{I.53})$$

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

$$\int_0^\beta p_\varepsilon(\beta') d\beta' = r \int_0^\beta p_\varepsilon(\beta') d\beta' \quad (\text{I.54})$$

La solution de cette équation intégrale donne

$$\cos\beta = \frac{1+f - (1+2f)^r}{f} \quad (\text{I.53})$$

Avec :

$$f = \frac{2\sqrt{\varepsilon\varepsilon'}}{(\sqrt{\varepsilon} - \sqrt{\varepsilon'})^2} \quad (\text{I.54})$$

II. 2. 4. 2. Interaction optique non polaire

Cette interaction n'intervient que dans les vallées de symétrie L du modèle 3 vallées. Ses effets sur l'état de l'électron sont comparables à ceux d'une interaction intervallée équivalente mais sa probabilité est très faible [10].

La probabilité de transition d'un état \vec{k} à un état \vec{k}' a la même expression que pour l'interaction intervallées équivalentes à ceci près que le nombre de vallées Z_j est remplacé par 1; que le phonon échangé est un phonon optique, et que le potentiel de déformation intervallées est remplacé par un potentiel de déformation optique.

La densité de probabilité s'écrit comme celle des interactions intervallées avec

($i = j$), le traitement de cette interaction est similaire à celui des interactions intervallées que l'on verra plus loin.

II. 2. 4. 3. Interactions intervallées 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. Ces interactions exigent que l'énergie après interaction soit supérieure à l'énergie du fond de la vallée d'accueil [9].

$$\varepsilon_i \pm \hbar W_{ij} + \Delta_i \Delta_j \geq 0 \quad (\text{I.55})$$

Δ_i est l'écart d'énergie entre les bas de la vallée de départ Γ et de la vallée d'arrivée X.

Δ_j est l'écart d'énergie entre les bas de la vallée de départ Γ et de la vallée d'arrivée L.

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

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 \vec{k} à l'état \vec{k}' , permettant le transfert de la vallée i vers la vallée j équivalente ou non, s'écrit:

$$S_{ij}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} B_{ij}(\vec{k}, \vec{k}') \left[N_{ij} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \delta(\varepsilon_j(k') - \varepsilon_i(k) + \Delta_j - \Delta_i \pm \hbar\omega_{ij}) \quad (\text{I.56})$$

Où

$$B_{ij}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{Z_j \hbar \Xi_{ij}^2}{2\rho\omega_{ij}V} \sum_k G_{ij}(\vec{k}, \vec{k}') \quad (\text{I.57})$$

Avec

$$G_{ij}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{(1 + \alpha_i \varepsilon_i(k)) \cdot (1 + \alpha_j \varepsilon_j(k'))}{(1 + 2\alpha_i \varepsilon_i(k)) \cdot (1 + 2\alpha_j \varepsilon_j(k'))} \quad (\text{I.58})$$

Et

$$N_{ij} = \left[\exp(\hbar\omega_{ij} / k_B T) - 1 \right]^{-1} \quad (\text{I.59})$$

Dans ces expressions, $\hbar\omega_{ij}$ représente l'énergie des phonons échangés, Δ_i et Δ_j sont les énergies relatives aux fonds des vallées i et j , ε_i et ε_j sont les énergies relatives dans chaque vallée, α_i et α_j les coefficients de non parabolicité, Z_{ij} le nombre de vallée d'arrivée de type j quand on part de la vallée i et E_{ij} le potentiel de déformation intervallée entre la vallée i et la vallée j , ρ désigne la masse volumique du matériau.

L'intégration sur tous les états finaux \vec{k}' conduit à :

$$\left[\lambda_{ij}(\varepsilon) = \frac{Z_j m_j^{*2} \Xi_{ij}^2}{\sqrt{2\pi\rho\omega_{ij}} \hbar^3} \gamma_j(\varepsilon') (1 + 2\alpha_j \varepsilon') \cdot F_{ij}(\varepsilon', \varepsilon) \cdot \left[N_{ij} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \right] \quad (\text{I.60})$$

Où:

$$F_{ij}(\varepsilon', \varepsilon) = G_{ij}(\vec{k}, \vec{k}') \quad (\text{I.61})$$

Et:

$$\varepsilon_j' = \varepsilon_i + \Delta_j - \Delta_i \pm \hbar\omega_{ij} \quad (\text{I.62})$$

Il est à remarquer que comme $s(\vec{k}, \vec{k}')$ ne dépend pas de l'angle β de déviation, sur la sphère représentative de l'énergie finale, tous les états \vec{k}' sont équiprobables.

L'angle β est alors obtenue en tirant au hasard un réel r entre 0 et 1 tel que :

$$r = \int_0^\beta \frac{\sin \beta \cdot d\beta}{2} \quad (\text{I.63})$$

Soit

$$[\cos \beta = 1 - 2r]$$

II.2.4.4. Interactions d'alliage

Dans les matériaux ternaires ou binaires, à l'échelle microscopique, la stœchiométrie du réseau n'est pas respectée: le potentiel cristallin est perturbé, perturbation prise en compte par le potentiel d'alliage. Le modèle le plus utilisé est celui de Harrison qui repose sur le raisonnement suivant :

Un électron qui passe au voisinage d'un atome de type 2 sur un site normalement occupé par un atome de type 1 subit un potentiel E_{all} dont l'extension spatiale est r telle que

[10]:

$$E_{all} = \begin{cases} qU_{all} & \text{si } r \leq r_0 \\ 0 & \text{si } r > r_0 \end{cases} \quad (\text{I.64})$$

Où U_{all} est le potentiel d'alliage et q la charge de l'électron. L'extension spatiale r est définie comme la distance entre deux plus proches voisins.

La densité de probabilité de cette dernière est donnée par :

$$\lambda(k, k') = \frac{4q \cdot \Delta U^2}{\hbar r_0^3} \frac{[\sin(r_0 |k - k'|) - r_0 |k - k'| \cos(r_0 |k - k'|)]^2}{|k - k'|^6} G(k, k') \cdot \delta(\varepsilon, \varepsilon') \quad (\text{I.65})$$

Avec:

$$r_0 = a_0 \left[\frac{3}{16\pi} \right]^{1/3} \quad (\text{I.66})$$

ΔU : Le potentiel correspondant.

Pour un composé $A_{1-x}B_x$, ce potentiel est donné par Harrison :

$$\Delta U^2 = x(1-x) [\chi_A - \chi_B]^2 \quad (\text{I.67})$$

Où

χ_A et χ_B sont respectivement les affinités électroniques de A et B

II. 2. 4. 5. Phénomène d'ionisation par impact

L'ionisation par choc résulte de l'interaction de gaz d'électrons de la bande de conduction avec les électrons de la bande de valence.

Du point de vue microscopique, on peut modéliser ce phénomène par des collisions entre électron avec création de paire électron- trou comme le présente la figure I.2.

Les lois de conservation d'énergie et de quantité de mouvement s'appliquent alors à l'ensemble formé de la particule incidente et des particules générées.

L'énergie nécessaire à l'électron incident pour produire l'ionisation doit être au moins égale à une énergie supérieure à la bande interdite E_g du matériau semi conducteur. Cette énergie est appelée énergie de seuil.

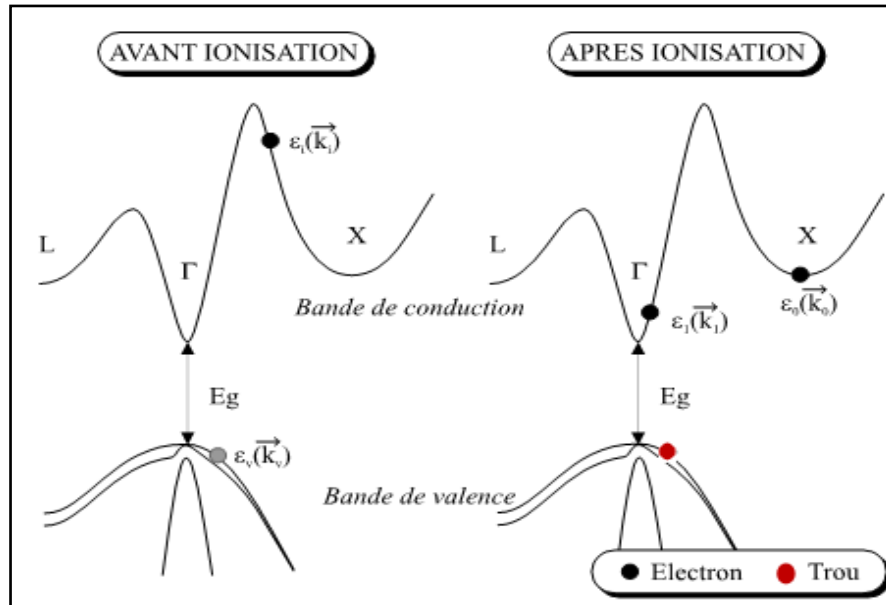


Figure I. 2 : Particules avant et après ionisation. Un électron libre de la bande de conduction entre en collision avec un électron de la bande de valence pour donner naissance à une paire électron-trou.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons exposé les phénomènes de transport dans un semi-conducteur soumis à un champ extérieur ou intérieur. Ils représentent les processus physiques accompagnant le mouvement des porteurs. L'étude de ces processus, fait appel à l'équation de Boltzmann.

Cette équation contient la fonction de distribution, la variation de cette équation au cours de temps se présente sous forme d'une somme de deux termes; celui du à l'action exercée par un champ extérieur et celui déterminé par les collisions.

Nous avons donc dans ce chapitre décrit la théorie de Boltzmann pour ces phénomènes de transport avec les différents processus de collision que peut subir un électron. La prépondérance de chaque type d'interaction varie en fonction de la nature du matériau et de la température.

Références bibliographiques

- [1] B. Sapoval, «Physique des semi-conducteurs », ellipses 1990.
- [2] J. Faist, Introduction à la physique du semi-conducteur, Institut de physique, Université de Neuchâtel, 2001
- [3] Y. Quéré, «Physique des matériaux», Ecole Polytechnique- ellipses, Paris, 1988.
- [4] P.A. Markawich C. A. Ringhofer and C Schmeiser: ‘‘semiconductor equations’’, Springer. Verlag, Wien-New York, 1990.
- [5] C. COHEN-TANNOUDJI et al. « Mécanique quantique », Hermann, Tome 2, 1996
- [6] C.Hamaguchi, “Basic semiconductor physics”, Springer-Verlag, Berlin (2001).
- [7] R.castagné, « Circuits intégrés en Arsenic de Gallium», Physique, technologie et conception, édition Masson, Mars 1989.
- [8] B. K Ridely, J Phys. C: Solid State Phys. 15, 5899 (1982).
- [9] M.E. Levinshtein et al, « Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, SiC, BN, SiC, SiGe». (John Wiley Sons, Inc., New York, pp. 93–148, 2001).
- [10] M. T. Yin and M. L. Cohen, Phys. Rev. B26, 5668 (1982).

Chapitre 2

Introduction

Il existe un grand nombre de méthodes de simulation des propriétés électroniques des matériaux et dispositifs, parmi lesquelles figurent en bonne place les modèles physiques particuliers.

Ceux-ci traitent en général le transport de manière "exacte" et offrent la possibilité d'une analyse fine du fonctionnement des composants. La modélisation par la méthode de Monte Carlo en fait partie et c'est elle que nous avons employée dans notre étude.

De très nombreux secteurs scientifiques et technologiques ont désormais adopté ce type d'approche connue sous le nom « méthode Monte Carlo ». C'est en fait la puissance accrue des ordinateurs qui a permis à ces méthodes de devenir opérationnels et de se répandre dans des secteurs aussi variés tels que la physique, la biologie moléculaire et génétique, les télécommunications, les réseaux, la recherche opérationnelle, la finance, et bien d'autres encore.

I. la méthode de Monte Carlo

I. 1. Définition :

La méthode de Monte Carlo est une méthode numérique statistique de simulation utilisée pour résoudre des problèmes mathématiques. Elle est basée sur des procédés aléatoires; c'est-à-dire des techniques probabilistes. Le nom de cette méthode, qui fait allusion aux jeux de hasard pratiqué au casino de Monte Carlo de Monaco, a été inventé en 1947 par Nicholas Metropolis.

La méthode Monte Carlo connaît des applications très nombreuses et diversifiées dans la résolution de problèmes mathématiques, physiques ou statistiques. Elle est souvent utilisée lorsque la solution mathématique recherchée n'est pas accessible par une méthode déterministe, ou encore lorsque les seules méthodes déterministes possibles sont construites sur des approximations jugées trop drastiques [1].

De façon plus précise, il apparaît que l'application des méthodes de Monte Carlo permet de se fixer un triple objectif:

- ❖ En facilitant l'étude des phénomènes de mobilité ou diffusion dans les matériaux, par la comparaison des résultats obtenus théoriquement avec les données expérimentales, on peut apporter des éléments utiles et nouveaux sur les mécanismes physiques qui déterminent la dynamique électronique dans un semi-conducteur.

- ❖ En permettant une étude précise des variations de la vitesse de dérive et du coefficient de diffusions en régimes stationnaires ou non, ces méthodes peuvent fournir les données de base nécessaires à la résolution numérique des composants, à partir des équations de l'électrocinétique.
- ❖ Les techniques de Monte Carlo permettent la simulation directe de certains de ces composants, et s'avère en définitive une méthode d'approche plus précise plus fiable et même parfois plus simple que les techniques numériques classiques [2]. Les qualités de la méthode se définissent par la rapidité de son exécution et sa souplesse d'emploi dans les diverses applications.

La méthode de Monte Carlo est basée sur un processus à tirages au sort à partir de lois de probabilités calculées préalablement et qui contiennent l'essentiel de la physique du transport. 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.
- ❖ Suivre le comportement de chaque électron au cours du temps.

I. 2. Génération d'un nombre aléatoire

La pierre angulaire de tout algorithme Monte Carlo est la génération de nombres aléatoires, c'est-à-dire des variables aléatoires [1,3].

Qu'est-ce que un nombre aléatoire?

On peut donner deux définitions pour le nombre aléatoire :

- a) **Définition conceptuelle:** Une séquence de nombres x_i est appelée aléatoire (*random*) si elle est égale à la séquence d'échantillons d'une variable aléatoire x .
- b) **Définition empirique:** Une séquence de nombres x_i est appelée aléatoire (*random*) si ses propriétés statistiques sont les mêmes que les propriétés d'une séquence de nombres obtenues dans une expérience aléatoire.

La définition empirique est une définition opérationnelle qui suggère une manière pratique pour répondre à la question si une séquence de nombres (par exemple générés par un ordinateur) est aléatoire.

Les nombres aléatoires peuvent être générés par les manières suivantes:

✓ **Observation d'expériences de nature aléatoire:**

- mesurer un dispositif physique qui présente certaine propriété stochastique (bruit d'une résistance, diode, etc....).
- observer les lancements d'une pièce équilibrée afin de générer une séquence aléatoire de 0 (pile) et 1 (face), extraire des billes d'une urne (loterie).

✓ **Par l'ordinateur:** Ceux ci sont appelés nombres *pseudo-aléatoires*, l'approche pseudo-aléatoire est souvent préférable puisque elle est plus rapide, plus facilement gérable et permet la contrôlabilité et la répétitivité de l'expérience si nécessaire.

Une des formules les plus utilisées pour engendrer des nombres pseudo-aléatoires r_i à distribution uniforme, est [4] :

$$X_i = aX_{i-1} + c \quad (\text{II.1})$$

Cependant, la périodicité de la séquence limite la validité du générateur de variable aléatoires, on a donc intérêt à ce que cette période soit très grande.

Pour cela, on prend $c = 0$ et $m = 2^N$ où N est généralement de l'ordre de 30 ou 40, les nombres obtenus ont une distribution uniforme. Pour obtenir ces nombres dans l'intervalle $[0, 1]$, on divise les x_i par $(m-1)$ et on obtient la relation d'échantillonnage suivante :

$$r_i = \frac{x_i}{m-1} = \frac{a}{m-1} x_{i-1} \quad (\text{II.2})$$

$$r_i \in [0, 1]$$

I. 3. Principe de la méthode Monte Carlo

Le principe de la méthode consiste à suivre au cours du temps un ou plusieurs électrons dans l'espace réel et dans l'espace des phases.

Chaque électron, caractérisé par son énergie \mathcal{E} et son vecteur d'onde \vec{k} , subit l'effet du champ électrique existant dans le matériau et interagit avec le réseau cristallin.

Il s'agit d'un processus itératif constitué de séries de vols libres entrecoupées d'interactions (figure II. 1) [5].

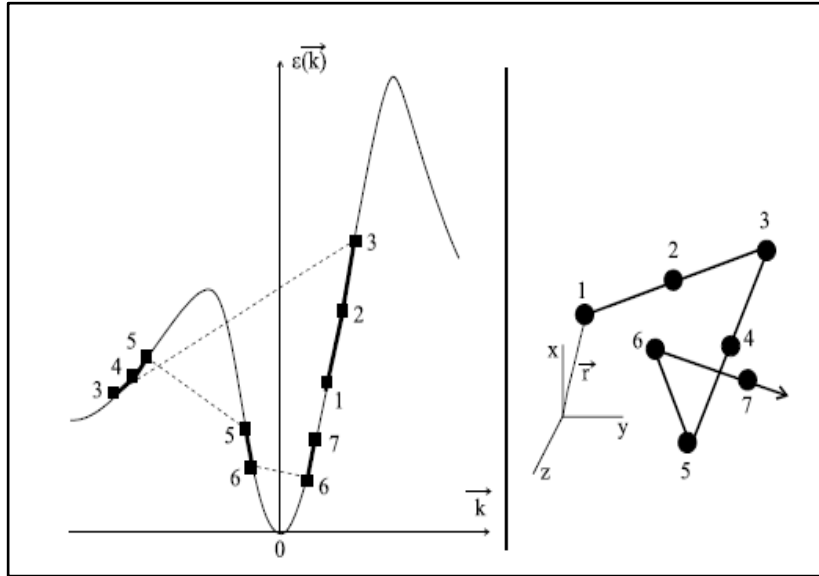


Figure II. 1: Transport de charge dans les semi-conducteurs. A l'évolution de la position et de la vitesse d'un électron dans l'espace réel (à droite) correspond une évolution de l'énergie dans l'espace réciproque (à gauche). Les électrons effectuent un vol libre à chaque pas de temps et subissent parfois des interactions (étapes 3,5 et 6).

Les échanges d'énergies et d'impulsion de l'électron avec le réseau cristallin, et la déviation de sa trajectoire par les impuretés vont modifier son énergie, son vecteur d'onde et sa position. En appliquant les lois de la mécanique et de l'électrodynamique, nous pouvons déterminer théoriquement le comportement de chaque électron dans le temps et dans l'espace des vecteurs d'onde.

Mais, une telle approche, compte tenu de la très grande densité d'atomes dans les cristaux, est totalement irréaliste avec les moyens de calcul, afin de ramener le problème à quelque chose de réaliste, on fait appel aux quatre hypothèses suivantes [6]:

❖ Nous faisons une étude statistique des échanges d'énergie possibles entre les électrons, les modes de vibrations du réseau et les impuretés, ce qui nous permet de calculer la probabilité de ces interactions et leur action sur l'énergie et le vecteur d'onde de l'électron. Chaque processus de collision a une densité $S(\vec{k}, \vec{k}')$ qui caractérise la probabilité pour qu'un électron passe de l'état défini par le vecteur d'onde \vec{k} à un autre état défini par le vecteur d'onde \vec{k}' , par unité de temps.

- ❖ Nous supposons que ces interactions sont instantanées, les électrons sont alors déplacés en vol libre sous le seul effet du champ électrique, entre deux chocs. Pour déterminer les temps de libre parcours Δt , où on tire au sort les nombres r à distribution uniforme entre 0 et 1.
- ❖ Lorsqu'une interaction a lieu, nous déterminons sa nature par tirage au sort, et nous modifions, en conséquence, l'énergie et le vecteur d'onde de l'électron calculée en conséquence.
- ❖ La répartition des électrons change; nous calculons alors le champ électrique qui en résulte à des intervalles de temps suffisamment petits, pour pouvoir le supposer constant entre deux calculs.

I. 4. Les différents éléments de la simulation

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

$$\frac{\partial \vec{k}}{\partial t} = \frac{q \vec{E}}{\hbar} \quad (\text{II.3})$$

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

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

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

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

Ainsi

$$p(t) = p(t - dt) \left[1 - \Gamma(\vec{k}(t - dt)) dt \right] \quad (\text{II.5})$$

En faisant tendre dt vers 0:

$$\frac{dp}{dt} = -\Gamma[\bar{k}(t)]p(t) \quad (\text{II.6})$$

Après intégration, on obtient:

$$p_n(t) = \exp\left\{-\int_0^t \Gamma(\bar{k}(t')) dt'\right\} \quad (\text{II.7})$$

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

$$p(t)dt = \Gamma(\bar{k}(t)) \exp\left\{-\int_0^t \Gamma(\bar{k}(t')) dt'\right\} dt \quad (\text{II.8})$$

La résolution de cette équation afin de générer la distribution du temps libre pour ces particules pour une simulation Monte Carlo standard, nous ramène à utiliser la technique de *self-scattering* que l'on décrira en paragraphe I.7.

I. 5. Mouvement des électrons [8]:

Durant son vol libre, l'électron se déplace dans l'espace réel et l'espace des vecteurs d'onde, sous l'action d'un champ électrique constant E (figure II. 2) [9]. L'évolution de son vecteur d'onde, suivant l'axe des x , est donnée par l'équation fondamentale de la dynamique :

$$k(t) = k(0) - \frac{e \cdot E}{\hbar} \cdot t \quad (\text{II.9})$$

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

$$\frac{\hbar^2 \cdot k^2(t)}{2m^*} = \varepsilon(t) \cdot (1 + \alpha \cdot \varepsilon(t)) \quad (\text{II.10})$$

d'où l'on tire son énergie :

$$\varepsilon(t) = \frac{1}{2\alpha} \left[\sqrt{1 + \frac{2\alpha \cdot \hbar^2 \cdot k^2(t)}{m^*}} - 1 \right] \quad (\text{II.11})$$

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

$$\mathbf{v}(t) = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\hbar \cdot \mathbf{k}(t)}{m^* (1 + 2\alpha \cdot \varepsilon(t))} \quad (\text{II.12})$$

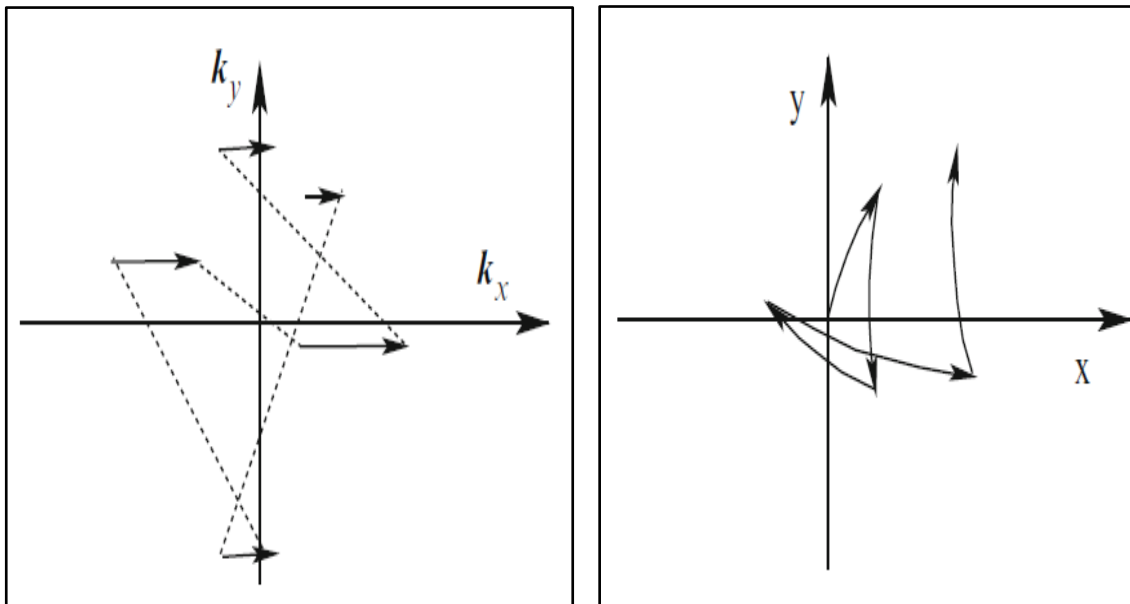


Figure II. 2: Mouvement d'un électron dans l'espace des vecteurs d'onde (à gauche), dans l'espace réel (à

I. 6. Calcul le temps de vol libre:

Le temps de vol libre c'est-à-dire le temps entre deux collisions successives.

Si $\lambda(k(t))\delta t$ est la probabilité pour qu'un électron ait une interaction entre t et $t + \delta t$, la probabilité p au temps t , pour que l'interaction ne se produise pas est donnée par [7]:

$$p_f(t) = \prod_i (1 - \lambda(k(t))\delta t) \quad (\text{II.13})$$

$$t = \sum_i \partial t_i \quad (\text{II.14})$$

Application du logarithme sur (II.13) donne :

$$\ln(p_f(t)) = \sum_i \ln(1 - \lambda[k(t)]\partial t_i) \quad (\text{II.15})$$

On sait que:

$$\ln(1 + x) \approx x, \quad x \ll 1 \quad (\text{II.16})$$

Donc la formule (II.15) devient:

$$\ln(p_f(t)) = -\sum_i \lambda[k(t)]\partial t_i \quad (\text{II.17})$$

Appliquons l'exponentiel sur (II.17):

$$\exp(p_f(t)) = \exp\left(-\sum_i \lambda[k(t)]\partial t_i\right) \quad (\text{II.18})$$

Ce qui donne:

$$p_f(t) = \exp\left(-\sum_i \lambda[k(t)]\partial t_i\right) \quad (\text{II.19})$$

On remplace la sommation par une intégrale:

$$P_f(t) = \exp\left(-\int_0^t \lambda[k(t)] \partial t_i\right) \quad (\text{II.20})$$

La probabilité pour que l'électron ait un vol libre pendant Δt est :

$$P(\Delta t) = \int_0^{\Delta t} \lambda[k(t)] \cdot \exp\left[-\int_0^t \lambda[k(t')] \partial t'\right] \partial t \quad (\text{II.21})$$

$$P(\Delta t) = \Gamma e^{-\Gamma \Delta t} \quad (\text{II.22})$$

C'est la probabilité (II.22) qui donnera les durées de vols libres qui seront effectivement suivis d'un choc. La procédure adoptée initialement par Kurosawa [10] pour déterminer les temps de libre parcours, consiste à tirer au hasard des nombres r à distribution uniforme entre 0 et 1, et de résoudre l'équation intégrale suivante:

$$\int_0^{\Delta t} \lambda[k(t)] \partial t = -Lnr \quad (\text{II.23})$$

Les formulaires d'analyse des taux de diffusion de $P(k)$ ne sont pas en général très simples, ce qui n'est pas pratique pour générer stochastique des durées de vol libre avec la distribution (II.22), ainsi si l'intégration analytique de l'expression (II.23) paraît impossible à réaliser, on peut éventuellement calculer numériquement cette valeur et la tabuler avant la simulation pour différentes valeurs du temps. Cependant, on préfère généralement éviter cette méthode, du fait de sa lourdeur [8].

Rees [9] a mis au point une méthode très simple pour surmonter cette difficulté. Il introduisait une interaction fictive supplémentaire dite *self-scattering* λ_{sc} qui est sans effet sur les porteurs.

I. 7. Méthode du Self Scattering:

La méthode de self scattering c'est une méthode qui consiste à introduire une interaction fictive supplémentaire qui est sans effet sur les porteurs, cette interaction permet de rendre constante la probabilité totale d'interaction [12] (figure II.3).

En posant:

$$\Gamma = \lambda_{sc} + \sum_i \lambda_i = \text{constante} \quad (\text{II.24})$$

Cette formule (II.24) permet d'écrire une expression simple pour $p(\Delta t)$:

$$p(\Delta t) = \Gamma e^{-\Gamma \Delta t} \quad (\text{II.25})$$

L'intégration apparaissant dans (II.23) est alors évidente et nous obtenons:

$$\Delta t = -\frac{1}{\Gamma} \ln r \quad (\text{II.26})$$

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

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

Etant donné que pour utiliser la relation (II.26) il faut se fixer à l'avance la valeur de Γ , il est nécessaire de connaître la valeur maximum que prendra la quantité $\sum_i \lambda_i$ dans la simulation envisagée.

Une fois la durée de vol libre Δt déterminée, on calcule l'ensemble des probabilités des interactions susceptibles de se produire à l'instant considéré. Comme l'on a nécessairement par définition:

$$\sum_{i=0}^N \lambda_i(\vec{k}) = \Gamma \quad (\text{II.27})$$

Le tirage d'un nouveau nombre aléatoire r à distribution uniforme entre 0 et 1 permet donc le test de l'inégalité pour tout m , afin de choisir le processus d'interaction qui interviendra effectivement:

$$r < \sum_{i=0}^m \lambda_i(\vec{k}) = \lambda_{sc} + \sum_{i=1}^m \lambda_i(\vec{k}) \quad (\text{II.28})$$

Il apparaît dans ce test que la collision choisie peut être une collision fictive dont la probabilité est λ_{sc} . Si c'est le cas, elle laissera le vecteur d'onde inchangé et le mouvement se poursuivra directement pour le Δt suivant. Dans le cas contraire; de nouveaux nombres aléatoires permettent de définir la position du vecteur d'onde, après le choc.

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

Il faut signaler que cette première méthode a été utilisée par de nombreux auteurs, pour étudier un grand nombre de matériaux [13].

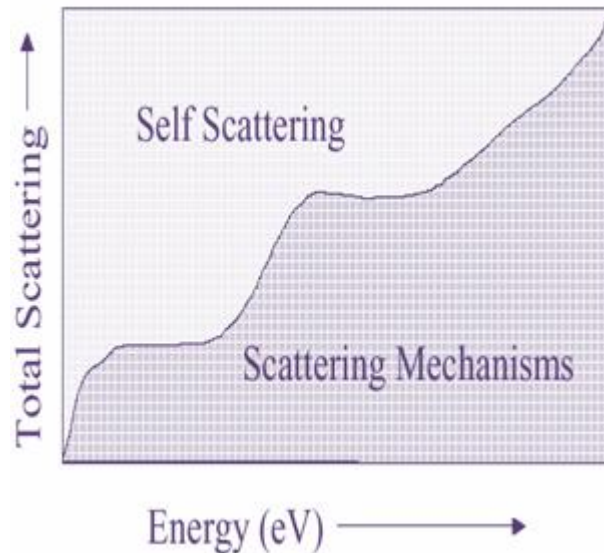


Figure II. 3: Probabilité totale d'interaction et Self Scattering [6].

II. Choix du mécanisme d'interaction

Plus récemment, cette méthode a été utilisée en champ statique et variable, en particulier pour tenir compte de la nouvelle énergie entre deux collisions successives. A chaque instant $t_n = n\delta t$, la probabilité $p[\bar{k}(t_n)]$ pour que le porteur subisse une collision, sera connue et pourra être utilisée pour déterminer par tirage au sort, si une collision a effectivement eu lieu ou non à la fin du δt considéré. Dans ce but; nous comparons la quantité $p[\bar{k}(t_n)]\delta t$ à un nombre r tiré au hasard, dans une distribution uniforme entre 0 et 1. Ce nombre r sert aussi au choix de l'interaction qui aura effectivement lieu dans le cas où le test est positif (figure II. 4).

Dans le cas où une collision a effectivement lieu, la procédure de choix du vecteur d'onde après choc est en tout point, identique à celle décrite précédemment. Le porteur continue ensuite son parcours pour le δt suivant [13].

La première constatation est que les libres parcours vécus par le porteur sont nécessairement constitués d'un nombre aléatoire de pas δt . Plus δt est petit, meilleure est la valeur approchée de la durée de parcours. Il en résulte que δt doit être beaucoup plus petit que le plus court des libres parcours. Cette condition garantit également que la quantité $p[\bar{k}(t_n)]\delta t$ ne peut jamais être plus grande que 1.

De plus, le tirage de r se fait selon une distribution uniforme; le fait de tirer l'interaction de rang i ne dépend pas de l'ordre dans lequel ces interactions sont effectuées, le résultat de test ne dépend que de la largeur $p_i(\bar{k})\delta t$ du segment correspondant, soit en pratique de l'énergie du porteur au moment considéré.

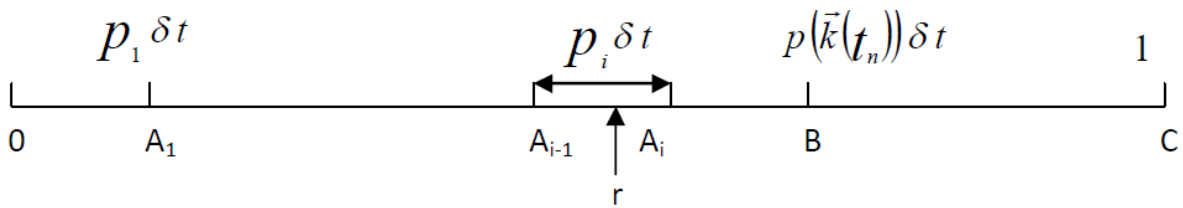


Figure II. 4: Le schéma indique la procédure de choix de l'interaction.

Quand r se situe entre les points A_{i-1} et A_i , le i ème type d'interaction a lieu. Le segment BC représente la probabilité pour que rien ne se passe après le pas δt [10].

II.1. Choix de l'angle de déviation

Tout échange éventuel de l'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 initiales et finales ε et ε' . C'est un changement d'orientation du vecteur d'onde qui décrit la déviation subie par l'électron. Le vecteur d'onde de l'état final \vec{k}' est repéré par rapport au vecteur d'onde initial \vec{k} par un angle de déviation β .

La densité de probabilité $S(\vec{k}, \vec{k}')$ relative au passage d'un état \vec{k} à un état \vec{k}' ne dépend généralement que des modules de \vec{k} et \vec{k}' , c'est-à-dire des énergies avant et après interaction ε et ε' , et de l'angle β entre \vec{k} et \vec{k}' (figure II. 5).

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

$$\lambda(k) = 2\pi \cdot \frac{V}{8\pi^3} \int_0^\pi \left[\int_0^\infty S(k, k') \cdot k'^2 dk' \right] \sin \beta \cdot d\beta \quad (\text{II.29})$$

Où $\frac{V}{8\pi^3}$ désigne la densité d'état dans l'espace des moments.

Après intégration par rapport à l'énergie c'est-à-dire par rapport au module \vec{k}' , l'expression de la probabilité d'interaction peut se mettre sous la forme :

$$\lambda(\varepsilon) = C_\varepsilon \int_0^\pi f_\varepsilon(\beta) d\beta \quad (\text{II.30})$$

La fonction normalisée :

$$g_\varepsilon(\beta) = f_\varepsilon(\beta) \cdot \left(\int_0^\pi f_\varepsilon(\beta') d\beta' \right)^{-1} \quad (\text{II.31})$$

Définit donc la fonction de distribution de l'angle β . Par définition la fonction de répartition de l'angle β est : $dF = g_\varepsilon(\beta) d\beta = dr$, où r est un réel uniformément distribué entre 0 et 1. Donc à tout réel r tiré au hasard uniformément entre 0 et 1 est associé suivant la relation :

$$r = \int_0^\beta g_\varepsilon(\beta') d\beta' \quad (\text{II.32})$$

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

L'angle de déviation du vecteur d'onde est déterminé par tirage au sort, suivant une loi de probabilité caractéristique de l'interaction [6,14]. 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 déplaçant dans un repère lié au vecteur d'onde k , avant la collision (figure II. 5).

Ces deux nombres sont tels que :

$$\begin{cases} \varphi = 2\pi.r_1 \\ \cos \beta = 1 - 2r_2 \end{cases} \quad (\text{II.33})$$

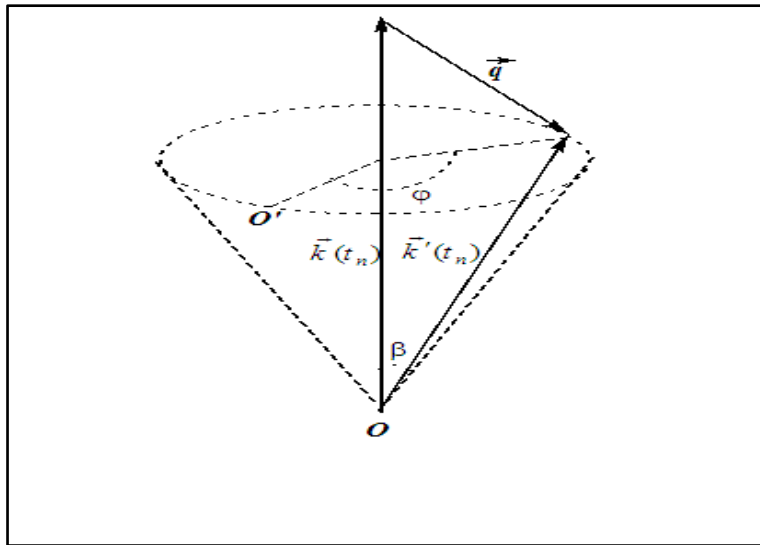


Figure II. 5: Evolution du vecteur d'onde au moment de la collision

β c'est l'angle entre les directions des vecteurs \vec{k} et \vec{k}' , le lieu de \vec{k}' est un cône de demi angle au sommet β , le lieu de l'extrémité de k' un cercle ayant pour axe la direction de \vec{k} . L'angle azimutal φ est aléatoire et à distribution uniforme entre 0 et 2π .

L'expression (II.33) pour chaque interaction est :

II.1.1 Interaction avec les impuretés:

L'état du vecteur d'onde est donné par (φ, β) tel que :

$$\begin{cases} \varphi = 2\pi r_1 \\ \cos \beta = 1 - \frac{2(1-r_1)}{1+r_2(4k^2/\theta^2)} \end{cases} \quad (\text{II.34})$$

Avec k^2 le module au carré du vecteur d'onde après le choc.

$$\theta^2 = \frac{N_D \cdot e^2}{\varepsilon_0 \varepsilon_s k_B T} \quad (\text{II.35})$$

N_D : Concentration en impuretés (dopant) de type donneur.

e : La charge d'électron.

ε_0 : La permittivité diélectrique de vide.

ε_s : La permittivité relative statique du matériau.

k_B : La constante de Boltzmann.

T : la température du réseau.

II.1. 2 Interaction avec les phonons acoustiques

Le couple (φ, β) de ce type d'interaction est donné par :

$$\begin{cases} \varphi = 2\pi r_1 \\ \cos \beta = 1 - \frac{(1+2\alpha\varepsilon)^3(1-r_2)+r_2)^{1/3}-1}{\alpha\varepsilon} - 1 \end{cases} \quad (\text{II.36})$$

α : Le coefficient de non parabolicité, ε l'énergie d'électron après l'interaction.

La plupart du temps $\alpha\varepsilon$ est petit devant 1, cette distribution est alors quasi-uniforme.

II.1.3. Interaction avec les phonons optiques polaires:

$$\text{Avec } \begin{cases} \varphi = 2\pi r_1 \\ \cos \beta = \frac{1+f-(1+2f)'}{f} \end{cases} \quad (\text{II.37})$$

$$f = \frac{2\sqrt{\varepsilon\varepsilon'}}{(\sqrt{\varepsilon}\sqrt{\varepsilon'})^2}$$

II. 1. 4. Interaction avec les phonons intervallées

Le couple (φ, β) est alors obtenu en tirant au hasard deux nombres aléatoire entre 0 et 1 tel que :

$$\begin{cases} \varphi = 2\pi r_1 \\ \cos \beta = 1 - 2r_2 \end{cases} \quad (\text{II.38})$$

II.1.5. Interaction avec les phonons optiques non polaires

Cette interaction est similaire à celle des interactions intervallées et le couple (φ, β) de cette interaction est donné par :

$$\begin{cases} \varphi = 2\pi r_1 \\ \cos \beta = 1 - 2r_2 \end{cases} \quad (\text{II.39})$$

III. Mise en œuvre de la méthode de simulation

Le détail de la mise en œuvre du programme de modélisation du transport électronique dans les matériaux massifs, récapitulée par l'organigramme de la figure II. 6.

Le programme débute par la lecture des données et les diverses initialisations indispensables au déroulement de la simulation. Elles concernent les paramètres des matériaux, le calcul ainsi que le stockage en mémoire des probabilités totales d'interaction et enfin la préparation des particules.

Le cœur du programme est constitué de deux boucles : l'itération sur le temps dans laquelle est imbriquée l'itération sur les électrons. Ceux-ci, tour à tour, subissent l'effet du champ électrique et des interactions.

Si l'on désigne par λ_i la probabilité d'une interaction et λ_T la somme totale des probabilités d'interaction par unité de temps, une procédure de tirage aléatoire entre 0 et 1 permet de déterminer si il y a lieu de faire subir une interaction et dans l'affirmative, de désigner sa nature (figure II. 4).

L'angle de déviation est alors déterminé puis le vecteur \vec{k} modifié et enfin l'énergie réactualisée en prenant en compte éventuellement un échange de phonon. Dans le cas d'une ionisation par impact, l'échange d'énergie s'effectue avec les particules générées lors du choc.

Le pas de temps Δt est généralement choisi de manière à ce que la probabilité $\lambda(\varepsilon)\Delta t$ soit très inférieure à 1 pour une grande gamme d'énergies. Mais il peut arriver que cette condition ne soit pas vérifiée, en particulier à énergie élevée; une procédure de réduction dichotomique permet de reprendre le vol libre précédent avec un pas de temps deux fois moindre, les probabilités d'interaction deviennent environ deux fois plus faibles et le tirage aléatoire peut s'effectuer correctement. Il ne restera plus qu'à compléter le pas de temps avec à nouveau un vol libre sur un demi-pas de temps puis l'effet des interactions. Une fois les boucles sur les particules et sur le temps exécutées, le programme calcule les moyennes des grandeurs physiques et les sauvegarde sur disque dur [15-16].

On peut voir sur l'organigramme que le traitement du problème comporte les états essentiels suivants:

A l'instant $t=0$, l'état initial $\vec{k}(0)$ de chaque électron correspond à une énergie tirée au hasard suivant la distribution de Maxwell-Boltzmann.

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{r}_i(t) \\ \vec{k}_i(t) \\ \varepsilon_i[\vec{k}_i(0)] \end{array} \right. \quad \text{(II.40)}$$

Une étape de vol libre entre l'instant t et $t + \Delta t$ pendant laquelle l'état du porteur est donné par les lois de la dynamique compte tenu de son état à l'instant t . Pour l'électron i on connaît donc sa position, sa vitesse et son énergie.

$$\begin{cases} \vec{r}_i(t) \\ \vec{k}_i(t) \\ \varepsilon_i[\vec{k}_i(0)] \end{cases} \quad (\text{II.41})$$

On effectue un vol libre de durée Δt et on aura :

$$\text{Et on calcule :} \quad \begin{cases} \varepsilon_i(t + \Delta t) = \varepsilon_i[\vec{k}_i(t)] \\ \vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \int_t^{t+\Delta t} \vec{v}_i(t).dt \\ \Delta t = -\frac{1}{\Gamma} \log r \end{cases} \quad (\text{II.42})$$

$$\varepsilon_i(t + \Delta t) = \varepsilon_i[\vec{k}_i(t + \Delta t)] \quad (\text{II.43})$$

Une étape de calcul pendant laquelle on recherche si le porteur a subi ou non une collision suivie du calcul de son nouvel état s'il y a eu collision (recherche de l'interaction au bout de l'intervalle de temps Δt par tirage au sort d'un nombre aléatoire) :

- ❖ S'il n'y a pas eu interaction, on ne modifie pas l'état du porteur.
- ❖ S'il y a eu interaction, on place l'interaction précisément à l'instant $t + \Delta t$ et on cherche le nouveau vecteur d'onde \vec{k}' après le choc par tirage au sort. Son état est maintenant défini par :

$$\begin{cases} \vec{k}_i(t + \Delta t) \\ \varepsilon_i'(t + \Delta t) = \varepsilon_i[\vec{k}_i(t + \Delta t)] \\ \vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t + \Delta t) \end{cases} \quad (\text{II.44})$$

III.1. Description du logiciel

Dans notre thèse, nous utilisons un programme écrit en langage C++ au sein de l'unité de recherche URMER de l'université de Tlemcen [17, 18]. Ce logiciel permet de remplir deux fonctions essentielles. La première est consacrée au calcul des probabilités à partir des expressions usuelles, en considérant dans notre cas, deux modèles trois et cinq vallées non paraboliques. Les interactions prises en compte sont dues aux phonons acoustiques, aux phonons optiques polaires intervallées et aux impuretés.

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

Les résultats obtenus sont fortement dépendants de nombreux paramètres qui caractérisent le matériau et qui, malheureusement, sont parfois très mal connus.

Le développement au niveau software, a permis de rendre notre programme plus convivial et plus simple. La procédure générale d'exécution de ce logiciel est composée de trois étapes essentielles qui peuvent être résumées comme suit:

- ❖ Lecture du fichier de données concernant les paramètres du matériau utilisé, tels que les énergies du gap, les masses effectives, les potentiels de déformation, les coefficients de non parabolicité, la vitesse du son, la concentration des impuretés, la température du réseau, les champs électrique appliqués, etc....
- ❖ Exécution du logiciel.
- ❖ Aboutir aux résultats cherchés sous forme de deux fichiers :
 - a) L'un de ces derniers contient les valeurs des énergies des probabilités d'interaction des porteurs.
 - b) L'autre fichier est réservé aux grandeurs physiques qui décrivent la trajectoire des porteurs pendant les interactions telle que la vitesse de dérive, la position, le temps, la mobilité et la population.

L'organigramme général de la procédure de Monte Carlo est représenté dans la figure II. 6.

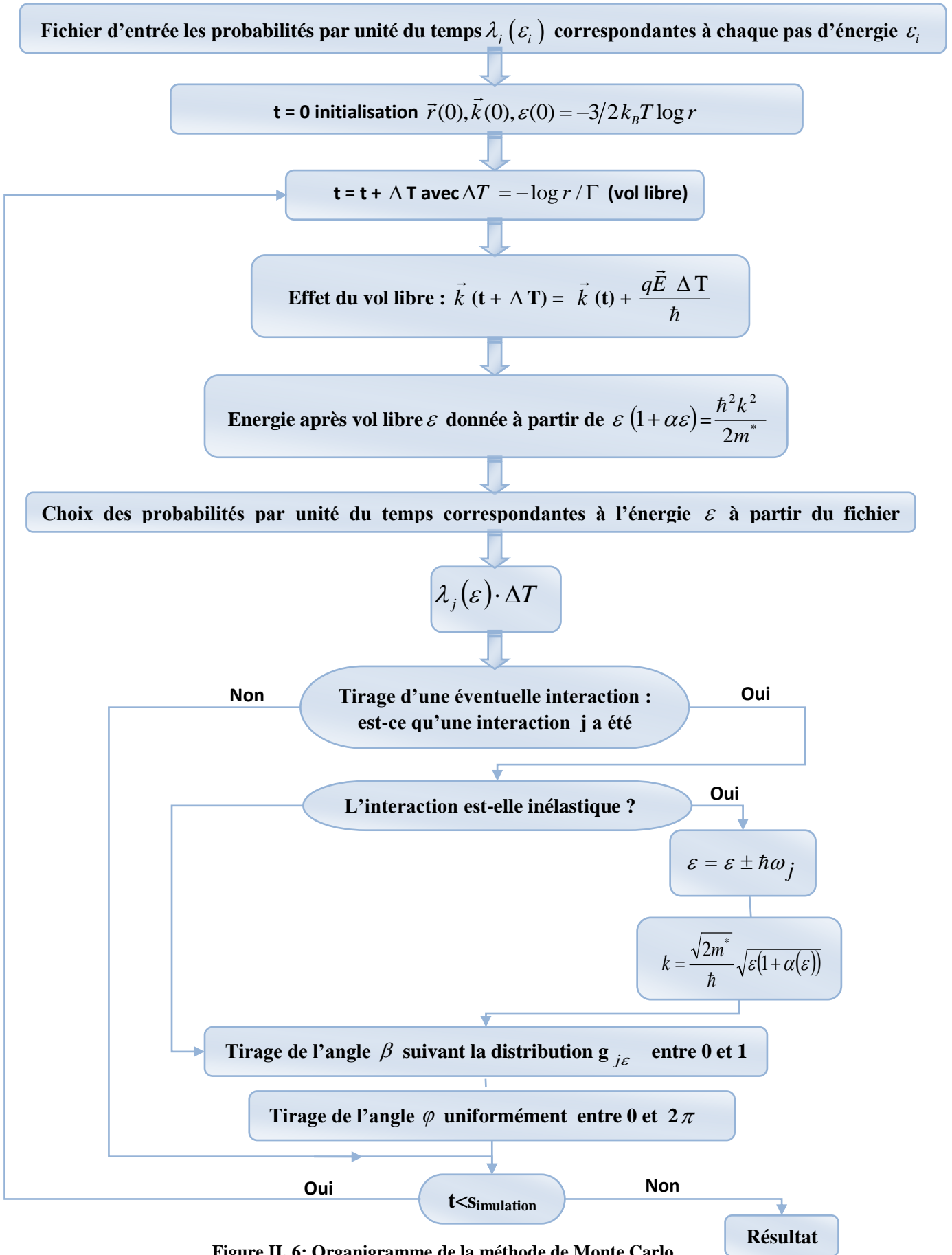


Figure II. 6: Organigramme de la méthode de Monte Carlo

III. 2. Récapitulatif

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 II. 7 à 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 (cf. figure II. 7.b) (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 [2].

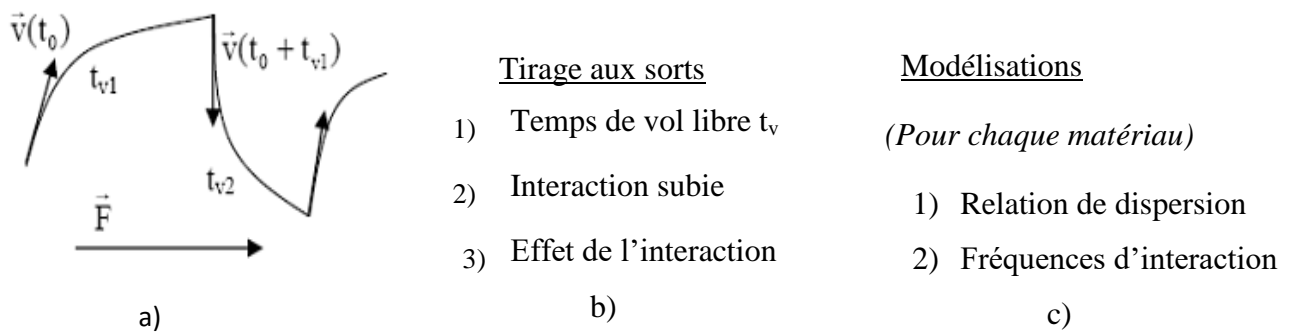


Figure II. 7: Présentation de la méthode Monte Carlo.

- Une trajectoire d'un porteur dans l'espace réel. F forces extérieures appliquées. t_v temps de vol libre.
- Les différents tirages aux sorts nécessaires à la génération d'une telle trajectoire.

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. Le choix de la représentation des relations de dispersion (ou diagrammes de bandes) et des fréquences d'interaction constituent le cœur de la modélisation physique des simulations de transport.

Références bibliothèques

- [1] C. Jacoboni and L. Reggiani, ‘the Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials’, *Rev. Mod. Phys.* 55(July 1983), no. 3,645-705.
- [2] J.P. Nougier, « Méthodes de calcul numérique », Masson, 1993.
- [3] G. Bontempi, ‘Modélisation et simulation,’ INFO 154 ; Département d’Informatique Boulevard de Triomphe - CP 212.
- [4] D.E. Knuth, “Seminumerical Algorithms”, 2nd. ed. vol. 2 of the Art of Computer Programming (Reading, Mass: Addison-Wesley), (1981).
- [5] F. Dessenne, «étude théorique et optimisation de transistors à effet de champ de la filière InP et de la filière GaN. », Thèse de doctorat, Université des sciences et technologies de Lille; 1998.
- [6] J. L.Thobel, “Simulation Monte Carlo du transport électronique et des phénomènes de diffusion dans les systèmes à base de semi-conducteurs III-V”, Thèse d’habitation, Lille 1 (2000).
- [7] O. Mouton, J .L .Thobel, and R. Fauquembergue, « Monte Carlo simulation of high-field electron transport in GaAs using an analytical band-structure model », *J.Appl.Phys.*81(7), 1 April 1997.
- [8] C.Moglestue, «Monte Carlo simulation semiconductor devices», CHAPMAN & Hall, New York, 1993.
- [9] H.D.Rees, « Journal of physics and Chemistry of solids », Vol 30, pp 643, 1969
- [10] M.Galler, Multigroup equations for the description of the particle transport in semiconductors, Series on advances in mathematics for applied sciences; vol.70. ISBN 1981-256-355-5.
- [11] P. J. Price, *IBM Journal of Research and Development*, Vol 17 (1973) 39.
- [12] A.Bournel, « Magnéto- électronique dans des dispositifs à semi-conducteurs ». *Ann.Phys.Fr.*25.N°1.2000.
- [13] Josan harris Dragica Vasileska, « Monte Carlo simulation of GaAs devices using high generality object-oriented code and encapsulated scattering tables » department of electrical engineering, Arizona state university.

- [14] O. Mouton, J.L Thobel, and R. Fauquemberg, "Monte Carlo simulation of high-field electron transport in GaAs using an analytical band structure model ", *J.Apl. Phys.* 74, (10), 1993.
- [15] G. B., Tait, and C. M. Krowne, "Transferred Electron Device Simulation Method for Microwave and Millimeter Wave CAD Applications", *Solid-State Electronics*, vol. 30, no. 10, pp. 1025-1036, 1987.
- [16] C. M. Snowden, and D. Loret., "Two-Dimensional Hot Electron Models for Short-Gate Length GaAs MESFET's" *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-34, pp. 212-223, 1987.
- [17] C.Sayah, « études des effets du champ électromagnétique sur les propriétés des composés III-V par la méthode de Monte Carlo et l'équation de Poisson couplées », thèse de doctorat, université de Tlemcen, 2010.
- [18] B. Bouazza, «Simulation Monte Carlo des Composants Microélectroniques à base de Matériaux III-V, II-VI ternaires. Intégration monolithique en électronique de puissance », Thèse de Doctorat, université de Tlemcen, 2007.

Chapitre 3

INTRODUCTION

Dans l'ensemble des matériaux, les semi-conducteurs constituent une classe bien définie, avec des propriétés physiques particulières qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et à celui des applications, les semiconducteurs à grande largeur de bande interdite s'avèrent particulièrement intéressants pour la génération de puissance.

Si on compare les différentes propriétés électriques du Carbure de Silicium (SiC) avec celles du Silicium (Si) et de l'Arséniure de Gallium (GaAs) on voit immédiatement que des champs critiques élevés en raison de leur grande énergie de bande interdite combinés à des grandes vitesses de saturation pour les électrons (tableau III-2), vont leur conférer de grandes potentialités en termes de puissance et de fréquence de fonctionnement.

L'étude théorique des propriétés de transport électronique à base de matériaux semi-conducteurs devient de plus en plus importante. Plus spécifiquement notre intérêt s'est porté essentiellement sur le matériau : Carbure de Silicium (6H-SiC) à grand gap et le matériau Arséniure de Gallium (GaAs) à gap moyen car les résultats de la simulation pourront être facilement testés par comparaison avec les nombreuses références existantes dans la littérature.

Donc nous présentons dans une première partie dans ce chapitre, une ouverture sur les composants à large bande interdite, en particulier le SiC (un historique sur le matériau semiconducteur carbure de silicium avant de décrire quelques unes de ses propriétés et les applications de ce matériau).

Ensuite, nous présentons les principes de calcul des structures de bandes énergétiques, les différentes méthodes de calcul de la structure de bandes dans les semi-conducteurs. Nous donnons l'allure générale de la structure de bande en particulier le 6H-SiC et GaAs. Les expressions permettant de calculer les masses effectives des électrons, les coefficients de non parabolicité dans les vallées et d'autres part les paramètres physiques des deux matériaux.

I. Carbure de Silicium (SiC)

I. Carbure de Silicium (SiC)

I. 1. Historique

Le carbure de silicium (SiC) fut observé pour la première fois en 1824 par le scientifique Suédois Jöns Jacob Berzelius [1]. A ce moment là, les propriétés du SiC n'étaient pas connues. Plus tard, Edward Goodrich Acheson, après avoir fait fondre du carbone et des silicates d'aluminium dans un four à arc électrique, découvrit des cristaux brillants et hexagonaux sur l'électrode de carbone. Il nomma alors ces cristaux Carborundum pensant qu'ils étaient constitués essentiellement de carbone et d'alumine (qui est appelée en minéralogie Corundum). En 1893, c'est donc sous le nom de Carborundum que sa découverte fut brevetée et commercialisée en tant que matériau abrasif [2].

Ce n'est que plus tard qu'il réalisa qu'il s'agissait en fait de carbure de silicium. Par la suite, il utilisa du carbone et du sable fondu. Ce procédé est d'ailleurs toujours utilisé dans une forme améliorée et connu sous le nom de méthode Acheson. En 1907, la première diode électroluminescente est fabriquée à partir de SiC [3].

Le carbure de silicium n'est pas seulement un matériau synthétique, mais peut se trouver, bien que rarement, dans la nature. En 1904, Ferdinand Henri Moissan le découvrit en Arizona dans le canyon Diablo Météo Crater en examinant des météorites. Comme le SiC requiert des conditions, élevées de pressions et de température pour être synthétisé, il ne peut uniquement être trouvé à l'état naturel que dans les météorites ou les pierres volcaniques comme la kimberlite.

En l'honneur de son découvreur, les minéralogistes ont appelé le matériau moissanite, qui est toujours son nom couramment utilisé en joaillerie. Ce matériau est d'ailleurs réputé pour son éclat et son brillant, qui sont supérieurs au diamant.

A partir de 1950, le carbure de silicium connut un regain d'intérêt grâce à la mise au point d'un procédé de croissance par Lély. Mais la recherche sur ce matériau fut rapidement abandonnée en raison de la taille trop petite des substrats obtenus et elle ne reprit qu'à la fin des années 1970 grâce à l'amélioration des techniques d'élaboration du carbure de silicium. En 1979, la première LED en carbure de silicium vit le jour. Les composants haute tension apparurent au début des années 1990. L'année 2000 vit notamment la commercialisation de dispositifs en carbure de silicium comme les diodes MESFET.

I. 2. Structure du carbure de silicium

I. 2.1. Le polytypisme dans le carbure de silicium

Le carbure de silicium est un cristal constitué d'atomes de carbone et d'atomes de silicium en quantités égales. Le cristal se présente sous forme d'un empilement compact de plans d'atomes de carbone et de plans d'atomes de silicium.

L'unité de base (figure III. 1) est un tétraèdre formé par quatre atomes de silicium (ou de carbone) avec un atome de carbone (ou de silicium) au barycentre. La distance a entre deux atomes premiers voisins est de $1,89 \text{ \AA}$ et celle séparant les seconds voisins est de $3,08 \text{ \AA}$.

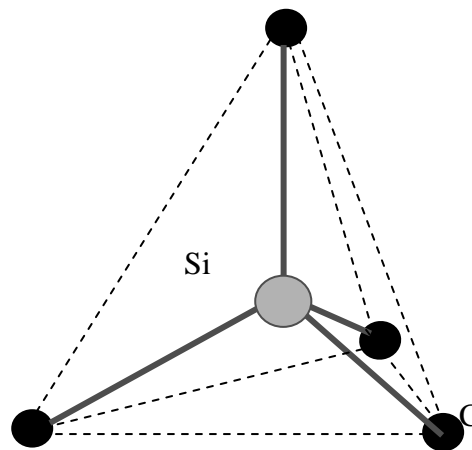


Figure III. 1 : Cellule tétraédrique du SiC

Le terme «carbure de silicium» recouvre toutes les formes stoechiométriques de carbone et de silicium existant en phase solide. En pratique, il en existe plusieurs dizaines et on peut toutes les décrire en partant de N bicouches élémentaires SiC constituant chacune un plan hexagonal compact. Un polytype déterminé comprend N bicouches (plans) et ne diffère des autres polytypes que par le détail de la séquence d'empilement des N plans successifs (figure III. 2). Dans chaque plan, les atomes de silicium se trouvent au centre d'un tétraèdre formé par leur partenaire inter couche et par trois atomes de carbone situés en position de premiers voisins dans la couche (inférieure ou supérieure) immédiatement adjacente. Seule la position relative des deuxièmes voisins, correspondant au mode d'empilement de deux plans consécutifs, peut changer d'un polytype à un autre.

La symétrie d'ensemble du cristal dépend donc du nombre N de bicouches successives qui constituent la cellule unitaire. On utilise souvent pour la représenter la

notation de Ramsdell NX : avec N le nombre de bicouches de la cellule, X = C, H ou R. Ces lettres précisent la symétrie (cubique, hexagonale ou rhomboédrique).

Au total, environ 180 polytypes ont été identifiés, parmi ceux-ci, quatre seulement présentent un intérêt pour les applications dans le domaine de la microélectronique. Ce sont ceux qui ont été les plus étudiés. 2H-SiC qui est de structure wurzite (symétrie identique à celle de GaN), 3C-SiC ou β -SiC qui est de structure cubique (symétrie identique à celle de GaAs), 4H-SiC et 6H-SiC qui sont de structures hexagonales, improprement appelés α -SiC [4-7].

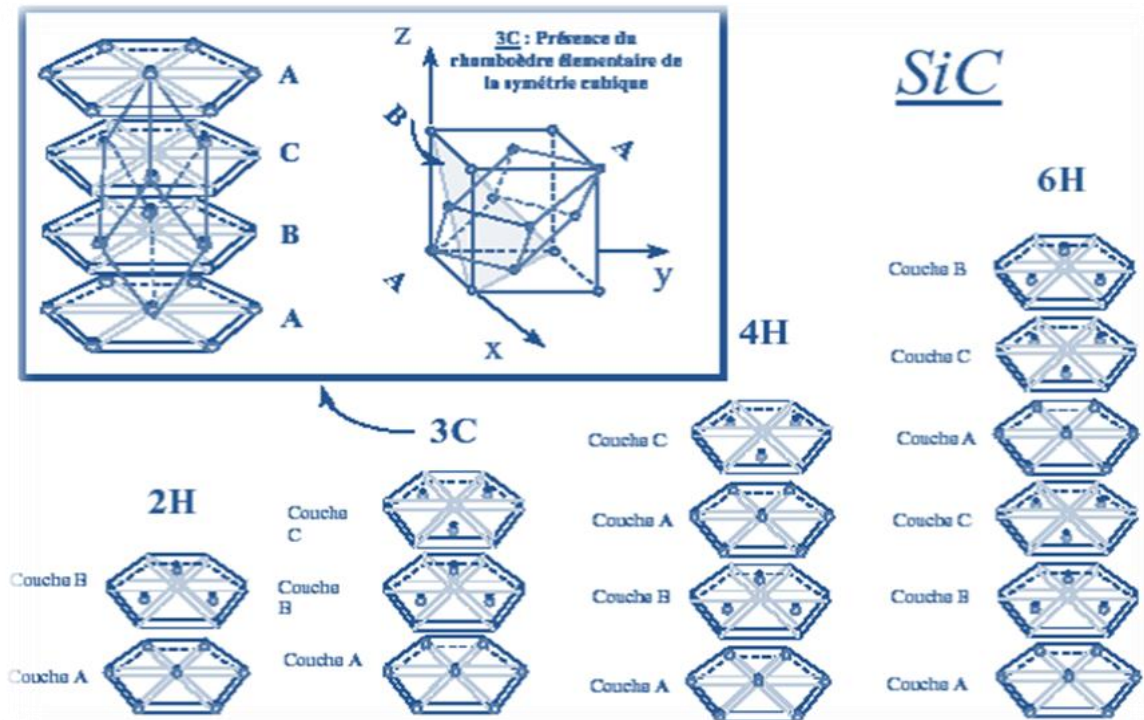


Figure III. 2: Représentation des polytypes 2H, 3C, 4H et 6H [8]

I. 2.1.1 Carbure de Silicium cubique

Dans le 3C-SiC, toutes les bicouches ont la même orientation, résultant en une structure de type zinc-blende, avec une séquence d'empilement ABC (ABC...). Le nombre 3 fait référence au nombre de couches électroniques nécessaires à la périodicité du cristal et la lettre C à la symétrie cubique de celui-ci. Elle est connue comme étant le polytype 3C-SiC ou β -SiC. Il n'existe en fait qu'un seul polytype de carbure de silicium appartenant au système cristallin cubique.

I. 2.1.2. Carbure de Silicium hexagonale

a. Structure cristalline du polytype 4H-SiC

Le polytype 4H-SiC, a une périodicité de quatre bicouches caractérisés par une séquence d'empilement ABAC (ABAC...). Il possède un nombre égal des sites cubiques et hexagonaux. Les structures hexagonales sont notées α -SiC.

b. Structure cristalline du polytype 6H-SiC

Le polytype 6H avec une périodicité de six bicouches et une séquence d'empilement ABCACB (ABCACB), le 6H-SiC est composé aux deux tiers de liaisons Cubiques, le tiers restant étant des liaisons hexagonales.

Le tableau III. 1 suivant représente les séquences d'empilement des bicouches SiC pour différents polytypes [8]:

Dénomination	Empilement
2H-SiC	(AB)
4H- SiC	(ABCB)
6H- SiC	(ABCACB)
3C- SiC	(ABC)
15R- SiC	(ABCACBCABACBCB)

Tableau (III. 1) : les séquences d'empilement des bicouches SiC pour différents polytypes

Le schéma suivant représente les structures des principaux polytypes du SiC : 2H-SiC, 4H-SiC, 6H-SiC et 3C-SiC [9]

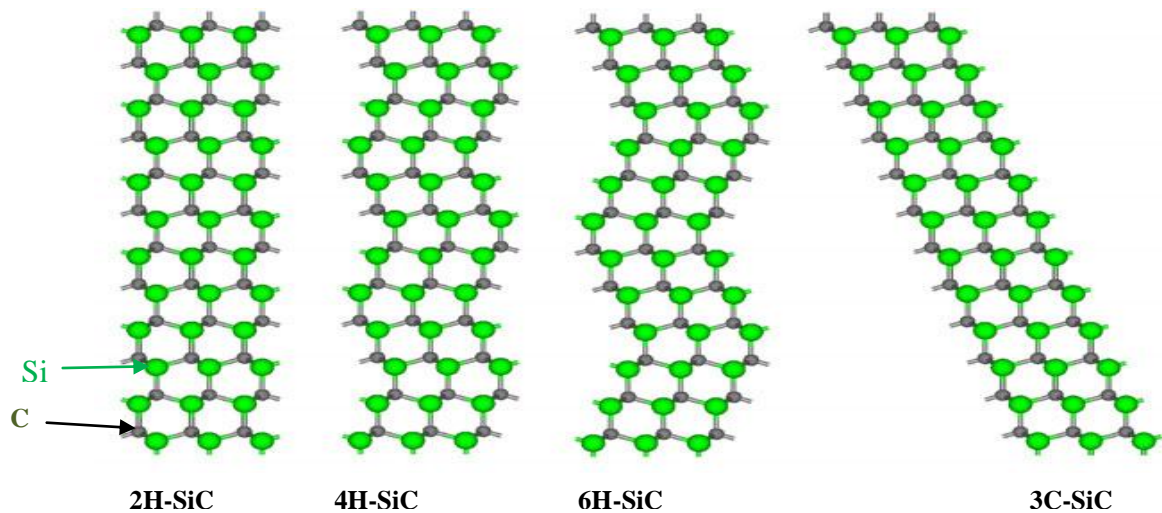


Figure III. 3 : les structures des principaux polytypes du SiC : 2H-SiC, 4H-SiC 6H-SiC et 3C-SiC.

I. 3. Propriétés et applications du SiC

I. 3. 1. Propriétés électriques

Le SiC est un semi-conducteur à grande largeur de bande interdite ayant un gap compris entre 2,2 et 3,3eV selon le polytype. Il existe une corrélation entre la structure et la largeur de bande interdite. Plus, on évolue vers la structure hexagonale indirecte, les transitions inter-bandes font appel à des phonons. Comparé au silicium, il possède un champ de claquage environ dix fois plus élevé pour une mobilité trois fois moindre.

I. 3. 2. Propriétés optiques

Les différents polytypes du SiC étant tous à gap indirect, ce matériau n'est donc pas indiqué pour les applications optoélectroniques. Il trouve un terrain plus favorable dans le domaine des capteurs (environnement sévère) et de l'électronique de puissance.

I. 3. 3. Propriétés thermiques

La conductivité thermique du carbure de silicium est importante avec une valeur comparable à celle du cuivre. Les composants à base de SiC auront ainsi une bonne

évacuation de la chaleur produite au sein de du composant. Cela peut permettre d’avoir une densité d’intégration plus forte et de réduire, voire supprimer le refroidissement de ces composants.

Rappelons également que la température de fusion du SiC est nettement plus grande que celle du silicium. Elle se place juste après celle du diamant.

I. 3. 4. Propriétés mécaniques

Le SiC est un matériau bien connu pour ses qualités mécaniques, sa dureté exceptionnelle (près de trois fois celle du Si) et son excellente stabilité physique. Il est employé depuis très longtemps dans le domaine des abrasifs et de la découpe des matériaux. En plus de ces qualités, le carbure de silicium possède un facteur de jauge tout à fait correct, bien que plus faible que celui du silicium, et un module d’Young élevé. Il conserve ses propriétés élastiques jusqu’à 850 C°.

Le Tableau III. 2 présente les principales propriétés du Silicium (Si), de l’Arséniure de gallium (AsGa), de Nitrure de Gallium (GaN), du Carbure de Silicium (SiC) et du diamant [10-12].

Matériaux	Gap Eg (eV)	Champ Critique (MV/cm)	Champ de claquage (MV/cm)	Mobilité des électrons μ_n ($\text{Cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$)	Mobilité des trous μ_p ($\text{Cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$)	Vitesse de saturation des électrons (10^7cm/s)	Conductivité thermique K ($\text{w} \cdot \text{k}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$)
Si	1,12	0,3	0,2	1400	600	1	1.5
GaAs	1,43	0,4	0,3	8500	400	2	0,5
3C-SiC	2,2	1,5	3	900	40	2	4.5
6H-SiC	2,9	2,2	2,4	400	90	2	4.5
4H-SiC	3,26	2,5	2,5	750	115	2	4,5
GaN	3,36	3,3	3,3	750	320	2,5	1,3
C	5,47	10	5,6	2200	1600	2,7	20

Tableau III. 2: Résumé des propriétés électriques de différents semi-conducteurs.

La figure III.4 reprend quelques unes de ces propriétés sous forme graphique, permettant une comparaison plus aisée. En effet, on observe, que le carbure de silicium présente une conductivité thermique 10 fois supérieure à celle de l'Arséniure de Gallium, ou encore que le champ critique du Nitrure de Gallium est environ 10 fois supérieur à celui du silicium [13].

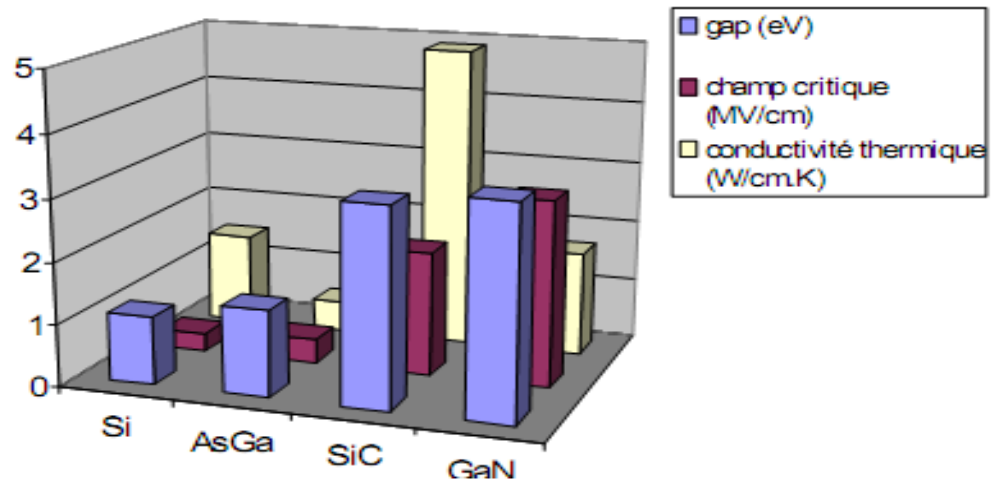


Figure III. 4 : Comparaison de quelques propriétés physiques de semiconducteurs.

I. 4. Applications

La large bande interdite permet au SiC de travailler à de hautes températures avec des courants et tensions élevés de supporter des densités de puissance importantes, et de réduire les pertes. Par conséquent, ce matériau est destiné à des applications électroniques en milieu hostile tels que les secteurs militaire et spatial, l'automobile..etc.

I. 4. 1. Applications hautes températures

- 1-Electronique pour les moteurs de voitures.
- 2-Electronique pour les moteurs d'avions.
- 3-Electronique spatiale.
- 4-Equipement pour la recherche pétrolière.
- 5-Suivi des réactions chimiques.

I. 4. 2. Applications dans l'électronique de puissance

- 1-Contrôle des moteurs électriques.
- 2-Asservissements de puissance pour les voitures électriques.
- 3-Actionneurs électroniques.
- 4-Générateur de puissance.
- 5-Lampe ballasts.
- 6-Transport (ferroviaire..).
- 7-Système de chaleur et de froid.
- 8-Equipements industriels.

I. 4. 3. Applications micro-ondes

- 1- Systèmes radars.
- 2- Systèmes de communication.
- 5- Systèmes d'émission UHF.
- 6- Systèmes d'alarme.

II. Arséniure de Gallium

II.1. Définition

L'arséniure de gallium est un composé chimique de formule brute GaAs appartenant à la famille des semi-conducteurs III-V. C'est un matériau semi-conducteur utilisé notamment pour réaliser des composants micro-ondes et des composants optoélectroniques, des diodes électroluminescentes dans l'infrarouge ou des cellules photovoltaïques. Le GaAs est dit « III-V » car le gallium et l'arsenic se trouvent respectivement dans les colonnes III et V des éléments du tableau périodique et présentent trois et cinq électrons de valence.

II.2. Propriétés électriques et physiques

Le tableau III.3 suivant résume les différentes propriétés électriques et physiques du GaAs [14].

Propriété	Valeur
Structure cristalline	Zinc blende
Paramètre de maille	5,65 Å
Densité	5,32 g/cm ³
Densité atomique	4,5 . 10 ²² atomes/cm ³
Masse molaire	144,64 g
Coefficient d'expansion thermique	5,8 . 10 ⁻⁶ K ⁻¹
Chaleur spécifique	0,327 J/g.K
Constante diélectrique	12,85
Mobilité des électrons (non dopé)	8500 cm ² /V.s
Mobilité des trous (non dopé)	400 cm ² /V.s
Point de fusion	1238 C°

Le tableau III. 3 : les différentes propriétés électriques et physiques du GaAs.

II. 3. Structure cristalline d'Arséniure de Gallium (GaAs)

La plupart des composés III-V cristallisent dans la structure Zinc-Blende présentée en Figure III. 5. Cette structure qui s'apparente à celle du diamant (C, Ge, Si, etc.), est constituée de deux sous réseaux cubiques à faces centrées(CFC), l'un d'éléments III et l'autre d'éléments V, décalés l'un par rapport à l'autre de (1/4, 1/4, 1/4) suivant la direction [111].

Cette structure est représentée soit en perspective, soit en projection sur un plan formé par une des faces du cube.

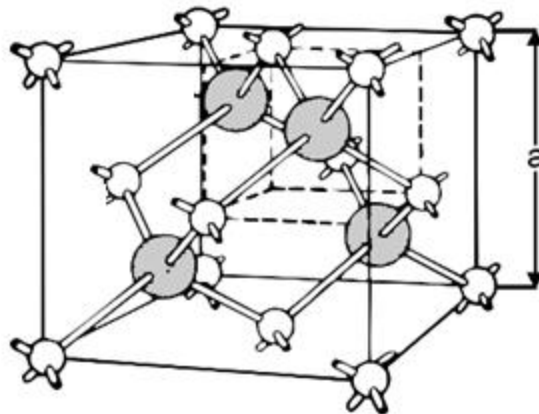


Figure III. 5 : La maille élémentaire de la structure Zinc-blende

Rappelons que la zone de Brillouin des réseaux CFC a la forme d'un octaèdre tronqué par les six faces d'un cube, comme représenté en figure III.6. Elle présente alors un centre de symétrie à l'origine (noté Γ) et des axes de symétrie [15]:

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

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

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

Les polytypes à structure hexagonale (de type wurtzite) ont une zone de Brillouin hexagonale. On définit les points de haute symétrie :

- Point Γ de coordonnées $(0, 0, 0)$ centre de zone de Brillouin.
- Point M de coordonnées $2\pi (1/a, \sqrt{3}/3a, 1/c)$ /centre de la face rectangulaire orthogonale à l'axe (010) .
- Point A de coordonnées $2\pi(0, 0, 1/2c)$ milieu de la face hexagonale.
- Point K de coordonnées $2\pi(0, 1/\sqrt{3}a, 0)$ milieu du coté de la face rectangulaire.

- Point L de coordonnées $2\pi(1/\sqrt{3}a, 1/\sqrt{3}a, 1/2c)$ milieu du coté commun à la face rectangulaire et hexagonale.

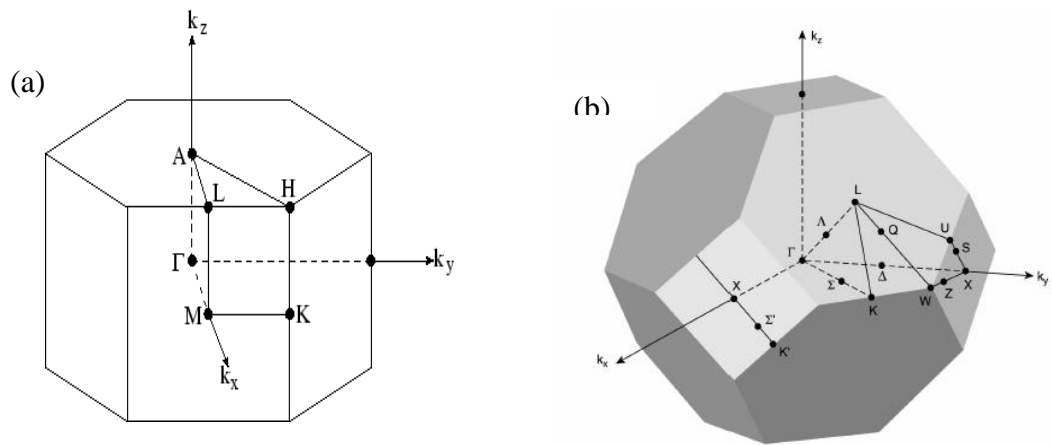


Figure III. 6: Les zones de Brillouin des deux structures: a) wurtzite et b) zinc blende.

III. Les méthodes de calcul de la structure de bande dans les matériaux semiconducteurs

III. Les méthodes de calcul de la structure de bande dans les matériaux semiconducteurs

Si on souhaite simuler un phénomène physique impliquant des particules évoluant dans un cristal, le premier élément à connaître est la fonction de dispersion de ces particules dans le milieu. Pour un semi-conducteur, l'ensemble de ces relations de dispersion des électrons constitue la structure de bande.

La relation de dispersion $E(\vec{k})$ s'obtient en résolvant l'équation de Schrödinger en tenant compte des interactions avec les atomes du cristal (noyaux et électrons). Dans l'approximation de Bloch [16], où l'électron considéré est soumis à un potentiel moyen périodique dû aux autres électrons et au réseau cristallin, l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$H\psi = \left[\frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] \psi \quad (\text{III. 1})$$

Où \vec{p} est l'opérateur quantité de mouvement : $\vec{p} = i\hbar\vec{\nabla}$, m_0 la masse de l'électron, $V(\vec{r})$ le potentiell périodique vu par l'électron dû aux atomes du réseau cristallin. Dans le vide ($V(\vec{r})=0$), la solution de l'Hamiltonien: $\hat{H} = \hat{P}^2/2m_0$ Dont des ondes planes de la forme de $e^{i\vec{k}\vec{r}}$.

Dans le cristal les solutions de l'équation de Schrödinger sont des fonctions de Bloch, réduits d'ondes planes par des fonctions périodiques :

$$\psi_{n,k}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} U_{n,k}(\vec{r}) \quad (\text{III. 2})$$

III.1. Diverses méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger

Les relations de dispersion des matériaux massifs ont été étudiées par deux types de théories. Le premier type contient les théories ayant peu de paramètres ajustables (un seul dans le cas minimum), telles par exemple la méthode du pseudo-potentiel, ou la méthode de la « boîte de camembert » (traduction de *muffin-tin*) [17-18].

Le deuxième type contient des théories avec une série de paramètres ajustables telles la méthode dite CLOA (Combinaison Linéaire d'Orbitales Atomiques), en anglais LCAO ou

des liaisons fortes (en anglais tight binding) [19-20], et bien sûr la méthode k.p. Le nombre de paramètres ajustables dépend du nombre de bandes que l'on veut décrire et de la précision recherchée.

III. 2. Hypothèses simplificatrices pour le calcul de la structure de bandes

Nous avons vu que des relations $E(\vec{k})$ on déduit les propriétés dynamiques des électrons et la densité des états. Pour comprendre les propriétés des semi-conducteurs il est donc nécessaire de déterminer leur structure de bandes, dans le calcul de la structure de bande d'un cristal, le principal problème qu'on trouve est l'absence d'une expression analytique du potentiel cristallin, ce qui rend la recherche de la solution générale de la fonction de dispersion très difficile. En effet, le solide est constitué d'un grand nombre de particules en interactions, dont le traitement théorique pour calculer les niveaux d'énergies et les fonctions d'ondes, ne peut être fait qu'avec d'un certain nombre d'hypothèses simplificatrices [21].

III. 2. 1. Les approximations des bases

L'Hamiltonien total d'un système constitué d'électrons et des noyaux atomiques s'écrit [22].

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_x + \hat{U}_e + \hat{U}_x + \hat{U}_{ex} \quad (\text{III.3})$$

Où \hat{T}_e et \hat{T}_x représentent les énergies cinétiques des électrons et des noyaux et \hat{U}_e , \hat{U}_{ex} et \hat{U}_x les énergies d'interactions électron-électron, électron-noyaux, et noyaux-noyaux respectivement.

III. 2.1.1. L'approximation de Born Oppenheimer

L'approximation de Born Oppenheimer [21], tient compte de ce que le caractère du mouvement des particules légères (électrons) et lourdes (noyaux des atomes) est fort différent ; du fait de son inertie le mouvement des noyaux ne peut évidemment pas réagir au mouvement de chacun des électrons et se meut dans le champ moyen résultant produit par tous les électrons.

L'hypothèse la plus grossière que l'on pourrait faire est celle qui supposerait que les noyaux atomiques soient immobiles $R_\alpha = R_\alpha^0$.

En adoptant cette hypothèse on simplifie notablement l'équation de Schrödinger, puisque l'énergie cinétique des noyaux devient nulle ($T_z = 0$), l'énergie d'interaction des noyaux devient constante, mais que l'on peut avec un choix convenable de l'origine rendre nulle ($U_z = 0$).

Nous pouvons définir un nouvel Hamiltonien, celui des électrons.

$$\hat{H}_e = \hat{T}_e + \hat{U}_e + \hat{U}_{ez} \quad (\hat{T}_z = 0 \text{ et } \hat{U}_z = 0) \quad \text{(III.4)}$$

Désignons par $\Psi_e(r; R_\alpha^0)$ la fonction d'onde des électrons, cette fonction doit dépendre des coordonnées des électrons, et celles des noyaux immobiles. La fonction de Schrödinger peut s'écrire :

$$H_e \Psi_e = E_e \Psi_e \quad \text{(III.5)}$$

E_e représente l'énergie des électrons qui se meuvent dans le champ créé par les noyaux.

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

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_x - \hat{E}_e \quad \text{(III.6)}$$

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

$$\Psi = \Psi_e \cdot \Psi_z$$

Avec:

$$\hat{H}_e \Psi_e = E_e \Psi_e \quad \text{ET} \quad \hat{H}_z \Psi_z = E_z \Psi_z \quad \text{(III.7)}$$

III. 2.1.1. L'Approximation de Hartree-Fock

Les simplifications de *Born Oppenheimer* permettent de séparer l'équation aux valeurs propres des noyaux de celle des électrons. La fonction d'onde des électrons doit satisfaire aux équations :

$$\hat{H}_e \Psi_e = E_e \Psi_e \quad (\text{III. 8})$$

Ou encore

$$\left[\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U_{ij} + \sum_{i, \alpha} U_{i\alpha} \right] \Psi_e = E_e \Psi_e \quad (\text{III.9})$$

Cette équation ne peut être résolue que si on suppose que les électrons n'interagissent pas entre eux ($U_{ij}=0$) [22], l'équation (III.9) se décomposerait en un système d'équations.

Il faut donc trouver un moyen qui permettrait de tenir compte des interactions entre les électrons tout en substituant à un système d'électrons en interaction à un système d'électrons indépendants. Ce résultat peut être atteint en faisant appel à la notion du *champ Self consistant*.

Considérons un électron i soumis à l'action du champ des noyaux et des électrons. Supposons qu'à l'aide d'un champ appliqué, nous réussissions à créer à tout instant à l'emplacement de l'électron i un champ identique à celui produit par tous les autres électrons.

Désignons par Ω_i l'énergie de l'électron dans ce champ. De cette façon, on peut écrire l'Hamiltonien du système d'électrons sous forme d'une somme d'Hamiltoniens de chaque particule :

$$H_e = \sum_i H_i \quad (\text{III.10})$$

Où

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \Omega_i(r_i) + U_i(r_i) \quad (\text{III.11})$$

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

$$\Psi_e(r_1, r_2, \dots) = \prod_i \Psi_i(r_i) \quad \text{(III.12)}$$
$$E_e = \sum_i E_i$$

Avec :

$$H_i \Psi_i = E_i \Psi_i$$

III. 3. Les méthodes de calcul de la structure de bande

III. 3. 1. La méthode de liaisons fortes

La méthode de liaisons fortes procède de l'idée que les états électroniques dans le cristal sont essentiellement des états atomique plus au moins perturbés par la nature périodique du cristal, dont les niveaux d'énergie électroniques et les fonctions d'onde, ainsi que le potentiel du solide sont de nature atomique avec des corrections exigées par le cristal. Cette méthode consiste à développer les fonctions d'onde du cristal sous forme de combinaisons linéaires d'orbitales atomiques, en tenant compte du théorème de Block auquel doivent satisfaire les fonctions d'onde du cristal.

La fonction d'onde est écrite sous forme d'une somme de fonction de Block d'orbitales atomiques. Cette méthode donne de bon résultats lorsqu'il s'agit d'orbitales atomiques très localisées autour des noyaux. Donc cette approche est mieux adaptée pour le calcul des états de coeur.

III. 3. 2. La méthode cellulaire

La méthode cellulaire est la première tentative de calcul de la structure de bandes introduites par Wigner et Seitz. Elle consiste à diviser la maille élémentaire en cellules contenant un seul atome. Le potentiel dans chaque cellule a alors une symétrie sphérique, ce qui permet de calculer simplement les fonctions de base en séparant la partie radiale des harmoniques sphériques. La difficulté de la méthode réside essentiellement dans la maîtrise des conditions aux limites [23- 25].

III.3. 3. La méthode des ondes planes augmentée (APW)

Cette méthode a été imaginée pour pallier au problème des conditions aux limites inhérentes à la méthode cellulaire. Le potentiel cristallin est supposé sphérique à l'intérieur de sphère de rayon r_e entourant les atomes, et constant à l'intérieur de ces sphères.

Les fonctions d'onde sont développées en ondes sphériques dans les régions où le potentiel est de type atomique et en ondes planes dans les régions où le potentiel est constant. Les fonctions d'onde sont appelées ondes planes augmentées elles sont continues en $r=r_e$ et ne présentent de ce fait aucun problème de conditions aux limites [26].

III. 3. 4. La méthode des ondes planes orthogonalisées (OPW)

La méthode OPW a été proposée par Herring, qui note que le fait d'approximer les fonctions d'ondes par des fonctions d'ondes planes n'est pas une bonne solution puis qu'elle ne tient pas compte des oscillations rapides du cœur, d'où le nom d'ondes planes orthogonalisées [27].

La fonction d'onde OPW est donnée par

$$\psi_k(r) = \exp(ikr) + \sum_c \mu_c \phi_k^c(r) \quad (\text{III - 13})$$

Où c : définit le cœur atomique.

Σ est portée sur tous les niveaux du cœur c.

ϕ généralement est une fonction atomique.

La constante μ_c est calculée par la condition d'orthogonalité de $\psi_k(r)$ avec chaque niveau du cœur.

$$\int \phi_k^c \exp(ikr) d^3 r = 0 \quad (\text{III - 14})$$

$$\mu_c = - \int \phi_k^c \exp(ikr) d^3 r \quad (\text{III - 15})$$

On choisit la solution de l'équation de Schrödinger comme combinaisons linéaire d'ondes planes orthogonalisées :

$$\psi_k(r) = \sum_k c_k \psi_k + k(r) \quad (\text{III - 16})$$

Les coefficients μ_c sont calculés à partir des conditions de Block, et les énergies E (k) sont obtenues en utilisant la méthode vibrationnelle.

La méthode OPW a été beaucoup utilisée pour calculer les bandes de valence et de conduction des semi-conducteurs IV-IV et III-V. La principale difficulté dans cette méthode réside dans le fait qu'elle nécessite la séparation entre les états du cœur d'une part, les états de valence et de conduction de l'autre. Ceci propose que les fonctions d'ondes du cœur sont très localisées à l'intérieur de la cellule élémentaire et que leur niveau d'énergie sont très séparés de ceux de la bande de valence.

III. 3. 5. La méthode des pseudo-potentiels

La méthode de pseudo-potential, comme la méthode OPW, utilise les propriétés d'orthogonalité des états de valence et de conduction avec les états de cœur. Mais dans le formalisme du PP, l'effet de l'orthogonalité est inclus dans le potentiel sous la forme d'un potentiel équivalent appelé PP. L'effet d'orthogonalité aux états de cœur revient à extraire du potentiel cristallin la contribution rapidement variable de la région du cœur [24,26, 28].

En chimie quantique, les méthodes de description par pseudo-potential sont un ensemble de méthodes visant à substituer le potentiel d'interaction coulombien du noyau et les effets des électrons dits « de cœur », considérés comme fortement liés par un potentiel effectif interagissant uniquement avec les électrons dits « de valence ».

Cette approximation présente un grand intérêt dans le calcul théorique de la structure électronique de la matière, car elle permet de ne traiter explicitement que les électrons de faible énergie (qui sont constitutifs, par exemple, de liaisons chimiques) et crée ainsi un gain important des ressources informatiques nécessaires aux calculs. De nombreux schémas de génération de pseudo-potentiels existent. Ils peuvent se baser sur une approche empirique (les paramètres sont ajustés sur les propriétés d'un système réel) ou sur des approches variées et nombreuses se basant sur une modification mathématique de la fonction d'onde électronique en deçà d'une distance donnée au noyau de l'atome. Le pseudo potential était introduit par Fermi pour simplifier les calculs des structures électroniques sans introduire les états atomiques des cœurs et les potentiels forts qui les lient. Il a été développé par Hellman pour calculer les structures électroniques des métaux alcalins. Bachelet et Hamann ont développé des pseudo-potentiels pour un grand nombre d'éléments du tableau périodique. Cette méthode du pseudo potential empirique sert à ajuster le pseudo-potential effectif afin d'avoir une première concordance avec la valeur expérimentale du gap en introduisant un shift dans la bande interdite [28-30].

III. 4. Structure de bandes des semiconducteurs 6H-SiC, et GaAs

La description de la structure des bandes d'énergie s'effectue dans l'espace des vecteurs d'onde c'est-à-dire l'espace réciproque. On considère les variations de l'énergie en fonction de vecteur d'onde que selon les directions de plus haute symétrie et en se limitant à la première zone de Brillouin. La structure de bandes dans les matériaux 6H-SiC et GaAs est représentée sur les figures (III.7) et (III.8). Elles se décomposent en bandes de conduction, bandes de valence et bande interdite qui les séparent, l'énergie de la bande interdite est une mesure de la quantité d'énergie qu'il faut donner à un électron pour transiter du haut de la bande de valence au bas de la bande de conduction sous l'effet d'une excitation quelconque.

Les propriétés de transport électronique dépendent principalement de la structure de bande de conduction la plus basse (BC) et de celle de la bande de valence la plus élevée (BV). Les semi-conducteurs III-V sont à transitions directes c'est-à-dire que le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont localisées au centre de la zone de Brillouin, L'arséniure de gallium GaAs est le représentant le plus connu, de gap 1,41eV. Cependant, le gap reste toujours inférieur à 2 eV environ et ainsi on ne peut pas les considérer comme des matériaux à grand gaps.

Le carbure de silicium appartient à la classe des matériaux généralement désignés sous le nom de semiconducteurs à grand gap. Ceci signifie que l'espace d'énergie, dit interdit (ou gap) entre la bande de valence et la band de conduction est plus grand que pour le GaAs par exemple. Il implique par exemple, qu'il est moins probable que les électrons thermiquement excités franchissent le gap. Dans le cas du 6H-SiC le minimum de la bande de conduction se situe au voisinage du point M et plus généralement pour les structures hexagonales [31].

Les figures (III.7, III.8) représentent les structures des bandes du GaAs et 6H-SiC calculée par la méthode pseudo potentiel.

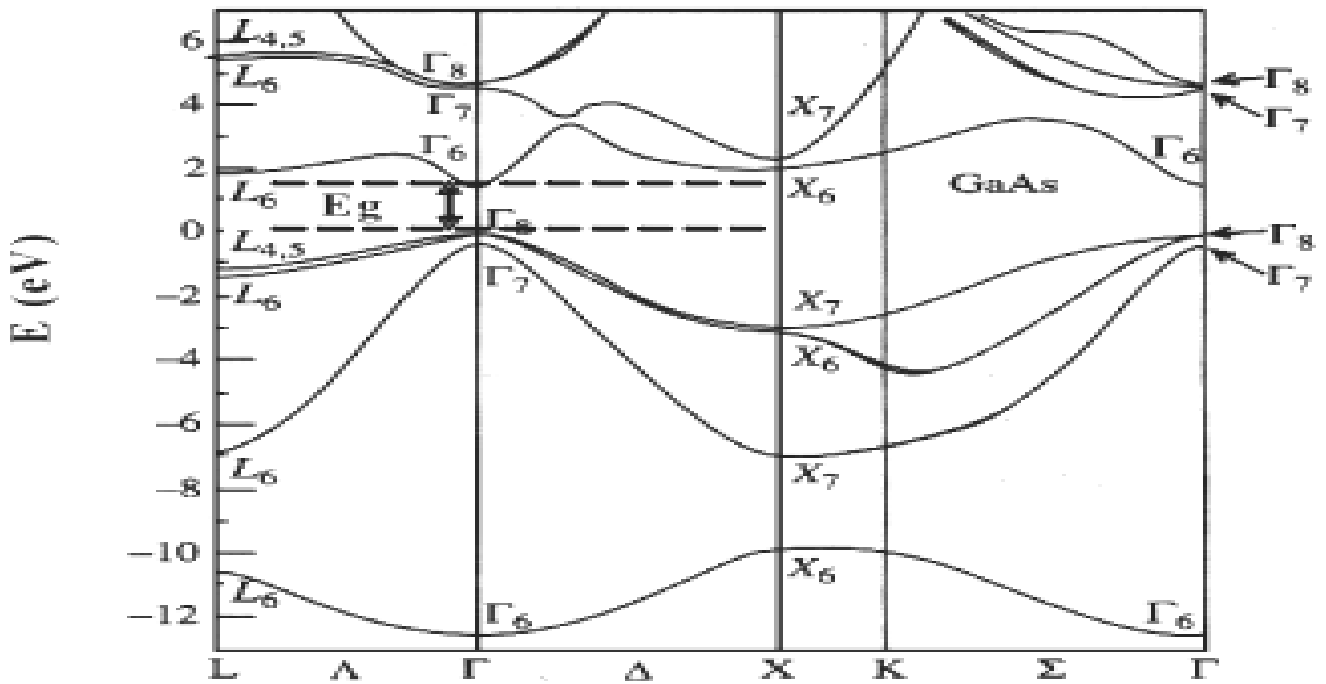


Figure III.7 : Structure de bande électronique du GaAs dont la bande interdite est reportée en pointillés ; $E_g = 1.42$ eV à 300 K. Le maximum de la bande de valence et le minimum de celle de conduction sont au centre de la zone de Brillouin d'où une absorption et une émission de lumière très efficaces (gap direct) [32].

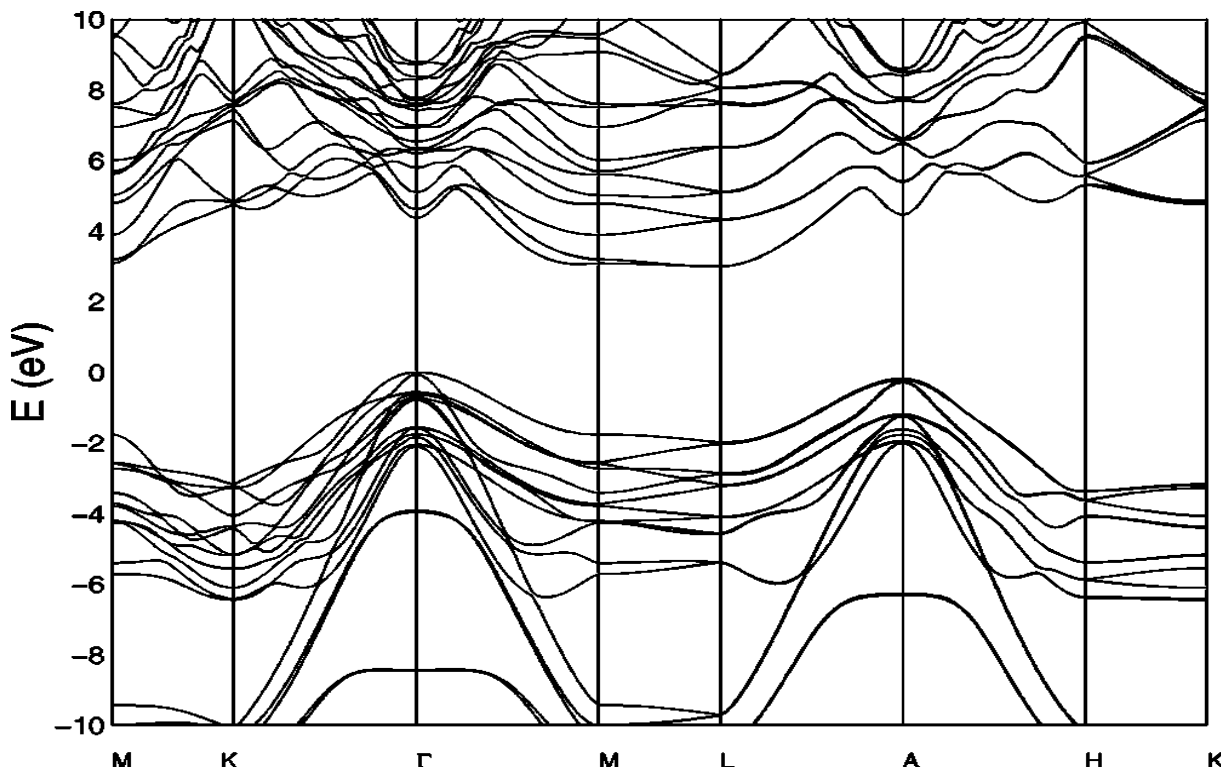


Figure III. 8 : La figure suivante montre la structure de bande du 6H-SiC obtenu par la méthode pseudopotential [33]

IV. Les paramètres physiques des deux matériaux 6H-SiC et GaAs.

IV. Les paramètres physiques des deux matériaux 6H-SiC, GaAs

Dans cette partie, nous avons rassemblé toutes les données relatives à l'étude du transport électronique par la méthode de Monte Carlo ; telles que la constante de réseau, la largeur du gap, les masses effectives dans la bande de conduction, les énergies des phonons optique et acoustique, ...etc.

IV.1 Les paramètres relatifs des deux matériaux

Tableau III. 4: Les paramètres relatifs des deux matériaux 6H-SiC, GaAs.

Paramètres relatifs au matériau	6H-SiC	GaAs
La constante de réseau en Å	a=3,07 ^a c=15,11 ^a	a= 5,36 ^d
Densité (10^3 kg/m^3)	3,2 ^c	5,36 ^d
Affinité électronique (eV)	3,3 ^f eV	0,065 ^e
Energie du phonon LO (meV)	120 ^c	36,13 ^d
Vitesse acoustique longitudinale (10^3 m/s)	13,73 ^c	5,24 ^b
Vitesse acoustique transversale (10^3 m/s)	7,1 ^f	3 ^e
Potentiel de déformation acoustique (eV)	15 ^c	8,9 ^d
Constante diélectrique statique	9,5 ^c	13,18 ^d
Constante diélectrique en haute fréquence	6,5 ^c	10,89 ^d

Notes: ^aRef. 33, ^bRef. 35, ^cRef. 36, ^dRef. 37, ^eRef. 38, ^fRef. 39

IV. 2. Les paramètres relatifs à la structure de bande

IV. 2. 1. L'énergie du gap : Le gap est par définition la largeur de la bande interdite, c'est-à-dire la différence d'énergie entre le minimum absolu de la bande de conduction et le maximum absolu de la bande de valence.

Le tableau III.5 suivant représente les valeurs d'énergie des gaps du 6H- SiC et GaAs.

Matériau	6H-SiC [39]	GaAs [36]
Energie de gap (eV)	3	1,42

Tableau III. 5 : Valeurs d'énergie des gaps du 6H- SiC, GaAs.

IV. 2. 2. Coefficient de non parabolicité

Pour le calcul de l'énergie des électrons dans chaque vallée, on utilise la formule de dispersion de Kane $E(1 + \alpha E) = \hbar^2 k^2 / 2m^*$, α indique le non parabolicité de la structure des bandes.

Matériau 6H-SiC [36]	Vallée				
	Γ_1	U	K	M	Γ_3
Coefficients de non parabolicité (eV ⁻¹)	0.32	0.50	0.03	0.00	0.029
Les valeurs des écarts énergétiques (eV)	00	0.61	0.67	0.90	1.30
Nombre des vallées équivalentes	1	6	2	3	1
Matériau GaAs [37]	Vallée				
	Γ_6	L ₆	X ₆	X ₇	Γ_7^*
Coefficients de non parabolicité (eV ⁻¹)	0.7	0.5	0.3	0.8	0.7
Les valeurs des écarts énergétiques (eV)	0	0.32	0.52	0.87	3.1
Nombre des vallées équivalentes	1	4	3	3	1

Tableau III. 6: Valeurs des coefficients de non parabolicité, les valeurs des écarts énergétiques et le nombre des vallées équivalents pour 6H-SiC, GaAs.

IV. 2. 3. les masses effectives

Un électron dans la bande de conduction est caractérisé par une fonction d'onde qui est la somme de Bloch d'orbitales antiliantes. En terme corpusculaire, c'est une particule dans un potentiel cristallin. On représente cette particule quasi libre de charge $-e$, de masse m^* qu'on appelle *masse effective* de l'électron.

Pour étudier la dynamique des porteurs dans les semi-conducteurs, nous avons besoin des valeurs des masses effectives près des extremums des bandes d'énergie. La masse effective est inversement proportionnelle à la courbure de bande :

$$m^* \propto \frac{1}{\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right)} \quad \text{(III. 17)}$$

E : étant l'énergie de l'électron dans la bande de conduction et \vec{k} le vecteur d'onde.

Pour les semi conducteurs à gap indirect, on introduit les masses effectives longitudinales et transversales.

IV. 2. 3. 1. Masses effectives de conductivité

La mobilité des porteurs est proportionnelle au rapport τ/m^* ($\mu = |q\tau/m^*|$, avec τ le temps de relaxation). Nous pouvons supposer le temps de relaxation isotrope, mais pas la masse effective m^* .

Cette dernière n'est un simple scalaire que pour les électrons de conduction d'une semi-conductrice univallée ($m^* = m_e$).

Dans un semiconducteur multivallée, l'expression précédente est modifiée par le fait que les électrons de chaque vallée sont caractérisés par une masse effective longitudinale m_l^* et une masse effective transversale m_t^* .

Dans ce cas, l'expression de masse effective de conductivité m_{ec} des électrons pour n'importe quel semi-conducteur multivallée cubique :

$$\frac{1}{m_{ec}^*} = \frac{1}{3} \left[\frac{1}{m_l^*} + \frac{2}{m_t^*} \right] \quad \text{(III. 18)}$$

IV. 2. 3. 2. Masse effective de la densité d'états

La masse effective de la densité d'états m_d^* joue dans le semi-conducteur multivallée le même rôle que m_e^* dans la semi-conductrice univallée.

$$m_d^* = (nm_l^{*1/2} m_t^*)^{2/3} \quad \text{(III. 19)}$$

Avec n le nombre de vallées équivalentes.

Le tableau III.7 suivant représente les valeurs de la masse effectives pour 6H- SiC et GaAs.

Matériau	Masse effectifs $\frac{m^*}{m_0}$				
	Γ_1	U	K	M	Γ_3
6H-SiC [36]	0.28	0.39	0.54	0.57	0.60
GaAs [37]	Γ_6	L ₆	X ₆	X7	Γ_7^*
	0.063	0.222	0.58	0.25	0.35

Tableau III. 7 : Les différentes valeurs de la masse effective pour 6H-SiC, GaAs.

Conclusion

La connaissance de la structure cristalline et de la structure des bandes ainsi que les propriétés physiques des matériaux est une étape indispensable avant toute simulation et utilisation du matériau, car elle permet de décrire le comportement des électrons à l'intérieur du semi-conducteur. C'est à quoi, nous nous sommes attelés dans ce chapitre, qui servira de support pour le suivant, lequel va présenter nos résultats de simulation.

Références bibliographiques

- [1] J. Berzelius, *Annalen der Physik* 169, (1824).
- [2] E. Acheson, US Patent 492767 (1893).
- [3] H. Round, *Electrical World* 19, 309 (1907).
- [4] L. Mihai Bogdan ‘‘Etude du dopage par implantation ionique d’Aluminium dans le carbure de silicium pour la réalisation de composants de puissance, Thèse de doctorat, Univ. Lyon (2002).
- [5] C.Gourbeyre, ‘‘Caractérisation et modélisation de couches minces de 3C-SiC sur Si pour applications aux microsystèmes en environnements sévères’’ Thèse de doctorat, Univ. Lyon (2000).
- [6] L. Harris *Properties of silicon carbide*. Washington DC, USA, Data reviews series n°13.282 p. (1975).
- [7] I. EL Harrouni, ‘‘Analyse des défauts et des propriétés électroniques du SiC-4H par voie optique’’, thèse de doctorat, Univ. Lyon (2004).
- [8] X. Kerbiriou, ‘‘Propriétés des défauts ponctuels natifs et induits par irradiation dans les polytypes 3C et 6H du carbure de silicium déterminées par annihilation de positons et rpe’’, thèse de doctorat, Univ. d’orléans (2006).
- [9] B. Guillaume., ‘‘Luminescence induite par microscopie à effet tunnel et étude des propriétés électroniques, chimiques et optiques de la surface de carbure de silicium 6H-SiC(0001)3×3’’, thèse de doctorat, Univ. Paris XI (2007).
- [10] H. Bousbia., ‘‘Analyse et développement de la caractérisation en puissance, rendement et linéarité de transistors de puissance en mode impulsionnel’’, thèse de doctorat, Univ. Limoges(2006).
- [11] V. Heu., ‘‘Optimisation des étapes technologiques pour la fabrication de composants de puissance en carbure de silicium’’, thèse de doctorat, Institut national des sciences appliquées de Lyon (2006)
- [12] O. Ambacher, ‘‘Growth and applications of group III nitrides’’, *journal of physics D (Applied Physics)*, vol. 31, pp. 2653-2710, 1998.

- [13] M. Audrey philippon., “étude d’une nouvelle filière de composants sur technologie nitrure de gallium : Conception et réalisation d’amplificateurs distribués de puissance large bande à cellules cascades en montage flip-chip et technologie MMIIC”, thèse de doctorat, Univ Limoges (2007).
- [14] NMS Archive: <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/>.
- [15] R.Castagné, J. P. Duchemin, M.Gloanec, Ch.Rumelhard, « Circuits Intégrés en Arséniure de gallium, Physique, Technologie et Règles de Conception », Edition Masson, Paris1989.
- [16] G.Goureaux, « Physique des composants à semi-conducteurs », Edition Masson, Paris, 1994.
- [17] L.W. Wang et A. Zunger, “Pseudopotential-based multiband k.p method for ~250 000-atom nanostructure systems”, *Phys. Rev. B* 54, 16, 11417-35 (1996).
- [18] M. Willatzen, M. Cardona et N. E. Christensen, “Linear muffin-tinorbital and k.p calculations of effective masses and band structure of semiconducting diamond” *Phys. Rev B* 50, 24, 18054-59 (1994).
- [19] P. Vogl, H.P. Hjalmarson et J.D. Dow, “A semi-empirical tight-bindingtheory of the electronic structure of semiconductors”, *J. Phys. Chem. Solids*, 44, 5,365-378 (1983).
- [20] J.M. Jancu, R. Scholz, F. Beltram et F. Bassani “Empirical spds* tight-binding calculation for cubic semiconductors: General method and material parameters”, *Phys. Rev. B* 57, 11, 6493-6507 (1998).
- [21] M. Born, J.R. Oppenheimer, *Ann. Phys.* 87,457 (1927)
- [22] P. Kiréeve, «La physique des semiconducteurs ».Edition Mir, Moscou (traduction française 1975).
- [23] J. C. Slater, « Quantum Theory of Molecules and Solids », vol2, Ch. 8 (1965).
- [24] Henry Mathieu. Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques, Masson, (1987).
- [25] S. Bounab.” Etude des états électroniques et positronique de l’alliage AlInN dans la phase Zinc-Blinde” mémoire de magister. Université de Constantine (2002).

- [26] Peter Y. YU, Manuel Cardona. "Fundamentals of semiconductors Physics and materials", properties. Springer (2001).
- [27] M. L. Cohen, "Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors", Springer-Verlag (1988).
- [28] H. Baaziz. "Étude des propriétés électronique et structurales des alliages semiconducteurs penternaires GaInPSbAs", Thèse d'état en sciences des matériaux. Université de Batna (2006).
- [29] G. B. Bachelet, D. R. Hamann and M. Schlüter, *Phys. Rev. B* 26 (1982) 4199-4228.
- [30] A. Chebihi, E.M. Oualim, M. Harmouchi, J.P. Vigneron, P. Lambin. "Propriétés optiques et électroniques du silicium et leurs applications dans le transfert radiatif". *Phys. Chem. News* 3 (2001).
- [31] C. Persson and U. Linderfelt. "Relativistic band structure calculation of cubic and hexagonal SiC polytypes". *J. Appl. Phys.*, **82** (1997), p. 11.
- [32] P. Y. Yu and M. Cardona, "Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties", Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New-York (2001).
- [33] M. E. Levinshtein, S.L. Rumyantsev and M.S. Shur, "Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, SiC, BN, SiC, SiGe", Newyork, John Wiley & Sons, Inc., p. 93-148 (2001).
- [34] H. E. Nilsson, M Hjelm, C Fröjdh, C Persson, U Sannemo, and C. S. Petersson, *J. Appl. Phys.* 86, (1999) 965-973.
- [35] W. Michael., "Analysis of Zincblende-Phase GaN, Cubic-Phase SiC, and GaAs MESFETs Including a Full-Band Monte Carlo Simulator", In Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree Doctor of Philosophy, School of Electrical and Computer Engineering Georgia Institute of Technology (2005).
- [36] H. Arabshahi., *International Journal of Modern Physics B* Vol. 22, No. 30 (2008) 5289-5297.
- [37] T González Sanchez et al "semicond. Sci. Technol. 6 (1991) 862-871. Printed in the UK.
- [38] <http://www.semiconductors.co.uk>.
- [39] NSM Archive - Silicon Carbide (SiC) - Basic Electrical parameters.

Chapitre 4

Introduction :

Le développement de la recherche dans le domaine des semi-conducteurs (IV-IV, III-V, II-VI) nécessite entre autres, l'étude des phénomènes de transport des électrons dans le matériau dans des conditions variables de température et de champ électrique appliqué.

Ces dernières décennies ce type d'investigation a connu une progression énorme. Parmi les modèles les plus efficaces pour étudier les caractéristiques de transport électronique dans des matériaux et dispositifs semi-conducteurs, figure le modèle microscopique de transport basé sur la méthode de Monte Carlo.

Dans les calculs de Monte Carlo sur les semiconducteurs, le modèle de la structure de bandes joue un rôle important, notamment pour l'étude des propriétés du transport électronique à champ élevé.

Dans le cas où l'on souhaite étudier le transport sous champ électrique intense, il y a des modèles dits « bande complète » ou « full band », ce type de calcul nécessite d'introduire toute la structure de bandes. Cependant, ceci demande un temps de calcul important car la structure de bande complète est complexe et ne peut être déterminée que de façon numérique. En outre, dans une telle approche, les taux d'interaction sont également calculés numériquement, ce qui contribue encore à consommer en puissance de calcul. Une solution acceptable (et nous allons le vérifier tout au long de ce travail) est de prendre en considération un nombre restreint de vallées de la structure de bande.

Dans ce travail, nous allons tenter d'optimiser le nombre de ces vallées, prises en compte dans le programme de simulation, afin d'obtenir les résultats les plus précis possibles, tout en améliorant l'efficacité du calcul pour les champs électriques de plus en plus intenses. Pour cela, nous avons effectué une étude comparative entre deux modèles prenant en compte trois et cinq vallées considérées comme non paraboliques dans la bande de conduction, et ce, pour les deux matériaux choisis (6H-SiC et GaAs). Pour ce faire, nous avons mis en œuvre un code de Monte Carlo écrit en langage C++, élaboré initialement au sein de l'URMER de l'université de Tlemcen.

Pour étudier le comportement des électrons, nous avons simulé 20.000 particules soumises à un champ électrique. Le champ électrique est appliqué dans la direction perpendiculaire à l'axe c pour le matériau 6H-SiC de structure hexagonale. Pour GaAs de

structure cubique, le champ électrique est appliqué selon la direction $\langle 100 \rangle$. Nos travaux, sont comparés à d'autres résultats à la fois de calcul et de l'expérience.

Nous allons examiner les deux régimes, permanent et transitoire dans les deux modèles trois et cinq vallées et pour des conditions de travail similaires (champ électrique appliqué, température...etc.) :

- ❖ Dans le régime stationnaire, nous calculons les différentes interactions en fonction de l'énergie, la vitesse de dérive, l'énergie et le coefficient de repopulation en fonction du champ électrique appliqué.
- ❖ Dans le régime transitoire, nous étudions l'évolution de la vitesse et l'énergie en fonction du temps pour plusieurs champs électriques.

I. filières de composés IV-IV (6H-SiC)

I. filières de composés IV-IV (6H-SiC)

Pour le transport d'électrons de semi-conducteurs dans la méthode de Monte Carlo pour le transport d'électrons de semi-conducteurs, on suppose que le mouvement des particules dans le solide est décrit par la trajectoire libre semi classique interrompue par des événements aléatoires instantanés. La simulation qui vient d'être décrite nécessite une bonne connaissance des caractéristiques du matériau étudié, en particulier les caractéristiques de la bande de conduction jouent un rôle prépondérant dans l'étude des phénomènes de transport, notamment quand le champ appliqué est élevé. Les niveaux des minima des vallées indiquent l'énergie à partir de laquelle un électron peut être transféré, modifiant ainsi éventuellement ses conditions de transport. Dans ce travail, on a utilisé la simulation par la méthode de Monte Carlo pour étudier les propriétés électroniques de la variété allotropique 6H-SiC du carbure du silicium.

La structure de bande des semiconducteurs à réseau hexagonal est complexe et assez difficile à déterminer, en tous cas bien plus que dans le cas des structures cubiques. Elle présente souvent des imbrications et chevauchement des bandes. Ceci s'est vérifié sur le carbure de silicium hexagonal. Dans le travail d'Arabshahi [1], la structure de bande de 6H-SiC a été calculée par la méthode pseudo-potentielle empirique. Contrairement à d'autres auteurs, le gap trouvé est direct avec un premier minimum de la bande de conduction au point Γ . Ceci semble être corroboré par le fait que dans la vallée M, les électrons ont une masse effective plus grande que Γ_1 et par conséquent une plus faible mobilité.

Afin de pouvoir comparer nos résultats, nous avons adopté cette dernière structure de bande. Pour implémenter la simulation Monte Carlo, nous avons utilisé un modèle analytique multivallée de la bande de conduction [2, 3]. Ce modèle prend en compte jusqu'à cinq vallées. En fait nous en avons pris 3 comme minimum pour rendre compte du transport à fort champ, et 5 pour s'approcher du modèle full band. Les vallées sont prises à partir de deux bandes de conduction, qui comprennent le minimum de la bande de conduction qui se trouve comme mentionné précédemment en vallée Γ , nommé Γ_1 et quatre vallées satellites, situées respectivement aux points U, K, M et Γ_3 . La vallée satellite U est la plus basse de la bande de conduction et la vallée Γ_3 est la plus élevée. Dans l'espace des moments, U est située à peu près au deux tiers de la distance de L à M. Dans cet espace, les vallées et leurs équivalents (six pour la vallée U, trois pour la vallée M et deux pour la vallée K) sont prises comme non

paraboliques, où les électrons sont répartis selon la statistique de Boltzmann. Dans la bande de conduction, la relation entre l'énergie des électrons E et le vecteur d'onde k est de la forme analytique [4,5].

$$E(k)[1 + \alpha_i E(k)] = \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{k_x^2 + k_y^2}{m_t} + \frac{k_z^2}{m_l} \right] \quad (\text{IV.1})$$

Avec m_t , m_l , les masses effectives transversale et longitudinale et α_i le coefficient de non-parabolicité dans la i ème vallée.

La formule analytique de l'équation (IV.1) représente la formule de dispersion d'une bande anisotrope (vallées ellipsoïdes). A l'aide de la transformation de Herring-Vogt, il est possible de s'affranchir de cette anisotropie en transformant le système de coordonnées afin d'obtenir un espace isotrope (vallées sphériques) qui nous permet de traiter le problème d'une façon plus simple.

Dans le programme de simulation de Monte Carlo que nous employons pour étudier les phénomènes de transport de 6H-SiC, on utilise deux modèles ; le premier modèle implique trois vallées (Γ_1 , U, K) et le deuxième modèle comporte cinq vallées (Γ_1 , U, K, M, Γ_3). Tout comme Arabshahi, nous avons considéré les interactions avec les phonons acoustiques, optiques polaires, intervallées, ainsi que les interactions avec les impuretés ionisées qui sont en fait les dopants introduits volontairement. Nous avons supposé qu'il n'y a pas d'autre impureté en concentration suffisante, de nature à influencer sur le transport des électrons.

Les données relatives à la structure de bande du 6H-SiC sont résumées dans le tableau IV.1

Matériau 6H-SiC [1]	Vallée				
	Γ_1	U	K	M	Γ_3
Coefficients de non parabolicité (eV^{-1})	0.32	0.50	0.03	0.00	0.029
Ecart énergétique (eV)	00	0.61	0.67	0.90	1.30
Masse effective m^*/m_0	0.28	0.39	0.54	0.57	0.60

Tableau IV.1. Données extraites de la structure de bande du 6H-SiC

Nous avons entrepris une étude comparative du transport électronique entre les deux modèles trois et cinq vallées. Nous abordons les caractéristiques de vitesse et de l'énergie avec quelques confrontations à des résultats expérimentaux et théoriques.

Les propriétés électriques du matériau semi-conducteur 6H-SiC sont connues pour être meilleures dans la direction perpendiculaire à l'axe c . En effet, la mobilité des électrons, la vitesse de saturation et l'énergie dans la direction perpendiculaire à l'axe c sont quatre fois plus élevés que dans la direction parallèle [6]. Pour cette raison, nous avons fait, dans cette étude le choix d'appliquer le champ électrique dans la direction perpendiculaire à l'axe c .

Avant de décrire les résultats obtenus concernant le transport en régime stationnaire et transitoire, il nous semble intéressant d'étudier l'évolution de la probabilité d'interaction en fonction de l'énergie des électrons et de la température du réseau, ce qui va nous donner une idée du rôle des divers phonons impliqués dans les interactions.

I. 1. Probabilités d'interaction par unité du temps en fonction de l'énergie et l'effet de la température sur les interactions

I. 1. Probabilités d'interactions par unité du temps en fonction de l'énergie et l'effet de la température sur les interactions

Durant leurs mouvements à l'intérieur du réseau cristallin, les électrons peuvent subir plusieurs interactions élastiques ou inélastiques. Leur rôle diffère selon l'énergie acquise par l'électron. La probabilité de ces interactions change également avec la température du réseau. Dans ce paragraphe, nous illustrons les différentes interactions pour trois températures: $T=100\text{K}$, $T=300\text{K}$ (température ambiante) et $T=500\text{K}$, nous faisons ce travail pour 6H-SiC et pour les modèles à trois et cinq vallées.

Les résultats seront présentés pour les interactions acoustiques (figures IV. 1), les interactions avec les impuretés (figures IV.2), les interactions intervallées d'absorption et d'émission (figures IV. 3 à IV. 7), les interactions intravallées d'absorption et d'émission (figures IV.8) et les interactions optiques polaires (figures IV.9).

I. 1.1. Interactions élastiques

Ces interactions n'influent pas de façon essentielle sur le comportement de l'électron à fort champ, car elles n'impliquent pas de transfert d'énergie. Elles sont néanmoins introduites pour obtenir une description aussi quantitative que possible de la dynamique électronique. Les interactions acoustiques et celles avec les impuretés rentrent dans cette catégorie.

- **Interactions acoustiques**

Les interactions acoustiques en fonction de l'énergie pour différentes températures sont représentées dans la figure IV. 1 pour le matériau 6H-SiC dans les deux modèles (trois et cinq vallées) dans les deux modèles. Nous remarquons que ce type d'interactions est très faible dans la vallée Γ_1 .

La probabilité de cette interaction augmente avec l'énergie et avec la température pour une énergie donnée.

- **Interactions avec les impuretés**

C'est une interaction élastique dont la probabilité est dépendante de la concentration en impuretés. Pour une concentration nulle en impuretés $N=0$; l'effet de l'interaction est, bien évidemment nul. Cette distribution tend à être uniforme quand le dopage est élevé, cette interaction est fortement prépondérante en champ faible (faible énergie).

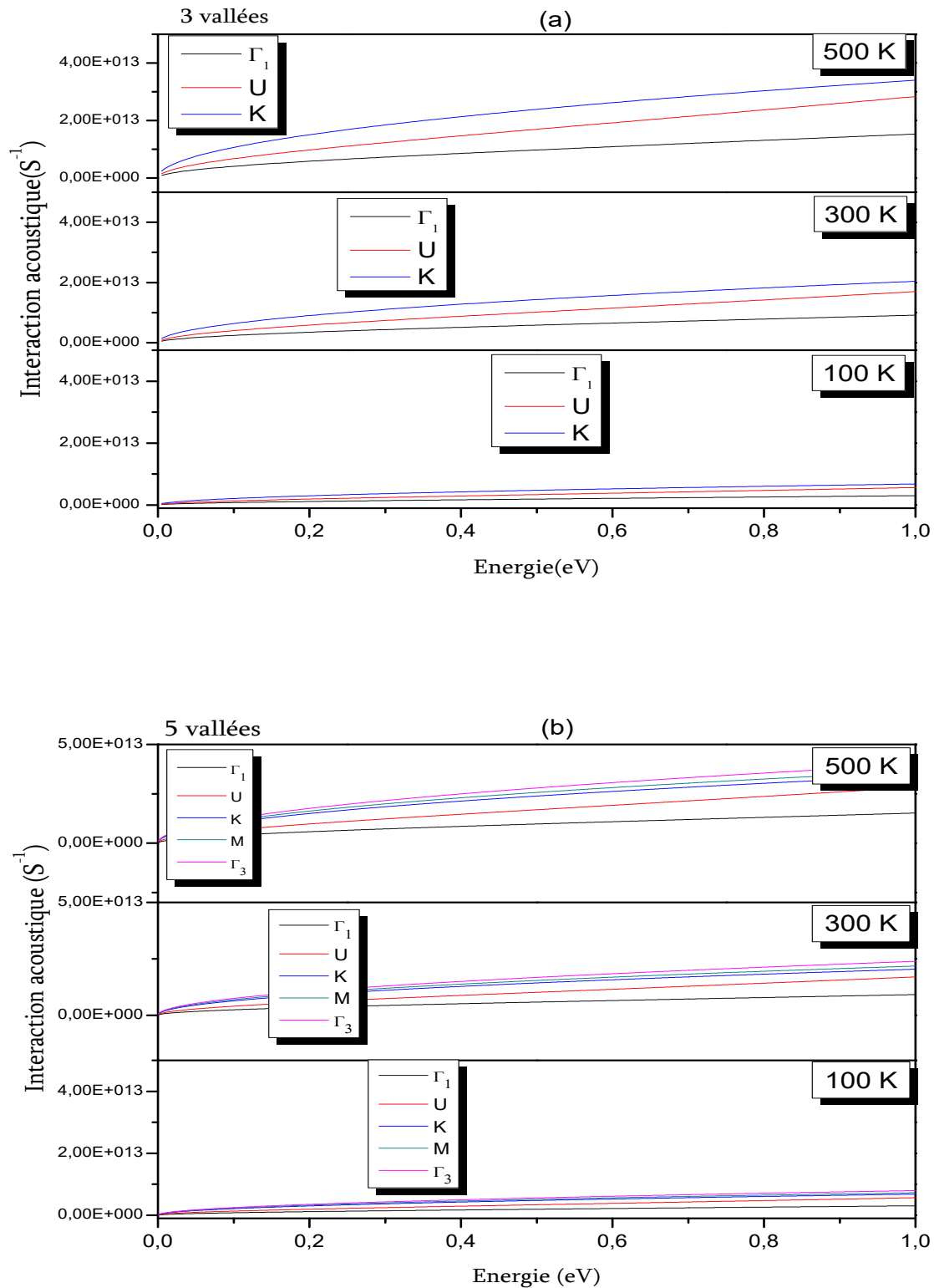


Figure IV. 1: Interactions acoustiques ((a)modèle 3 vallées, (b) modèle 5 vallées) en fonction de l'énergie pour des températures de 100, 300 et 500K

Nous avons trace sur la figure IV. 2, la probabilité d'interaction avec les impuretés en fonction de l'énergie de l'électron, dans les deux modèles trois et cinq vallées pour un dopage de 10^{18} cm^{-3} aux températures 100, 300 et 500K.

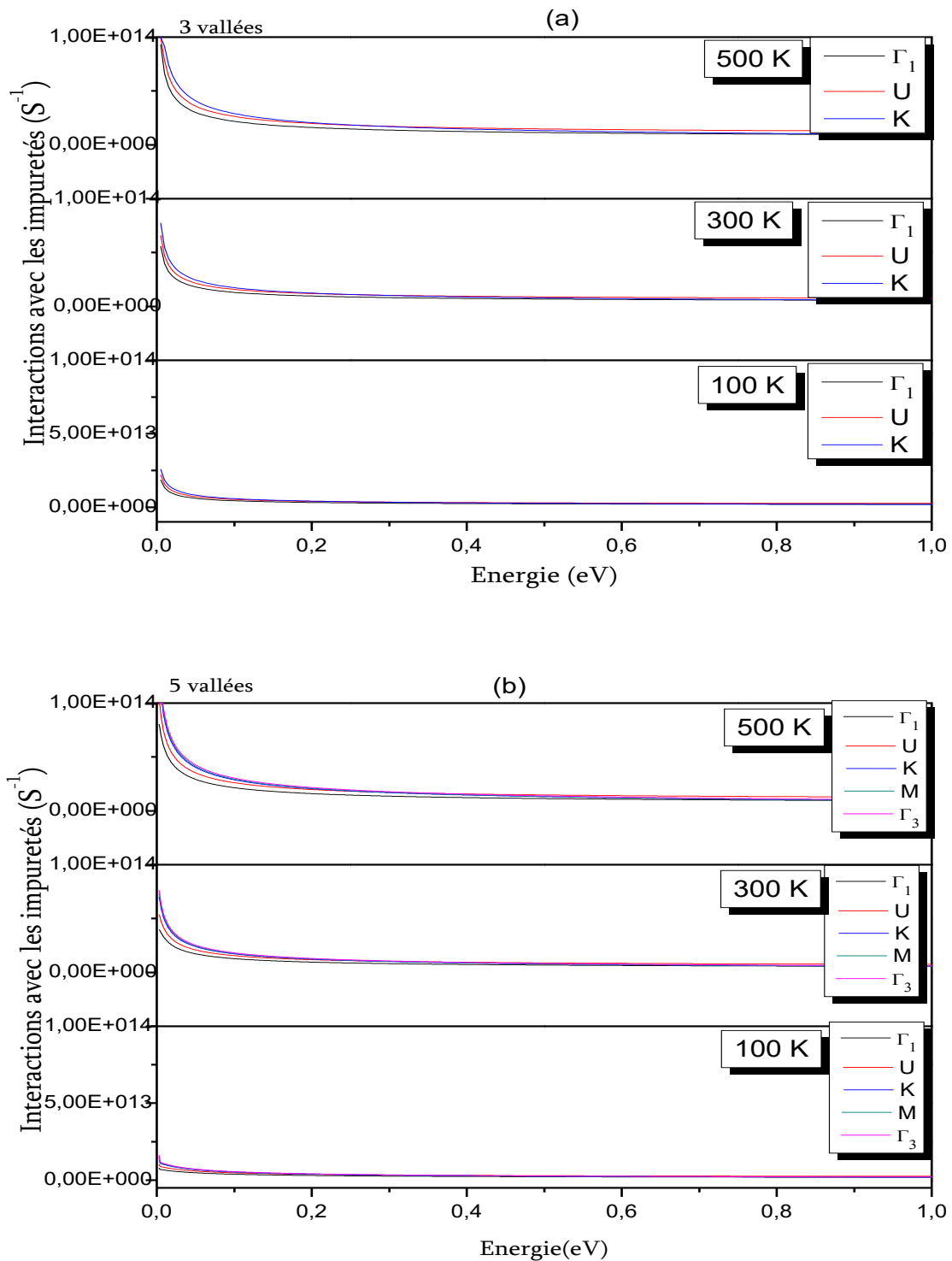


Figure IV. 2: Interactions avec les impuretés ((a) modèle 3 vallées, (b) modèle 5 vallées) en fonction de l'énergie pour 6H-SiC à des températures de 100, 300 et 500K

On constate sur ces figures que les interactions avec les impuretés sont très faibles dans les deux modèles. Leur probabilité diminue avec l'énergie à faible énergie puis atteint une valeur stationnaire uniforme. Cette probabilité augmente cependant légèrement avec la température. Notons cependant pour ces deux interactions élastiques, bien que la probabilité d'interaction augmente légèrement quand la température est augmentée, elle demeure inférieure (à haute température) à celle provoquant les collisions avec les phonons optiques.

I. 1. 2. Interaction inélastiques

- **Interactions intervallées d'absorptions et émissions**

Quand un électron est transféré vers une autre vallée, aux effets directs de l'interaction elle-même, viennent s'ajouter toutes les discontinuités dues à la non équivalence éventuelle des vallées d'origine et d'arrivée.

En particulier, comme l'énergie cinétique de l'électron se mesure à partir du minimum de la vallée qu'il occupe, un transfert vers une vallée non équivalente provoque une importante variation d'énergie cinétique correspondant à la différence de niveaux entre les deux vallées.

La figure IV.3 représente toutes les transitions possibles des vallées Γ_1U , Γ_1K , $U\Gamma_1$, UK , $K\Gamma_1$ et KU (absorptions et émissions) pour le modèle à trois vallées. Les transitions d'absorptions et d'émissions pour le modèle à cinq vallées sont portées sur les figures IV.4, IV. 5 et IV.6.

a. Modèles trois vallées

On voit sur la figure IV.3 que les probabilités d'interactions intervallées d'absorption sont faibles dans toutes les transitions, surtout pour températures faibles à modérées (100 K-300 K). Elles sont beaucoup plus faibles que les probabilités par émission.

Dans le domaine de température élevé (500 K), la probabilité d'interaction intervallées d'absorption UK , Γ_1K sont les plus prédominantes.

En effet pour des petites énergies ($E < 0,2$ eV), la probabilité d'interaction intervallées d'absorption UK augmente avec l'énergie. Car l'énergie de séparation ΔE_{UK} est très petite (0,06 eV) par rapport à l'énergie de séparation entre les autres vallées. Donc pour des faibles énergies les électrons vont acquérir une énergie supérieure à l'énergie de séparation ΔE_{UK} . L'interaction intervallées d'absorption Γ_1K qui était nulle commence à augmenter faiblement

quand l'énergie $E > 0,5$ eV ; parce qu'en augmentant la température, le gap se réduit et les électrons peuvent ainsi aller occuper les vallées supérieures.

Dans le cas de l'émission, les interactions intervallées $U\Gamma_1$, Γ_1U qui sont les plus dominantes est le plus importantes pour chaque valeur de température, car c'est cette transition qui est la plus favorable énergétiquement.

b. Modèle cinq vallées

Dans les figure IV.4- IV.6, on constate que à faible énergie ce sont les interactions intervallées d'absorption UK, KM, MK et $M\Gamma_3$ qui sont les plus dominantes car les électrons ont acquis une énergie supérieure à l'énergie de séparation $\Delta E_{M\Gamma_3}$ et ΔE_{KM} . C'est là une preuve que le transfert vers les autres vallées est possible; la vallée M reçoit les électrons de la vallée K plus qu'elle émet vers la vallée Γ_3 . Les électrons vont ainsi pouvoir émigrer dans la vallée M, puis la vallée K qui sont les vallées les plus proches par rapport à la vallée Γ_3 .

Dans le cas d'interactions intervallées d'émissions (figure IV.4- IV.6) ; On voit qu' à faible énergie, ce sont les interactions intervallées d'émission KM, MK, Γ_3M , Γ_3K , KU, MU, $U\Gamma_1$ qui sont les plus dominantes, mais les interactions KU, KM, MU et $U\Gamma_1$ augmentent plus faiblement que les interactions MK, Γ_3M et Γ_3K .

Dans ces types d'interaction, on note que :

- Les probabilités d'émissions sont plus grandes que celles d'absorptions.
- L'effet de la température est plus importante dans le cas des interactions intervallées d'absorption et il est faible dans le cas d'émission (figures IV.3- IV.6).

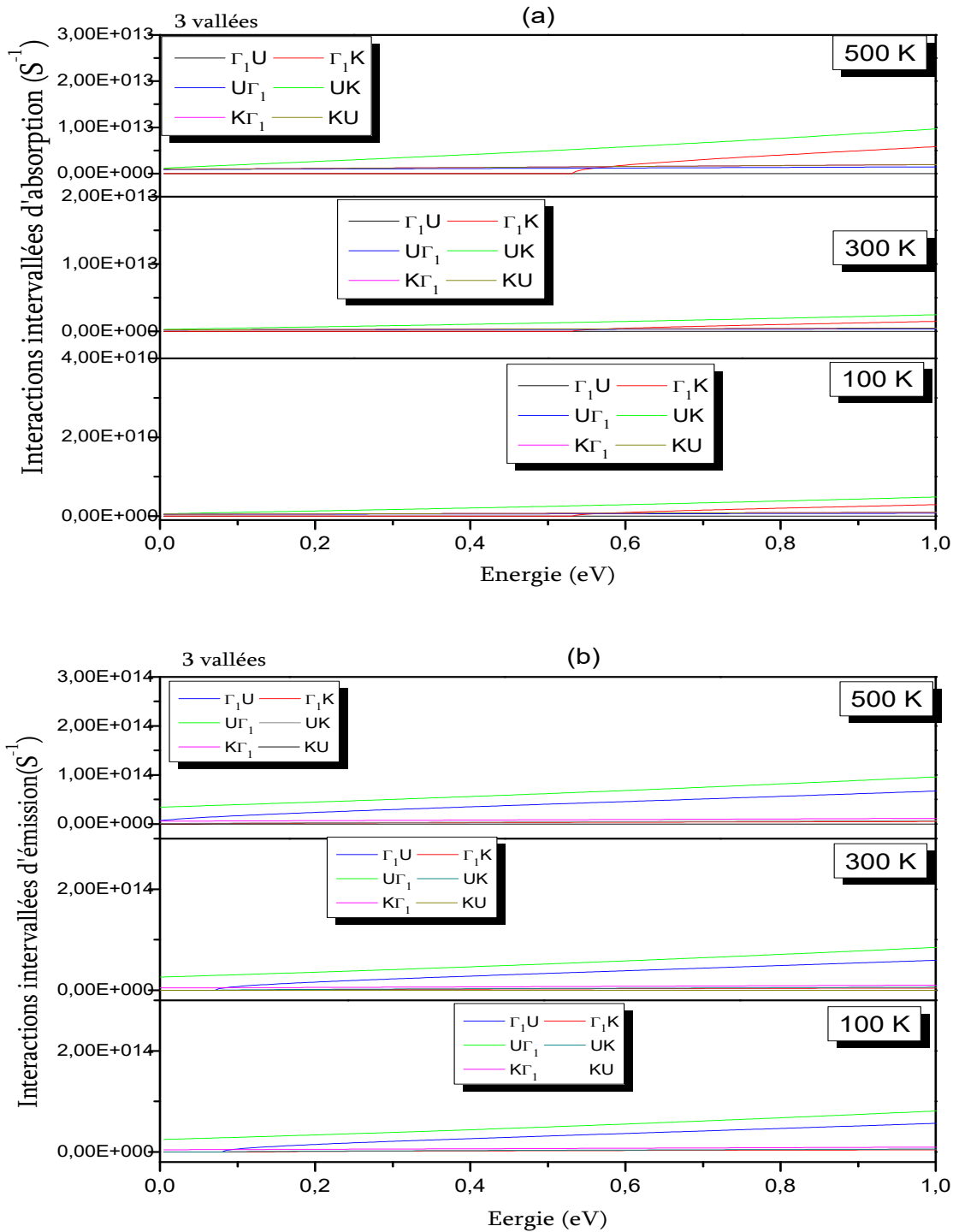


Figure IV. 3: Interactions intervalées d'absorptions (a) et émissions (b) en fonction de l'énergie pour 6H-SiC à températures 100 K, 300K et 500 K (modèle 3 vallées).

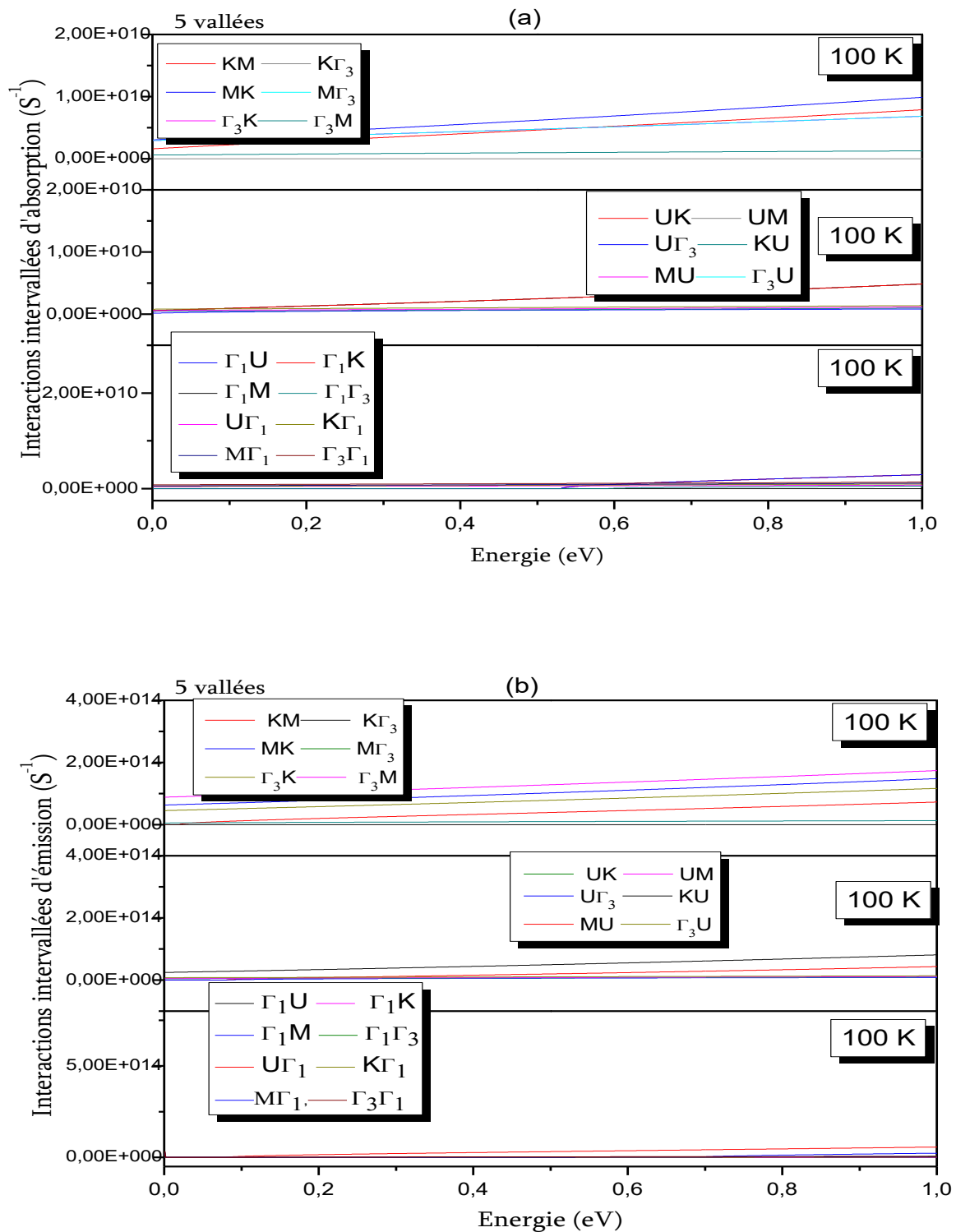


Figure IV. 4: Interactions intervalées d'absorption (a) et émission (b) en fonction de l'énergie pour 6H-SiC à températures 100 K (modèle 5 vallées).

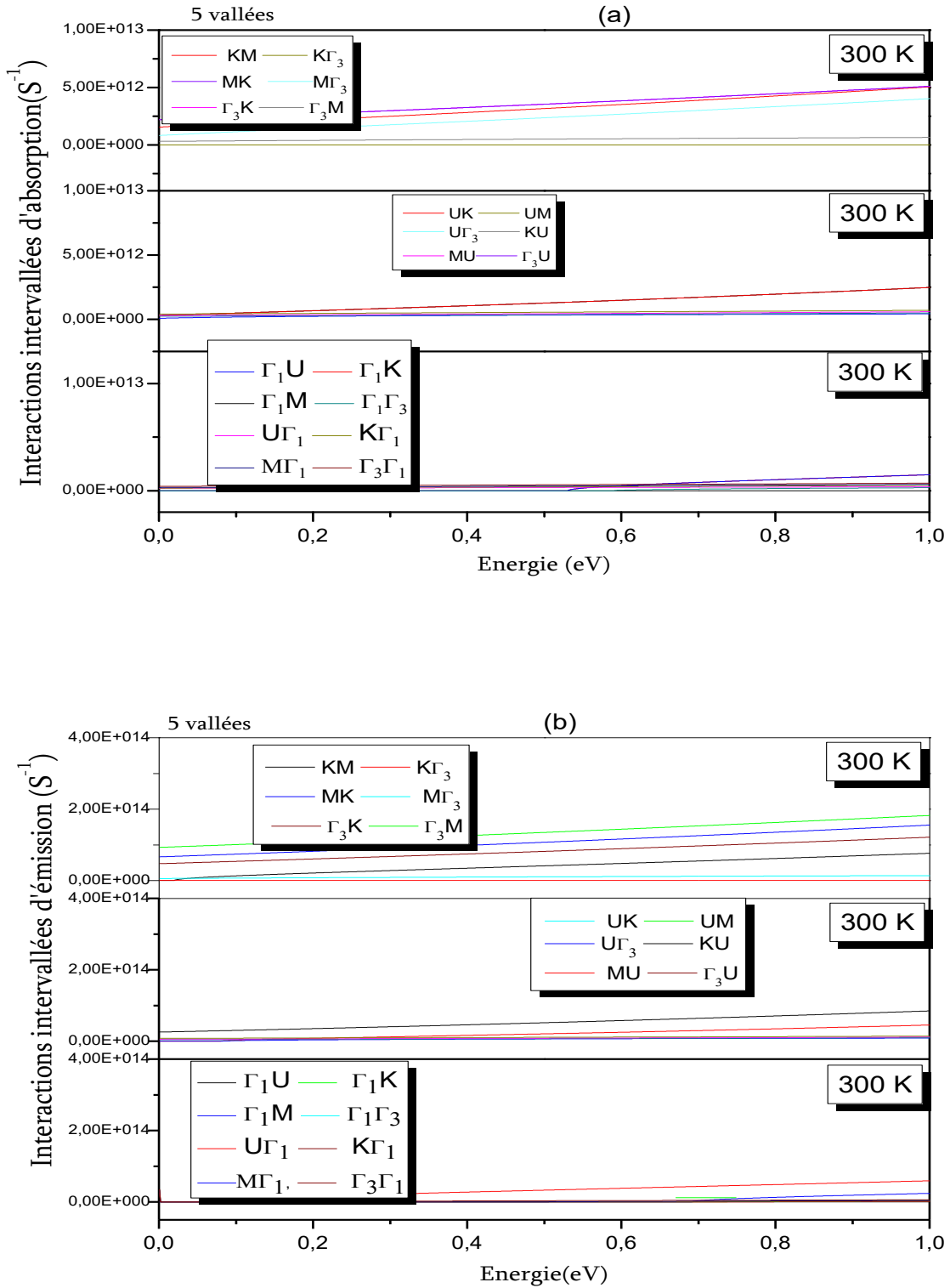


Figure IV. 5: Interactions intervalées d'absorptions (a) et émission (b) en fonction de l'énergie pour 6H-SiC à températures 300 K (modèle 5 vallées)

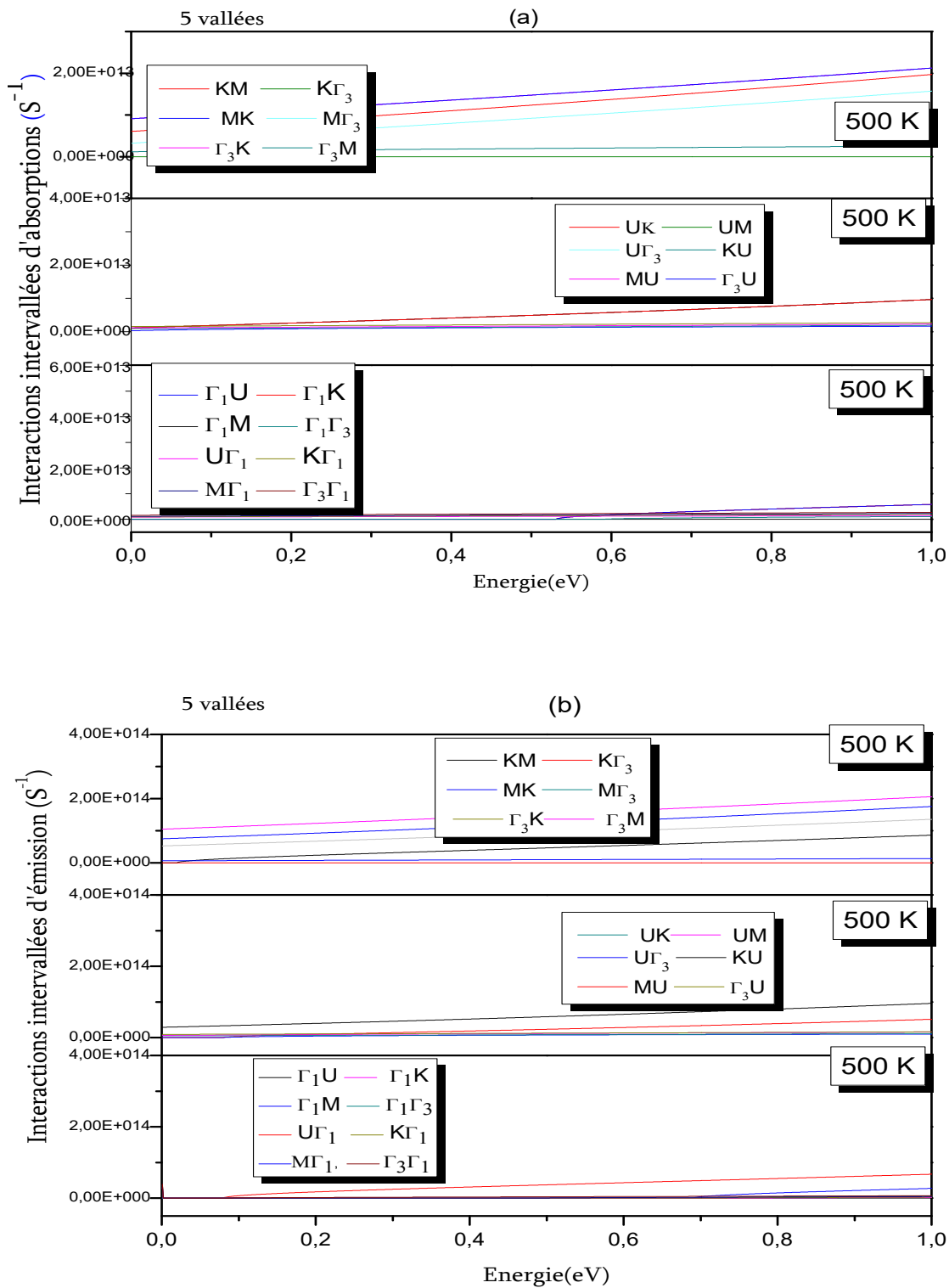


Figure IV. 6: Interactions intervalles d'absorptions (a) et émission (b) en fonction de l'énergie pour 6H-SiC à température 500K (modèle cinq vallées).

- **Interactions intravallées**

Dans les figures IV. 7 et IV. 8, nous représentons les interactions intravallées (absorptions et émissions) en fonction de l'énergie des électrons dans les deux modèles trois et cinq vallées.

La figure IV. 7 représente les interactions intravallées d'absorption et d'émission dans le modèle 3 vallées, comme pour le cas des interactions précédentes, les interactions intravallées augmentent avec l'énergie des porteurs et deviennent plus importantes dans la vallée K par ce qu'en augmentant la température, le gap devient plus petit et les électrons peuvent ainsi aller occuper les vallées supérieurs (le cas d'absorption).

Dans le cas de modèle cinq vallées (figure IV.8) : les interactions intravallées d'absorptions et d'émissions augmentent avec l'énergie des porteurs et elles sont plus importantes dans les vallées K et M et moins importantes dans la vallée supérieure Γ_3 , à cause de la masse effective des électrons est grande dans cette vallée et faible dans les vallées les plus bas de la bande de conduction Γ_1 , U dans les deux cas d'absorption et d'émission

Pour les deux modèles, les probabilités d'émissions sont plus grandes que celles d'absorption. Les interactions intravallées dépendent peu de la température par ce qu'elles se passent dans la même vallée dans les deux modèles à trois et à cinq vallées.

I. 1. 3. Interactions optiques polaires

L'évolution des interactions optiques polaires dans les modèles trois et cinq vallées sont représentées dans la figure IV. 9 dans le cas d'absorption et d'émission:

Les interactions optiques polaires sont importantes dans toutes les vallées et sont caractérisées par une absorption ou émission d'un phonon optique.

On remarque que le seuil correspondant à l'énergie du phonon optique polaire est de l'ordre de 0,12 eV, les probabilités d'interactions d'émission sont plus importantes que celles d'absorption et leur valeur augmente considérablement quand l'énergie des électrons augmente entre ce seuil de 0,12 eV et environ 0,3 eV, pour garder une valeur quasi-constante par la suite. L'électron qui est entraîné dans la direction du champ électrique durant le vol libre sera donc dévié de sa trajectoire sous l'effet de cette interaction.

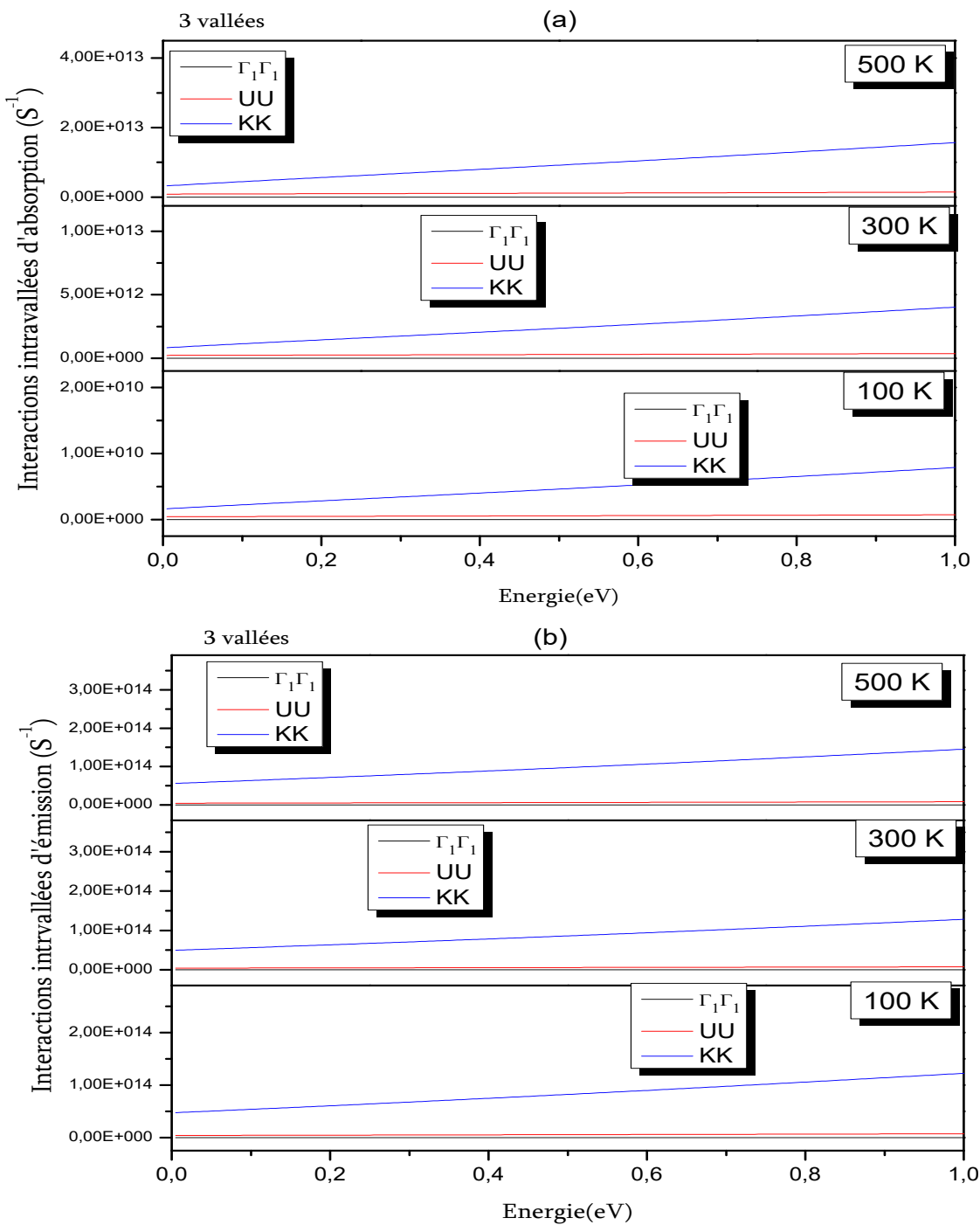


Figure IV. 7: Interactions intravallées d'absorptions(a) et émissions(b) en fonction de l'énergie pour 6H-SiC à des températures 100 K, 300K et 500K. (modèle 3 vallées)

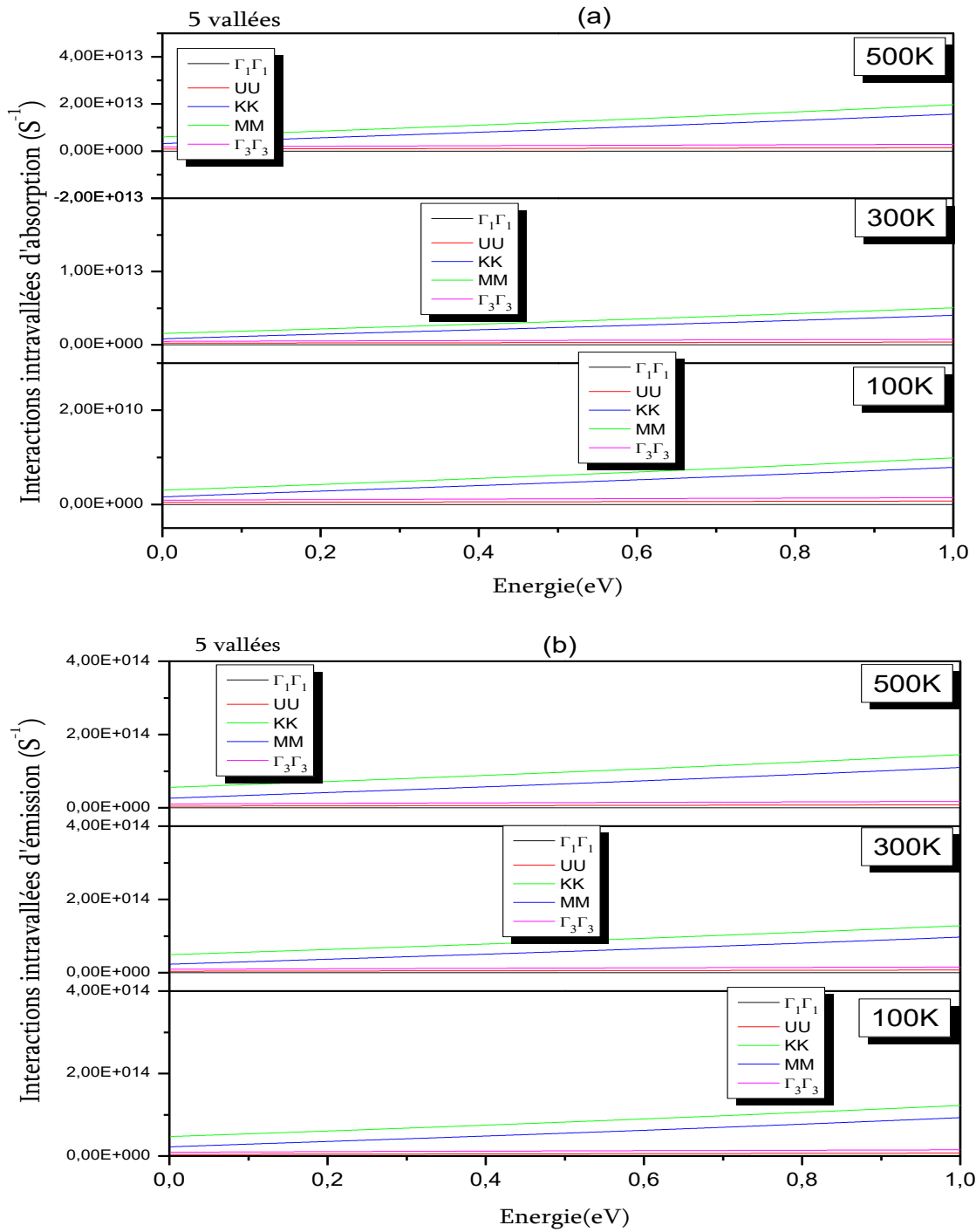


Figure IV. 8: Interactions intravallées d'absorptions(a) et émissions(b) en fonction de l'énergie pour le 6H-SiC à des températures 100K, 300 K et 500K (modèle 5 vallées).

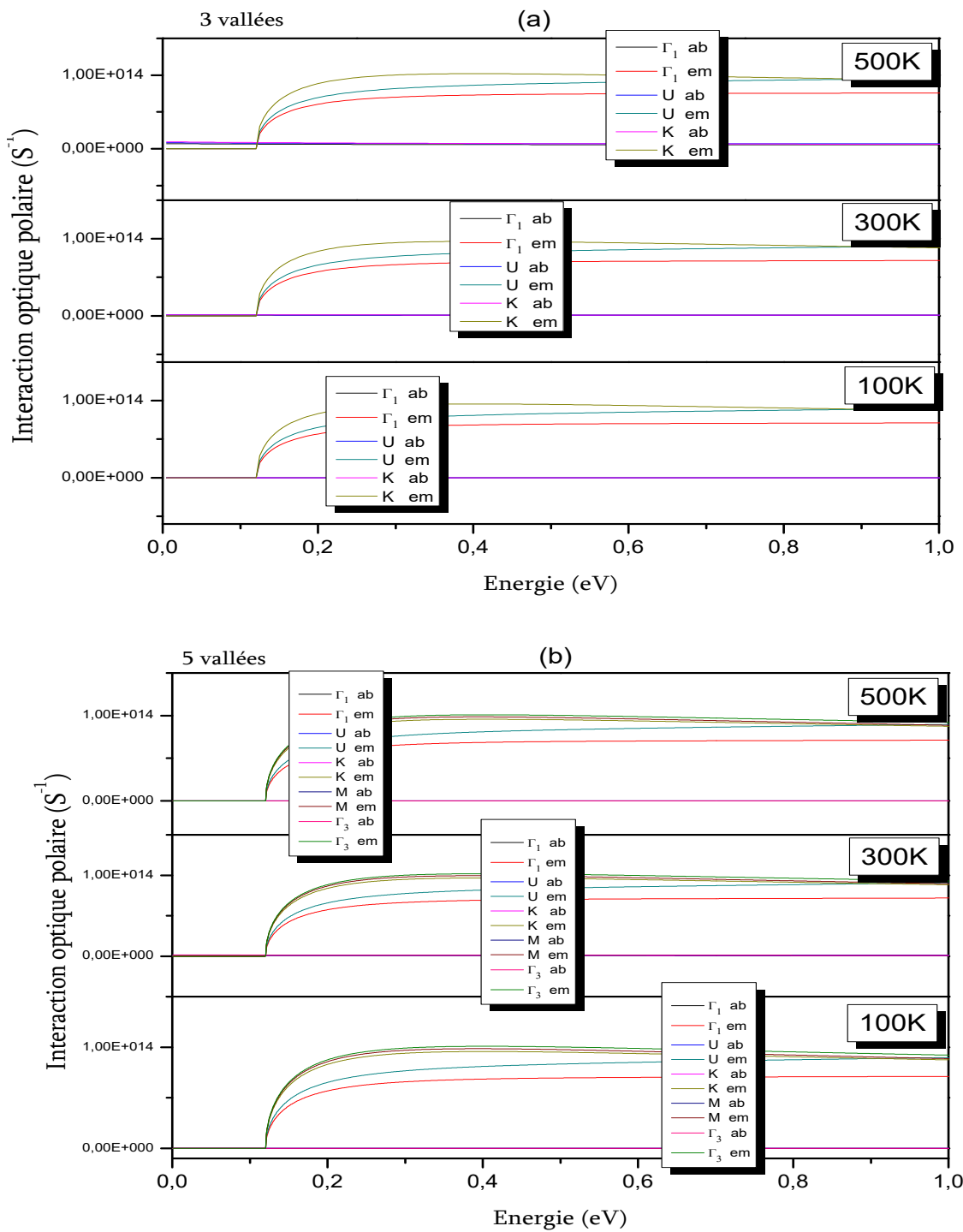


Figure IV. 9 : les interactions optiques polaires absorptions et émissions en fonction de l'énergie pour le 6H-SiC à des températures 100K, 300K et 500K ((a)modèle 3 vallées, (b) modèle 5 vallées)

Bilan sur les interactions

- Pour les électrons de faible énergie, les interactions acoustiques sont les plus dominantes et influent sur le comportement des porteurs.
- A plus forte énergie, les interactions avec les phonons optiques prédominent et les interactions d'émissions sont plus importantes devant celles d'absorption.
- Alors que les phonons acoustiques peuvent échanger arbitrairement de faibles quantités d'énergie, les phonons optiques possèdent une énergie caractéristique pour leur émission, évaluée à 120 meV dans le cas du 6H-SiC.
- Quand on augmente la température il y a une augmentation, de la probabilité des interactions acoustiques, une très faible augmentation de la probabilité de l'interaction avec les impuretés, et avec les phonons optiques polaires. Les interactions d'absorption demeurent négligeables devant celles d'émission dans ces interactions.
- L'effet de la température est plus important dans le cas des interactions intervalles d'absorption et il est plus faible dans le cas d'émission.
- Les interactions intravallées dépendent peu de la température par ce qu'elles se passent dans la même vallée.
- Nous trouvons aussi que les interactions optiques polaires d'absorption sont faibles devant celles d'émission. Les électrons vont donc émettre plus de phonons qu'ils n'en absorbent.

I.2. Transport en régime stationnaire

I. 2. Transport en régime stationnaire

Après avoir calculé le taux des différentes interactions que subissent les porteurs durant leur parcours dans le semi-conducteur, nous présentons maintenant les caractéristiques du transport en régime stationnaire.

Ces résultats sont suivis d'une comparaison avec d'autres références théoriques et expérimentales qui existent dans la littérature. Les principales grandeurs moyennes accessibles par cette simulation sont la vitesse de dérive, l'énergie et la répartition des populations d'électrons dans chaque vallée.

On rappelle que le régime stationnaire est atteint lorsque les électrons ont subi plusieurs interactions, c'est à dire lorsque la distance qu'ils ont parcourue est plus grande que le libre parcours moyen pour que l'énergie qu'ils gagnent dans le champ électrique compense l'énergie qu'ils cèdent aux différentes interactions.

I.2.1. Evolution de la vitesse de dérive et de l'énergie moyenne avec l'intensité du champ électrique appliqué

La figure IV. 10 représente les évolutions de la vitesse de dérive et de l'énergie moyenne avec l'amplitude du champ électrique appliqué perpendiculaire à l'axe c pour le matériau 6H-SiC pour une concentration en dopants $N_D = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et à la température ambiante pour les deux modèles à trois et cinq vallées.

La figure IV. 10 (a) représente la vitesse de dérive en fonction du champ. On distingue schématiquement 3 régimes :

(1) Pour de faibles champs électriques, la vitesse augmente dans les deux modèles qui donnent des résultats identiques et fournissent à peu près la même mobilité (pente de la courbe). Dans ce régime de faibles champs, le gaz d'électrons est encore en équilibre thermodynamique avec le réseau cristallin, les seules interactions qui entrent en jeu sont celles avec les phonons acoustiques et avec les impuretés. Comme ces interactions sont élastiques, les électrons sont accélérés par le champ, entrent en collision sans perdre de l'énergie et la vitesse de dérive augmente de façon monotone.

(2) À une certaine valeur du champ $E = E_s = 200 \text{ kV/cm}$, la mobilité commence à diminuer, et pour une valeur du champ de 300 kV/cm , la vitesse de dérive atteint son maximum qui est de $2,1 \cdot 10^7 \text{ cm/s}$ (nos calculs avec les deux modèles donnent sensiblement les mêmes résultats). Puis certains électrons vont être transférés vers les vallées satellites

supérieures où ils auront une masse effective plus grande, d'où la légère baisse de la vitesse observée.

(3) Pour des champs plus importants, l'électron acquiert suffisamment d'énergie pour émettre des phonons optiques accompagnant des transitions intervallées. L'excédent d'énergie acquise par le biais du champ est donc en permanence cédé sous forme de phonons optiques. L'énergie cinétique n'augmente plus et la vitesse se sature. Les vitesses de saturation calculées sont respectivement de $1,7 \cdot 10^7$ cm/s pour le modèle trois vallées et $1,85 \cdot 10^7$ cm/s pour le modèle cinq vallées. Ici, l'inclusion de 5 vallées au lieu de seulement 3, semble donner un résultat plus précis puisque se rapprochant de la valeur expérimentale. Notons que la valeur E_s du champ électrique apparaît comme étant le seuil à partir duquel les interactions intervallées commencent à survenir. En effet, on peut corréler cette observation avec l'augmentation brutale de l'énergie totale moyenne des électrons à partir de E_s (figure IV.10 (b)).

Sur la figure IV.10 (a) représentant la vitesse de dérive, la comparaison avec les calculs full band et certains résultats expérimentaux de la littérature fait apparaître que :

- Dans le régime des faibles champs et des champs moyens, nos deux modèles donnent des résultats en bon accord avec ceux de la littérature (5 vallées et full band) et montrent sensiblement la même mobilité et pic de vitesse. Ces valeurs sont cependant légèrement inférieures aux résultats expérimentaux.

- Pour des champs plus intenses (supérieurs à environ 500 kV/cm), nos calculs de la vitesse de saturation avec 5 vallées sont en accord avec les résultats full band et aussi avec la valeur expérimentale. En effet, la vitesse atteint son état stationnaire $1,7 \cdot 10^7$ cm/s pour le modèle trois vallées et $1,85 \cdot 10^7$ cm/s pour le modèle cinq vallées pour des champs relativement élevés supérieurs à 500 kV/cm. La vitesse expérimentale communément admise est autour de $2 \cdot 10^7$ cm/s. Ceci nous amène à dire que l'inclusion des vallées latérale M et Γ_3 donnent l'espace nécessaire pour que les porteurs puissent atteindre une vitesse de dérive assez importante.

La figure IV. 10 (b) montre l'évolution de l'énergie en fonction du champ électrique appliqué. On voit que pour des champs électriques faibles, l'énergie des porteurs est petite; donc la probabilité qu'un porteur émet des phonons intervallées de haute énergie est nulle. Mais quand le champ électrique augmente l'énergie moyenne des électrons augmente

considérablement à partir du champ seuil E_s . Si l'on examine l'énergie des électrons en fonction du champ électrique appliqué (entre les modèles trois et cinq vallées), pour des faibles champs, on constate que les deux modèles donnent des résultats identiques et comparables avec les résultats obtenus par le modèle full band.

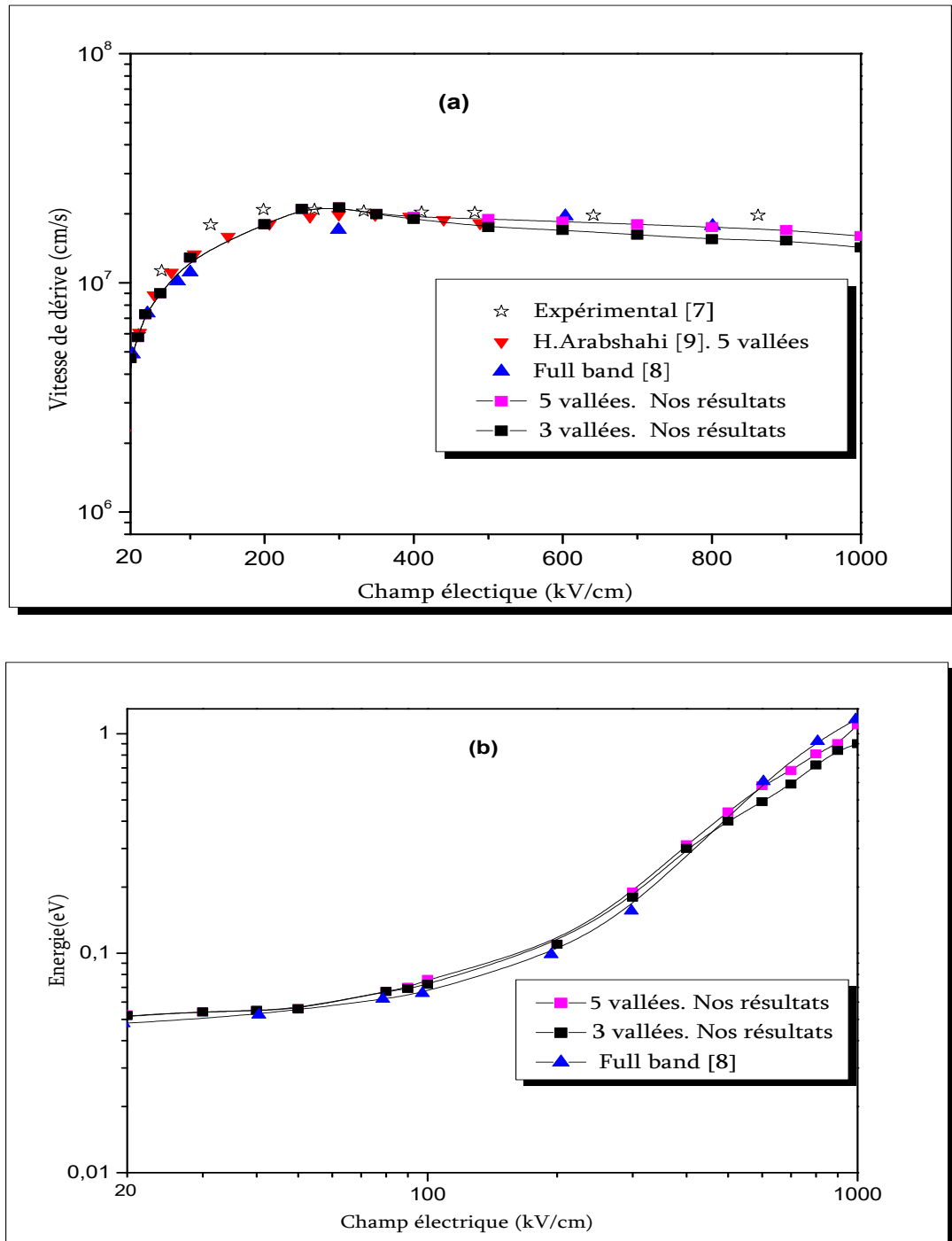


Figure IV. 10 : Vitesse de dérive(a) et l'énergie(b) des électrons en fonction du champ électrique ($T = 300$ K)

Pour des champs forts ($E > 500$ kV/cm), on voit clairement que l'énergie du 6H-SiC modèle cinq vallées est légèrement supérieure à celle du modèle trois vallées. Car 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. Une fois les porteurs sont dans les vallées plus élevées, leur énergie va converger vers une valeur stationnaire puisque toute l'énergie acquise par les électrons va compenser l'énergie qu'ils ont cédée au réseau cristallin. Ainsi, la vitesse de dérive diminue jusqu'à la vitesse de saturation. On note qu'à forts champs, l'énergie transportée par le porteur dans le modèle cinq vallées est légèrement supérieure à celle transportée par un porteur dans le cas du modèle trois vallées. Ceci explique les résultats concernant la vitesse de saturation, meilleurs pour le modèle 5 vallées.

I. 2.3. Influence de la température sur l'énergie en fonction du champ électrique

Les figures IV. 11 (a) et 11 (b) représentent l'influence de la température sur l'énergie en fonction du champ électrique pour trois valeurs de température (100 K, 300 K et 500 K).

L'énergie des électrons augmente avec l'augmentation de l'intensité du champ. Ces courbes mettent clairement en évidence 2 régimes distincts caractérisés par 2 pentes différentes quelle que soit la température : une phase d'augmentation lente puis une phase d'augmentation rapide de l'énergie. La valeur E_s (200 kV/cm à 300 K) marque le début de la deuxième phase. À une température du réseau fixe et pour des champs inférieurs au seuil E_s , l'énergie acquise à partir du champ est en grande partie perdue par la diffusion sur des phonons optiques intravallée (essentiellement dans la vallée Γ_1). Pour des champs électriques plus élevés, ces phonons ne peuvent plus absorber cette énergie acquise par les électrons et donc l'énergie moyenne augmente considérablement. Ces électrons vont interagir par émission de phonons optiques polaires accompagnant les transferts intervallées.

Quand on augmente la température de 100K à 300K puis à 500K, l'énergie thermique augmente. En raison de la diminution de l'énergie gagnée par les électrons (cette énergie est mieux dissipée dans le réseau par les différentes interactions), le premier régime « s'élargit » et le champ seuil E_s augmente. La disposition relative des courbes de l'énergie est alors inversée comme le montrent les figures IV 11(a) et IV11(b). Dans le domaine de champ élevé,

l'énergie moyenne des électrons diminue donc légèrement avec la température, alors qu'elle augmente pour les champs faibles à modérés.

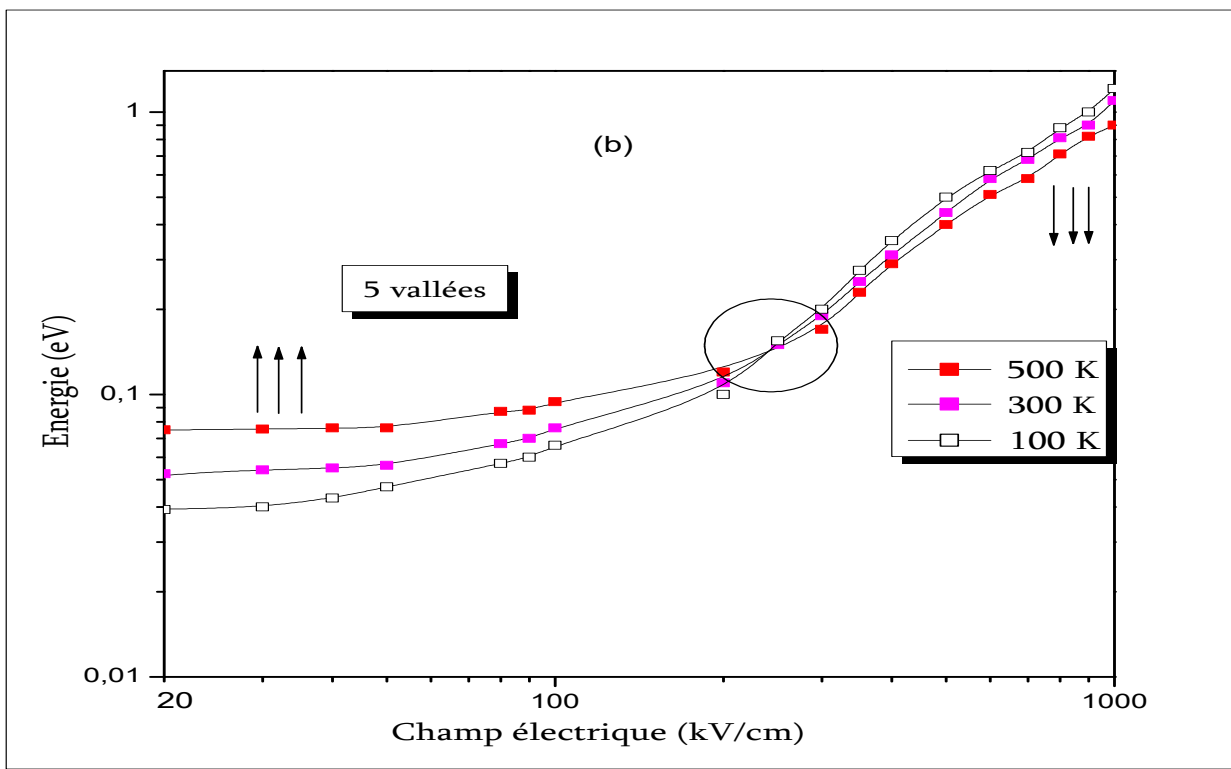
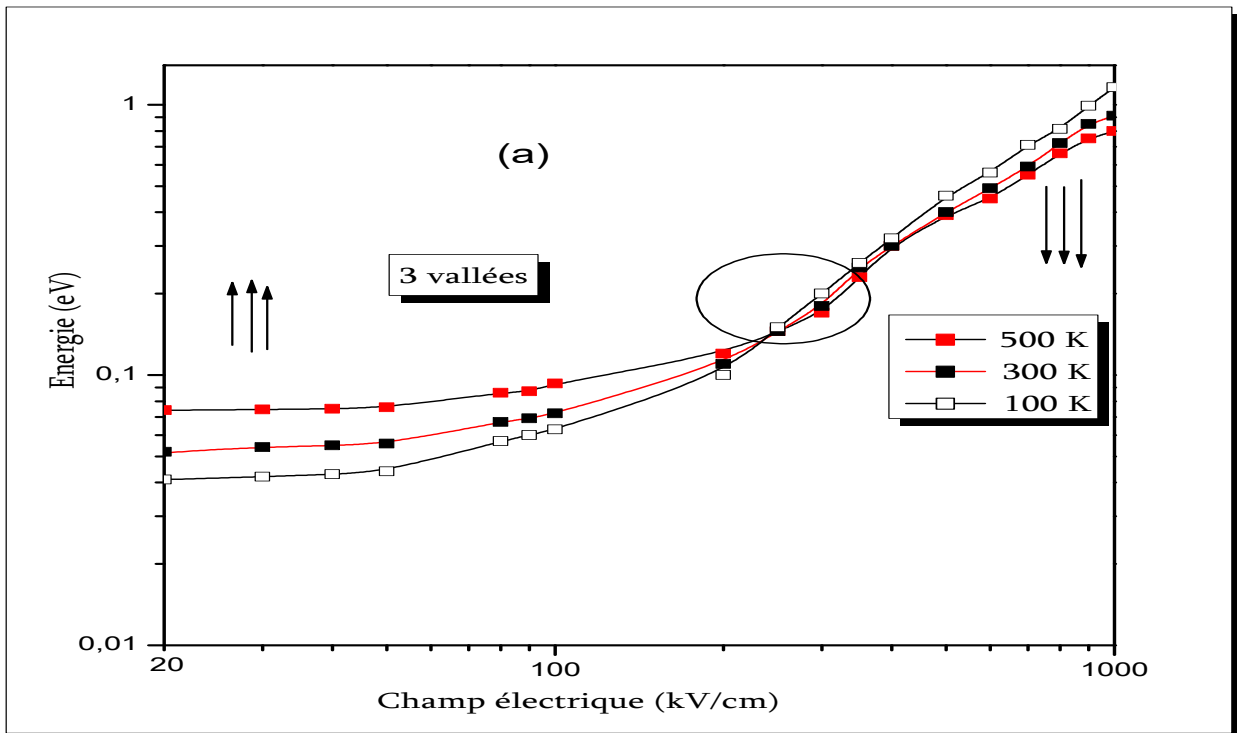


Figure IV. 11 : Energie moyenne des électrons en fonction du champ électrique pour divers températures ((a) modèle 3 vallées, (b) modèle 5 vallées).

I. 2.4. Coefficient de repopulation stationnaire

Les figures IV.12 (a) et IV. 12 (b) représentent la population des vallées en fonction du champ électrique pour les deux modèles considérés.

Le comportement des courbes montre clairement l'importance du transfert intervallée à fort champ. Le transfert d'électrons dans les vallées supérieures commence à se produire à partir de la valeur de champ seuil E_s . le transfert des électrons dans les vallées hautes explique le léger pic de vitesse et le régime de saturation, visibles sur la figure IV.10.

En effet, lorsque le champ électrique est inférieur à E_s , les électrons sont majoritairement encore dans la vallée Γ_1 car ils n'ont pas une énergie suffisante pour pouvoir quitter cette vallée pour rejoindre les vallées supérieures. Quand le champ augmente au-delà de E_s , ces électrons vont acquérir suffisamment d'énergie pour être transférés vers les vallées supérieures où leur masse effective est plus grande et où donc ils vont se mouvoir plus lentement. A mesure que la vallée U se remplit la vitesse moyenne des électrons décroît.

Les vallées les plus hautes, M et Γ_3 commencent à être occupées pour des champs supérieurs à 500 kV/cm, quand 50% des électrons ont quitté la vallée Γ_1 . Alors que la vallée M est peuplée de manière significative, le taux d'occupation dans la vallée Γ_3 demeure inférieur à 3%, même pour un champ aussi élevé que 1 MV/cm, car l'énergie de séparation entre les vallées supérieures est grande. Par conséquent, pour ces propriétés de transport des électrons en régime stationnaire, le modèle full band ne s'avère pas être d'une grande utilité puisqu'il ne contribue pas à améliorer notablement la précision du calcul.

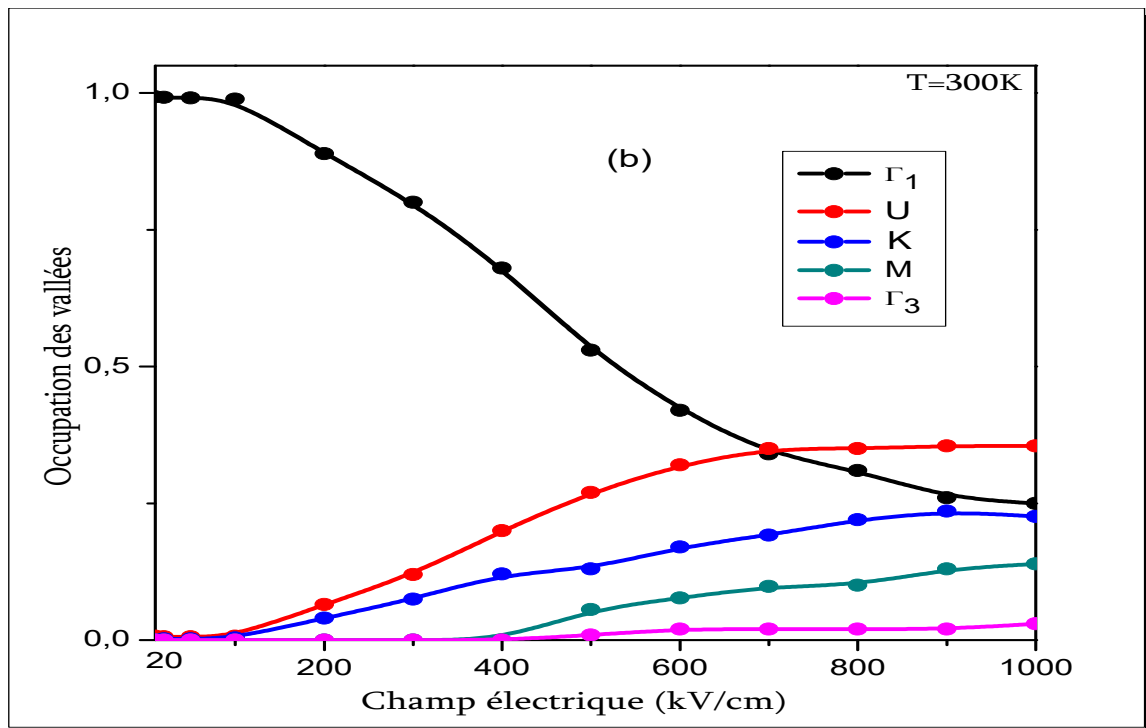
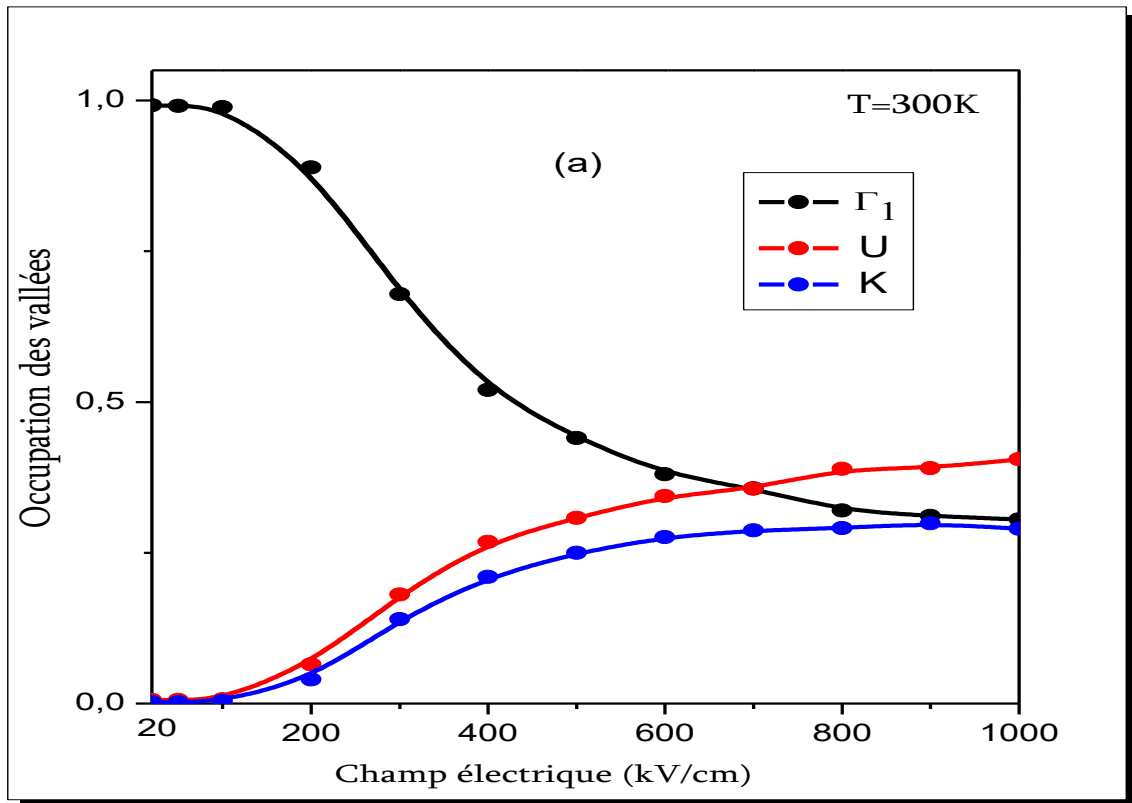


Figure IV. 12 : Population des vallées en fonction du champ électrique ((a)modèle 3 vallées, (b) modèle 5 vallées).

I. 2. 5. Influence du dopage sur la vitesse de dérive

Les vitesses de dérive en fonction du champ électrique pour différents dopages ont été tracées sur la figure IV.13(a) pour le modèle trois vallées et la figure IV. 13 (b) pour le modèle cinq vallées.

L'affaiblissement de la vitesse moyenne, lie à la présence d'une concentration des impuretés, se manifeste en champ faible et autour du champ de seuil.

La déformation de la caractéristique de la vitesse, liée à la présence des différentes concentrations égales à 10^{16}cm^{-3} , 10^{17}cm^{-3} et 10^{18}cm^{-3} , est caractérisée par une diminution de la mobilité en champ faible par un affaiblissement de la vitesse pic de $2,24.10^7\text{cm/s}$ pour 10^{16}cm^{-3} jusqu'à $2,10.10^7\text{cm/s}$ pour 10^{18}cm^{-3} .

Quand le champ est supérieur au champ critique, l'effet des impuretés est négligeable. Notons que les deux modèles donnent ici les mêmes résultats.

I. 2. 6. Influence de la température sur la vitesse de dérive

Il est bien connu que la température de réseau joue un rôle décisif en influençant sur les caractéristiques de la vitesse de dérive et la mobilité en fonction du champ électrique.

Les vitesses de dérive en fonction du champ électrique pour différentes températures ont été représentées dans les figures IV. 14 (a) et IV.14 (b) pour le 6H-SiC (modèle trois et cinq vallées).

Nous remarquons que la forme des caractéristiques de vitesse en fonction du champ change sensiblement à mesure que la température augmente. En particulier, la vitesse de dérive maximale et la vitesse de saturation diminuent sensiblement avec la température.

L'élévation de la température diminue le pic de vitesse de $2,25.10^7\text{cm/s}$ pour 100 K à $1,88.10^7\text{cm.s}^{-1}$ pour 500 K dans les deux modèles trois et cinq vallées, soit une diminution de plus de 16%.

La vitesse de saturation montre une dépendance un peu moins prononcée de la température. Ceci peut être expliqué par le fait que cette saturation a lieu à forts champs pour lesquels l'énergie des électrons est grande et sera peu influencée par des variations de température. Le transport à champ élevé est, en effet, dominé par les dispersions des phonons optiques polaires et intervallées qui ont une faible dépendance de la température du réseau.

La vitesse de saturation (ou vitesse stationnaire) diminue de $1,92.10^7\text{cm/s}$ pour 100 K jusqu'à $1,69.10^7\text{cm/s}$ pour 500 K pour le modèle cinq vallées (diminution d'environ 13%) et

$1,8 \cdot 10^7 \text{ cm/s}$ pour 100 K jusqu'à $1,62 \cdot 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$ pour 500 K pour le modèle trois vallées (environ 11% de diminution).

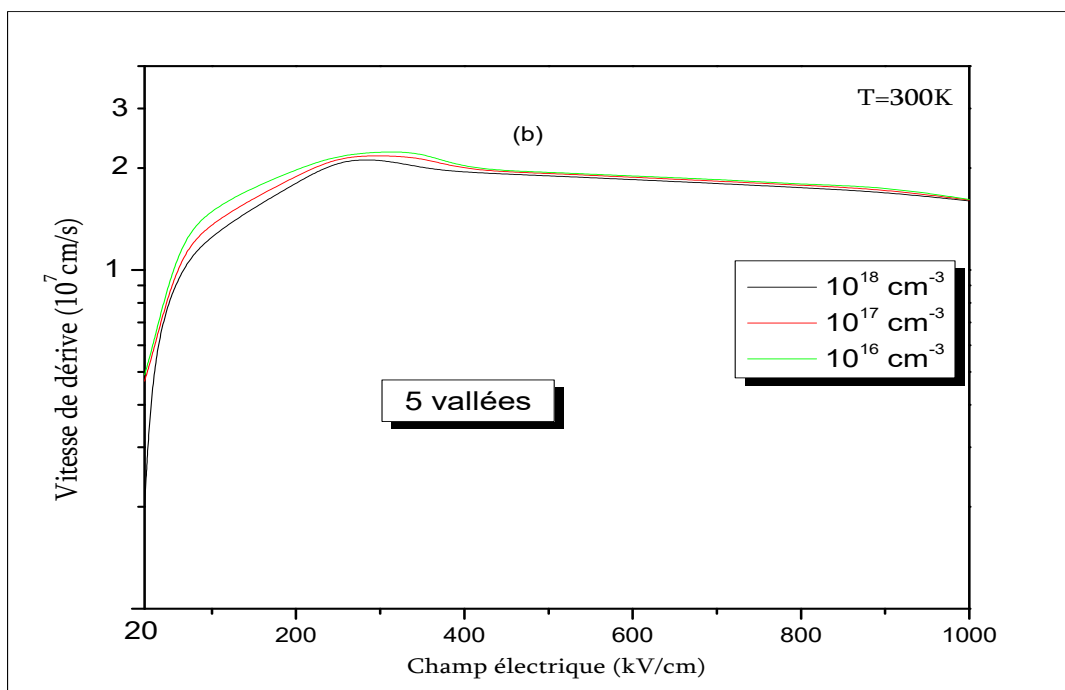
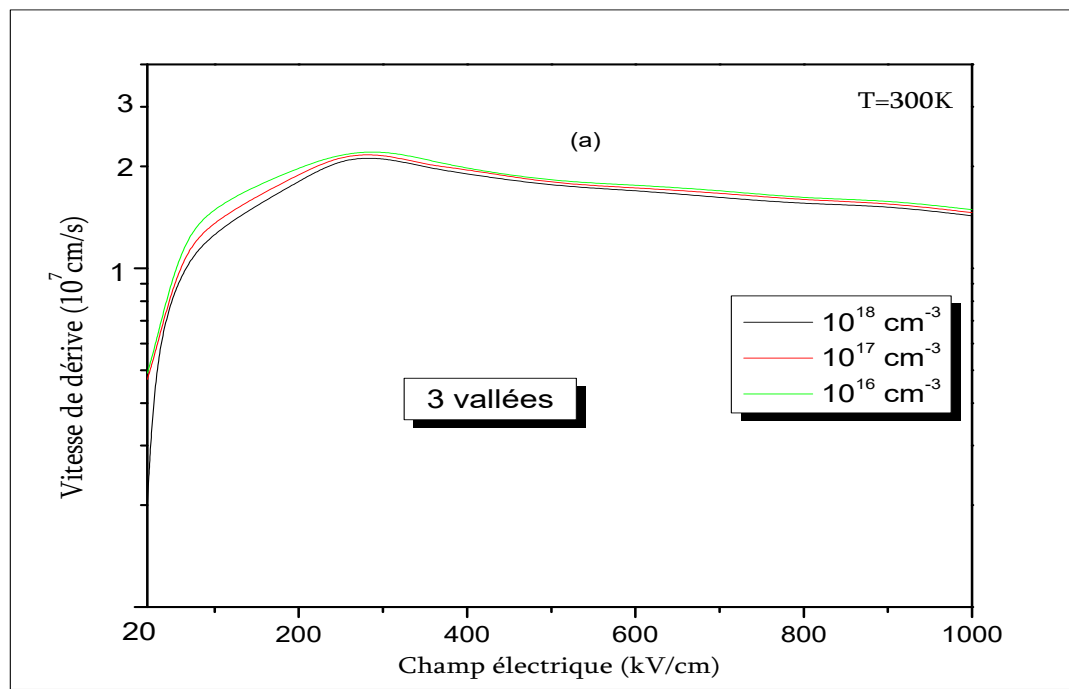


Figure IV. 13 : Vitesse de dérive des électrons en fonction du champ dans le 6H-SiC pour divers dopages ((a) modèle 3 valles, (b) modèle 5 vallées).

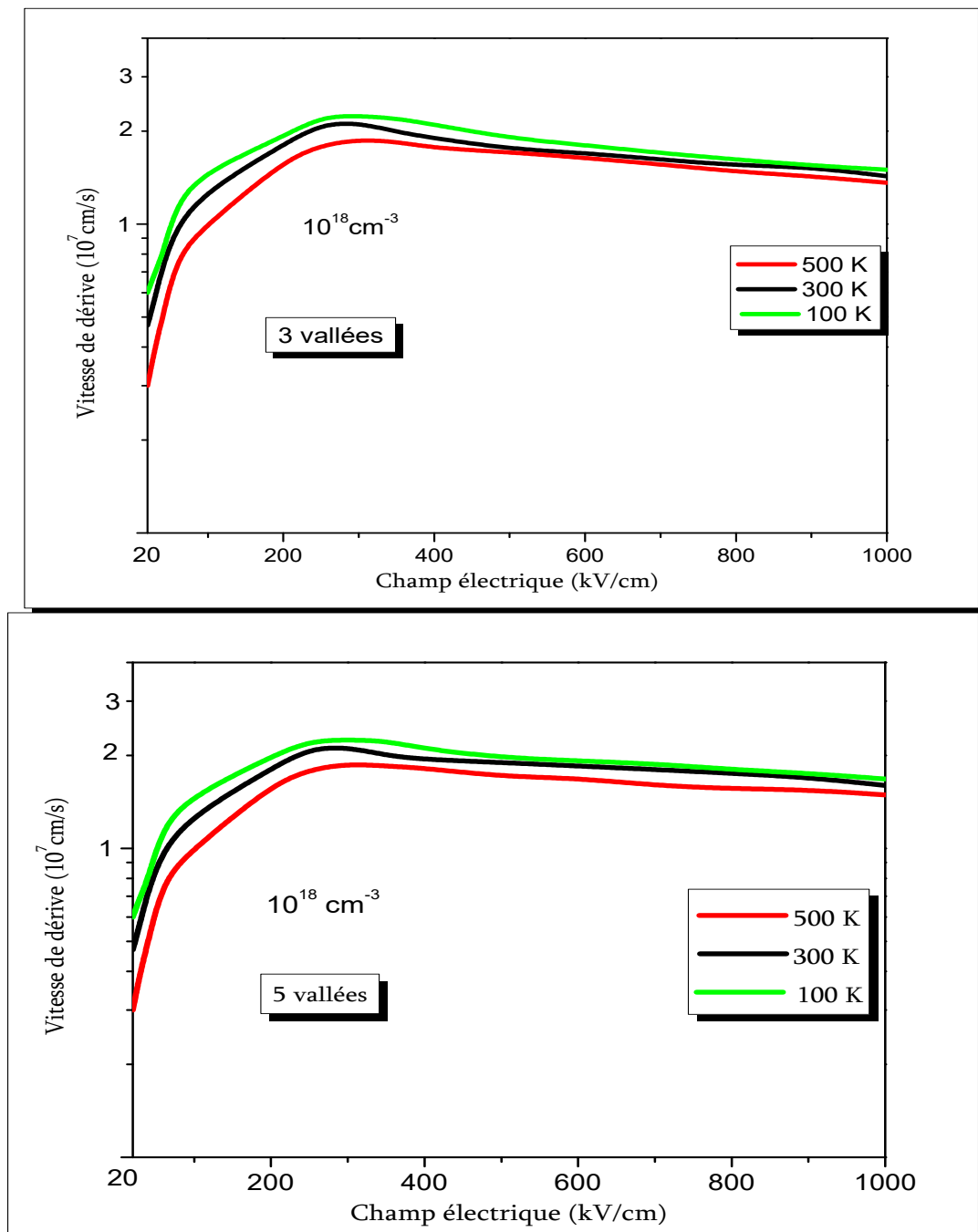


Figure IV. 14: Vitesse de dérive en fonction du champ dans le 6H-SiC pour trois températures ((a) modèle 3 vallées, (b) modèle 5 vallées).

I. 2.7. Influence du champ électrique et de la température sur la mobilité des porteurs

Après la description de la vitesse de dérive des porteurs ; il est intéressant d'étudier l'influence du champ électrique et la température sur la mobilité des porteurs.

La mobilité des porteurs en fonction du champ électrique pour différentes températures ont été représentées dans les figures IV. 15 (a) et IV.15 (b) pour le 6H-SiC dans les deux modèles considérés.

On définit la mobilité μ comme le facteur de proportionnalité reliant la vitesse de dérive des porteurs (électrons ou trous) V au champ électrique appliqué E .

On appelle le terme $\mu = \mu_0$ la mobilité qu'on note μ permettant de définir la vitesse de dérive

$$V = \mu E, \mu = \frac{q\tau}{m^*}$$

Où τ est le temps moyen entre deux collisions, m^* est la masse effective et q la charge des porteurs.

Pour le champ électrique E inférieur à champ critique: On peut dire que la mobilité d'un porteur est d'autant plus grande qu'il accélère facilement sous l'action d'un champ, car sa charge est grande et sa masse est faible. Cette mobilité est d'autant plus importante que le temps moyen entre deux collisions est long. Ce temps ayant tendance à diminuer si la température augmente

Quand le champ dépasse le champ critique cette mobilité d'autant plus petite car les collisions subies par les porteurs seront nombreuses et la vitesse moyenne $\langle V \rangle$ tend vers une valeur limite lorsque $\frac{dV}{dt} = 0$

On constate que cette mobilité à faible champ dépend essentiellement de la température (collision avec les phonons) et du dopage (collision avec les impuretés) et à fort champ dépend essentiellement de champ électrique.

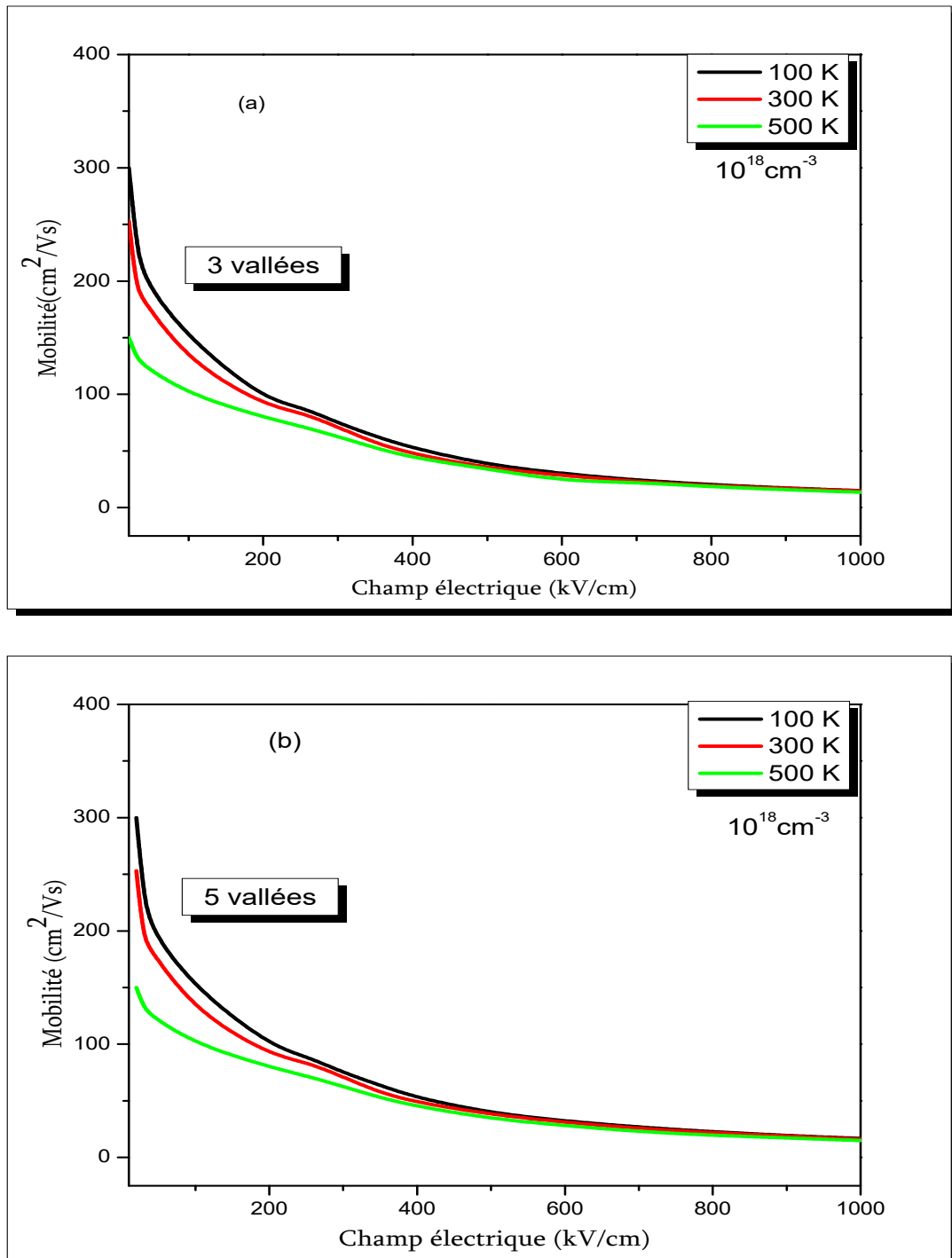


Figure IV. 15: Variations de la mobilité en fonction du champ électrique dans le 6H-SiC pour divers température ((a) modèle 3 vallées, (b) modèle 5 vallées).

I. 3. Transport en régime non stationnaire

I. 3. Transport en régime non stationnaire et survitesse.

Nous allons à présent décrire ce qui se passe dans les tous premiers instants après application d'un champ électrique. Les porteurs n'ont pas suffisamment de temps pour entrer en interaction avec les défauts du cristal (impuretés, phonons). C'est une situation transitoire ou non stationnaire. Cette situation est intéressante à considérer à cause du fait que la dimension des composants actuels tend à être de plus en plus réduite. Les électrons se déplacent sur de très faibles distances, et donc en des temps extrêmement courts.

Les figures (IV. 16- IV. 18) permettent de comparer les variations temporelles des vitesses et des énergies pour différents échelons de champ entre les modèles trois et cinq vallées de 6H-SiC. Nous remarquons dans ces graphes (vitesse en fonction du temps) deux phases : Dans la première phase, la vitesse présente un maximum. Dans la seconde phase, la vitesse retrouve sa valeur de saturation.

Dans la première phase, pendant un laps de temps de l'ordre du temps de relaxation (où il parcourt une distance de l'ordre du libre parcours moyen), l'électron n'a pas le temps de rentrer en collision avec les défauts cristallins (régime dit balistique), il est simplement accéléré par le champ. A fort champ, son accélération et sa vitesse peuvent atteindre des valeurs élevées bien plus grandes que les valeurs atteintes en régime stationnaire. Cette phase est appelée **régime de survitesse**, caractérisé par une augmentation brusque de l'énergie. Après cette phase, les électrons vont céder leur énergie au réseau par le biais des diverses interactions et la vitesse retrouve sa valeur d'équilibre. L'énergie redevient constante, correspondant au champ appliqué. Notons enfin que le pic de survitesse pourrait également être expliqué par le transfert des électrons chauds vers les vallées hautes où la masse effective est plus grande d'où la baisse brutale de la vitesse. Cette dernière interprétation trouve son origine dans le fait que le régime de survitesse apparaît pour un champ correspondant quasiment au champ donnant le pic de vitesse en régime stationnaire (ici 300 kV/cm comme on va le voir ci-dessous).

On remarque qu'il y a une augmentation brusque de l'énergie pour atteindre une valeur maximale puis l'énergie devient constante et on peut remarquer aussi que plus le champ est élevé, plus l'énergie est grande, et plus la survitesse est marquée.

A partir de champ supérieure à 300 kV/cm jusqu'à 1000 kV/cm les vitesses présentent un pic franc pour les deux modèles. On peut y observer dans la figure IV.16 des survitesses jusqu'à 4.10^7 cm/s dans le modèle trois vallées et cinq vallées successivement pour un échelon de 1000 kV/cm. Par exemple pour $T=300$ K pour un champ grand (1000 kV/cm), on constate que le phénomène de survitesse est plus bref.

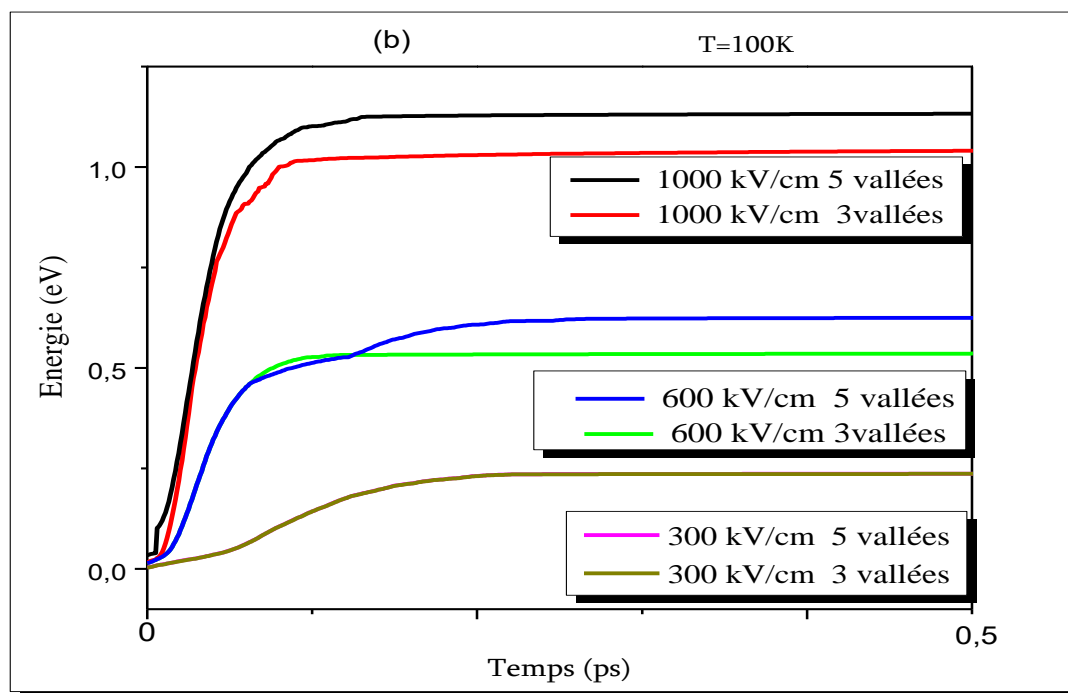
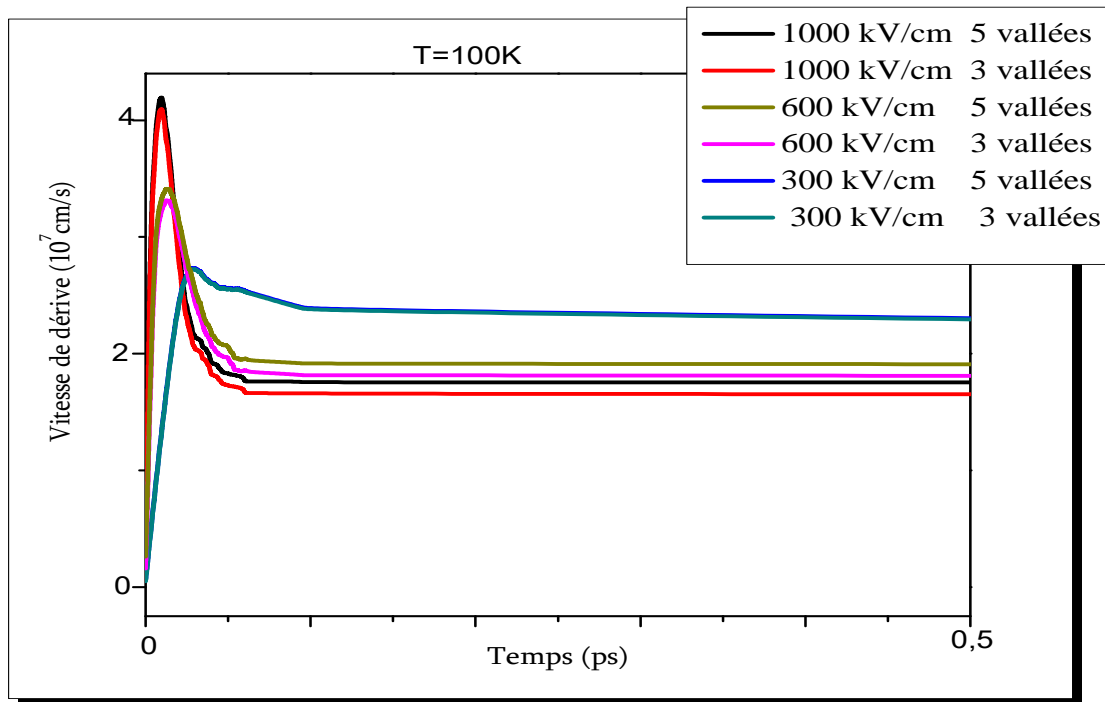


Figure IV. 16: Réponse transitoire en vitesse (a) et en énergie (b) à des impulsions de champ électrique ($T=100$ K) dans le 6H-SiC (modèle 3 vallées et 5 vallées).

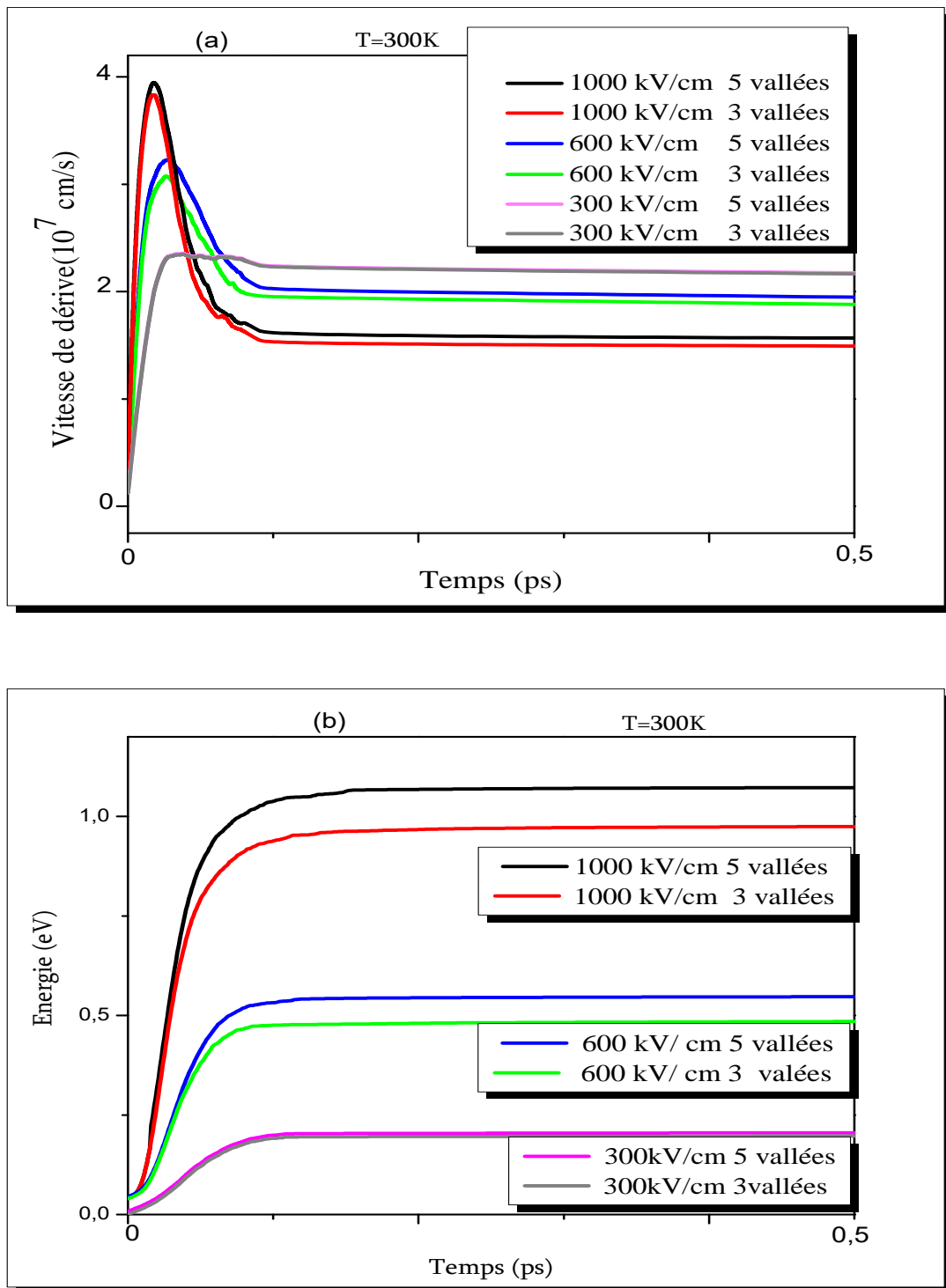


Figure IV. 17: Réponse transitoire en vitesse (a) et en énergie(b) à des impulsions de champ électrique (T=300K) dans le 6H-SiC (modèle 3 et 5 vallées)

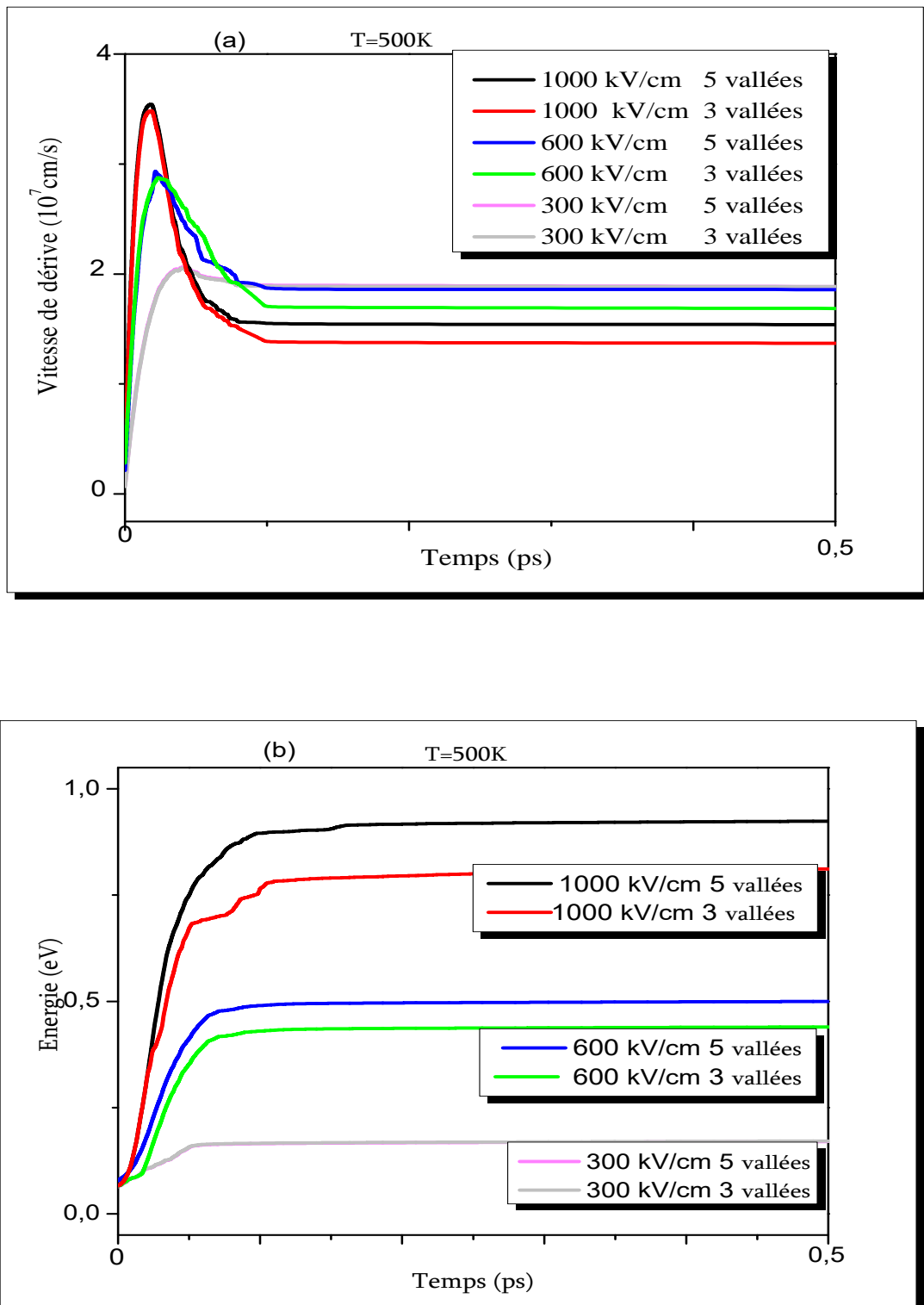


Figure IV. 18 : Réponse transitoire en vitesse(a) et en énergie (b) à des impulsions de champ électrique (T=500 K) dans le 6H-SiC (modèle 3 et 5 vallées).

La valeur maximale de la vitesse est égale à 4.10^7 cm/s, pour le modèle cinq vallées, elle est atteinte à 0,04 ps puis elle chute progressivement et l'état stationnaire commence à 0,1 ps. L'énergie croit très rapidement atteint la valeur 1,1 eV. Pour le modèle trois vallées la valeur maximale de la vitesse est égale à $3,9.10^7$ cm/s, elle est atteinte à 0,05 ps puis elle chute progressivement et l'état stationnaire commence à 0,1 ps. L'énergie croit très rapidement atteint la valeur 0,87 eV.

A partir de cet ensemble des courbes figurent IV. 16 à IV. 18 on constate que :

- ✓ les pics de survitesse deviennent de plus en plus importants lorsque le champ électrique augmente.
- ✓ les pics de survitesse surviennent en des temps plus courts quand le champ augmente.
- ✓ le régime stationnaire est atteint plus vite à fort champ.
- ✓ les pics de survitesse deviennent de plus en plus remarquables pour des faibles températures.
- ✓ plus le champ est élevé, plus l'énergie est grande

Doté d'une bonne vitesse pic, pour des champs relativement élevés et de survitesses élevés, 6H-SiC est un matériau semi-conducteur tout à fait acceptable pour des applications en microélectronique.

I. 4. Quelques conclusions

Concernant la comparaison entre les deux modèles pour 6H-SiC:

- La vitesse de saturation en fonction du champ figure IV.10 (a) est de $1,7.10^7$ cm/s pour le modèle trois vallées et $1,85.10^7$ cm/s pour le modèle cinq vallées. Aux champs élevés supérieur à 500 kV/cm, le modèle cinq vallées et le modèle full band montrent une vitesse de saturation proche de la vitesse de saturation donnés dans les résultats expérimentaux.
- L'énergie en fonction du champ figure IV .10 (b) de 6H-SiC modèle cinq vallées est l'égerment supérieure à celle du modèle trois vallées entre 600 kV/cm à 1000 kV/cm est comparable avec les résultats obtenue par le modèle full band.
- Les vitesses de saturation et l'énergie en fonction du temps des électrons dans le 6H-SiC modèles cinq vallées est légèrement supérieur que celle dans le 6H-SiC modèle trois vallées figures (IV.16- IV.18).

- Les deux modèles en régime non stationnaire ont montré un phénomène de survitesse au cours duquel la vitesse peut être très largement supérieure à sa valeur en régime stationnaire.
- Inclure 5 vallées dans le programme de calcul Monte Carlo semble donc être suffisant et permet de s'affranchir des calculs laborieux et très longs, incluant la structure de bande complète.

Concernant le phénomène de transport des électrons dans 6H-SiC :

- L'émission de phonons optiques polaires n'a lieu que pour une énergie seuil de 120 meV.
- Il existe une valeur seuil du champ E_s (environ 200 kV/cm) à partir de laquelle l'équilibre thermodynamique est franchement rompu et les interactions avec les phonons optiques entrent en jeu, avec échange d'énergie avec le réseau cristallin.
- L'énergie des électrons augmente avec la température à faible et moyen champ mais diminue à fort champ.
- La mobilité est indépendante de la température à fort champ.

II. Filière de composés III-V (GaAs)

II. Filière de composés III-V (GaAs)

Dans cette partie, nous avons appliqué la simulation Monte Carlo décrite précédemment au cas du GaAs, matériau bien plus largement étudié que le carbure de silicium. Outre son intérêt intrinsèque, cette étude est également motivée par le fait de pouvoir tester la fiabilité de notre programme de simulation, puisque nous avons le loisir, à toute étape du calcul, de vérifier ce dernier par comparaison avec les nombreuses études effectuées par d'autres auteurs.

La structure de bande demande à être définie précisément (Chapitre. III). En ce qui concerne l'Arséniure de Gallium, des modèles ont été proposés dans la littérature et sont présentés très brièvement ici. Le modèle de structure de bande le plus anciennement utilisé présente une vallée centrale Γ noté Γ_6 (000) au minimum absolu de la bande de conduction et trois vallées latérales à symétries X_6 correspondant à des minima relatifs dans les directions (100); le modèle deux vallées a été initialement utilisé par W. Fawcett [10]. Ce n'est que très récemment que des vallées à symétrie L_6 présentant des minima relatifs inférieurs à ceux des vallées X , ont été mises en évidence expérimentalement dans les directions (111). M.A. Littlejohn [11] les fait intervenir dans son modèle trois vallées, ainsi que A. Kaszynski [12].

La méthode de Monte Carlo que nous employons pour étudier les phénomènes de transport de GaAs, utilise deux modèles trois vallées (Γ_6 , L_6 et X_6) et cinq vallées (Γ_6 , L_6 , X_6 , et X_7 , Γ_7^*), isotropes mais non paraboliques, les deux vallées supplémentaires X_7 , Γ_7^* appartiennent à des sous-bandes de conduction au dessus de la première bande de conduction [13, 14].

Nous avons entrepris une étude comparative du transport électronique entre les deux modèles. Nous abordons les caractéristiques de vitesse et d'énergie avec quelques confrontations à des résultats expérimentaux et théoriques. L'ensemble des données relatives de structure de bande de l'Arséniure de Gallium est présenté dans le tableau IV.2.

Matériau GaAs [15]	Vallée				
	Γ_6	L_6	X_6	X_7	Γ_7^*
Masse effectives m^*/m_0	0.063	0.222	0.58	0.25	0.35
Coefficients de non parabolicité (eV^{-1})	0.7	0.5	0.3	0.8	0.7
Valeurs des écarts énergétiques (eV)	0	0.32	0.52	0.87	3.1
Nombre de vallées équivalentes	1	4	3	3	1

Tableau IV. 2 : Données extraites de la structure de bande du GaAs

II. 1. Probabilités d'interaction par unité du temps en fonction de l'énergie

II. 1. Les probabilités d'interactions en fonction de l'énergie

II. 1. 1. Interactions acoustiques

La figure IV. 19 représente la probabilité d'interactions acoustiques pour le GaAs (modèle trois et cinq vallées).

Nous remarquons que ce type d'interactions est presque inexistant dans la vallée Γ_6 , par contre dans les vallées satellite leur probabilité augmente considérablement avec l'énergie dans les trois vallées Γ_6 , L_6 et X_6 .

On remarque dans la figure IV. 19 (b), quand l'énergie augmente la probabilité d'interactions acoustiques augmente dans les cinq vallées, mais ce type d'interactions est très important dans la vallée X_6 par rapport aux vallées supérieures X_7 , Γ_7^* car l'énergie de séparation entre ces vallées est grande.

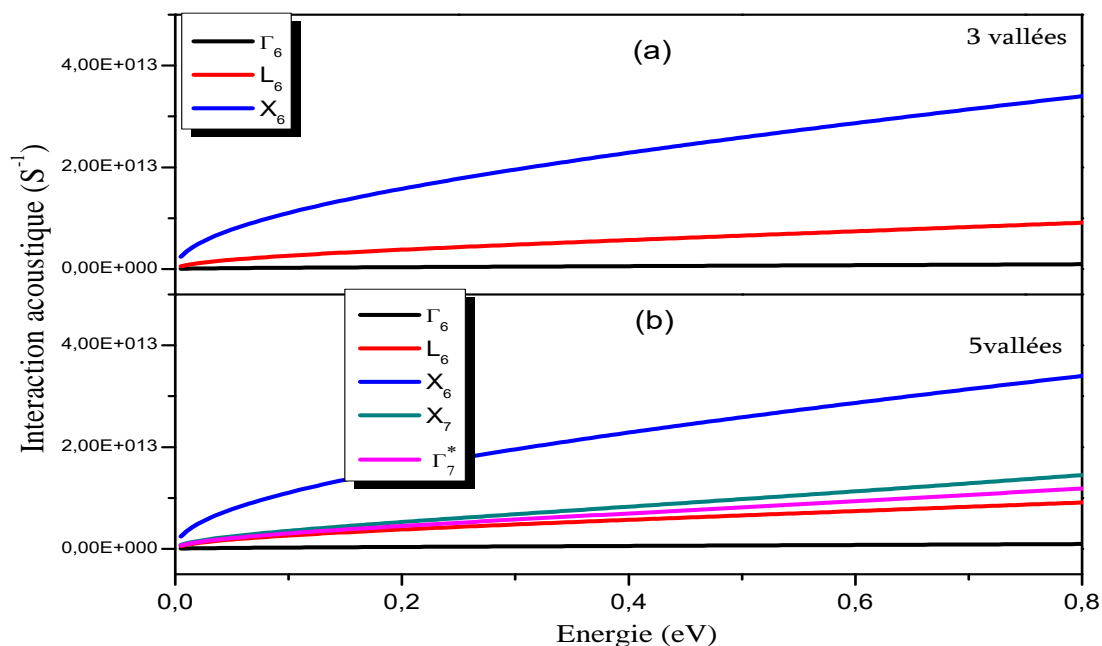


Figure IV. 19: les interactions acoustiques en fonction de l'énergie pour le GaAs (modèle 3 et 5 vallées) pour T=300K.

II. 1. 2. Interactions piézoélectriques

Nous avons introduit les interactions piézoélectriques dans notre simulateur car ce type d'interaction entre souvent en jeu dans les matériaux III-V. La figure IV. 20 représente la probabilité d'interaction piézoélectrique pour le GaAs (modèle trois et cinq vallées). Nous remarquons que ce type d'interactions est très important à très faible énergie (à l'instar des

interactions avec les impuretés) mais diminue rapidement vers des valeurs négligeables quand l'énergie de l'électron augmente.

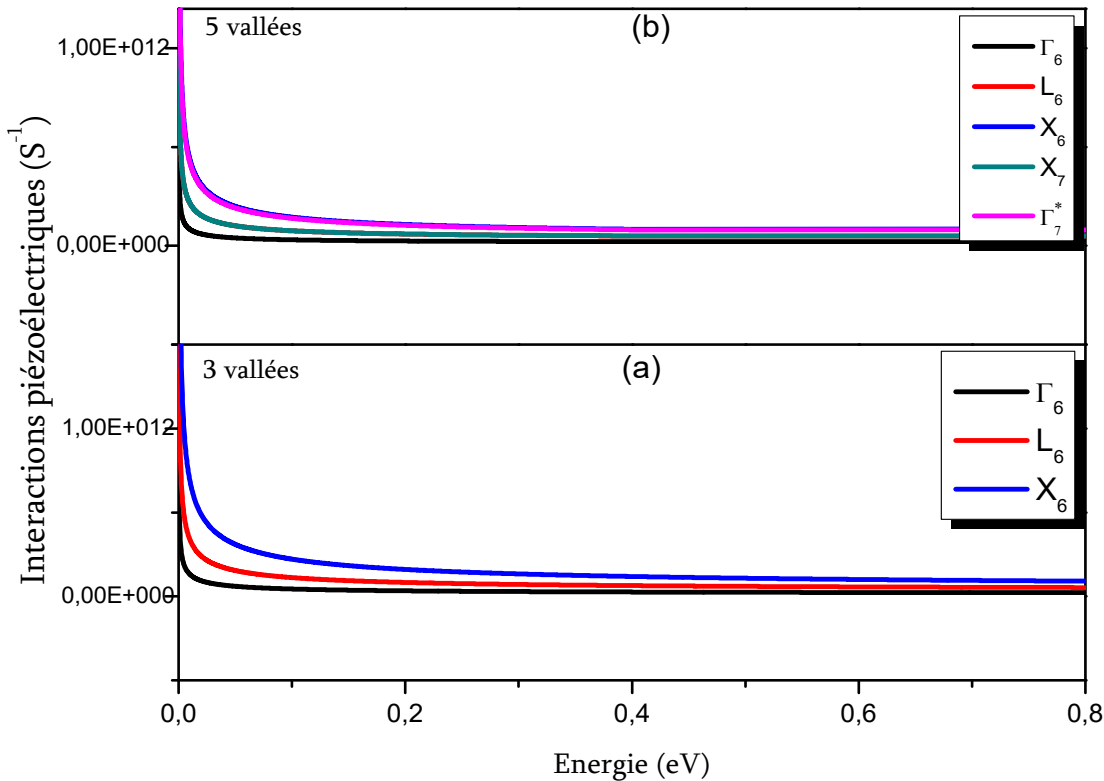


Figure IV. 20: les interactions piézoélectriques en fonction de l'énergie pour le GaAs ((a) modèle 3 et (b) modèle 5 vallées) pour $T=300K$.

II. 1. 3 Interactions avec les impuretés

Cette interaction, est fortement prépondérante en champ faible. Nous avons tracé sur la figure IV. 21 la probabilité d'interaction en fonction de l'énergie de l'électron, dans les modèles 3 et 5 pour un dopage en donneurs de 10^{15}cm^{-3} à la température de 300 K. On voit sur cette figure que les interactions avec les impuretés sont très faibles dans toutes les vallées.

Le modèle 5 vallées montre une probabilité d'interaction plus élevée en vallée X6 qu'en vallée Γ_7^* , ce qui semble indiquer que cette dernière vallée reçoit très peu d'électrons, quelle que soit l'énergie acquise par les électrons. Cette remarque va être vérifiée et confortée plus loin sur les résultats obtenus concernant les coefficients de repopulation des différentes vallées.

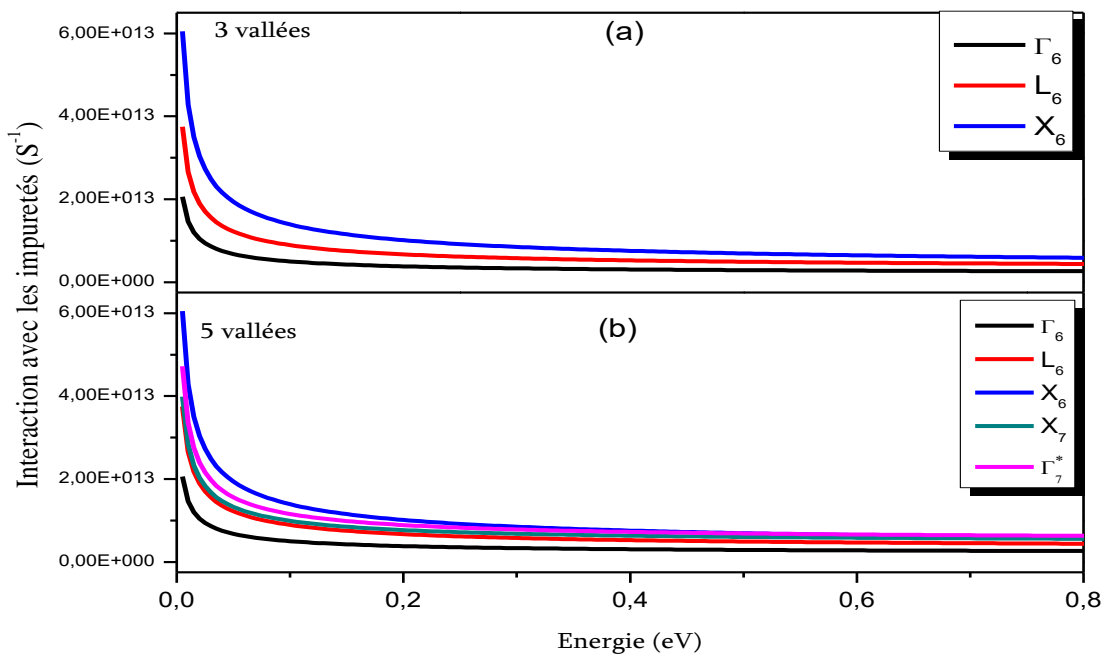


Figure IV. 21: Interactions avec les impuretés en fonction de l'énergie pour le GaAs (modèle 5 et 5 vallées) pour $T=300K$.

II. 1. 4. Interactions optiques polaires

Les évolutions des interactions optiques polaires dans le cas d'émissions et d'absorptions sont représentées par la figure IV. 22: Les interactions optiques polaires sont importantes dans toutes les vallées et sont caractérisées par une absorption ou émission d'un phonon optique, On retrouve le seuil correspondant à l'énergie du phonon optique polaire qui est de l'ordre 0,038 eV, les probabilités d'interactions d'émission sont plus importantes que celles d'absorption comme pour le SiC, et leur valeur augmente considérablement quand l'énergie des électrons augmente dans les deux modèles. L'émission n'a lieu que si l'électron possède une énergie supérieure à 0,038 eV. L'absorption a lieu à toute énergie.

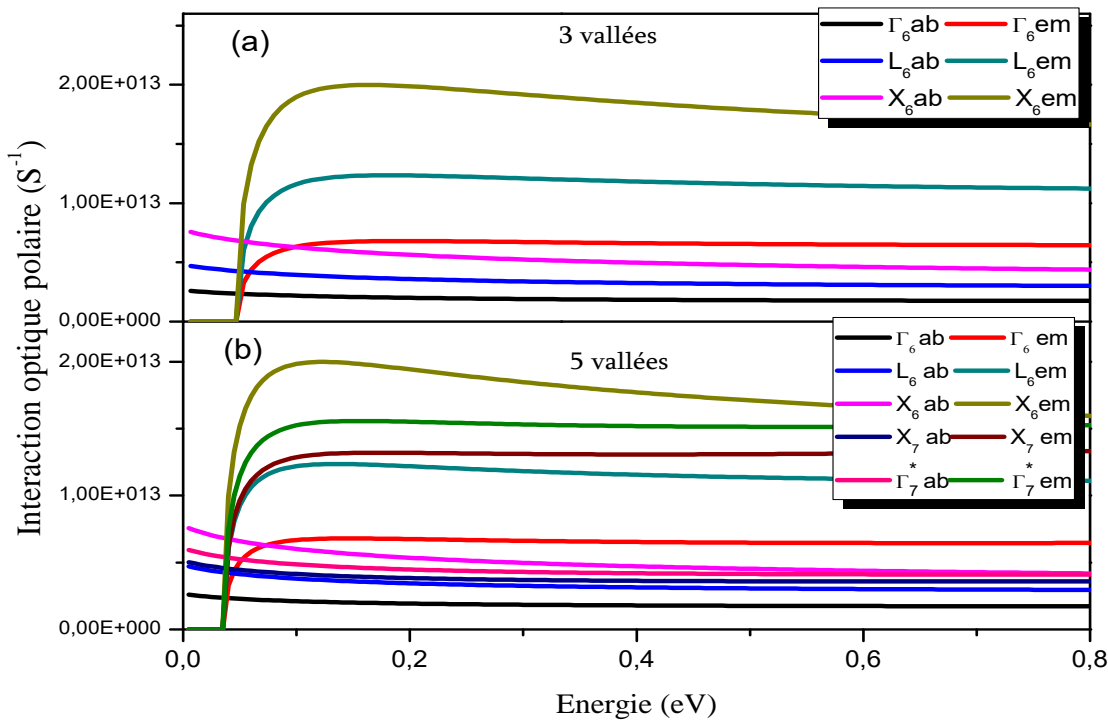


Figure IV. 22 : Interactions optiques polaires dans le GaAs à températures 300 K ((a)modèle 3 et (b) 5 vallées)

II.1.5. Interactions intervallées

II.1.5.1. Interactions intervallées d'absorption et d'émission

Les différentes transitions possibles entre les vallées (absorptions et émissions) sont représentées dans les figures IV. 23 et IV. 24 dans les deux modèles.

En absorption, et comme nous pouvons le constater sur les figures IV. 23 (a) et IV. 24 (a); pour des énergies ($E > 0,25$ eV), les interactions $\Gamma_6 L_6$, $L_6 X_6$ sont les plus dominantes dans les deux modèles parce que d'une part, la vallée L_6 est supérieure à la vallée Γ_6 , et d'autre part la vallée L_6 est plus proche par rapport à la vallée Γ_6 , donc ils passent de la vallée L_6 à la vallée X_6 . Et on remarque aussi que l'interaction $L_6 X_6$ augmente plus rapidement que l'interaction $\Gamma_6 L_6$, car l'énergie de séparation est petite (0,20 eV) par rapport à l'énergie de séparation entre les autres vallées

Les interactions intervallées d'émission sont représentées par les figures IV.23 (b) et IV.24 (b) : Pour des petites énergies, ces taux d'interaction augmentent drastiquement sur un très faible intervalle puis saturent. Les probabilités d'interaction intervallées d'émission $X_7 X_6$, $X_7 L_6$, $X_6 X_7$, $X_7 \Gamma_6$ et $\Gamma_7^* \Gamma_6$ sont les plus dominantes pour le modèle cinq vallées et l'interaction intervallées d'émission $L_6 \Gamma_6$ est la plus importante pour les deux modèles.

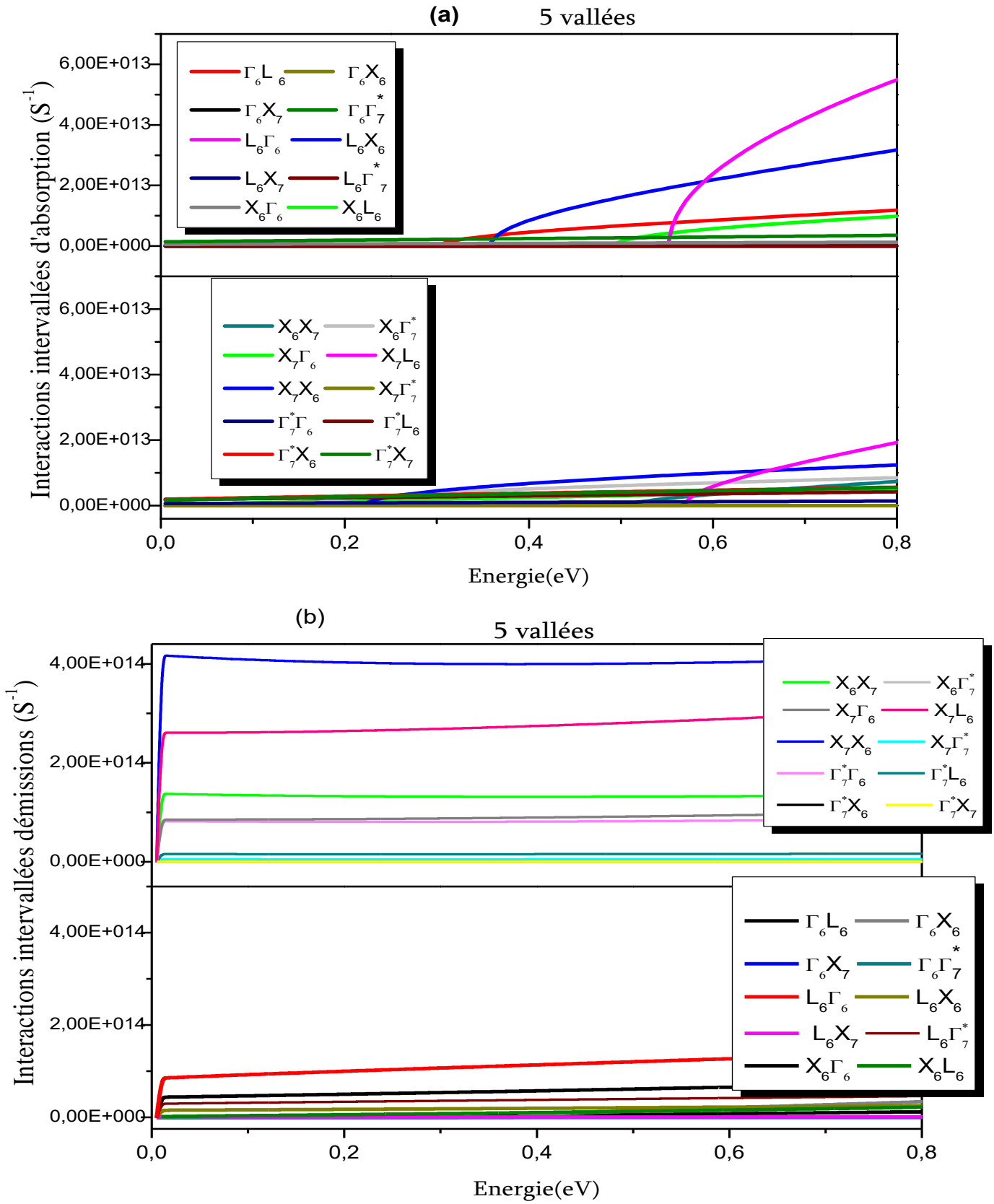


Figure IV. 23: Interactions intervalles d'absorptions (a) et émission (b) pour GaAs (modèle 5 vallées) en fonction de l'énergie

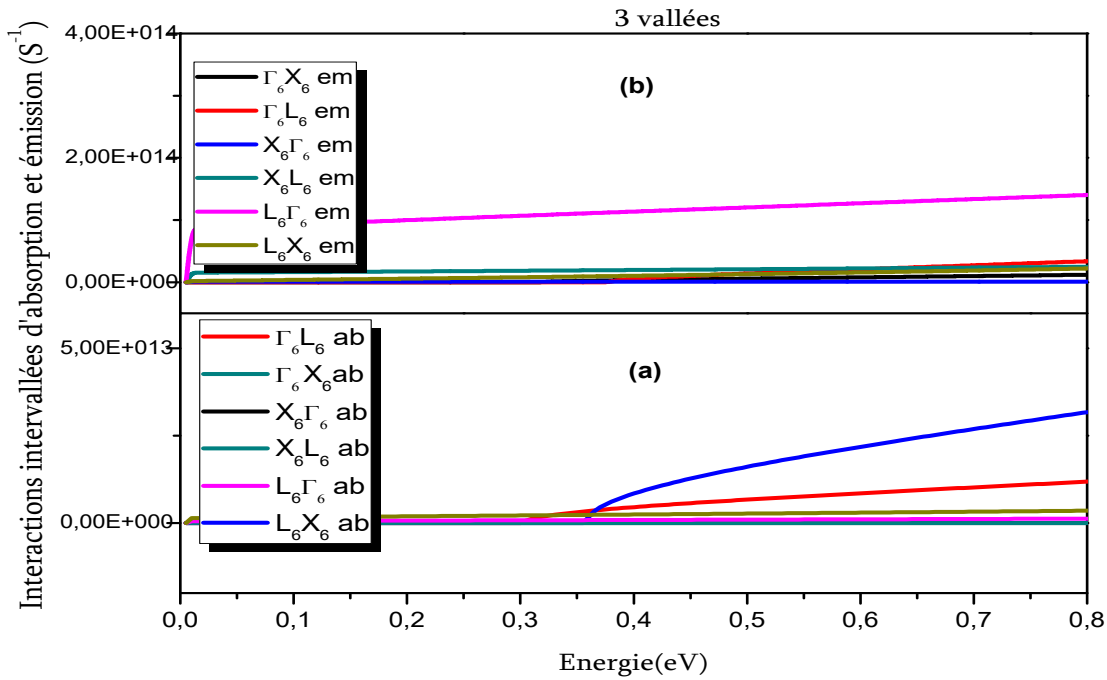


Figure IV. 24: Interactions intervalées d'absorptions(a) et émission (b) pour le GaAs (modèle 3 vallées) en fonction de l'énergie

On constate que pour des faibles énergies l'interaction X_7X_6 augmente plus rapidement car dans le cas d'émission les électrons n'ont pas besoin d'énergie pour descendre à des niveaux inférieurs. Toujours dans le cas d'émissions les interactions intervalées d'émission X_7L_6 , $\Gamma_7^* \Gamma_6$, paraissent faibles en regard de l'interaction X_7X_6 à cause de la présence de vallée intermédiaire ainsi la grand énergie de séparation entre ces vallées.

II.1.5.2. Interactions intravallées d'absorptions et d'émissions

Nous calculons pour les deux modèles les interactions intravallées en fonction de l'énergie des électrons, elles sont données par la figure IV.25.

Les interactions intravallées d'absorption et émission dans le modèle trois vallées est montrée sur la figure. IV.25 (a). Comme pour le cas des interactions précédentes, les interactions intravallées augmentent avec l'énergie des porteurs et deviennent plus importantes dans la vallée X_6 , dans le cas d'émission et d'absorption. Les interactions intravallées X_6 , X_7 sont les plus important dans le cas d'absorptions et émission (figure IV.25(b)) modèles cinq vallées.

On remarque que :
 Les probabilités d'émissions sont plus grandes que celles d'absorptions.
 L'interaction intravallées X_6 est la plus important dans le cas d'absorptions et émission pour le modèle trois vallées.

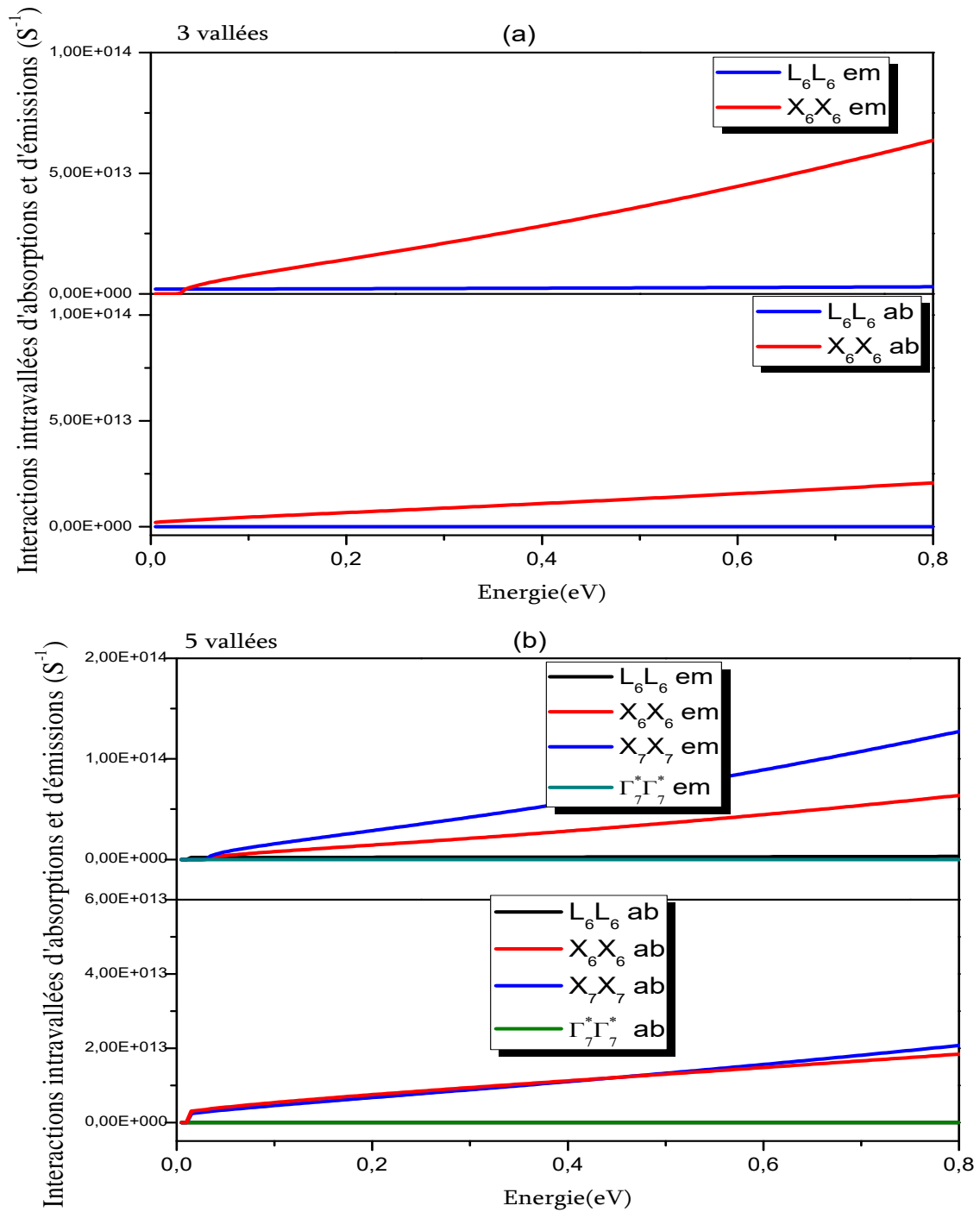


Figure IV. 25: Interactions intravallées d'absorptions et émission (a) modèle 3 vallées et (b) modèle 5 vallées) pour le GaAs en fonction du l'énergie

II. 2. Transport en régime stationnaire

Nous avons simulé le composé GaAs en régime stationnaire et en régime non stationnaire dans les deux modèles trois et cinq vallées. Les résultats obtenus sont représentés dans les figures IV.26- IV.30.

II. 2. Transport en régime stationnaire

Comme pour le carbure de silicium, les grandeurs moyennes directement accessibles dans la simulation sont la vitesse de dérive, l'énergie et la répartition des populations dans les modèles trois et cinq vallées.

II.2.1 Résultats à faible et moyen champ électrique

Pour le matériau GaAs, nous entreprenons une étude en fonction du champ électrique de la vitesse des électrons, l'énergie et le coefficient de repopulation pour différents champs électriques à la température ambiante et pour une concentration $N_D=10^{15}\text{cm}^{-3}$. La vitesse et l'énergie en fonction du champ électrique sont représentées sur la figure IV. 26.

On peut identifier trois régimes ou domaines différents dans la constitution des caractéristiques vitesse-champ dans les deux modèles. Le régime linéaire correspond au champ électrique compris approximativement entre 1 et 5 kV/cm. Ce domaine est caractérisé par une réponse linéaire de la vitesse de dérive à l'application du champ électrique E :

$$v_d = \mu E$$

Le coefficient de proportionnalité μ est la mobilité à faible champ ou mobilité ohmique des porteurs. Dans ce domaine l'électron est en vallée centrale. Pendant les phases de vol libre il est fortement accéléré. En vallée centrale, les électrons possèdent des masses effectives petites. Quand on applique des champs électriques faibles, l'énergie des porteurs est également faible et inférieure à celle du phonon; il y a des interactions seulement au niveau de la vallée Γ_6 . Le champ de seuil E_s introduit précédemment pour le 6H-SiC se situe ici à très faible champ, non visible sur nos courbes. A partir de E_s , les phonons optiques ne peuvent plus absorber l'énergie acquise par l'électron à partir du champ et donc l'énergie de l'électron augmente. Dans le domaine (5 kV/cm - 10 kV/cm), l'énergie des électrons est d'abord supérieure à celle du phonon et nous avons dans ce cas une transition des porteurs vers les vallées latérales L_6 . la vitesse de dérive atteint une valeur maximale $=1,7 \cdot 10^7 \text{cm/s}$ pour un champ de 5 kV/cm.

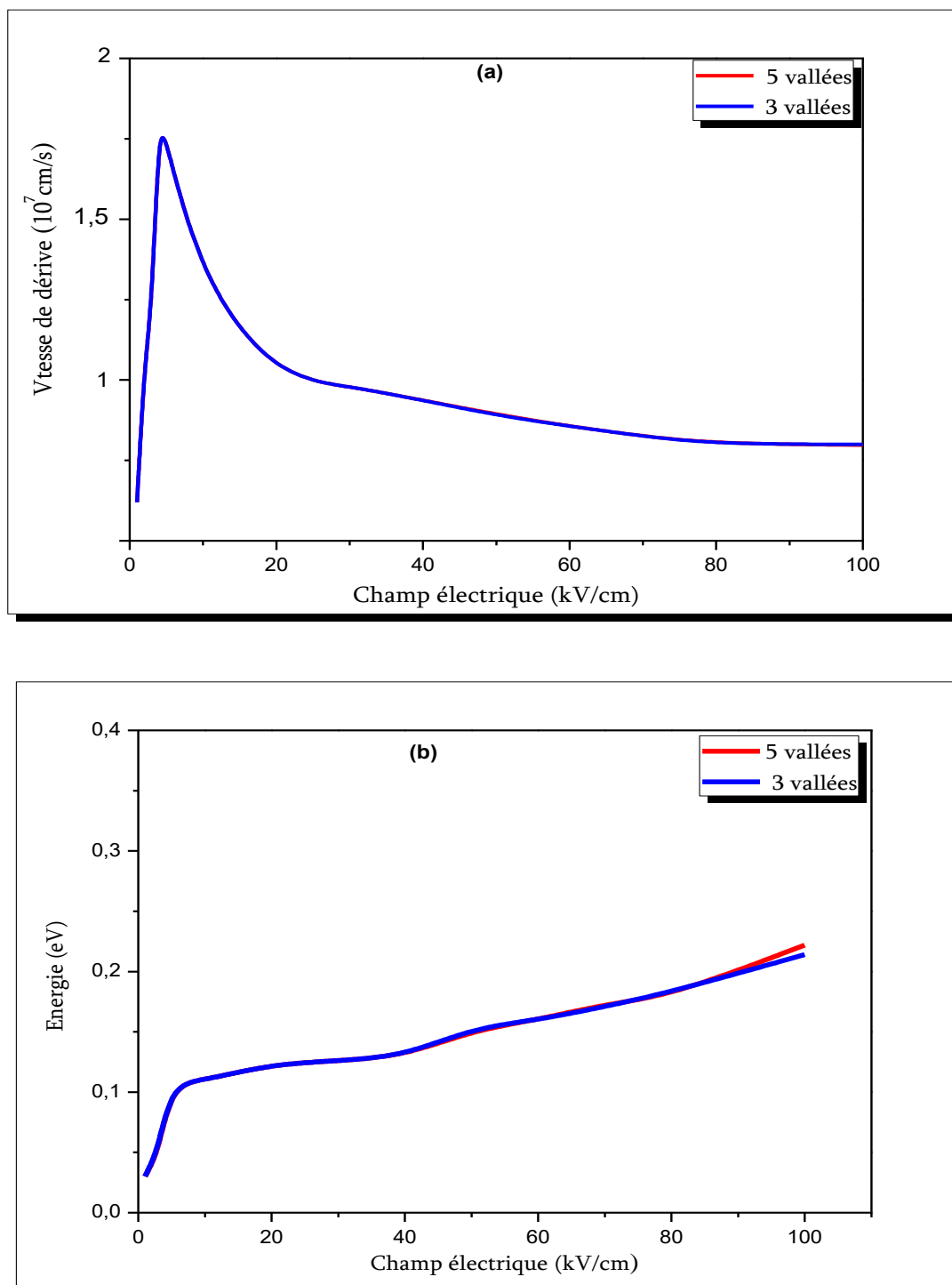


Figure IV. 26: Vitesse de dérive(a) et l'énergie moyenne des électrons (b) en fonction du champ électrique (1kV/cm-100kV/cm).

Quand on augmente le champ, la vitesse diminue car les électrons, plus nombreux en vallées latérales, sont plus lourds (masses effectives plus grandes car courbure de bande plus faible). Les interactions mises en jeu dans ce cas sont les interactions optiques polaires et les interactions intervallées. Pour des champs supérieures à 10 kV/cm, les électrons passent à la vallée X_6 et la vitesse atteint son état stationnaire avec $v=0,9.10^7$ cm/s autour de 50 kV/cm dans les deux modèles.

La comparaison avec les valeurs expérimentales de la littérature sera montrée dans le paragraphe II.2.2 qui va suivre.

Comme on peut le constater dans tous les résultats (identiques pour 3 et 5 vallées), les deux vallées supérieures que nous avons introduit dans la simulation (modèle 5 vallées) semblent n'avoir aucun effet, pour des champs inférieurs à 100 kV/cm. Par contre, au-delà de 100 kV/cm, des contraintes de calcul avec le modèle 3 vallées nous ont clairement indiqué la nécessité d'introduire des vallées supplémentaires. Nous verrons qu'en fait, une 4^{ème} vallée suffit.

II.2 .2. Résultats à champ électrique élevé

Sur la figure IV.27, nous avons porté nos résultats de calcul de la vitesse de dérive et de l'énergie des électrons en fonction du champ électrique appliqué. Afin d'avoir une idée globale du comportement de ces deux grandeurs et de pouvoir comparer nos résultats avec ceux de la littérature, les champs considérés s'étalent sur toute la gamme de 0 à 300 kV/cm. Cependant nous nous intéressons plus particulièrement au domaine (100-300 kV/cm), représentant le domaine des champs élevés pour GaAs. Au-delà de 100 kV/cm, l'introduction d'une 4^{ème} vallée devient nécessaire, les calculs ne convergeant plus (nous en avons introduit deux, les vallées X_7 et Γ_7^*). Rappelons qu'au-delà de 300 kV/cm, il y a claquage du matériau.

a) Vitesse de dérive

Pour un champ inférieur à 100 kV/cm, nous reproduisons la courbe de variation de la vitesse de dérive en fonction du champ de la figure IV.26(a). Les deux modèles donnent des résultats identiques et très proches de valeurs obtenues en full band.

Pour des champs supérieures à 100kV/cm, pour comparaison, nous avons placé sur la même figure IV. 27(a) des valeurs expérimentales et de calcul de la littérature. Comme nous pouvons le constater sur cette figure, les résultats obtenus par notre simulateur Monte Carlo

sont comparables avec les résultats expérimentaux et de calcul (modèle cinq vallées et le modèle full band).

A titre d'exemple pour un champ de 200 kV/cm la vitesse de saturation est de $6,5 \cdot 10^6$ cm/s (nos calculs), $6,2 \cdot 10^6$ cm/s (expérience), $7,1 \cdot 10^6$ cm/s (5 vallées [15]) et $6,6 \cdot 10^6$ cm/s pour le modèle full band [17]. Les résultats obtenus par notre simulateur Monte Carlo modèle cinq vallées est donc tout à fait cohérente avec les résultats obtenus par le modèle full band. Ils sont d'autre part supérieurs d'environ 5% à ceux déduit de l'expérience et inférieurs d'environ 9% aux résultats obtenus par le modèle cinq vallées d'autres auteurs [15].

b) Energie des électrons en fonction du champ électrique appliqué

Pour les raisons précédemment citées, nous avons utilisé le modèle 3 vallées jusqu'à 100 kV/cm et le modèle 5 vallées au-delà de 100 kV/cm. La figure 27 (b) représente l'énergie en fonction du champ électrique pour les deux modèles. La brusque augmentation de l'énergie se produit ici à très faible champ, non visible sur la figure, où seules les interactions avec les phonons acoustiques, avec les impuretés, les interactions piézoélectriques et les interactions intravallée avec les phonons optiques étaient mises en jeu (rappelons que E_s était de 200 kV/cm pour 6H-SiC). Comme pour la vitesse, pour un champ inférieur à 100 kV/cm, la variation de l'énergie est la même pour les 2 modèles. Dans le paragraphe suivant, nous décrirons plus en détails le mécanisme de variation de l'énergie dans ce domaine des faibles et moyens champs (0-100 kV/cm). Dans le domaine de champ élevé supérieurs à 100 kV/cm, l'énergie augmente presque linéairement avec le champ. Nous constatons que les résultats obtenus par notre simulateur Monte Carlo sont comparables avec les résultats obtenus par le modèle cinq vallées [7] et full band [8].

Rappelons que l'inclusion des deux vallées supérieures s'est avérée nécessaire au-delà de 100 kV/cm, ce qui souligne l'importance des vallées X_7 et Γ_7^* de la deuxième sous-bande de conduction dans le transport des électrons à fort champ (100kV/cm-300kV/cm).

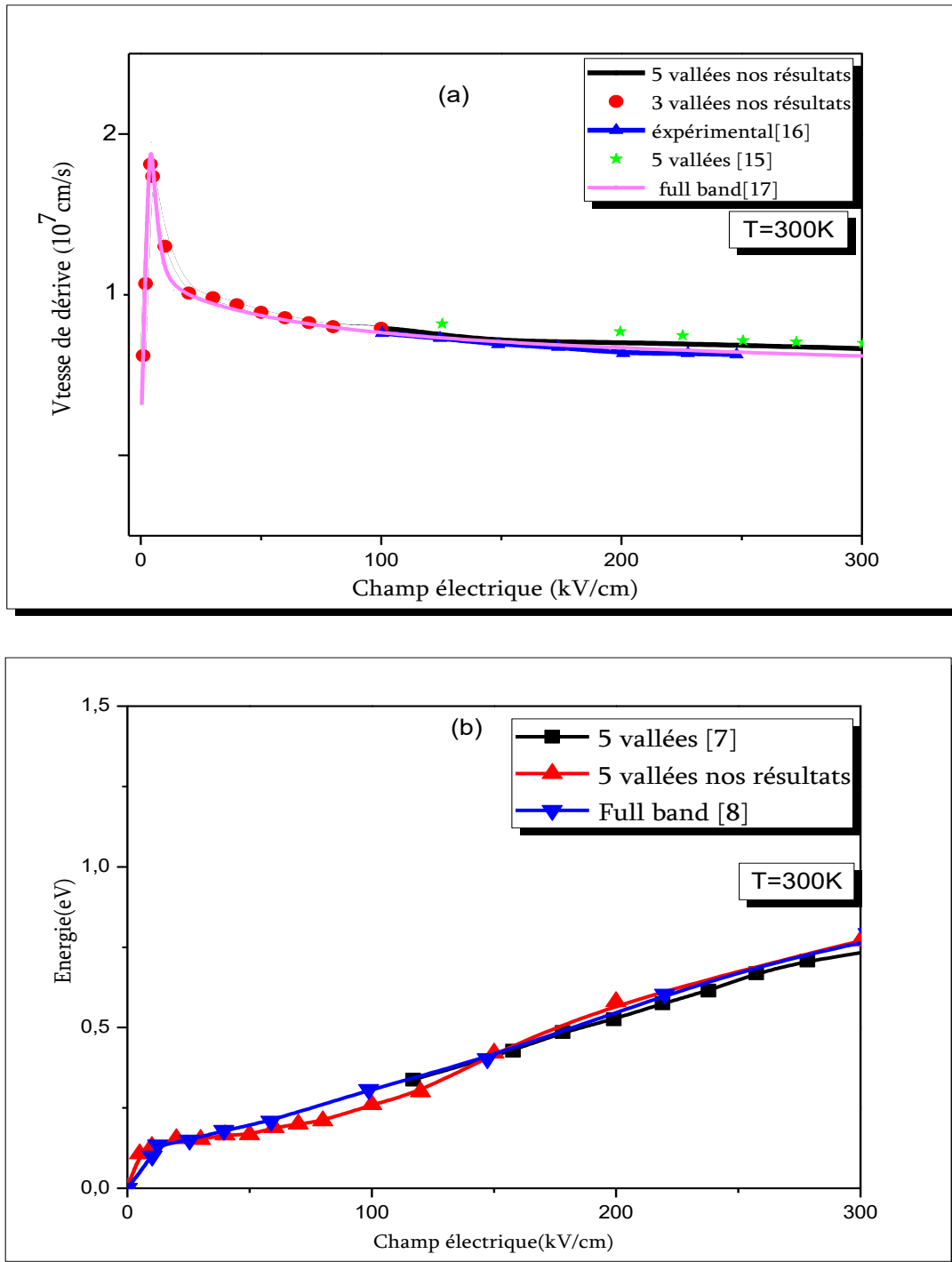


Figure IV. 27: Vitesse de dérive(a) et l'énergie (b) des électrons en fonction du champ électrique (1kV/cm-300kV/cm)

c) Influence de la température sur l'énergie

Les figures IV. 28(a) et 28(b) représentent l'influence de la température sur l'énergie en fonction du champ électrique. Trois valeurs de température (77K, 200K et 300K) ont été choisies pour les deux modèles.

Pour les faibles valeurs du champ électrique, inférieures à 10 kV/cm et pour une température fixe, l'énergie moyenne des électrons augmentent considérablement. Une fois cet intervalle dépassé, cette énergie va continuer à croître mais plus lentement, à cause de la dominance de l'interaction avec les phonons optique polaires et intervallées.

Il existe une seconde valeur seuil du champ, à partir de laquelle, la vallée X_7 commence à se remplir. Ce seuil augmente avec la température (50 kV/cm à 77 K, 60kV/cm à 200 K et 70 kV/cm à 300 K). Par conséquent, pour les champs élevés, la disposition relative des courbes est inversée et on peut en déduire la même conclusion déjà émise pour le 6H-SiC, à savoir que l'énergie des électron décroît avec la température à fort champ alors qu'elle augmente à faible et moyen champ.

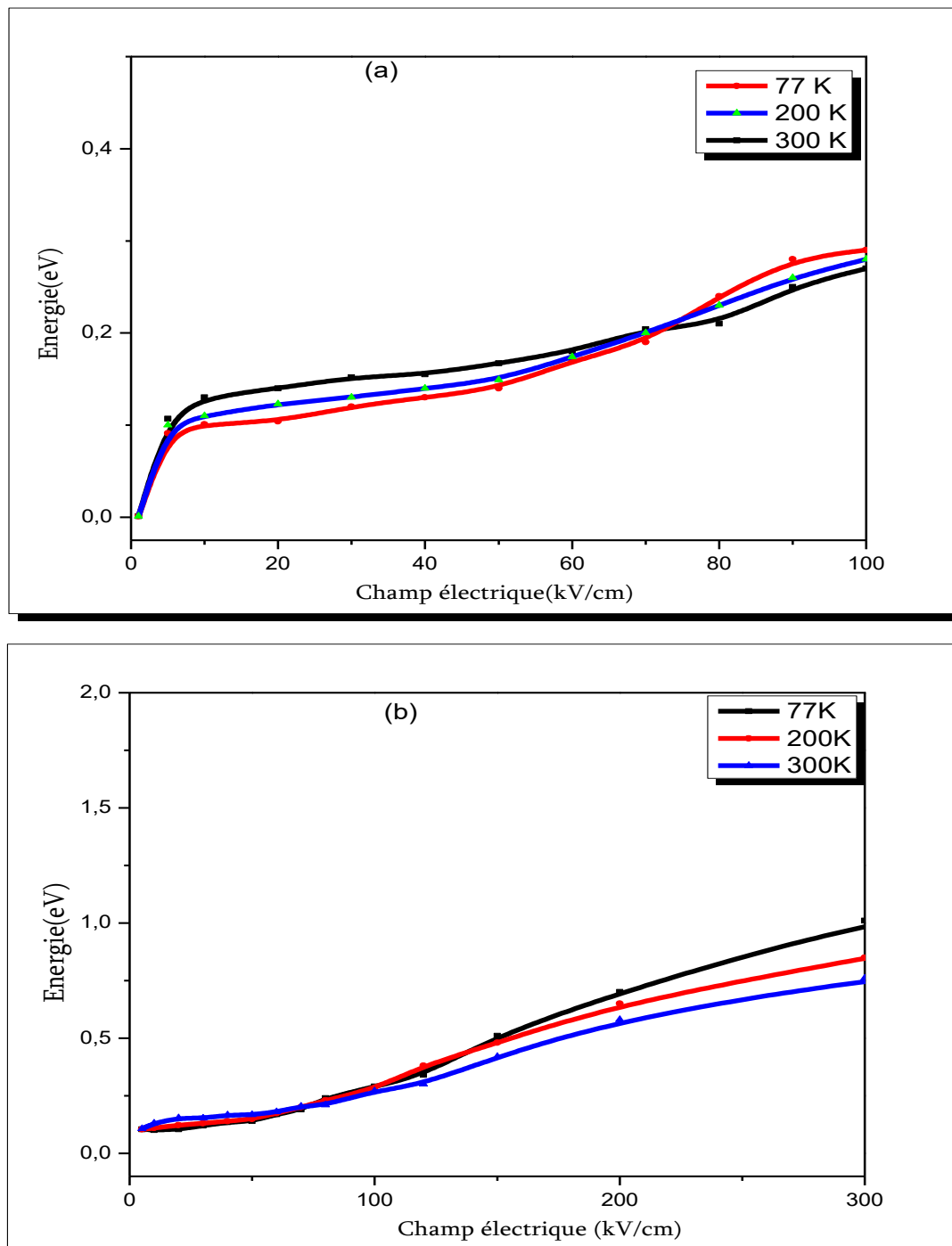


Figure IV. 28 : Energie moyenne des électrons en fonction du champ électrique pour divers températures ((a)modèle 3 vallées, (b) modèle 5 vallées).

d) Coefficients stationnaires de repopulation

Il est intéressant de connaître les pourcentages des populations de porteurs dans les différentes vallées en fonction du champ électrique car ils interviennent dans le calcul des énergies et vitesses moyennes sur l'ensemble des vallées. Nous avons présenté les coefficients de repopulation en figure IV. 29(a) pour le modèle trois vallées et sur la figure IV.29(b) pour le modèle cinq vallées. Pratiquement, on remarque que tous les porteurs sont dans la vallée Γ_6 jusqu'à 5 kV/cm environ, ce qui correspond au pic de la courbe de la vitesse en fonction du champ (figure. IV 29). Le transfert vers la vallée L_6 commence aux environs du pic et les électrons seront répartis à parts égales sur ces 2 vallées vers 10 kV/cm, les autres vallées étant quasiment vides. Pour un champ supérieur à 10 kV/cm, la vallée X_6 commence à se remplir faiblement. Pour un champ supérieur à 50 kV/cm (région du 2^{ème} champ seuil) on remarque que la vallée X_6 se peuple considérablement et la vallée L_6 se dépeuple avec apparition d'électrons dans la vallée X_7 (fig. IV 29(b)).

Pour $E > 100$ kV/cm la population dans la vallée X_7 augmente faiblement pour atteindre 15% à $E = 300$ kV/cm. Cela signifie qu'aux champs électriques très élevés (300 kV/cm) cette vallée aura une certaine influence sur le phénomène de transport. Cependant l'influence de la vallée Γ_7^* est quasi-nulle car quand on augmente le champ électrique les électrons n'ont pas une énergie suffisante pour remplir cette vallée, « énergétiquement éloignée » de 3,1 eV de la vallée la plus basse Γ_6 et de 2,2 eV de la 4^{ème} vallée X_7 . Ainsi à 300 kV/cm, donc dans des conditions proches du claquage, seulement 0,01% d'électrons sont dans cette vallée. L'introduction de cette 5^{ème} vallée n'est donc pas nécessaire. Elle l'est encore moins que pour le 6H-SiC.

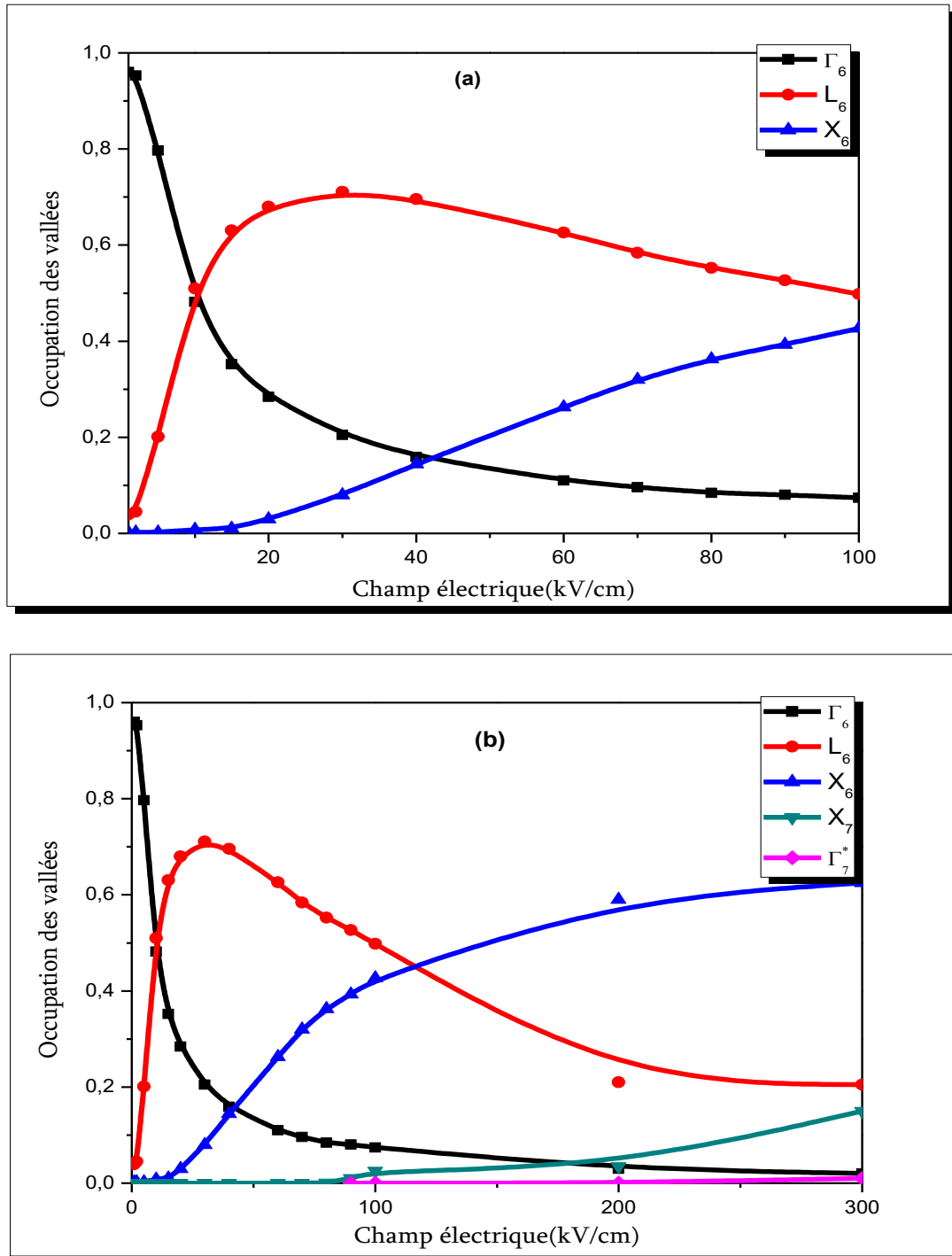


Figure IV. 29 : Population des vallées en fonction du champ électrique pour $T=300K$ ((a) modèle 3 vallées), (b) modèle 5 vallées)

II.3. Transport en régime non stationnaire

II. 3. Transport en régime non stationnaire

Pour mettre en valeur le phénomène de survitesse nous avons simulé pour différents champs électriques l'évolution de la vitesse moyenne en fonction du temps dans le matériau GaAs. Les vitesses de dérive et l'énergie à différents champs électriques en fonction du temps sont illustrées dans les figures IV. 30 et IV.31.

Les résultats obtenus montrent que pour des champs faibles le phénomène de survitesse est inexistant. Ce phénomène commence à apparaître faiblement pour des valeurs du champ supérieur à 5 kV/cm. Il est très accentué pour un champ de 100 kV/cm (avec augmentation brutale de l'énergie, visible sur la figure IV.30(b)), la valeur maximale de la vitesse est égale à $4,3 \cdot 10^7$ cm/s, elle est atteinte à 0,03 ps puis elle chute progressivement et l'état stationnaire commence à 0,2 ps. Dans le modèle cinq vallées ; On peut y observer des survitesses jusqu'à $5,5 \cdot 10^7$ cm/s pour un échelon de 200 kV/cm.

Comme dans le cas du 6H-SiC, le régime de survitesse peut être interprété de deux manières : en considérant les porteurs en mouvement balistiques sans interaction, ou en considérant les interactions intervallées puisque le champ d'apparition de la survitesse (5 kV/cm) coïncide avec celui donnant le pic de vitesse en régime stationnaire. Seules des expériences sur des dispositifs très courts peuvent fournir une réponse à cette question.

En définitive, cet ensemble de courbes permet de constater que :

- ✓ les pics de survitesse deviennent de plus en plus importants lorsque le champ électrique augmente.
- ✓ les pics de survitesse surviennent en des temps plus courts quand le champ augmente.
- ✓ le régime stationnaire est atteint plus vite à fort champ.

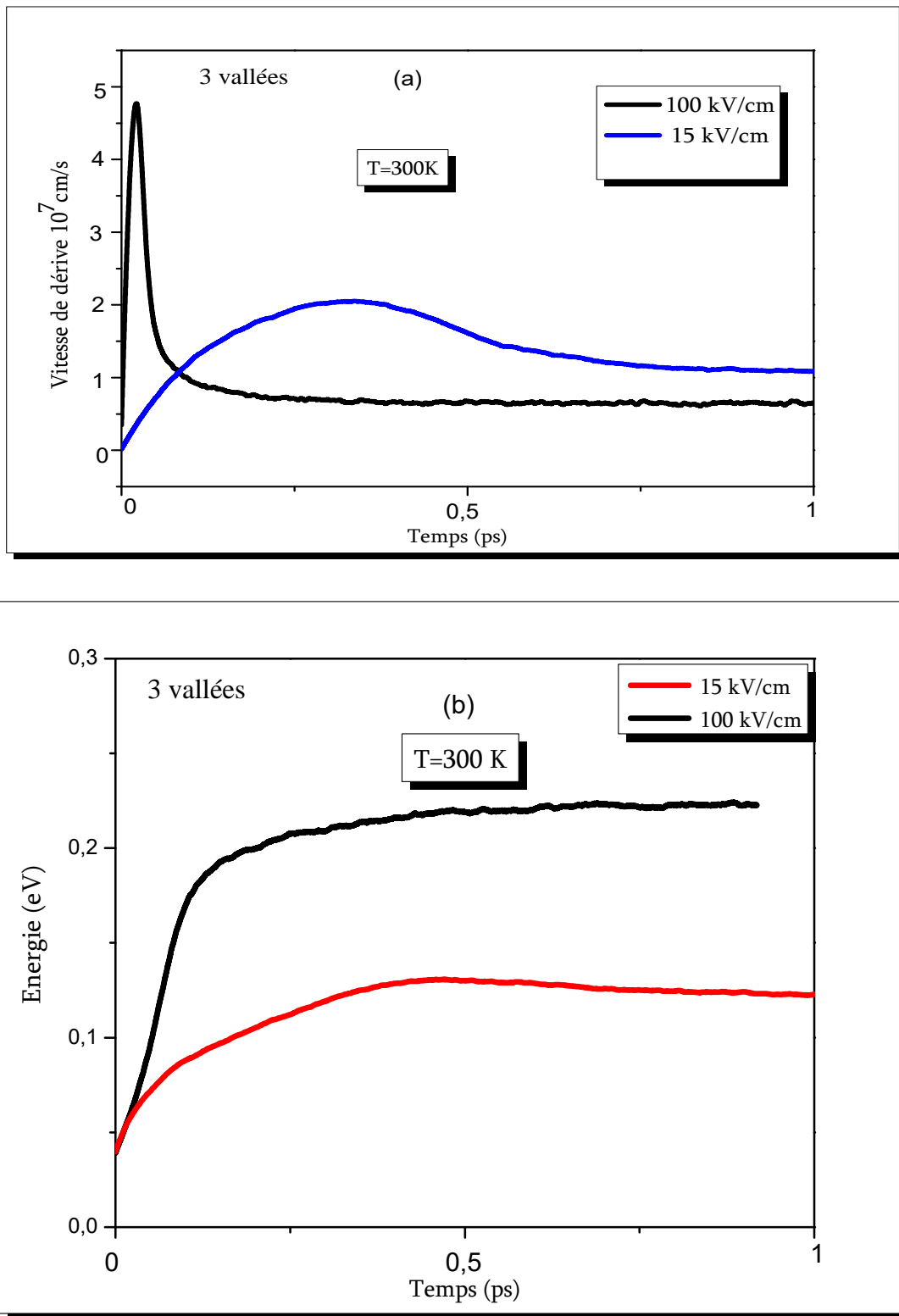


Figure IV. 30: Evolution de la vitesse (a) et l'énergie(b) moyenne en fonction du temps dans le GaAs Pour différents champs ($ND = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) pour le modèle 3 vallées.

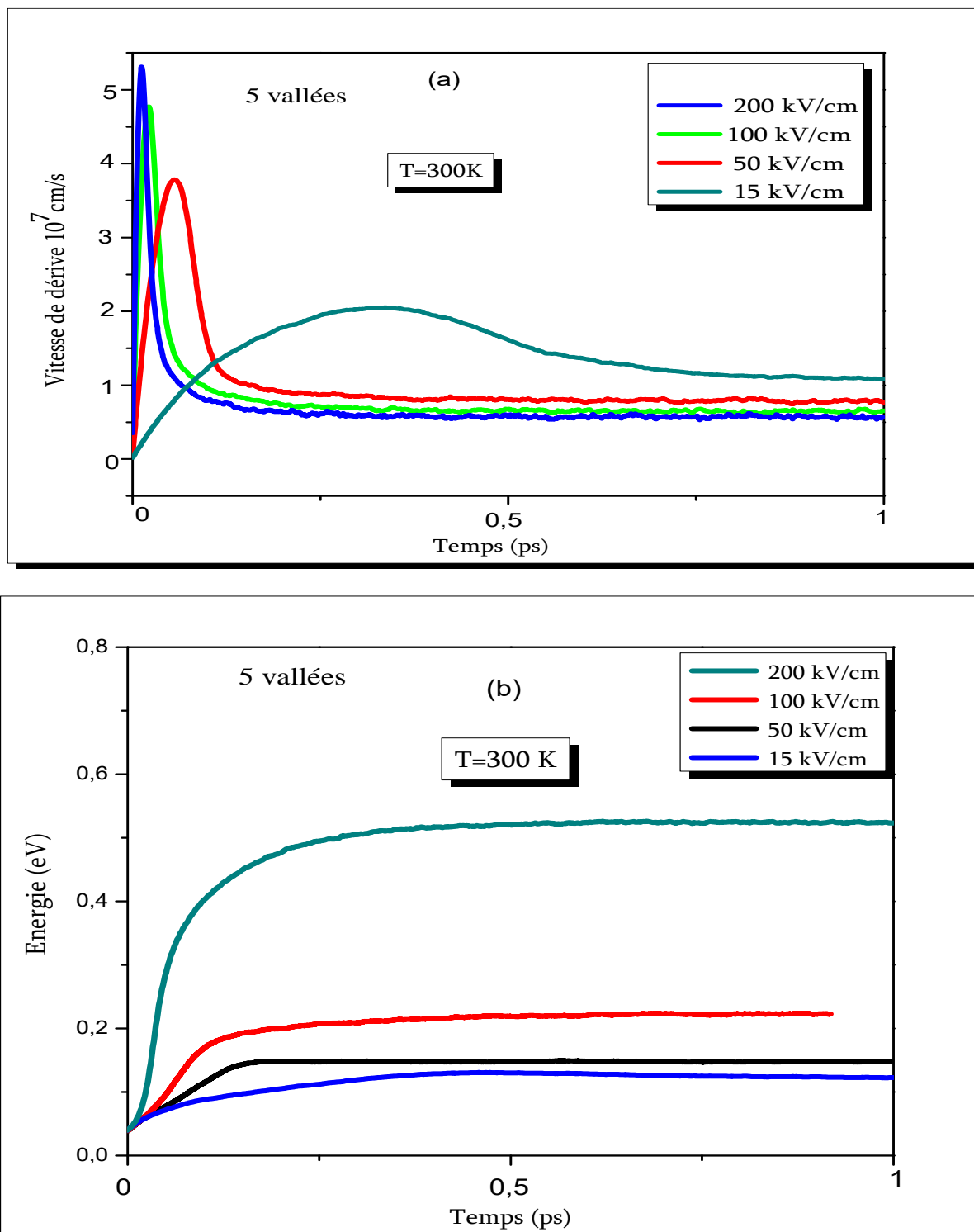


Figure IV. 31: Evolution de la vitesse (a) et l'énergie(b) moyenne en fonction du temps dans le GaAs Pour différent champs ($ND = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) pour le modèle 5 vallées

II.4. Quelques conclusions concernant cette étude sur GaAs

- Nos résultats sont comparables à ceux de la littérature en 5 vallées et full band et expérimentaux.
- Il existe deux valeurs seuil du champ électrique: une première valeur vers les très faibles champs (2 kV/cm), marquant la fin du régime d'équilibre thermodynamique et à partir de laquelle l'énergie amorce une augmentation brutale, et une deuxième valeur à partir de laquelle l'énergie des électrons décroît avec l'augmentation de la température.
- L'écart énergétique entre la 4^{ème} et la 5^{ème} vallée étant trop important, cette dernière a très peu de chance d'être peuplée par les électrons, même les plus énergétiques. Un modèle à 4 vallées suffit donc pour décrire le transport électronique pour toute la gamme des champs électriques utilisables, jusqu'au champ de claquage.

Conclusion

Conclusion

Notre étude s'est portée essentiellement sur les matériaux : Carbure de Silicium (6H-SiC) grand gap et l'Arséniure de Gallium (GaAs). Nous avons appliqué la technique numérique de Monte Carlo en introduisant les interactions entre les électrons et les défauts du cristal et les phonons acoustiques et optiques.

Nous avons effectué une étude comparative entre deux modèles trois et cinq vallées en régime stationnaire et non stationnaire. Nous avons abordé les caractéristiques de vitesse et l'énergie avec quelques confrontations à des résultats expérimentaux et théoriques.

Pour le matériau 6H-SiC les résultats obtenus avec le modèle cinq vallées, comparés avec les résultats théorique ainsi que ceux expérimentaux, nous permettent de conclure que pour des champs élevés, ils sont meilleurs que ceux de modèle trois vallées. Ils sont, par ailleurs, aussi proches des résultats obtenus par le modèle « full band ».

Pour le matériau GaAs nous avons utilisé le modèle trois vallées jusqu'à 100kV/cm et le modèle cinq vallées jusqu'à 300kV/cm. Le modèle 3-vallées est inopérant au-delà de 100 kV/cm et l'introduction d'au moins une vallée supplémentaire est nécessaire. Les résultats obtenus par le modèle cinq vallées sont en bon accord avec les résultats expérimentaux et full band à fort champ électrique.

Pour le GaAs, il existe deux valeurs seuil du champ électrique: une première fois vers les très faibles champs (2 kV/cm), marquant la fin du régime d'équilibre thermodynamique et à partir de laquelle l'énergie amorce une augmentation brutale, et une deuxième valeur à partir de laquelle l'énergie des électrons diminue avec l'augmentation de la température. Pour le 6H-SiC, ces deux seuils sont plus ou moins confondus vers 200 kV/cm. Cette différence de comportement entre les deux matériaux est due au fait que pour GaAs, l'écart énergétique entre les 2 premières vallées (0,32 eV) est bien plus faible que celui du 6H-SiC (0,61 eV).

Pour les deux matériaux, nous avons mis en évidence l'existence d'un régime de survitesse qui se manifeste d'autant plus que le champ appliqué augmente. La coïncidence des seuils de champ entre l'apparition de la survitesse et le pic de la vitesse stationnaire plaide en faveur d'une interprétation de la survitesse basée sur les transferts intervallées. Néanmoins, l'interprétation balistique n'est pas à écarter et cette question reste d'actualité.

Références bibliographiques

- [1] H. Arabshahi, *Int. J. Mod. Phys. B* 22, 5289 (2008).
- [2] C. Jacoboni and P. Lugli, “The Monte Carlo Method for Semiconductor and Device Simulation,” Springer-Verlag, New York, 1989. doi: 10.1007/978-3-7091-6963-6
- [3] C. Moglestue, *Monte Carlo Simulation of Semiconductor Devices* (Chapman and Hall, UK, 1993).
- [4] H. Arabshahi, *Mod. Phys. Lett. B* 20, 787 (2006).
- [5] H. Arabshahi, *Mod. Phys. Lett. B* 21, 199 (2007).
- [6] I. A. Khan and J. A. Cooper Jr., *IEEE Trans. Electron Devices* 47, 269 (2000).
- [7] W. von Munch and E. Pettenpaul, *J. Appl. Phys.* 48, 4823 (1977).
- [8] H.-E. Nilsson, M. Hjelm, C. Fröjdh, C. Persson, U. Sannemo and C. S. Petersson, *J. Appl. Phys.* 86, 965 (1999).
- [9] H., Arabshahi. *Modern Physics Letters B*, Vol. 23, Nos. 20 & 21 (2009) 2533-2540
- [10] W. Fawcett, A. D Boarman, and S. Swain, «Monte Carlo Determination of Electron Transport Properties of Gallium Arsenide», *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 31, pp.1963, 1970.
- [11] M. A. Littlejohn, J. R Hauser, T. H. Glisson, D. K. Ferry, and J.W. Harrison, «Alloy Scattering and High Field Transport in Ternary and Quaternary III- V Semiconductors », *Solid State Electr.*, vol 21, pp. 107-114, 1978.
- [12] A.Kaszynski, « étude des phénomènes de transport dans les matériaux semiconducteurs par les méthodes de Monte Carlo: application a l'Arséniure de Gallium de type N », thèse de Docteur Ingénieur, Université des Sciences et Techniques de Lille, 1979.
- [13] M V. Fischetti and S E. Laux 1988 *Phys. Rev. B* 38 9721.
- [14] M Shur, *GaAs Devices and Circuits* 1987 (New York: Plenum).
- [15] T González Sanchez et al “*semicond. Sci. Technol.* 6(1991)862-871. Printed in the UK.
- [16] T H. Windhorn, T J .Roth, L M. Zinkiewicz, O L. Gaddy and G E. Stillman (1982) *Appl. Phys. Lett.* 40 513.

- [17] G. M. Dunn, G. J. Rees, J. P. R. David, S. A. Plimmer, and D. C. Herbert, “Monte Carlo simulation of impact ionization and current multiplication in short GaAs diodes,” *Semiconductor Science and Technology*, vol. 12, no. 1, pp. 111–120, 1997.

CONCLUSION

GÉNÉRALE

Conclusion générale

Conclusion générale

La simulation des phénomènes de transport électronique par la méthode de Monte Carlo constitue une étape essentielle vers la connaissance des propriétés de matériaux. Comme toute démarche de simulation, de part ses potentialités de prédictions, cette méthode de calcul permet d'économiser du temps et de l'argent en s'affranchissant de certaines expériences préliminaires. En outre, la simulation peut être effectuée dans des conditions extrêmes (températures, champ électrique...etc) non accessibles à l'expérience. Cependant, dans le cas de la présente étude, son utilisation est venue répondre à un besoin théorique, en ce sens qu'elle nous a permis de nous affranchir de la résolution analytique de l'équation de Boltzmann. Sa flexibilité donne en fait un outil adaptable à une grande diversité des applications.

Le travail que nous avons réalisé montre et illustre les possibilités que peut présenter la méthode de Monte Carlo dans l'étude de quelques propriétés des semiconducteurs.

Dans le but d'étudier les phénomènes de transport électronique à forts champs électriques, nous avons ciblé deux matériaux semi-conducteurs, le 6H-SiC et le GaAs, représentant les filières binaires IV-IV et III-V respectivement. Le SiC est en outre caractérisé par sa large bande interdite.

Nous avons mis en œuvre un programme de calcul basé sur la méthode de Monte Carlo, et dont nous avons vérifié la fiabilité en reproduisant les résultats connus pour le GaAs. Ce programme qui peut modéliser jusqu'à 5 vallées et qui tient compte de la non parabolicité des bandes, nous a permis de calculer les paramètres relatifs aux états stationnaire et transitoire lors du transport de charge suite à l'application d'un champ électrique.

Nous avons effectué une étude comparative entre deux modèles incluant trois et cinq vallées de la structure de bande pour les deux matériaux.

Nous avons montré les très bons résultats « haute tension » obtenus par le modèle cinq vallées. Nous notons cependant que les résultats obtenus dans le modèle trois vallées, donne des résultats satisfaisants. Mais le meilleur compromis qui permet de s'affranchir de la

Conclusion générale

prise en compte de toute la structure de bande (full band) reste le «modèle cinq vallées » car il est très proche des résultats expérimentaux et des résultats obtenus par le modèle full band d'autres auteurs, et ce, même pour des champs électriques intenses. Comme les temps de calcul sont bien plus courts qu'avec le full band, nous pensons qu'un tel modèle est approprié pour prédire les propriétés de transport des électrons, y compris dans des conditions extrêmes.

La comparaison des résultats de notre démarche appliquée aux deux matériaux fait ressortir que pour 6H-SiC les résultats obtenus avec le modèle cinq vallées, pour des champs élevés, sont meilleurs que ceux du modèle trois vallées. Ils sont, par ailleurs, très proches des résultats obtenus par le modèle « full band ». Cet effet apparaît plus clairement dans le cas de GaAs que dans celui du 6H-SiC. En effet, pour le matériau GaAs le modèle à trois vallées n'est utilisable que jusqu'à 100kV/cm, alors que le modèle cinq vallées peut supporter des champs allant jusqu'à 300kV/cm. Cela est due aux grandes distances énergétiques qui séparent les vallées latérales de la vallée centrale. En outre, un nombre de 4 vallées semble suffisant pour GaAs, la 5^{ème} vallée étant peu accessible aux électrons même les plus énergétiques.

Pour les deux matériaux, nous avons mis en évidence une phase de survitesse qui intervient en réponse à un échelon de champ électrique, donc en régime transitoire. Cette survitesse est d'autant plus marquée que le champ est important. Ce régime de survitesse prend toute son importance dans les dispositifs électroniques de taille submicronique. Un modèle à plus de 3 vallée décrit cette survitesse de manière plus précise, et ce, pour les deux matériaux.

Résumé

Nos investigations portent sur le phénomène du transport électronique dans les matériaux 6H-SiC et GaAs, choisis pour leur différence de gap et de champ électrique de claquage. Pour cela, nous avons utilisé un programme de simulation numérique écrit en langage C++, basé sur la méthode de Monte Carlo.

La méthode choisie pour intégrer la structure de bande dans le programme de simulation utilise deux modèles comprenant respectivement 3 et 5 vallées non-paraboliques. Le champ électrique est appliqué dans la direction perpendiculaire à l'axe c pour la structure hexagonale de 6H-SiC et dans la direction $\langle 100 \rangle$ pour GaAs de structure cubique. Notre simulation permet de suivre les évolutions d'un ensemble de particules au cours du temps sous l'action d'un champ électrique. En régime stationnaire, on détermine leur vitesse de dérive, leur énergie, leur mobilité ainsi que les coefficients de repopulation des vallées. Notre programme de calcul permet également d'étudier l'influence du régime de survitesse en phase transitoire, sur l'évolution de l'énergie moyenne des porteurs de charge. Enfin, nous avons comparé nos résultats à d'autres résultats de la littérature spécialisée. Les résultats obtenus avec le modèle 5-vallées, comparés avec des résultats théoriques et expérimentaux s'avèrent meilleurs que ceux du modèle 3 vallées, pour des champs forts. Ils sont, par ailleurs, très proches des résultats obtenus par le modèle « full band » qui inclut toute la structure de bande d'énergie. Nous en concluons que la prise en compte de 5 vallées pour 6H-SiC et 4 vallées pour GaAs suffit à rendre compte de tout le transport électronique dans ces matériaux, même pour des champs extrêmes, proches des champs de claquage, ce qui permet un gain très substantiel en effort de calcul.

Les mots clés : Transport électronique, cinq vallées, full band, composants électroniques, Monte Carlo.

Abstract

Our investigations focus on the electronic transport phenomenon in 6H-SiC and GaAs materials, chosen for their different gaps and breakdown fields. For this purpose, we used a C++ numerical simulation program, based on the Monte Carlo method.

The method chosen to incorporate the band structure in the simulation program uses two models including 3 and 5 non-parabolic valleys respectively. The electric field is applied in the direction perpendicular to the c axis for the 6H-SiC hexagonal structure and in the $\langle 100 \rangle$ direction for GaAs cubic structure. Our simulation allows us to track a set of electrons over time under the action of an electric field. In steady state conditions, we determined their drift velocity, their energy, their mobility as well as the valleys occupancy. Our calculation program also allows us to study the influence of the velocity overshoot that appears in the transient state, on the evolution of the average energy of the charge carriers. Finally, we compared our results with other results of the literature. Compared with theoretical and experimental results, our 5-valley results are better than those from the 3-valley model for high fields. They are, moreover, very close to the results obtained by the "full band" model which includes the entire energy band structure. We conclude that taking into account 5 valleys for 6H-SiC and 4 valleys for GaAs is quite enough to account for all electronic transport in these materials, even for extreme field strength, close to breakdown conditions, which is considerably less computer-time consuming than the use of a full band model..

Keywords :: Electron transport, Five-valley, Full Band, Monte Carlo, Electronics Component

الملخص:

في هذه الأطروحة قمنا بدراسة خصائص نقل الإلكترونات في أشباه النواقل 6H-SiC, GaAs تم إختيارهما نظرا لإختلافهما في فارق الطاقة الممنوعة ومجال الإنهيار الكهربائي.

بغية تمكين من دراسة ظواهر النقل الإلكترونيات في المواد شبه نواقل استخدمنا المحاكاة العددية على أساليب مونت كارلو مدونة بلغة ++C . في برنامج المحاكاة لمكاملة بنية الأحزمة استخدمنا نموذجين: نموذج يأخذ في الاعتبار ثلاثة أودية غير مكافئة، والنموذج الثاني يأخذ خمسة أودية غير مكافئة. يتم تطبيق الحقل الكهربائي في اتجاه عمودي على محور C في سداسي H6- كربيد والاتجاه <100> لهيكل مكعب الغاليوم. المحاكاة المستخدمة في هذه الحالة تسمح لنا بمتابعة تغير خصائص مجموعة من الإلكترونات بمرور الزمن. يتم تحديد سرعة الانحراف الإلكترونيات، وطاقتهم المتوسطة، حركيتهم كذلك نسبة وجودهم في مختلف الأودية، بدلالة الزمن وبمختلف الحقول الكهربائية كما يسمح لنا البرنامج بدراسة تأثير نظام السرعة الزائدة على تغير الطاقة المتوسطة لشحنة الإلكترونات. وفي الأخير قمنا بمقارنة النتائج التي توصلنا إليها بالنتائج النظرية والتجريبية فوجدنا بان في مجالات الحقول عالية النتائج التي تم الحصول عليها بنموذج خمسة أودية، مقارنة مع النتائج النظرية والتجريبية أفضل من النتائج التي تم الحصول عليها بنموذج ثلاثة أودية وأقرب من النتائج المتحصل عليها نموذج فرقة كاملة. نستنتج أن أخذ 5 أودية لH6- كربيد و 4 أودية الغاليوم بما فيه الكفاية لحساب جميع خصائص نقل الإلكترونات في هذه المواد، حتى بالنسبة لحقول عالية مقربة من حقول الإنهيار، يستهلك وقت أقل بكثير من وقت الحاسوب عند استخدام نموذج " بنية كاملة ".

الكلمات المفتاحية: النقل الإلكتروني، خمسة أودية، المكونات الإلكترونية، مونت كارلو، بنية كاملة.