



Université Abou Bakr Belkaïd

- TLEMEN -

Faculté de Technologie

Département de Génie Electrique et Electronique

Mémoire présenté par

**EL OUCHDI Ahmed Amine**

Pour obtenir le diplôme de Magister en Microélectronique

**Thème**



**Caractérisation du phénomène de transport  
électronique dans les matériaux composés ternaires :  
Application au matériau  $Ga_xIn_{1-x}Sb$**

*Soutenu le : - - 2011*

*devant le jury composé de :*

**Président :**

**M<sup>r</sup>. K.E.GHAFFOUR**

**Prof. Université de Tlemcen**

**Examineurs :**

**M<sup>me</sup>. A.GUEN-BOUAZZA**

**MCA. Université de Tlemcen**

**M<sup>r</sup>. A.HAMDOUNE**

**MCA. Université de Tlemcen**

**Directeur :**

**M<sup>r</sup>. B.BOUAZZA**

**MCA. Université de Tlemcen**

**Année Universitaire 2011-2012**

## Remerciements

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

*Ce travail a été effectué au sein du laboratoire de microélectronique à l'Université Abou Bakr Belkaid de Tlemcen.*

*Je tiens à remercier très vivement Monsieur B.BOUAZZA, Maître de conférences à l'Université de Tlemcen pour la bienveillance avec laquelle il a guidé mes travaux, pour son soutien, ainsi que pour les précieux conseils qu'il m'a prodigués tout au long de ce thèse. J'ai eu beaucoup de plaisir de travailler avec lui.*

*Mes plus vifs remerciements vont à Monsieur K.E.GHAFFOUR, Professeur à l'Université de Tlemcen et responsable du laboratoire qui nous a transmis ses connaissances et son savoir et pour l'honneur qu'il me fait en présidant le Jury de cette thèse.*

*Ma profonde reconnaissance envers Madame A.GUEN-BOUAZZA, Maître de conférences à l'Université de Tlemcen que j'ai déjà travaillé avec elle auparavant d'avoir apporté son aide et ses conseils et pour l'honneur qu'elle me fait en acceptant de faire partie du jury.*

*Je remercie également Monsieur A.HAMDOUNE Maître de conférences à l'Université de Tlemcen, 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 d'électronique.*

*Merci*

## Dédicace

*À la mémoire de mes regrettables grands parents,*

*À mes très chers parents qui m'ont toujours soutenu, aimé et encouragé,*

*À mon très cher grand père à qui je souhaite une longue vie,*

*À mes chers frères, sœurs, beaux frères et belles sœurs,*

*À mes adorables neveux et nièces,*

*À mes très chères tantes, oncles, cousins et cousines,*

*À toute ma famille et tous mes amis,*

*À tous ceux qui me sont chers.*

# Table des matières

Remerciements .....	2
Dédicace .....	3
Table des matières .....	4
Liste des tableaux .....	7
Liste des figures .....	8
Introduction Générale.....	10
Chapitre I.....	15
Introduction .....	16
I.1-Présentation des matériaux III-V .....	16
I.2-Structure cristalline .....	20
I.3-Réseau réciproque et zone de Brillouin .....	22
I.4-Structure des bandes d'énergie .....	23
I.4.1-Influence de la température sur la structure de bande.....	26
I.4.2-Notion de la masse effective .....	27
I.4.3-Notion du coefficient de non-parabolicité .....	27
I.5-Variation des paramètres d'alliage en fonction du coefficient stœchiométrique x.....	28
I.5.1-Variation linéaire des paramètres en fonction du coefficient x .....	29
I.5.2-Variation non linéaire des paramètres en fonction du coefficient x .....	29
I.6-Principaux paramètres utilisés dans la simulation Monte Carlo .....	31
Conclusion .....	32
Chapitre II .....	33
Introduction .....	34
II.1-Phénomènes de transport dans les semi-conducteurs .....	34
II.2-Généralités sur l'équation de Boltzmann.....	35
II.2.1-Les différents types de collisions.....	36
II.2.1.1-Interactions avec le réseau cristallin .....	36
II.2.1.2-Interactions avec les porteurs.....	37
II.2.1.3-Interactions avec les impureté .....	37
II.2.1.4-Interactions avec les alliages .....	38
II.2.2-Libre parcours moyen élastique et inélastique.....	38
II.2.3-Equation de Boltzmann.....	39

II.3-Différents régimes de transport électronique.....	41
II.3.1-Transport dans le régime balistique.....	41
II.3.2- Transport dans le régime stationnaire.....	42
II.3.3- Transport dans le régime non-stationnaire .....	42
II.4-Mécanismes d'interactions .....	43
II.4.1-Interactions élastiques.....	44
II.4.1.1-Interactions acoustiques.....	45
II.4.1.2- Interactions piézoélectriques .....	46
II.4.1.3-Interactions avec les impuretés ionisées .....	46
II.4.1.4-Interactions avec les alliages .....	47
II.4.2.1-Interactions inter-vallées.....	48
II.4.2.1.1-Interactions inter-vallées équivalentes.....	48
II.4.2.2-Interactions optiques.....	50
II.4.2.2.1-Interactions avec un phonon optique polaire .....	50
II.4.2.2.2-Interactions avec un phonon optique non polaire .....	51
II.5-Interactions prépondérantes dans les semi-conducteurs .....	51
II.5.1-Champ électrique faible.....	51
II.5.2-Champ électrique moyen .....	52
II.5.3-Champ électrique fort .....	52
II.5.4-Champ électrique très fort .....	53
Conclusion .....	53
Chapitre III .....	54
Introduction .....	55
III.1-Historique de la méthode.....	55
III.2-Principe de la méthode .....	56
III.3-Equation de mouvement.....	59
III.4-Temps de vol libre.....	62
III.5-Choix du type de l'interaction.....	64
III.6-Angle de déviation.....	66
III.7-Mise en œuvre de la simulation.....	67
III.8-Description du logiciel .....	69
Conclusion .....	70

Chapitre IV .....	71
Introduction .....	72
IV.1-Propriétés de transport dans les matériaux III-V .....	72
IV.2- Model de simulation.....	73
IV.3-Résultats de la simulation .....	74
IV.3.1-Différents types d'interactions .....	75
IV.3.1.1-Interactions élastiques .....	75
IV.3.1.1.1-Interactions acoustiques .....	75
IV.3.1.2-Interactions inélastiques .....	76
IV.3.1.2.2-Interactions intra-vallées .....	79
IV.3.1.2.3-Interactions optiques polaires.....	79
IV.3.1.3-Influence de la température sur les interactions .....	81
IV.3.2-Caractéristiques du transport dans les différents régimes .....	81
IV.3.2.1-Caractéristiques du transport en régime stationnaire .....	81
IV.3.2.1.1-Caractéristique Vitesse-champ électrique .....	82
IV.3.2.1.2-Influence de la température sur la caractéristique Vitesse-champ électrique .....	84
IV.3.2.1.3-Taux d'occupations d'électrons.....	85
IV.3.2.2-Caractéristiques du transport en régime non stationnaire .....	86
IV.3.2.2.1-Vitesse en fonction du temps .....	86
IV.3.2.2.2-Vitesse en fonction du temps pour différent champs électriques.....	88
IV.3.2.2.3-Vitesse en fonction du temps pour différent températures.....	89
Conclusion .....	90
Conclusion Générale .....	91
Références bibliographiques .....	94

## Liste des tableaux

Tableau (I.1) : extrait de la classification périodique des éléments.....	16
Tableau (I.2) : propriétés des principaux composés binaires III-V à 300°K.....	17
Tableau (I.3) : Paramètre de variation de la bande interdite en fonction de la température....	26
Tableau (I.4) : Paramètre du GaSb, InSb et $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ .....	31

## Liste des figures

Figure (I.1) : évolutions de l'énergie de bande interdite et du paramètre cristallin des alliages de composés III-V .....	19
Figure (I.2) : mailles cristallographiques de la structure Zinc Blende .....	20
Figure (I.3) : Structure Zinc Blende en projection sur un plan formé par une des faces du cube .....	21
Figure (I.4) : première zone de Brillouin d'un cristal Zinc-Blende .....	22
Figure (I.5) : structure de bandes dans le GaSb au centre de la zone de Brillouin .....	23
Figure (I.6) : structure de bandes dans l'InSb au centre de la zone de Brillouin .....	24
Figure (II.1) : Le mode de vibration longitudinal et les deux modes transversales .....	37
Figure (II.2) : Principaux mécanismes d'interactions dans les semi-conducteurs .....	44
Figure (III.1) : l'évolution d'un ensemble de particule au cours du temps .....	57
Figure (III.2) : trajectoire d'un électron dans l'espace réel et dans l'espace des K .....	61
Figure (III.3) : Probabilité totale d'interactions et Self Scattering .....	64
Figure (III.4) : Tabulations et sélections des mécanismes d'interactions .....	65
Figure (III.5) : Angle de déviation .....	67
Figure (III.6) : Organigramme de la méthode Monte Carlo .....	68
Figure (IV.1) : Modèle à trois vallées .....	73
Figure (IV.2) : interactions acoustiques .....	75
Figure (IV.3) : Interactions inter-vallées d'absorptions .....	77
Figure (IV.4) : Interactions inter-vallées d'émissions .....	77
Figure (IV.5) : Interactions intra-vallées .....	79
Figure (IV.6) : Interactions optiques polaires .....	80
Figure (IV.7) : Vitesse de dérive des électrons en fonction du champ électrique .....	82
Figure (IV.8) : Comparaison de nos résultats avec ceux de la littérature .....	82
Figure (IV.9) : Vitesse de dérive des électrons en fonction du champ électrique pour différentes températures .....	84
Figure (IV.10) : Comparaison de nos résultats avec ceux de la littérature .....	85
Figure (IV.11) : Taux d'occupation des électrons en fonction du champ électrique .....	85
Figure (IV.12) : Vitesse de dérive des électrons en fonction du temps .....	87
Figure (IV.13) : Vitesse de dérive des électrons en fonction du temps pour différents champs électriques .....	89

Figure (IV.14) : Vitesse de dérive des électrons en fonction du temps pour différentes températures ..... 90

## Introduction Générale

Le développement dans le domaine de la micro-électronique a connu une énorme croissance durant le demi-siècle dernier. Ce développement est dû en grande partie aux évolutions techniques et en particulier à la miniaturisation des dispositifs semi-conducteurs, mais aussi à l'utilisation de nouveaux matériaux surtout les matériaux composés tel que les III-V et les II-VI pour différentes applications dans l'optoélectronique et l'électronique de puissance.

Durant cette même période, le développement dans le domaine de l'informatique a connu le même essor que la micro-électronique. Le cout exorbitant lors de la fabrication de nouveaux composants a poussé les chercheurs a utilisé la simulation pour mieux comprendre les phénomènes physiques et pour proposer des pistes d'améliorations des structures et de nouvelles architectures de dispositifs à moindre cout.

Ces logiciels de simulation sont utilisés pour résoudre numériquement les systèmes d'équations obtenues par les lois de la physique qui sont difficiles à résoudre analytiquement.

Aujourd'hui, les logiciels de simulations jouent un rôle très important dans tous les domaines de l'électronique générale. En effet, avant la fabrication d'un composant électronique, on procède à une simulation. Cette simulation est définit dans le cas général comme une technique permettant de reproduire de façon virtuelle le comportement d'un phénomène réel, et dans ce cas, les résultats obtenus sont très satisfaisantes, car la simulation gagne en terme de cout et de temps par rapport à la fabrication.

Actuellement l'étude théorique des propriétés du transport électronique dans les matériaux semi-conducteurs et plus précisément dans les matériaux III-V ternaires fait l'objet de plusieurs recherches. Le transport électronique dans un cristal est très différent du transport dans le vide car dans ce dernier, la trajectoire des électrons n'est pas perturbée et les électrons n'effectuent pas d'interaction, alors que dans un cristal, le transport dépend fortement de la

structure de bande dans laquelle les électrons évoluent. Ils subissent plusieurs types de collisions que nous allons présenter dans les chapitres suivants. Pour étudier le transport électronique dans un semi-conducteur, on a recours à résoudre l'équation de Boltzmann. Cette résolution s'avère très difficile à reproduire analytiquement. On a souvent recours, à l'utilisation des 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 existant dans la littérature.

C'est dans ce même contexte que se situe notre étude, « Caractérisation du phénomène de transport électronique dans les matériaux composés ternaires : Application au matériau  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$  ». Notre but est de simuler le transport électronique par la méthode Monte Carlo dans le matériau  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ , et par la suite, fixer les performances de ce matériau en température et en champ électrique.

Nous avons scindé notre mémoire en quatre chapitres principaux entourés d'une brève introduction et d'une conclusion générale.

Le premier chapitre est consacré à l'étude des principales propriétés des matériaux semi-conducteurs III-V. Nous abordons ce chapitre par une présentation générale de ces matériaux, ensuite on définit leur réseau cristallin, leur réseau réciproque ainsi que leur structure de bande d'énergie et l'influence de la température sur cette structure. On donne aussi les expressions permettant de calculer les masses effectives des électrons et les

coefficients de non parabolicité dans les vallées  $\Gamma$ , L et X. Enfin, on donne la variation des paramètres d'alliage en fonction du coefficient stœchiométrique  $x$ .

Le deuxième chapitre est employé pour l'étude de transport électronique dans les semi-conducteurs. On donne tout d'abord les origines du courant électrique, ensuite on présente un aperçu général sur l'équation de Boltzmann en définissant tous les termes de cette équation. Nous citons enfin les différents types de collisions subis par les électrons avec leurs probabilités d'interactions en fonction de l'énergie. Cette étape de calcul de probabilités de calcul est fondamentale car c'est grâce à ces dernières qu'il nous est possible de décrire la physique des phénomènes microscopiques qui entre en jeu dans le transport électronique.

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

Le quatrième chapitre est destiné à l'exploitation des différents résultats obtenus par notre simulation. On présente tout d'abord les différents types d'interactions en fonction de l'énergie dans un premier temps. Ensuite on présente les caractéristiques du transport électronique dans les différents 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 non stationnaire, la vitesse de dérive est donnée en

fonction du temps. Les résultats obtenus seront comparés avec d'autres résultats existant dans la littérature.

## Chapitre I

Propriétés physiques des matériaux semi-conducteurs

III-V

**Introduction :**

Malgré sa grande domination dans le marché de la microélectronique grâce à sa disponibilité naturelle et son coût moins cher par rapport à d'autres matériaux, le silicium avec son gap indirect reste néanmoins peu efficace et présente des difficultés dans le domaine de l'optoélectronique, il n'y a donc pas une possibilité de réaliser des composants optiques performants avec de tels matériaux.

Pour cela, l'utilisation de nouveaux matériaux dans la fabrication des semi-conducteurs est devenue indispensable pour le développement dans ce domaine. Alors, plusieurs chercheurs ont travaillé dans ce cadre, et vers la fin des années 50, une nouvelle gamme de matériaux semi-conducteurs est née, c'est les semi-conducteurs III-V.

**I.1-Présentation des matériaux III-V :**

Les matériaux III-V sont une association d'éléments de la colonne III et de la colonne V du tableau périodique de Mendeleïev. Le tableau (I.1) montre un extrait de cette classification et nous donne une idée sur les composés binaires qui peuvent être réalisés à partir de ces deux colonnes, les chiffres représentent le nombre atomique de matériau:

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

Tableau (I.1) : extrait de la classification périodique des éléments

Le tableau (I.2) présente quelques semi-conducteurs binaires en donnant leur énergie de la bande interdite  $E_g$ , la masse effective des électrons du bas de la bande de conduction en fonction de la masse de l'électron  $m^*/m_0$ , la mobilité électronique à champ faible  $\mu$  et les paramètres cristallins  $a$  et  $c$  dans le cas du GaN :

Composé III-V	$E_g$ (eV)	$m^*/m_0$	$\mu$ (cm <sup>2</sup> /Vs)	$a$ (Å)
AlSb	1.58	0.12	200	6.1355
GaN	3.36	0.19	380	a=3.189 c=5.185
GaP	2.26	0.82	110	5.4512
GaAs	1.42	0.067	8500	5.6533
GaSb	0.72	0.042	5000	6.0959
InP	1.35	0.077	4600	5.8686
InAs	0.36	0.023	33000	6.0584
InSb	0.17	0.0145	80000	6.4794

Tableau (I.2) : propriétés des principaux composés binaires III-V à 300°K [1]

Comme on peut le remarquer dans le tableau précédent, plusieurs combinaisons binaires sont possibles, mais chacune a ses propres propriétés. L'étude de la structure de bande a montré que les éléments les plus légers incluant le bore, l'aluminium, l'azote... donnent un composé à large bande interdite avec une structure de bande indirecte et dans laquelle la masse effective des électrons est élevée, c'est le cas du GaP. De tels matériaux ont peut d'intérêt pour l'électronique rapide [2]. Alors que les éléments les plus lourds incluant l'antimonide, le thallium... donnent un composé à courte bande interdite avec une structure de bande directe, c'est le cas du GaSb et InSb. Ces derniers ont des propriétés très intéressantes surtout dans l'électronique rapide et l'optoélectronique [3].

Parmi les intérêts principaux des matériaux III-V, c'est qu'ils possèdent des mobilités très élevées et des grandes vitesses de saturation par rapport au silicium, sa leurs permet donc de fonctionner dans une gamme de fréquence atteignant 250 GHz, alors que les nitrures (GaN) ont des tensions de claquage 10 fois supérieurs que celle du silicium, donc c'est des matériaux utilisés en électronique de puissance [4].

Mais l'intérêt majeur de ces semi-conducteurs, c'est qu'on peut les utilisés pour fabriquer des alliages ternaires et quaternaires par substitution de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne. Les alliages ternaires apparaissent donc sous la forme  $A_xB_{1-x}C$  où (x) est un coefficient stœchiométrique qui varie entre 0 et 1 et qui représente la concentration du composé AC alors que (1-x) représente la concentration du composé BC, comme c'est le cas du  $Ga_xIn_{1-x}Sb$ , alors que Les alliages quaternaires apparaissent sous la forme  $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ , comme c'est le cas du  $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ .

La figure (I.1) représente la variation de l'énergie de bande interdite en fonction du paramètre cristallin  $a$  dans le cas des alliages ternaires et quaternaires :

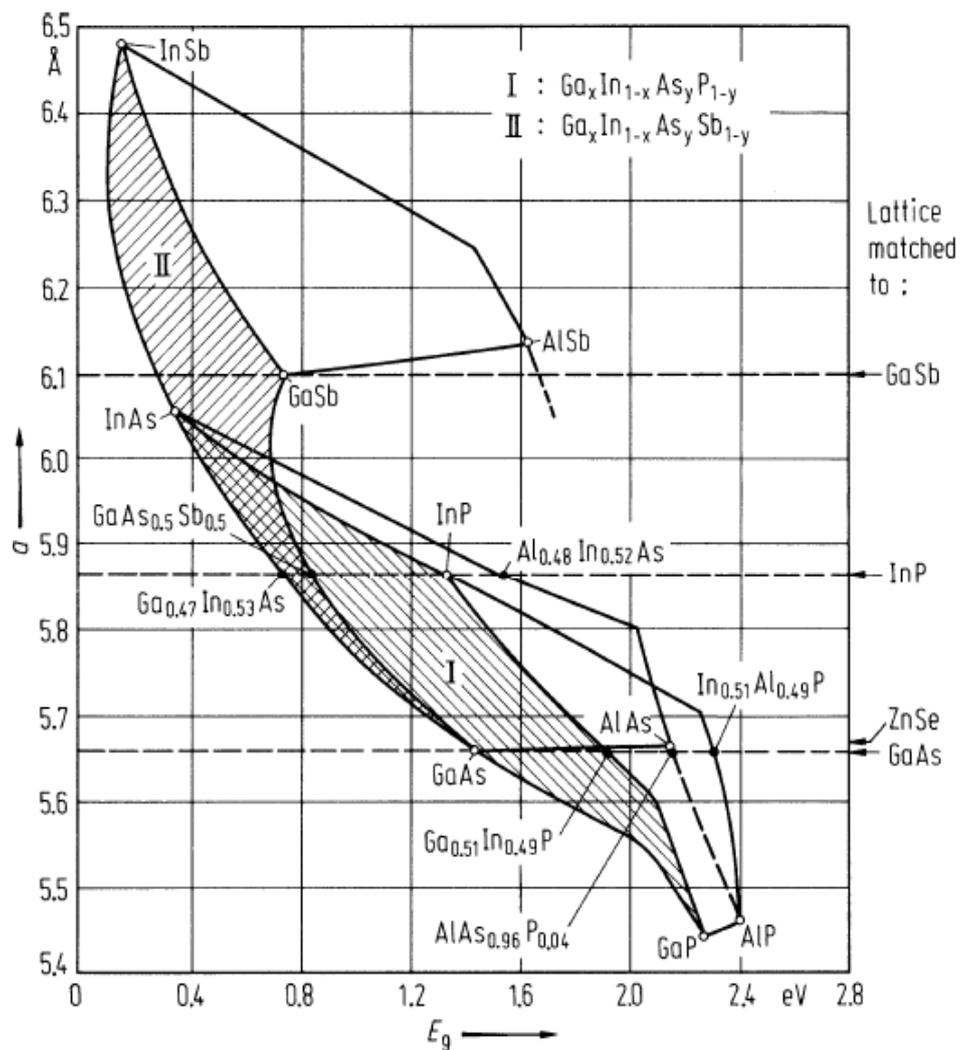


Figure (I.1) : évolutions de l'énergie de bande interdite et du paramètre cristallin des alliages de composés III-V [5]

Les matériaux III-V offrent une grande variété de compositions permettant de modifier leurs propriétés électroniques. Les points du graphe indiquent la position des composés binaires, et les lignes représentent l'évolution du gap  $E_g$  et du paramètre cristallin  $a$  en fonction du coefficient stœchiométriques pour les alliages ternaires. Les lignes présentant un point anguleux montrent qu'il y a une transition d'un gap direct à un gap indirect et vice versa.

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

### I.2-Structure cristalline :

A l'exception des matériaux III-V nitrurés qui cristallisent suivant la structure hexagonale Wurtzite, la majorité des matériaux III-V cristallisent suivant la structure cubique Zinc Blende qui est constituée de deux sous-réseaux cubique à face centrée CFC, l'un d'éléments III et l'autre d'éléments V, décalés l'un par rapport à l'autre de  $(1/4, 1/4, 1/4)$  suivant la direction  $[111]$ . Cette structure est représentée soit en perspective, soit en projection sur un plan formé par une des faces du cube.

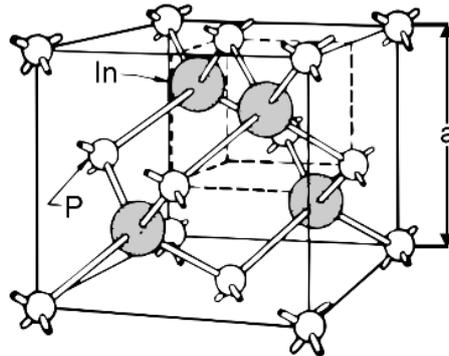


Figure (I.2) : mailles cristallographiques de la structure Zinc Blende [6]

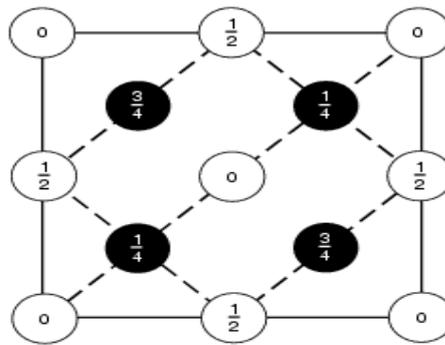


Figure (I.3) : Structure Zinc Blende en projection sur un plan formé par une des faces du cube

Dans les matériaux III-V, les atomes des deux mailles CFC interpénétrées sont différents et on a 4 paires d'atomes par cellule conventionnelle. Il est important de remarquer que la structure zinc-blende n'a pas de symétrie d'inversion. On peut s'en rendre compte en considérant l'ordre des atomes le long de la diagonale de la structure cubique: la suite est ABABAB. Si l'on inverse le cristal, on obtient BABABA, qui n'est pas la même structure. Le diamant en revanche, n'a pas le même problème car la structure CCCCCC devient CCCCCC. L'absence de symétrie d'inversion pour la structure zinc-blende est très importante pour les applications optoélectroniques: en effet, l'effet électro-optique Pockels (variation de l'indice de réfraction sous application d'un champ électrique statique) n'est possible que dans un cristal ne possédant pas de symétrie d'inversion.

Nous remarquons dans ce type de matériaux que les liaisons atomiques ne sont pas covalentes comme dans le cas du silicium, elles reposent sur le transfert d'électrons des atomes du groupe V vers ceux du groupe III. Ainsi, dans le cas du l'antimoniure de gallium (GaSb), l'antimonide possède cinq électrons périphériques et que le gallium possède trois électrons périphériques. Dans le cristal, chaque atome d'antimonide est entouré de quatre atomes de gallium, et chaque atome de gallium est entouré de quatre atomes d'antimonide. Il se produit alors un échange d'électrons, et le cristal se construit avec les ions  $\text{Sb}^+$  et  $\text{Ga}^-$ , qui

ont tous quatre électrons périphériques [7]. Cette répartition est à l'origine du caractère partiellement ionique et partiellement covalent des liaisons (semi-conducteurs polaires), qui sont orientées dans l'espace suivant les axes de symétrie d'un tétraèdre régulier.

### I.3-Réseau réciproque et zone de Brillouin :

Le réseau réciproque est défini à partir du réseau cristallin direct, il est le système de coordonnées [énergie - vecteur d'onde] dans lequel on représente la variation de l'énergie des états électroniques en fonction du vecteur d'onde  $k$  caractérisant la propagation de l'onde considérée. En effet, le réseau réciproque associé à la structure cristalline de type zinc-blende est cubique centré. Sa maille élémentaire, qui correspond à la première zone de Brillouin à la forme d'un octaèdre tronqué par les six faces d'un cube, elle est représentée sur la figure ci-dessous :

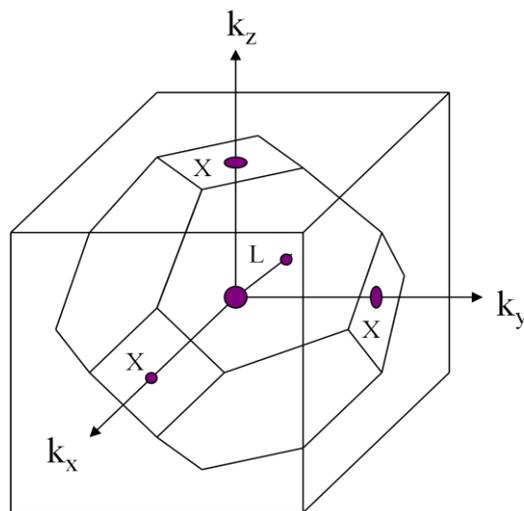


Figure (I.4) : première zone de Brillouin d'un cristal Zinc-Blende

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

- Quatre axes équivalents dans la direction  $\langle 100 \rangle$  coupant le bord de la zone de Brillouin aux points X qui est le centre d'une face carré de l'octaèdre.
- Six axes équivalents dans la direction  $\langle 111 \rangle$ , coupant le bord de la zone de Brillouin aux points L qui est le centre d'une face hexagonale de l'octaèdre [8].

#### I.4-Structure des bandes d'énergie :

La description de la structure des bandes d'énergie s'effectue dans l'espace des vecteurs d'onde  $\vec{k}$  c'est-à-dire l'espace réciproque. On considère les variations de l'énergie E en fonction de  $\vec{k}$  que selon les directions de plus haute symétrie et en se limitant à la première zone de Brillouin. La structure des bandes dans les composés III-V est représentée dans les figures (I.5) et (I.6) avec un exemple pour le GaSb et InSb :

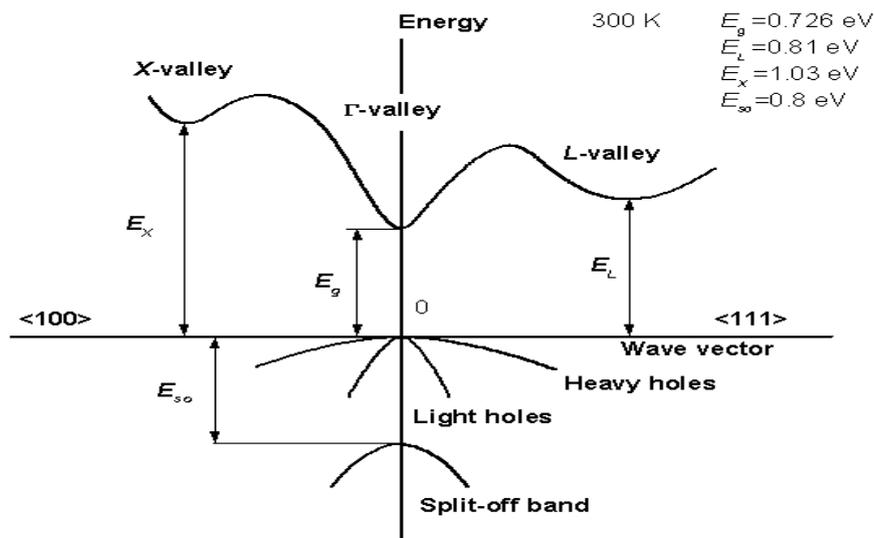


Figure (I.5) : structure de bandes dans le GaSb au centre de la zone de Brillouin

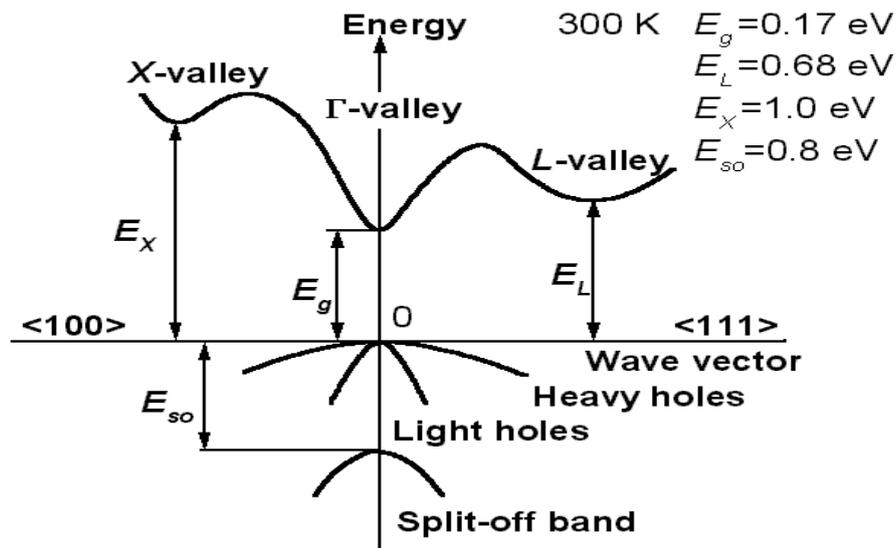


Figure (I.6) : structure de bandes dans l'InSb au centre de la zone de Brillouin [9]

Elles se décomposent en bandes de conduction et bandes de valences et bande interdite qui les sépare, 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. La largeur de la bande interdite fixe la température critique c'est-à-dire la température maximale pour la quelle le matériau fonctionne normalement et que si on la dépasse, le matériau est détérioré [10].

Les propriétés de transport électronique dépendent principalement de la structure de la bande de conduction la plus basse (BC) et de celle de la bande de valence la plus élevée (BV). 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, ce qui les rend performant en optoélectronique.

De façon habituelle, à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger, les variables relatives aux vecteurs d'onde s'expriment par [11]:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \quad (1.1)$$

Donc :

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = \frac{\hbar^2}{m} \quad (1.2)$$

Par définition, la dérivée seconde d'une fonction nous donne l'ouverture de sa courbe.

En tenant compte que la constante de Planck  $\hbar$  est constante, et que  $\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$  change suivant l'ouverture de chaque vallée, ceci nous ramène alors que la masse ou plutôt la masse effective est différente dans chaque vallée et est défini par :

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}} \quad (1.3)$$

La bande de conduction présente dans son minimum une courbure très accentuée, et par définition, la masse effective des électrons est inversement proportionnelle à cette courbure, ce qui implique que la masse effective des électrons dans cet endroit est très faible, et par conséquent, la mobilité électronique élevée. Il existe aussi dans la bande de conduction, la présence de vallées secondaires en bordure de la zone de Brillouin, quatre vallées L équivalentes dans la direction  $\langle 111 \rangle$ , et trois vallées de type X dans la direction  $\langle 100 \rangle$ . Ces vallées sont caractérisées par une courbure faible et par conséquent, par des électrons ayant une masse effective élevée et donc une faible mobilité par rapport à la vallée centrale.

La bande de valence comporte trois vallées qui se situent à des niveaux énergétiques proches. Deux sous-bandes qui se rejoignent au centre de la zone de Brillouin et qui portent le nom de bande de trous lourds et bande de trous légers ayant des masses effectives différentes,

car la courbure des deux sous-bandes n'est pas la même. La troisième bande qui correspond à des états d'énergie plus faible est dite split-off.

#### I.4.1-Influence de la température sur la structure de bande :

La largeur de la bande interdite ou l'énergie de gap n'est pas constante, en effet, elle présente une variation avec la température. La relation qui nous donne cette variation est donnée par l'équation pseudo-empirique de Varshni [12]:

$$\varepsilon_g = \varepsilon_{g0} - \frac{\alpha T^2}{\beta + T} \quad (1.4)$$

Avec  $\varepsilon_{g0}$  est la largeur de la bande interdite à T=0,  $\alpha$  et  $\beta$  sont des constantes propres à chaque matériaux.

Le tableau ci-dessous donne les valeurs des constantes  $\alpha$ ,  $\beta$  et l'énergie de Gap à T=0°k et à T=300°k pour quelques semi-conducteurs [13]:

Matériaux	$\varepsilon_{g 0^\circ}$ [ev]	$\alpha$ [ev/k]	$\beta$ [K]	$\varepsilon_{g 300^\circ}$ [ev]
Si	1.17	$4.73 \cdot 10^{-4}$	636	1.12
Ge	0.743	$4.77 \cdot 10^{-4}$	235	0.661
GaAs	1.521	$5.58 \cdot 10^{-4}$	220	1.424
AlAs	2.239	$8.78 \cdot 10^{-4}$	332	2.163
InAs	0.420	$2.5 \cdot 10^{-4}$	75	0.360
GaN	3.28	$7.32 \cdot 10^{-4}$	700	3.20
InN	2.01	$1.2 \cdot 10^{-3}$	627	1.970

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

#### I.4.2-Notion de la masse effective:

La masse effective des électrons qui est calculée par rapport à la masse de l'électron dans le vide est donnée par les relations suivantes [14]:

$$m_n^* = \begin{cases} m_\Gamma^* \\ m_L^* = (m_{nl}^2 m_{nt})^{1/3} \\ m_X^* = (m_{nt}^2 m_{nl})^{1/3} \end{cases} \quad (1.5)$$

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

La masse effective des trous est aussi calculée par rapport à la masse de l'électron dans le vide est donnée par :

$$m_p^* = (m_{pl}^{(3/2)} + m_{ph}^{(3/2)})^{2/3} \quad (1.6)$$

#### I.4.3-Notion du coefficient de non-parabolicité :

La forme de la bande de conduction près des minima n'est parfaitement parabolique, en effet, la relation de dispersion  $\varepsilon(k)$  qui relie l'énergie  $\varepsilon$  et le vecteur d'onde du cristal  $k$  est modifiée et donnée par [15]:

$$\gamma(\varepsilon) = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (1.7)$$

Avec  $m^*$  est la masse effective du porteur,  $\alpha$  est le coefficient de non parabolicité et  $\hbar$  est la constante de Planck réduite c'est-à-dire divisée sur  $2\pi$ .

Les coefficients de non parabolicité sont donnés dans chaque vallée par les relations [15]:

$$\alpha_n = \begin{cases} \alpha_\Gamma = \frac{1}{\varepsilon_\Gamma} \left(1 - \frac{m_\Gamma^*}{m_e}\right)^2 \\ \alpha_L = \frac{1}{\varepsilon_{L_{3v}} - \varepsilon_{L_{1c}}} \\ \alpha_X = \frac{1}{2(\varepsilon_{X_{2c}} - \varepsilon_{X_{1c}})} \left(1 - \frac{m_X^*}{m_e}\right) \end{cases} \quad (1.8)$$

Avec  $\varepsilon_\Gamma$  est l'énergie de gap du semi-conducteur et  $m_0$  la masse du porteur libre,  $L_{3v}$  et  $L_{1c}$  sont les états des bandes de valence et de conduction avec la symétrie donnée, et  $X_{2c}$  et  $X_{1c}$  sont les états de la bande de conduction avec la symétrie donnée.

### I.5-Variation des paramètres d'alliage en fonction du coefficient stœchiométrique x :

L'alliage ternaire se présentant sous la forme  $A_xB_{1-x}C$  est constitué de deux semi-conducteurs III-V, il s'agit des semi-conducteurs AC et BC avec (x) est un coefficient stœchiométrique qui varie entre 0 et 1 et qui représente la concentration du composé AC alors que (1-x) représente la concentration du composé BC. La variation du coefficient stœchiométrique conduit à une modification de la plupart des paramètres caractérisant l'alliage tel que la largeur de la bande interdite, le paramètre de la maille cristalline, les masses effectives... Ces paramètres évoluent fonction du coefficient stœchiométrique en suivant la loi de Vegard qui est sous la forme :

$$Y_{A_xB_{1-x}C} = xY_{AC} + (1-x)Y_{BC} + x(1-x)C \quad (1.9)$$

Avec :

x est le coefficient stœchiométrique du matériau (0.5 dans notre cas).

$Y_{AC}$  et  $Y_{BC}$  sont les deux semi-conducteurs utilisés (GaSb et InSb dans notre cas).

$C$  est un paramètre de courbure défini pour chaque paramètre.

Il existe deux types de variations des paramètres en fonction du coefficient  $x$  :

- Variation linéaire.

- Variation non linéaire.

### **I.5.1-Variation linéaire des paramètres en fonction du coefficient $x$ :**

Dans le cas où le paramètre de courbure est nul, la variation des paramètres d'alliage en fonction du paramètre de composition est linéaire. On trouve ce cas dans le calcul de la variation du paramètre de la maille cristalline, Variation de l'affinité électronique, variation de l'énergie de séparation entre les différentes vallées... Dans le cas d'un alliage ternaire de type  $A_xB_{1-x}C$ , la variation de ces paramètres est donnée par :

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

Avec  $y_A$  et  $y_B$  sont les paramètres mailles des semi-conducteurs considérés, le paramètre de courbure  $C$  est nul.

### **I.5.2-Variation non linéaire des paramètres en fonction du coefficient $x$ :**

Dans le cas où le paramètre de courbure n'est pas nul, la variation des paramètres en fonction de la composition  $x$  n'est pas linéaire et présente quelque fois une loi parabolique.

Elle est donnée par :

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

Les paramètres de courbure pour chaque matériau sont des constantes existant dans la littérature. On trouve ce cas dans la variation de la masse effective, la variation de la permittivité électrique... Le calcul de la variation de la largeur de gap est un cas exceptionnel, Il existe deux approches possibles pour la calculée:

- Soit d'une fonction prédéfini pour chaque alliage ternaire, dans le cas du  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ , elle est donnée par [14]:

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

- Soit par la loi de Végard en comparant les énergies obtenues dans les différentes vallées et en prenant leurs minimums, ce cas existe quand on met en jeu un semi-conducteur à gap directe et un semi-conducteur à gap indirecte comme dans le cas du GaInP. La relation est donnée par [16] :

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

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

**I.6-Principaux paramètres utilisés dans la simulation Monte Carlo :**

Dans cette dernière partie de ce chapitre, on va présenter l'ensemble des paramètres du GaSb, InSb et Ga<sub>0,5</sub>In<sub>0,5</sub>Sb utilisés dans notre simulation [9] [14] [17] [18] :

<b>Paramètres</b>	<b>GaSb</b>	<b>InSb</b>	<b>Ga<sub>0,5</sub>In<sub>0,5</sub>Sb</b>
Constante du réseau (Å°)	6.0959	6.479	6.2859
Densité (g/Cm <sup>3</sup> )	5.61	5.77	5.69
Affinité électronique (ev)	4.06	4.59	4.325
Energie du phonon LO (ev)	0.0297	0.025	0.27
Permittivité statique	15.7	16.8	16.25
Permittivité dynamique	14.4	15.7	15.05
Masse effective $\Gamma$ (1/m <sub>0</sub> )	0.041	0.014	0.0252
Masse effective L (1/m <sub>0</sub> )	0.57	0.25	0.41
Masse effective X (1/m <sub>0</sub> )	0.87	0.55	0.71
Coefficient de non parabolicité $\Gamma$ (J <sup>-1</sup> )	1.226	5.652	2.78
Coefficient de non parabolicité L (J <sup>-1</sup> )	2.201	1.102	1.17
Coefficient de non parabolicité X (J <sup>-1</sup> )	0.0545	0.25	0.14
Energie du Gap (ev)	0.726	0.172	0.34525
Energie de séparation $\Gamma$ L (ev)	0.084	0.51	0.297
Energie de séparation $\Gamma$ X (ev)	0.31	0.83	0.57
Potentiel de déformation $\Gamma$ L (*10 <sup>8</sup> ev/cm)	3.04	1.56	2.3
Potentiel de déformation $\Gamma$ X (*10 <sup>8</sup> ev/cm)	2.205	1.905	2.055
Potentiel de déformation L $\Gamma$ (*10 <sup>8</sup> ev/cm)	3.04	1.56	2.3

Potentiel de déformation $X\Gamma$ ( $\cdot 10^8$ eV/cm)	2.205	1.905	2.055
Potentiel de déformation LX ( $\cdot 10^8$ eV/cm)	1.26	1.78	1.52
Potentiel de déformation XL ( $\cdot 10^8$ eV/cm)	1.26	1.78	1.52
Potentiel de déformation LL ( $\cdot 10^8$ eV/cm)	1.29	1.37	1.33
Potentiel de déformation XX ( $\cdot 10^8$ eV/cm)	6.73	5.48	6.10
Energie du phonon inter-vallée $\Gamma L$ (eV)			0.0275
Energie du phonon inter-vallée $\Gamma X$ (eV)			0.0275
Energie du phonon inter-vallée $L\Gamma$ (eV)			0.0275
Energie du phonon inter-vallée $X\Gamma$ (eV)			0.0275
Energie du phonon inter-vallée LX (eV)			0.311
Energie du phonon inter-vallée XL (eV)			0.311
Energie du phonon inter-vallée LL (eV)			0.294
Energie du phonon inter-vallée XX (eV)			0.0283

Tableau (I.4) : Paramètre du GaSb, InSb et  $Ga_{0.5}In_{0.5}Sb$ **Conclusion :**

La connaissance des propriétés physiques des matériaux ainsi que la structure de bande 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.

## Chapitre II

# Phénomènes de transport électronique dans les semi-conducteurs

**Introduction :**

L'étude des propriétés du transport électronique dans les semi-conducteurs III-V est indispensable avant toute utilisation du matériau, car elle permet de décrire le mouvement des particules à l'intérieur du cristal en analysant les différents types d'interactions qu'ils y subissent et leurs effets sur la vitesse des électrons, et par la suite, fixer les performances du semi-conducteur et de déterminer le domaine d'utilisation en température et en champ électrique.

**II.1-Phénomènes de transport dans les semi-conducteurs :**

Dans les semi-conducteurs, le courant résulte du déplacement des porteurs libres (électrons ou trous) sous l'action d'une force extérieure. L'origine de cette force peut être soit une excitation par champ électrique soit par un gradient de concentration dans le semi-conducteur [11]. Dans le premier cas, le courant est dit de conduction ou d'entraînement, et dans le second cas, le courant est dit de diffusion.

Le courant de conduction apparaît lorsqu'on applique au semi-conducteur un champ électrique (ou magnétique), on a tendance à déplacer les porteurs de charge, électrons et trous. La conduction par champ électrique dans le matériau pourra se faire à deux niveaux :

- Par les électrons de la bande de conduction qui remontent le champ électrique appliqué.
- Par les trous de la bande de valence qui se déplacent dans le même sens que le champ électrique. Notons que du fait que les charges équivalentes sont de signe opposé, les courants équivalents résultants seront dans le même sens en s'ajoutant.

Le courant de diffusion apparaît lorsque la densité des porteurs libres est modifiée localement à l'intérieur du semi-conducteur, soit par des variations de température ou de lumière, soit généralement par une technologie appropriée comme un dopage non uniforme.

Ce gradient de concentration va provoquer un déplacement des porteurs de la région la plus peuplée à la région la moins peuplée, ce phénomène est appelé processus de diffusion.

Dans le cas général, le courant résulte des deux phénomènes (présence d'un champ électrique et d'un gradient de concentration). Dans notre étude, le courant étudié est le courant de conduction des électrons dans la bande de conduction.

La vitesse des porteurs de charge est le paramètre le plus important lié à l'étude des phénomènes du transport électronique. Elle est à son maximum quand le cristal se trouve dans un potentiel périodique c'est-à-dire que les porteurs de charge se déplacent librement et sans aucune interaction à l'intérieur du réseau, ce qui est impossible en réalité, car, durant leur mouvement à l'intérieur du matériau, les électrons sont soumis à des différents types d'interactions que nous allons détailler dans ce deuxième chapitre.

## II.2-Généralités sur l'équation de Boltzmann :

A l'équilibre thermodynamique, les porteurs de charges sont groupés dans les bandes d'énergies suivant la statistique de Fermi-Dirac :

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

(2.1)

L'agitation thermique fait passer sans cesse des électrons des niveaux inférieurs aux niveaux supérieurs, et réciproquement. Cet équilibre est perturbé dès qu'il y a une présence d'un champ électrique et les porteurs sont excités et accélérés et subissent des collisions à l'intérieur du cristal. Les électrons sont soumis à la fois aux collisions dans le cristal et au champ électrique.

Dans le réseau réciproque, les phénomènes limitant le transport sont commandés par l'équation de Boltzmann qui a pour rôle de connaître la distribution des porteurs dans l'espace des phases en fonction des forces appliquées au semi-conducteur en tenant compte des phénomènes d'interactions. On rappelle que la fonction de distribution d'un système de particules permet de calculer le nombre de particules en n'importe quel point de l'espace

des phases.

Pour les électrons dans un semi-conducteur, on peut en déduire les paramètres du transport du matériau étudié tels que les taux de remplissage des différentes vallées des bandes de conduction ou de valence, la vitesse moyenne, l'énergie moyenne ...

L'étude des mécanismes d'interactions dans les semi-conducteurs est l'ingrédient indispensable de toute simulation monte Carlo car ce sont elles qui régissent les phénomènes de transport dans les semi-conducteurs et qui fixe leurs performances. Pour décrire d'une manière efficace le transport électronique, un nombre important d'interaction doit être considéré.

### **II.2.1-Les différents types de collisions :**

Les interactions subies par les électrons durant leurs trajectoires dans un cristal soumis à l'agitation thermique sont divisées en quatre catégories :

#### **II.2.1.1-Interactions avec le réseau cristallin :**

Dans les cristaux semi-conducteurs, les atomes s'organisent pour former des structures cristallines bien définies. Si on se place à 0 K, les atomes sont fixes dans leurs positions d'équilibre. Si on augmente la température, les atomes vont vibrer autour de leurs positions d'équilibre avec une pulsation  $\omega$ . Plus la température est élevée, plus les vibrations du réseau cristallin sont importantes et les chocs avec les phonons sont fréquents.

L'énergie d'une vibration est quantifiée  $h\omega$  et le quantum d'énergie est appelé phonon (par analogie avec les photons). On rappelle qu'un phonon n'est pas une vraie particule, en effet il n'a pas d'existence propre. Il existe que parce que le réseau existe et que les atomes vibrent. Toutefois, il se comporte à l'intérieur du cristal comme une vraie particule et on le traite comme tel. Dans un cristal à 3D l'espace réciproque devient également 3D et aux modes

longitudinaux (acoustiques et optiques) que l'on a en 1D s'ajoutent dans chaque cas 2 modes transverses polarisés à  $90^\circ$  l'un de l'autre, comme illustré sur la figure (II.1):

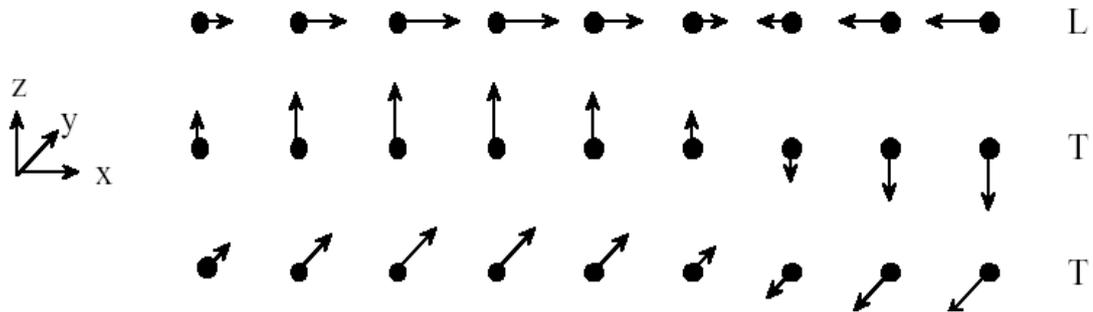


Figure (II.1) : Le mode de vibration longitudinal et les deux modes transversales

Les phonons acoustiques sont associés aux modes de vibration correspondant à des atomes voisins vibrant en phase. Ceux-ci déforment le potentiel cristallin, ce qui va provoquer l'interaction acoustique de déformation.

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

### II.2.1.2-Interactions avec les porteurs :

Ce type d'interaction apparait lorsque la densité des porteurs  $n_i$  est très grande à cause de leurs potentiels coulombiens. Ce phénomène n'est pas pris en considération dans notre étude.

### II.2.1.3-Interactions avec les impuretés :

Ce type d'interaction est élastique et se produit lorsque les matériaux sont très dopés où les impuretés ionisées interagissent fortement avec les porteurs de charge par l'intermédiaire du potentiel Coulombien.

### II.2.1.4-Interactions avec les alliages :

La présence d'alliage dans le cristal cause un désordre important dans le réseau qui perd facilement sa périodicité pour crée un changement de potentiel à l'échelle atomique.

Cette différence de potentiel influe sur le mouvement du porteur et l'oblige à changer sa direction pendant son parcours [19].

Le potentiel effectif qui contribue à cette diffusion dépend de la nature d'alliage qu'il soit ternaire ou quaternaire car à l'échelle microscopique dans ces matériaux la stœchiométrie du réseau n'est pas respectée donc le potentiel cristallin est perturbé. Cette perturbation est prise en compte par le potentiel d'alliage.

Le modèle adopté le plus utilisé est basé sur le raisonnement étudié par [20] qui est comme suite : quand un électron passe devant un atome de type B sur une place qui doit être normalement occupée par un atome de type A subit un potentiel  $E_{all}$  telle que :

$$E_{all} = \begin{cases} eU_{all} & \text{si } r \leq r_0 \\ 0 & \text{si } r > r_0 \end{cases} \quad (2.2)$$

Avec  $U_{all}$  est le potentiel d'alliage et  $q$  est la charge de l'électron, et  $r_0 = \frac{\sqrt{3}}{4}a$  avec  $a$  le paramètre de maille du semi-conducteur.

### II.2.2-Libre parcours moyen élastique et inélastique :

Le libre parcours moyen est défini comme étant la distance parcourue entre deux interactions successives, durant cette distance les électrons circulent librement dans le semi-conducteur, il peut être élastique comme il peut être inélastique suivant le type d'interactions subis par les électrons.

On définit pour ces types d'interactions deux temps caractéristiques  $\tau_e$  et  $\tau_i$  ainsi que leurs probabilités de collisions par unité de temps :

$\tau_e$  : Temps de collision élastique

$\tau_i$  : Temps de collision inélastique

On définit alors deux longueurs caractéristiques du transport :

- le libre parcours moyen élastique :  $l_e = v_f \tau_e$

Pour les interactions élastiques, les propriétés ondulatoires de l'électron restent inchangées le long de cette distance  $l_e$  [21].

- le libre parcours moyen inélastique :  $l_i = v_f \tau_i$

Pour les interactions inélastiques, il y a un changement d'énergie.

Ces Deux longueurs représentent la distance que parcourt balistiquement un électron avant de faire une collision.

### II.2.3-Equation de Boltzmann :

L'étude classique du transport électronique consiste en la détermination de l'évolution temporelle de l'état des porteurs dans le semi-conducteur, le transport électronique est décrit par la résolution de l'équation de Boltzmann qui caractérise la modification de l'état des particules provoqué par différentes actions. Cette équation décrit l'évolution d'un ensemble de particules subissant des collisions instantanées et qui se propage en ligne droite entre deux collisions successives, elle est décrite par [22]:

$$\frac{df}{dt} + \vec{v} \times \vec{\nabla}_r f + \frac{1}{\hbar} \vec{F} \times \vec{\nabla}_k f = \left( \frac{df}{dt} \right)_{coll} \quad (2.3)$$

Avec  $f(x, k, t)$  est la fonction de distribution des électrons dans la bande de conduction, elle représente la probabilité de trouver à un instant  $t$ , un porteur positionné dans l'espace aux coordonnées  $\vec{r}$  et présentant un vecteur d'onde  $\vec{k}$ .

Le premier terme correspond à la variation de la fonction de distribution en fonction du temps, le second terme prend en considération la variation de la fonction de distribution

résultants des gradients de concentration, alors que le troisième terme représente l'effet des forces extérieures.

$$\vec{F} = \hbar \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} = -e \times (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (2.4)$$

$\vec{E}$  et  $\vec{B}$  sont les champs électriques et magnétiques.

Le vecteur de vitesse est donné par :

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{k}} \quad (2.5)$$

Le deuxième membre représente les effets d'interactions avec le réseau cristallin qui perturbe le mouvement des électrons.

Les collisions provoquent la transition d'un électron d'un état  $\vec{k}$  à un état  $\vec{k}'$  avec la densité de probabilité  $S(\vec{k}, \vec{k}')$ .

Dans l'approximation d'un gaz d'électron dilué, le facteur de collision peut être décrit:

$$\left( \frac{df}{dt} \right)_{coll} = \sum_{k'} \left[ f(\vec{r}, \vec{k}', t) S(\vec{k}', \vec{k}) - f(\vec{r}, \vec{k}, t) S(\vec{k}, \vec{k}') \right] \quad (2.6)$$

L'équation de Boltzmann devient alors :

$$\frac{df}{dt} + \vec{v} \times \vec{\nabla}_r f + \frac{e}{\hbar} \vec{E} \times \vec{\nabla}_k f = \sum_{k'} \left[ f(\vec{r}, \vec{k}', t) S(\vec{k}', \vec{k}) - f(\vec{r}, \vec{k}, t) S(\vec{k}, \vec{k}') \right] \quad (2.7)$$

Pour que l'équation de Boltzmann soit valable, il faut satisfaire quelques conditions qui sont les suivantes :

- Il faut considérer que les chocs sont locaux et instantanés, pour cela, la durée d'une collision  $\tau_0$  doit être négligeable devant l'intervalle de temps  $\tau$  séparant deux collisions successives.

Sinon, l'électron pourra se trouver en même temps sous l'influence de deux centres diffuseurs différents.

- Il faut aussi que la distance que parcourt les électrons durant le vol libre doit être négligeable devant la longueur totale pour qu'un nombre important d'interactions doit être considéré.

La résolution analytique de cette équation est quasi impossible. Pour remédier à ce problème, on a développé un modèle qui donne la résolution stochastique de cette équation dans les semi-conducteurs pour les électrons et les trous par la méthode Monte Carlo qui est une méthode numérique de simulation qui peut déterminer les grandeurs caractérisant la dynamique électronique.

La résolution Monte Carlo est l'une des meilleurs techniques de simulation du transport dans les semi-conducteurs [23], mais étant stochastique, l'incertitude sur la solution dépend du nombre de particules considérés.

### **II.3-Différents régimes de transport électronique :**

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

#### **II.3.1-Transport dans le régime balistique :**

Le régime du transport balistique est défini comme étant le régime où les électrons n'ont pas encore effectué des interactions. Il est souvent observé dans les dispositifs ultracourts surtout dans les transistors MOSFET où la longueur de grille est fortement submicronique, c'est-à-dire que la longueur du canal est de l'ordre du libre parcours moyen que parcourt l'électron. Pendant la traversée de ce type de canal, le nombre d'interactions subies par les électrons sont très faible et parfois nul, le porteur est alors qualifié de balistique [24].

### **II.3.2- Transport dans le régime stationnaire :**

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

### **II.3.3- Transport dans le régime non-stationnaire :**

Avant d'atteindre le régime stationnaire, c'est-à-dire qu'au tout premier instant de la simulation et en laissant le champ électrique fixe, l'accélération des électrons est très rapide car peu d'interactions ont eu lieu, donc les vitesses électroniques dans cette partie de temps sont supérieures que les vitesses dans le régime stationnaire, il apparaît donc des pics qu'on les nomme les pics de survitesse. Il est donc important de prendre en compte dans cette partie de temps les effets des différents champs électriques sur les vitesses électroniques. Les pics de survitesse commencent à apparaître lorsque le champ électrique atteint le champ critique.

#### II.4-Mécanismes d'interactions :

Durant leurs parcours dans le semi-conducteur, les porteurs subissent plusieurs types d'interactions soit avec les impuretés présentes dans le réseau cristallin, soit avec les différents types de phonons, optiques ou acoustiques.

Ces interactions peuvent être divisées en deux grandes familles: les interactions élastiques et les interactions inélastiques. Pour les interactions élastiques, le porteur de charge est affecté par un changement de sa quantité de mouvement pour donner une nouvelle orientation à sa trajectoire en conservant le module du vecteur d'onde donc sans changer son énergie. Pour les interactions inélastiques, le porteur est affecté par un changement d'énergie.

Dans notre étude, nous supposons que la dispersion des porteurs de charge est confinée dans une simple bande d'énergie c'est-à-dire électrons dans la bande de conduction et trous dans la bande de valence.

Ces interactions sont des phénomènes aléatoires décrites par des lois de probabilités qui lient leur état initial à un état final. Chaque processus d'interaction a une densité de probabilité  $S_j(\vec{k}, \vec{k}')$  qui caractérise la probabilité pour que le processus j (par exemple) fasse passer un électron d'un état du vecteur d'onde  $\vec{k}$  à un autre état  $\vec{k}'$ .

On donne la probabilité par unité de temps dans l'espace de  $\vec{k}'$  pour avoir l'interaction j est donnée par [25]:

$$\lambda_j(\vec{k}) = \int S(\vec{k}, \vec{k}') \quad (2.8)$$

Cette probabilité va dépendre que des vecteurs d'ondes  $\vec{k}$  et  $\vec{k}'$  et de l'angle de déviation qui les sépare. En intégrant cette densité sur tout l'espace des  $\vec{k}'$  on aura la probabilité pour qu'un électron, se trouvant dans l'état k, subisse une interaction par unité de temps:

$$\lambda(\vec{k}) = \frac{V}{8\pi^3} 2\pi \int_0^\pi \left[ \int_0^\infty S(\vec{k}, \vec{k}') K'^2 dk' \right] \sin \beta. d\beta \quad (2.9)$$

Avec  $\frac{V}{8\pi^3}$  est la densité d'état dans l'espace des moments,  $\beta$  est l'angle de déviation.

La figure (II.2) regroupe les principaux mécanismes d'interactions dans les semi-conducteurs:

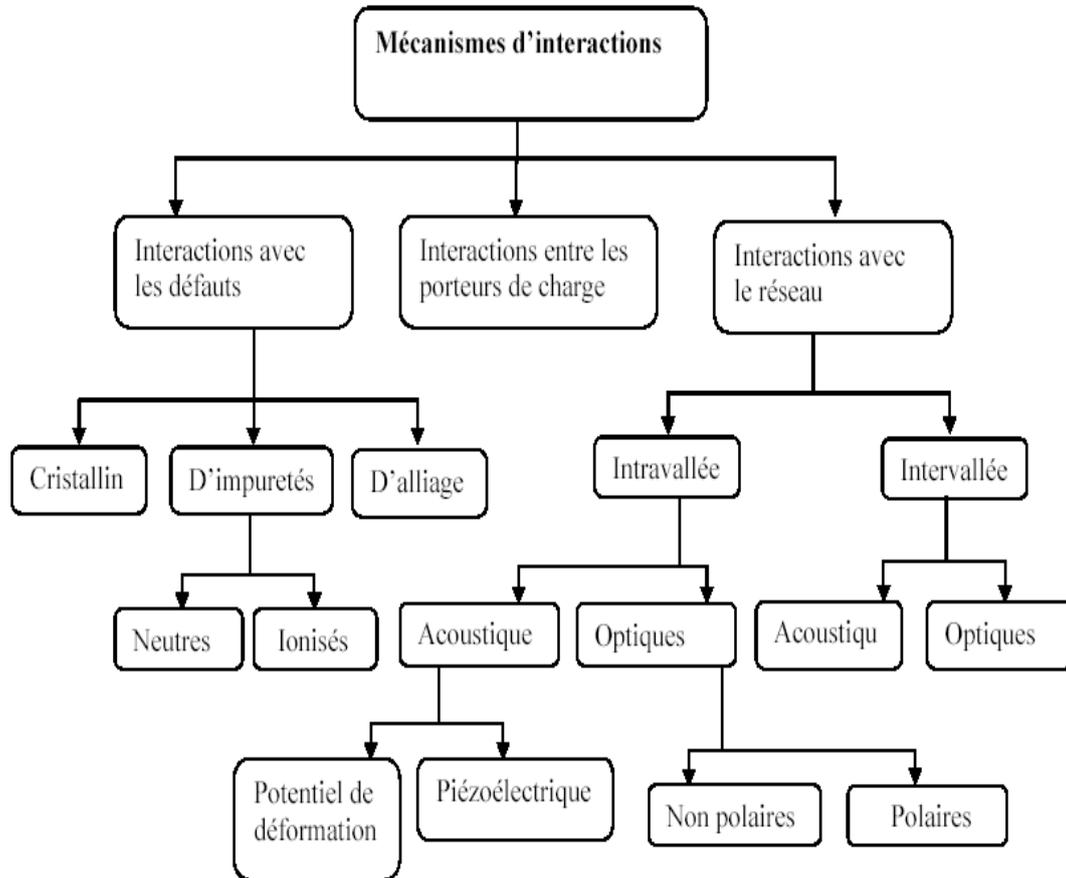


Figure (II.2) : Principaux mécanismes d'interactions dans les semi-conducteurs [26]

#### II.4.1-Interactions élastiques:

Le changement du vecteur d'onde sans changement d'énergie est expliqué par l'effet du potentiel coulombien à cause de la différence de charge entre les porteurs et les impuretés ionisées. L'effet de ce potentiel se traduit par une déviation du trajet des porteurs en conservant le module du vecteur d'énergie. Ces interactions n'influent pas de façon essentielle sur le comportement de l'électron [15].

### II.4.1.1-Interactions acoustiques:

Le mode de vibration acoustique du réseau cristallin est du aux variations du déplacement atomique qui déplace les atomes voisins dans un même sens, il introduit un changement de la structure, et donc déforment le potentiel cristallin. Le potentiel résultant de cette fluctuation est dit potentiel de déformation, ce qui engendre une interaction acoustique dite de déformation.

Ce type d'interaction est dominant dans les semi-conducteurs intrinsèques à la température ambiante. Durant cette interaction, le porteur reste dans la même vallée car le phonon acoustique a une faible valeur d'énergie qu'on ne distingue alors souvent pas les cas d'absorption et d'émission de phonons donc, c'est une interaction élastique et très importantes dans les vallées latérales, le module du vecteur d'onde dans cette vallée reste constant [27].

La théorie de ce type d'interaction a été étudiée par Bardeen en 1950 puis modifiée par Rode en 1975 pour tenir compte de la non parabolicité des bandes d'énergies.

La probabilité d'interaction par unité de temps vaut [28]:

$$\lambda_{ac}(\varepsilon) = \frac{K_B T E_{ac}^2 m^{*3/2}}{\rho s^2 \hbar^4 3\pi\sqrt{2}} \delta^{1/2}(\varepsilon) \frac{3(1+\alpha\varepsilon)^2 + (\alpha\varepsilon)^2}{(1+2\alpha\varepsilon)} \quad (2.10)$$

Avec  $K_B$  est la constante de Boltzmann,  $T$  est la température de réseau,  $E_{ac}$  est la constante acoustique,  $i$  est l'index de la vallée,  $\rho$  est la masse volumique du matériau,  $\hbar$  la constante de Planck et  $s$  la vitesse de son qui est définit par :

$$s = \frac{1}{3}(2c_t + c_l)$$

(2.11)

Où  $c_t$  et  $c_l$  sont les vitesses longitudinales et transversales du son.

### II.4.1.2- Interactions piézoélectriques:

La présence du champ de polarisation par les vibrations thermiques à des longueurs d'ondes acoustiques ce traduit par un effet piézoélectrique pour modifier le parcours du porteur et causer une diffusion [22].

L'interaction piézoélectrique devient importante dans les cristaux piézoélectriques à faible température mettant en jeux un phonon acoustique de faible longueur d'onde. C'est une interaction élastique qui ne provoque aucune déviation de la trajectoire de l'électron.

La probabilité d'interaction piézoélectrique par unité de temps vaut [29]:

$$\lambda_{pi}(\varepsilon) = \frac{e^2 K_B T \cdot P_{pi}^2 \cdot m^{*1/2}}{4\sqrt{2}\pi\hbar^2 \varepsilon_0 \varepsilon_s \delta^{1/2}(\varepsilon) (1 + 2\alpha\varepsilon)} I \quad (2.12)$$

Avec

$$I = (1 + 2\alpha\varepsilon)^2 \ln \left| \frac{2}{1 - \cos(a)} \right| - 2\alpha\varepsilon(1 + 2\alpha\varepsilon)(1 + \cos(a)) + \frac{(\alpha\varepsilon)^2}{2} [4 - (1 - \cos(a))^2] \quad (2.13)$$

Avec  $P_Z$  est le potentiel piézoélectrique et  $L_D$  est la longueur de Debye.

A 300k, le potentiel piézoélectrique est presque cinq fois plus faible que le potentiel de déformation.

### II.4.1.3-Interactions avec les impuretés ionisées:

Les interactions avec les impuretés ionisées sont dues à cause de la masse des électrons qui est plus petite que celle des impuretés ionisées par l'intermédiaire du potentiel Coulombien, le changement de l'énergie de l'électron dans ces collisions est négligeable [30].

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

Ce sont un modèle classique des interactions élastiques et la probabilité est indépendante de la concentration en impureté. Plusieurs théories ont été développées pour

rendre compte de ce type d'interaction, mais dans notre simulation, on a adopté l'hypothèse développée par Brooks et Herring. Pour ce type d'interaction, la probabilité d'interaction vaut [31]:

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2\pi}N_D e^4 \varepsilon^{-1/2} (1+2\alpha\varepsilon)}{(4\pi\varepsilon_0\varepsilon_s)^2 m^{*1/2} (1+\alpha\varepsilon)^{3/2}} I \quad (2.14)$$

Avec

$$I = \frac{\left[1 + 2e_k^4 (\theta/2K)^2\right]^2}{4(\theta/2K)^2 \left[1 + (\theta/2K)^2\right]} + e_k^2 \left[1 + 2e_k^2 (\theta/2K)^2\right] \ln \left[ \frac{(\theta/2K)^2}{1 + (\theta/2K)^2} \right] + e_k^4 \quad (2.15)$$

Et

$$e_k = \left( \frac{\alpha\varepsilon}{(1+2\alpha\varepsilon)} \right)^{1/2} \quad (2.16)$$

#### II.4.1.4-Interactions avec les alliages:

Les alliages ternaires sont constitués par des fractions molaires dans le réseau atomique en remplaçant x atomes du matériau A par x atome du matériau B et le matériau sera sous la forme  $A_{1-x}B_xC$ .

L'hypothèse de ce type d'interaction a été étudiée par Shichijo [32], et la probabilité vaut:

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{3\pi (m^*)^{3/2}}{8\sqrt{2}\hbar^4 N_s} (\Delta E_a)^2 x(1-x) \frac{\delta\gamma(\varepsilon)}{\delta\varepsilon} \gamma(\varepsilon)^{1/2} \quad (2.17)$$

Ou  $\Delta E_a$  représente la différence des affinités des matériaux binaires, x est une fraction molaire

et  $N_s$  est la densité des sites d'alliages donnée par  $N_s = \frac{x}{\Omega}$  avec  $\Omega$  est le volume d'une cellule

unitaire du réseau cristallin.

### **II.4.2-Interactions inélastiques:**

Ces interactions sont caractérisées par un échange d'énergie qui est lié au transfert des porteurs de la vallée centrale aux vallées latérales.

#### **II.4.2.1-Interactions inter-vallées:**

La diffusion inter vallée provoque un transfert du porteur de la bande centrale aux bandes supérieures. Ce transfert est possible pour des énergies qui sont comparables à la différence d'énergie entre les bandes supérieures et la bande centrale. Il existe deux types: équivalentes et non équivalentes. Elles sont accompagnées d'absorption ou d'émission d'un phonon dont la valeur dépend de l'écart d'énergie entre la vallée de départ et la vallée d'arrivée [33].

Une interaction inter vallée ne peut s'effectuer que si l'énergie après absorption ou émission du phonon est supérieure à l'énergie du fond de la vallée centrale qui est le repère de toutes les énergies.

Quand un électron est transféré de la vallée centrale aux vallées latérales, sa vitesse moyenne diminue car dans ces vallées les masses sont plus grandes que la vallée centrale. Ces interactions sont le processus le plus dominant dans les hautes températures.

Ces interactions sont le plus importantes parmi toutes les autres interactions. Cela est dû à leur forte probabilité et à leurs conséquences sur le comportement de l'électron.

##### **II.4.2.1.1-Interactions inter-vallées équivalentes:**

Chaque bande d'énergie a une ou plusieurs bandes équivalentes qui sont caractérisées par les mêmes constantes physiques. Par exemple, le transfert d'une vallée X dans l'une des deux autres vallées équivalentes, ou d'une vallée L dans l'une des trois autres vallées équivalentes.

Les porteurs peuvent faire une diffusion et être transférés dans ces bandes qui sont similaires à la bande de départ et la transition est analogue à une transition intra-vallée.

La probabilité d'interaction de ce type de collision est donnée par [34] [35]:

$$\lambda_i(\varepsilon) = Z_i \frac{\pi \hbar D_i^2}{\rho \omega_i} \left( N_i + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) g_i(\varepsilon') \quad (2.18)$$

Où l'énergie finale  $\varepsilon'$  est donnée par :

$$\varepsilon' = \varepsilon \pm \hbar \omega$$

Avec  $Z_i$  le nombre de vallées finales équivalentes possibles du même type,  $D_i$  est le potentiel de déformation et  $\hbar \omega_i$  est l'énergie du phonon échangée.

#### II.4.2.1.2-Interactions inter-vallées non équivalentes:

C'est la transition des porteurs de charges à des vallées non équivalentes supérieures en gagnant un phonon ou vers des vallées inférieures en perdant un phonon.

La probabilité d'interaction inter-vallée non équivalente est donnée par la relation suivante [34] [35]:

$$\lambda_{ij}(\varepsilon) = \frac{Z_{ij} m_j^{3/2} E_{ij}^2}{\pi \sqrt{2} \rho \omega_{ij} \hbar^3} \left( N_{ij} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \frac{\delta(\varepsilon')(1 + \alpha_i \varepsilon_i) + (1 + \alpha_j \varepsilon_j)}{(1 + 2\alpha_i \varepsilon_i)} \quad (2.19)$$

Avec  $Z_{ij}$  le nombre de vallées d'arrivée de type j quand on part de la vallée i et  $E_{ij}$  le potentiel de déformation inter-vallée entre la vallée i et la vallée j tandis que  $\omega_{ij}$  est l'énergie du phonon échangée.

### II.4.2.2-Interactions optiques:

#### II.4.2.2.1-Interactions avec un phonon optique polaire:

Dans les semi-conducteurs composés, le mouvement des atomes chargés positivement et négativement dans une cellule unitaire du réseau va créer un dipôle oscillateur. Les atomes forment des dipôles entre eux pour créer un seul mode de vibration longitudinal connu comme le phonon optique polaire.

L'interaction optique polaire est très importante dans toutes les vallées et l'énergie du phonon est comparable à celle des électrons à la température ambiante. L'énergie des électrons après interaction dans le cas de l'émission ou d'absorption est donnée par:

$$\varepsilon' = \varepsilon \pm \hbar\omega_0 \quad (2.20)$$

La probabilité d'interaction des électrons avec les phonons optiques polaires est donnée par [36] [29]:

$$\lambda_p(\varepsilon) = \frac{e^2 m^{*1/2} \omega_0}{\hbar \sqrt{2.4\pi\varepsilon_0}} \left( \frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right) \frac{1+2\alpha\varepsilon'}{\sqrt{\delta(\varepsilon)}} F(\varepsilon, \varepsilon') \left( N_o + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \quad (2.21)$$

Ou

$$F(\varepsilon, \varepsilon') = \frac{1}{C} \left( A \ln \left| \frac{\delta^{1/2}(\varepsilon) + \delta^{1/2}(\varepsilon')}{\delta^{1/2}(\varepsilon) - \delta^{1/2}(\varepsilon')} \right| + B \right) \quad (2.22)$$

Avec

$$A = \left[ 2(1+\alpha\varepsilon)(1+\alpha\varepsilon') + \alpha(\delta(\varepsilon) + \delta(\varepsilon')) \right]^2 \quad (2.23)$$

$$B = -2\alpha(\delta(\varepsilon) + \delta(\varepsilon'))^{1/2} \left[ 4(1+\alpha\varepsilon)(1+\alpha\varepsilon') + \alpha(\delta(\varepsilon) + \delta(\varepsilon')) \right] \quad (2.24)$$

$$C = 4(1+\alpha\varepsilon)(1+\alpha\varepsilon') 4(1+2\alpha\varepsilon)(1+2\alpha\varepsilon') \quad (2.25)$$

#### II.4.2.2-Interactions avec un phonon optique non polaire:

L'interaction des électrons avec les phonons optiques non polaires est due essentiellement aux variations du déplacement atomique qui déplace les atomes voisins dans un sens opposé. La diffusion est causée directement par ce déplacement qui est considérée comme le potentiel de déformation [15]. Ces interactions sont négligées dans la vallée centrale mais deviennent importantes dans la vallée L.

La probabilité d'interaction des électrons avec les phonons optiques non polaires est donnée par [33]:

$$\lambda_{np}(\varepsilon) = (Z_L - 1) \frac{\pi \hbar D_{no}^2}{\rho \omega_{no}} \left( N_{no} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) g_L(\varepsilon) \quad (2.25)$$

Avec  $N_{no}$  est la fonction d'occupation des phonons et  $\hbar \omega_0$  est l'énergie du phonon échangé.

#### II.5-Interactions prépondérantes dans les semi-conducteurs :

Les électrons subissent sur leurs trajectoires différents types d'interactions dont certaines ont une influence beaucoup plus importantes que les autres et avec une grande probabilité d'interaction, mais cela suivant la nature du champ électrique et la position des électrons dans le diagramme de bande, nous allons faire un récapitulatif des interactions en précisant la position et le champ utilisé:

##### II.5.1-Champ électrique faible :

Quand un électron dérive dans un matériau sous l'effet d'un champ électrique, il gagne de l'énergie sous forme cinétique et la transmet progressivement au cristal par le biais des nombreux chocs qu'il effectue avec les phonons du réseau.

Dans la vallée centrale et à faible champ électrique, les électrons ont une énergie très faible par rapport à l'énergie des phonons optiques polaires, ils ont une énergie équivalente avec les phonons acoustiques. Les interactions prépondérantes sont les interactions

acoustiques et les interactions optiques polaires d'absorptions. Les interactions acoustiques sont des interactions élastiques et isotropes, dans ce cas, on ne distingue pas les cas d'absorption et d'émission de phonons. Elles rendent la direction du vecteur-vitesse des électrons aléatoire. Alors que les interactions optiques polaires d'absorptions sont des interactions inélastiques.

### **II.5.2-Champ électrique moyen :**

Quand le champ électrique devient moyen, les électrons possèdent une énergie supérieure à celle des phonons optiques polaires et peuvent émettre des phonons optiques, l'énergie de l'électron varie d'une quantité égale à l'énergie du phonon optique, ces interactions donnent une déviation du vecteur-vitesse de l'électron, qui décroît quand l'énergie  $\varepsilon$  augmente. La probabilité d'émission est supérieure à la probabilité d'absorption.

Ce type d'interaction devient le plus dominant dans la vallée centrale dans les champs électriques moyens à température ambiante. Quand l'énergie de l'électron augmente et donc le module de sa vitesse augmente, l'électron a tendance à transmettre au réseau une partie de l'énergie que lui a fournie le champ électrique, donc, l'électron est de moins en moins dévié de sa trajectoire, car, il perd de l'énergie en parallèle à cause de l'émission des phonons, l'électron va se transporter de plus en plus vite dans la direction du champ électrique qui l'accélère.

### **II.5.3-Champ électrique fort :**

Plus le champ augmente, plus l'énergie des électrons augmente jusqu'à avoir une énergie supérieure à l'énergie de séparation entre la vallée centrale et les vallées latérales (L,X) où les électrons peuvent transiter. Ces interactions sont isotropes et d'une probabilité élevée. Elles influent beaucoup sur le déplacement de l'électron dans les champs électriques forts. Ce processus devient le plus important parmi toutes interactions possibles.

Les phonons qui entre en jeu dans les transferts inter-vallées sont ce qui se situe au bord de la zone de Brillouin, car leur vecteur d'onde  $K_0$  est grand devant celui de l'électron dans la vallée centrale, c'est-à-dire au centre de la zone de Brillouin. Les vecteurs d'ondes  $\vec{k}$  sont répartis sur un cercle de rayon  $K_0$  au centre de la zone de Brillouin.

Dans les vallées latérales, la masse effective des électrons est très grande par rapport à la masse effective de la vallée centrale, car dans ces vallées, la courbe n'est pas très accentuée, ce qui va nous mener à une mobilité faible des électrons.

#### **II.5.4-Champ électrique très fort :**

Lorsque le champ électrique devient très fort et dans les composants de petites dimensions, les électrons gagnent de l'énergie sous forme cinétique et la transmet au cristal par l'intermédiaire des chocs qu'ils effectuent avec les phonons.

Ce pendant, si un électron possède une énergie très grande, il transfère une partie de celle-ci à un autre électron de la bande de valence qui va lui-même être transféré dans la bande de conduction créant ainsi une paire électron-trou.

Ce processus s'appelle ionisation par impact et est indésirable dans les transistors à effet de champs, car il génère des courants parasites qui s'amplifient très vite ce qui nous mène au claquage du composant

#### **Conclusion :**

Le calcul des probabilités d'interactions de chaque type de collisions est une étape indispensable pour toute étude de simulation de la trajectoire des électrons, dans le chapitre suivant, nous allons présenter le simulateur utilisé dans notre étude qui n'est d'autre que le simulateur Monte Carlo.

## Chapitre III

### Présentation de la méthode Monte Carlo

**Introduction :**

Bien souvent, les problèmes scientifiques conduisent à l'évaluation d'intégrales ou de sommes ainsi qu'à la résolution d'équations différentielles qui sont difficiles à résoudre analytiquement, comme dans le cas de la compréhension des phénomènes physiques qui décrivent le comportement des porteurs dans les matériaux semi-conducteurs, celle-ci nécessite la connaissance de la fonction de distribution d'énergie qui est obtenue grâce à la résolution de l'équation de Boltzmann. La résolution de cette équation s'avère très difficile à reproduire, alors on a souvent recouru à des méthodes numériques pour la résoudre.

L'une de ces méthodes, la plus efficace et qui donne une solution directe de cette équation à travers une simulation microscopique des trajectoires des porteurs à l'intérieur du cristal est la méthode de Monte Carlo [37].

**III.1-Historique de la méthode :**

Les techniques de Monte Carlo ont été utilisées depuis très longtemps, même si ce n'est qu'en seconde guerre mondiale qu'elles ont acquis un véritable statut de méthode.

Les premiers travaux par ces méthodes dans le domaine de la recherche ont été faits sur la bombe atomique par Ulam, Metropolis et von Neumann pendant la seconde guerre mondiale en 1942 au laboratoire de Los Alamos au Nouveau Mexique. Ces travaux, dans le projet Manhattan, impliquaient une collaboration entre mathématiciens et physiciens pour étudier le comportement aléatoire des neutrons diffusés et absorbés dans les matériaux fissibles [38].

Inspiré par l'intérêt d'Ulam pour le poker, Metropolis eut l'idée d'utiliser cette similitude avec les jeux de hasard en associant à leur mission le nom de Monte Carlo, ville célèbre pour ses nombreux casinos qui est située dans la principauté de Monaco [15].

La méthode de Monté Carlo fut pour la première fois appliquée à l'étude du transport électronique en 1960 par Luthi [39], puis par en 1966 Kurosawa [40], en 1972 Fawcett a étudié la première simulation sur les transistors à effet de champ [41], et depuis le début des années 80 elle est très utilisée dans les simulations de transport électroniques dans les semi-conducteurs.

Plusieurs travaux ont participé à l'amélioration et développement de cette méthode comme ceux de Price [42], Jacoboni [43] et du groupe Malvern [29] qui ont étudié le modèle à plusieurs bandes. Par la suite, Littlejohn et Ferry ont analysé le transport dans les alliages ternaires et quaternaires.

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

La simulation par les méthodes de Monte Carlo est aujourd'hui l'un des outils les plus utilisés pour l'étude du fonctionnement physique des composants électroniques en offrant la possibilité de reproduire les divers phénomènes qui se produisent dans semi-conducteurs. Elle permet de résoudre de façon numérique des problèmes physiques qui n'ont pas de solutions analytiques.

### **III.2-Principe de la méthode :**

Le principe général de la méthode Monte Carlo est d'étudier au cours du temps, la dynamique des porteurs de charges durant leurs déplacements à l'intérieur du semi-conducteur. Sous l'effet d'un champ électrique externe, la trajectoire des électrons est constituée de deux séquences ; une séquence de vol libre sous l'effet du champ électrique dite libre parcours moyen, et une autre séquence d'interactions des électrons dans le matériau qui

sont des phénomènes aléatoires. Donc les électrons vont être déviés de leurs trajectoires, ainsi leurs énergies, leurs vecteurs d'ondes et leurs positions vont être modifiés. Le mouvement des électrons est représenté par la figure (III.1) :

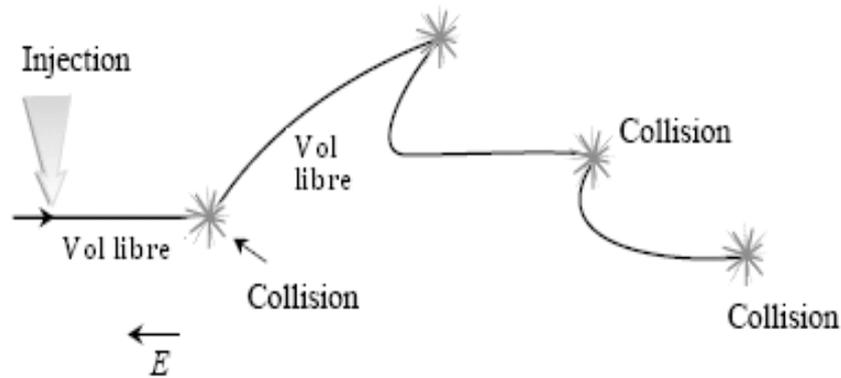


Figure (III.1) : l'évolution d'un ensemble de particule au cours du temps [15]

Il existe deux études possibles pour simuler le comportement des électrons dans les semi-conducteurs [22]:

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

Comme la résolution de l'équation de Boltzmann est quasi impossible analytiquement, alors on utilise la méthode numérique Monte Carlo pour la résoudre qui va nous donner une solution exacte et précise. Pour cela, on a recours à suivre au cours du temps la trajectoire des électrons durant leurs mouvements dans l'espace réel et dans l'espace réciproque des vecteurs d'onde  $k$ .

L'avantage de cette méthode par rapport à d'autres réside dans le fait que l'effet des mécanismes d'interactions est incorporé c'est-à-dire, c'est comme résoudre l'équation de Boltzmann en tenant compte du deuxième membre.

Typiquement, le résultat d'une simulation de Monte Carlo d'un semi conducteur est la fonction de distribution d'électron. A partir de cette distribution n'importe quelle autre quantité peut être calculée par exemple: la densité locale, l'énergie moyenne et la vitesse de dérive.

On définit dans l'étape de l'initialisation, les paramètres de la simulation pour permette de décrire l'environnement où évoluent les électrons simulés, dans le cas d'un semi-conducteur, on définit les propriétés du matériau utilisées, par exemple : la largeur de gap, les masses effectives, la température, l'énergie de séparation des différentes vallées, etc. Dans le cas de la simulation d'un transistor MOSFET, on doit définir le maillage, les dimensions des différentes cellules, le dopage, etc.

Ensuite, on calcul les probabilités des différentes interactions que subissent les électrons durant leurs parcours. Puis, on divise le temps en des intervalles très petit  $\Delta t$  afin de maximiser les essais, le temps de libre parcours est déterminé par tirage au sort.

Durant chaque intervalle du temps, on fait évoluer suivant les équations de mouvement toutes les particules utilisées. Si à la fin de  $\Delta t$  le libre parcours ne se termine pas, alors le mouvement est semi-classique, sinon, à la fin de ce parcours, la sélection du type d'interactions exige de sélectionner par tirage au sort, le processus qui est responsable de l'interruption du libre parcours tout en respectant les probabilités propres à chaque type de d'interactions considéré. L'angle de déviation est aussi sélectionné par tirage au sort. Les

interactions sont supposées binaires et instantanées, donc les électrons se déplacent en série de vol libre.

Ensuite, on sélectionne l'état final où se trouve la particule après avoir subi l'interaction. Une fois le type de d'interaction est choisit, on génère un nouveau temps de libre parcours pour la suite de simulation.

### III.3-Equation de mouvement :

L'évolution des porteurs de charges à l'intérieur des semi-conducteurs est décrite par la structure de bande qui détermine leurs états énergétiques. Ces états sont déterminés en résolvant l'équation de Schrödinger et sont exprimés par la relation de dispersion  $\varepsilon(k)$  qui relie l'énergie  $\varepsilon$  et le vecteur d'onde du cristal  $k$  [43], cette relation est donnée par :

$$\gamma(\varepsilon) = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (3.1)$$

Avec  $m^*$  est la masse effective du porteur,  $\alpha$  est le coefficient de non parabolicité et  $\hbar$  est la constante de Planck réduite c'est-à-dire divisée sur  $2\pi$ .

Le coefficient de non parabolicité est donné par la relation :

$$\alpha = \frac{1}{E_g} \left( 1 - \frac{m^*}{m_0} \right)^2 \quad (3.2)$$

Avec  $E_g$  est l'énergie de gap du semi-conducteur et  $m_0$  la masse du porteur libre.

On rappelle que la vitesse de groupe  $v$  avec laquelle se déplace le porteur est donnée par :

$$v = \frac{dr}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\gamma(\varepsilon)}{dk} \quad (3.3)$$

Elle est égale à :

$$\frac{dr}{dt} = \frac{\hbar}{m^*} k \quad (3.4)$$

D'autre part, le porteur est accéléré avec une variation du vecteur d'onde qui est déterminé par la loi de Newton :

$$\frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar} eE \quad (3.5)$$

Donc l'évolution de la position et du vecteur d'onde en fonction du temps qui est traitée semi-classiquement en absence du champ externe est donnée par les deux équations suivantes [44]:

$$\begin{cases} \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar} eE \\ \frac{dr}{dt} = \frac{\hbar}{m^*} k \end{cases} \quad (3.6)$$

Si on applique un champ électrique externe pendant une durée  $\delta t$ , le porteur passe de son état initial  $(r_i, k_i)$  à l'instant  $t_i$ , à un autre état supposé final  $(r_f, k_f)$  à l'instant  $t_f$ .

Ceci permet de décrire que:

$$\begin{cases} k_f = k_i + \frac{\delta t}{\hbar} eE \\ r_f = r_i - \frac{\hbar}{m^*} \frac{(k_i + k_f)}{2} \delta t \end{cases} \quad (3.7)$$

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

Durant le vol libre, l'électron se déplace dans l'espace réel et dans l'espace des vecteurs d'ondes en suivant la direction du champ électrique comme le montre la figure (III.2) :

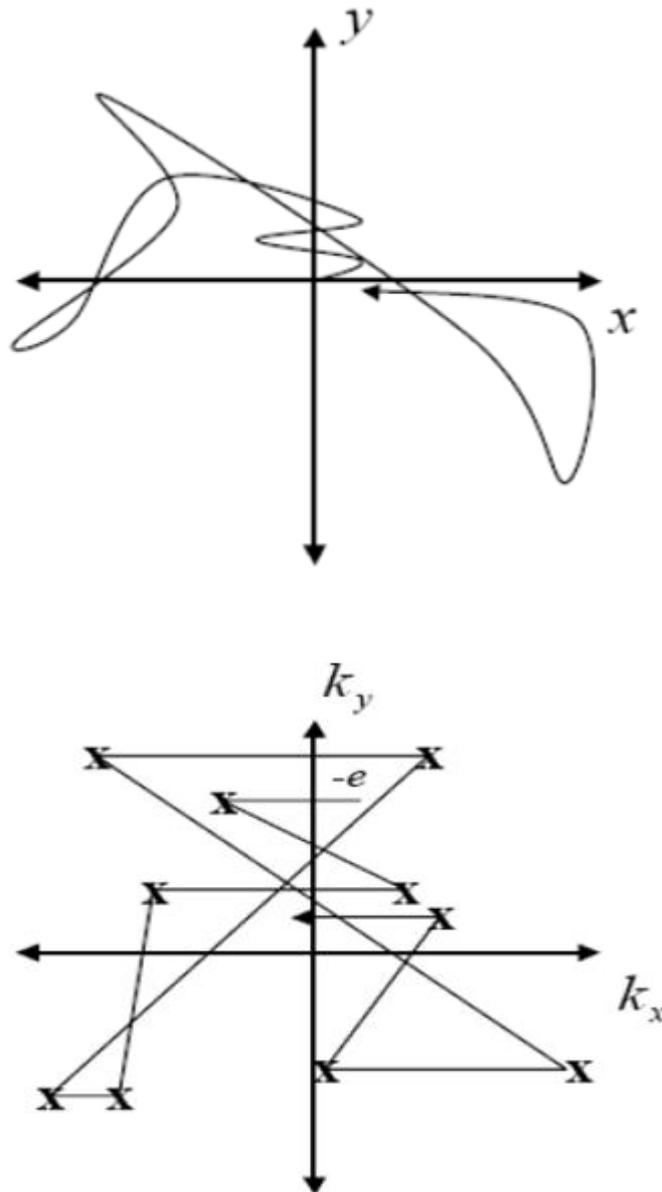


Figure (III.2) : trajectoire d'un électron dans l'espace réel et dans l'espace des K

### III.4-Temps de vol libre:

Pendant leurs mouvements sous l'effet de forces extérieures, les électrons subissent une succession d'interactions à l'intérieur du réseau cristallin, le temps séparant deux interactions successives est dit temps du vol libre dont sa détermination est l'un des points le plus important dans l'algorithme Monte Carlo.

La probabilité pour qu'un électron se trouvant dans l'état  $k$  ait une interaction par unité de temps, est donnée par :  $\lambda(k(t))\delta t$ . En supposant que ces interactions sont instantanées, alors sous l'effet du champ électrique les électrons sont déplacés en vol libre, entre deux chocs.

En déduit alors, la probabilité par unité de temps pour qu'une interaction ne se produise pas, elle est donnée par :

$$p_f(t) = \exp \left[ - \int_0^t \lambda(k(t') \delta t') \right] \quad (3.8)$$

On aura alors la probabilité pour qu'un électron suive un vol libre de durée  $\Delta t$  suivi d'un choc qui est donnée par l'équation :

$$p(\Delta t) = \int_0^{\Delta t} \lambda(k(t)) \cdot \exp \left[ - \int_0^t \lambda(k(t') \delta t') \right] \delta t \quad (3.9)$$

On doit générer un premier temps de libre parcours pour chaque électron simulé, et qu'à la fin de ce libre parcours, un nouveau temps sera choisi pour les électrons qui ont subis des collisions. Pour déterminer ces temps de libre parcours  $dt$ , on suit la procédure adoptée par Kurosawa qui est de tirer au sort des nombres aléatoire  $r$  à distribution uniforme entre 0 et 1 et de résoudre l'équation intégrale suivante:

$$\int_0^{\Delta t} \lambda(k(t)) \delta t = -Lnr \quad (3.10)$$

En raison de la complexité de cette dernière équation qui nécessite de calculer cet intégrale à chaque fois qu'on veut générer un temps du libre parcours, nous allons la simplifiée en employant la procédure dite « Self Scattering » suggéré par Rees [45], qui a pour but d'introduire une interaction fictive supplémentaire qui est sans effet sur le mouvement de l'électron mais qui facilite les calculs en rendant la probabilité totale constante.

$$\Gamma = \lambda_{sc} + \sum_i \lambda_i \quad (3.11)$$

Le Self Scattering doit maintenant figurer parmi les interactions susceptibles de se produire à la fin de leurs libres parcours. L'avantage qu'offre cette procédure est qu'elle permet de choisir la valeur de la probabilité totale d'interaction  $\Gamma$  de telle sorte à minimiser le nombre de collisions fictives qui ne jouent aucun rôle sur la trajectoire de l'électron mais qu'elle soit au moins égales à la plus grande somme de  $\Sigma\lambda_i$  afin d'éviter  $\lambda_{sc}$  négative.

Donc l'équation précédente devient très simple :

$$p(\Delta t) = \Gamma e^{-\Gamma\Delta t} \quad (3.12)$$

Le temps du vol est calculé à partir d'une distribution uniforme de  $r$  entre 0 et 1:

$$\Delta t = -\frac{1}{\Gamma} \text{Lnr} \quad (3.13)$$

Après avoir trouvé la durée du vol libre, on calcule à cet instant les probabilités qui sont susceptible de se produire et de choisir après, le type d'interactions qui est responsable de la collision.

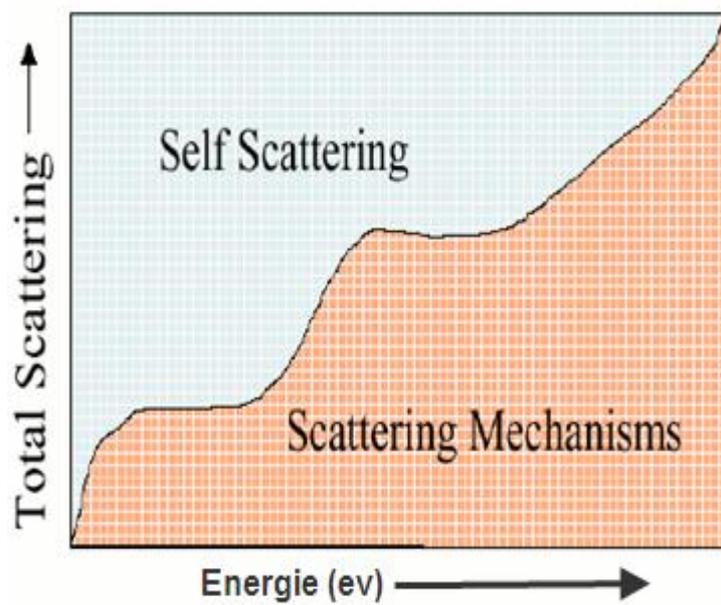


Figure (III.3) : Probabilité totale d'interactions et Self Scattering [22]

### III.5-Choix du type de l'interaction :

Le type d'interaction est choisi à la fin du libre parcours à partir d'un nombre aléatoire  $r$  compris entre 0 et 1 par la méthode de rejection, en utilisant les étapes suivantes :

- On calcul tout d'abord les probabilités d'interactions correspondant à chaque type de diffusions utilisées dans la simulation en fonction de l'énergie.
- On construit ensuite un tableau dans lequel on met toute les sommes des taux calculés sur un ordre croissant correspondants à chaque valeur d'énergie.
- Pour sélectionner le type d'interaction, on fixe tout d'abord la valeur de l'énergie finale de l'électron et on tire un nombre aléatoire  $r$  uniformément choisi entre 0 et 1.
- On calcul  $R_{diff}$  qui est égale au nombre aléatoire  $r$  multiplier par la somme totale des taux d'interactions calculés auparavant  $R_{diff} = r \cdot \Gamma_{tot}$  (3.14)

- On compare par la suite ce nombre avec la somme des taux calculés et on doit vérifier la relation suivante:

$$R_{diff} \leq \sum_{i=1}^q \lambda_i \tag{3.15}$$

- Si  $R_{diff} \leq \lambda_1$ , alors le processus  $\lambda_1$  est choisi.

- Si  $R_{diff} \leq \lambda_q$ , alors le processus  $\lambda_q$  est choisi.

L'explication du choix du type d'interaction est représentée dans la figure (III.4) :

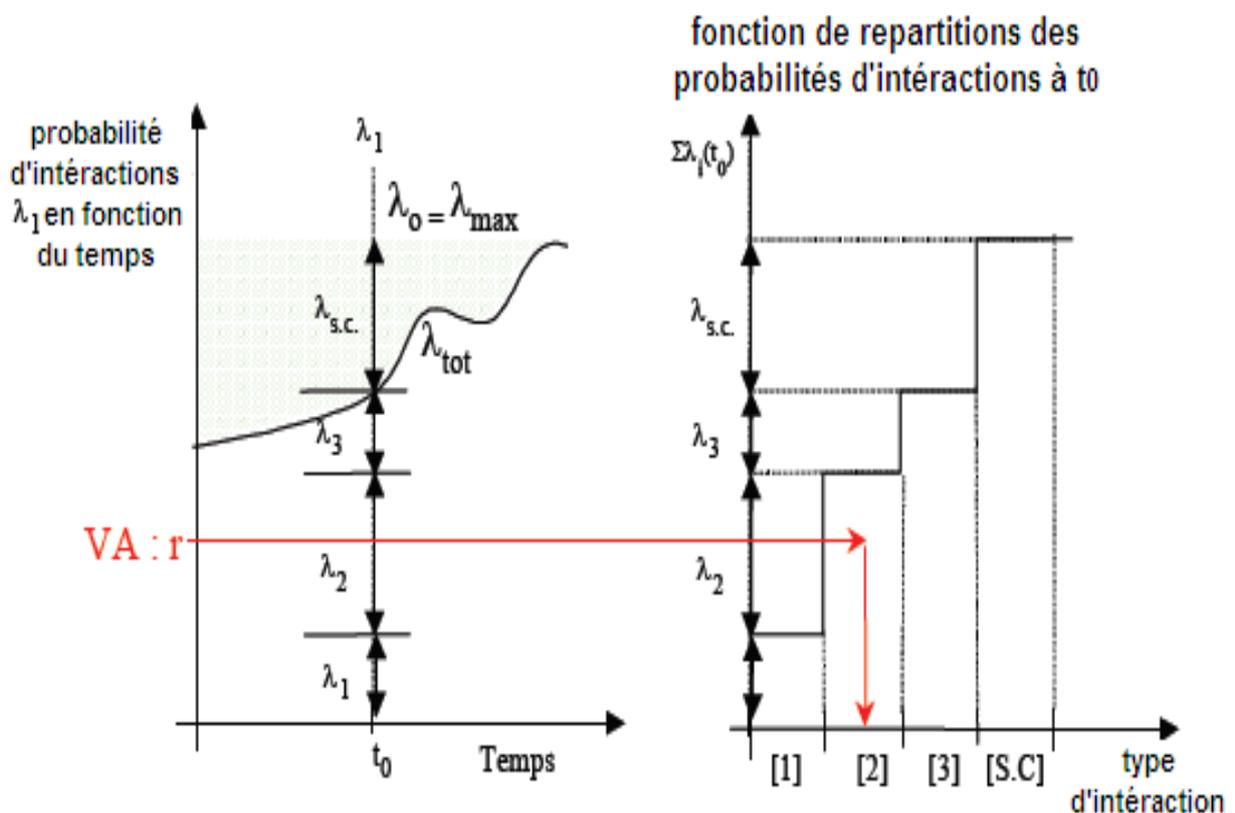


Figure (III.4) : Tabulations et sélections des mécanismes d'interactions [25]

### III.6-Angle de déviation :

Les interactions qu'effectuent les électrons sont supposées instantanées, et ont pour effet de provoquer une discontinuité de leurs trajectoires, cette discontinuité se manifeste à la fois par un échange d'énergie et par un brusque changement d'orientation de la vitesse de l'électron, ce changement se traduit au niveau du vecteur d'onde par une variation de son module qui dépend des énergies initiales et finales.

Le vecteur d'onde final est repéré par rapport au vecteur d'onde initial par un angle de déviation  $\beta$ , ce dernier est déterminé par tirage au sort suivant une loi caractéristique de l'interaction, pour cela, on tire deux nombre  $r_1$  et  $r_2$  suivant des distributions qui dépendent du type de collision choisie en se plaçant dans un repère lié au vecteur d'onde  $k$  avant l'interaction [27]:

$$\begin{cases} \phi = 2\pi r_1 \\ \cos \beta = 1 - 2r_2 \end{cases} \quad (3.16)$$

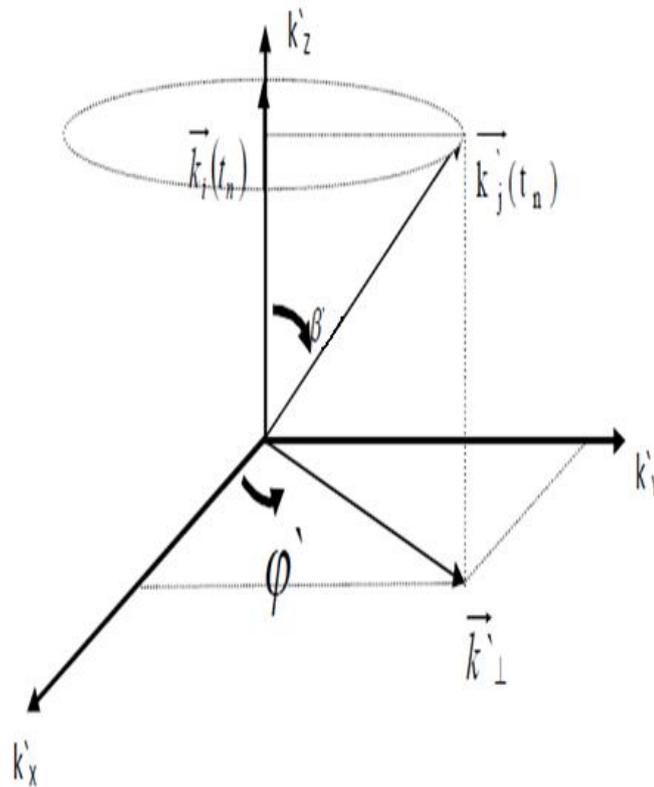


Figure (III.5) : Angle de déviation [22]

### III.7-Mise en œuvre de la simulation :

Les détails du programme de la méthode Monte Carlo utilisé pour la modélisation du transport électronique dans les matériaux massifs sont représentés par l'organigramme de la figure (III.6) :

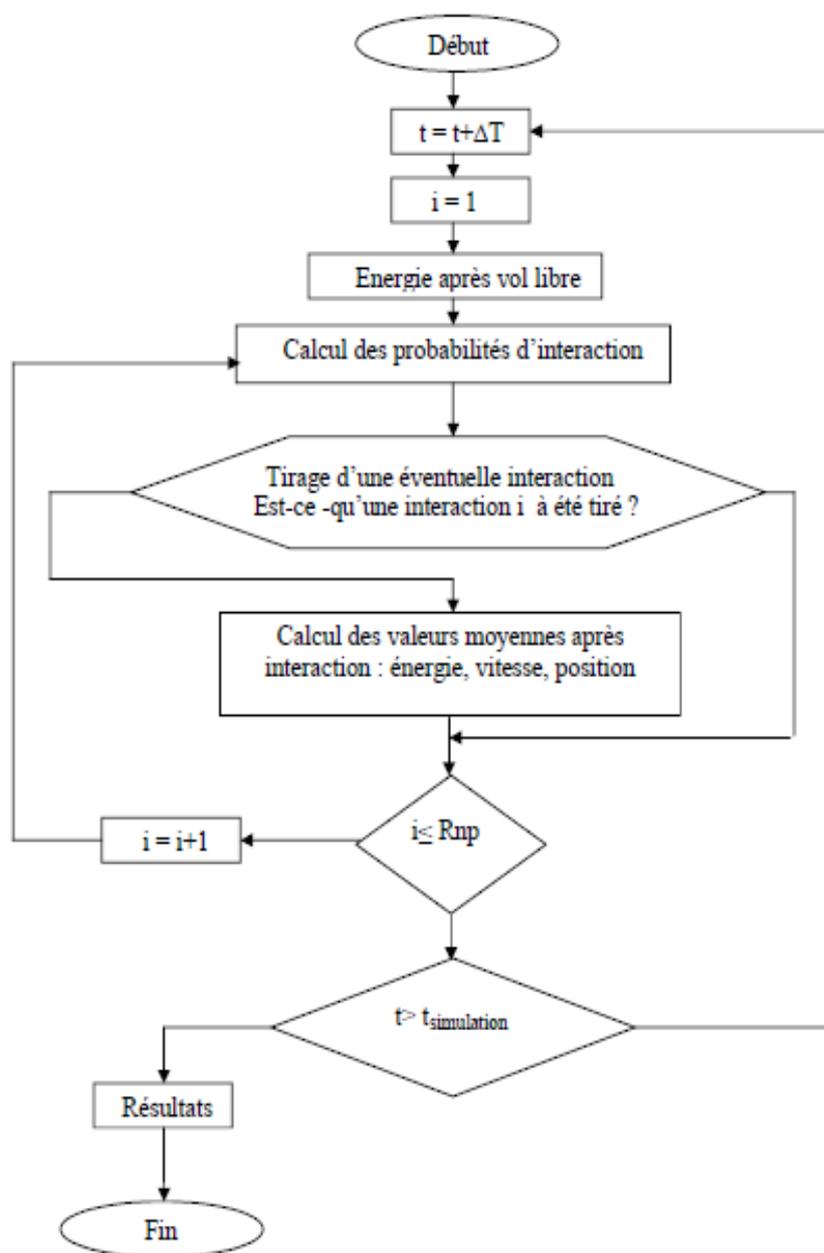


Figure (III.6) : Organigramme de la méthode Monte Carlo [26]

Le programme commence par lire les données des paramètres du matériau utilisé, de calculer les taux d'interactions et de les stockés en mémoire. Le cœur du programme est constitué de deux boucles ; la première itération sur le temps dans laquelle est imbriquée une deuxième sur les électrons, c'est à dire qu'à chaque itération sur le temps, les électrons sont animés grâce à la procédure Monte Carlo mono particulaire. Donc chaque électron subit

plusieurs interactions sous l'effet de champ électrique et pour déterminer la nature d'une interaction, une procédure de tirage au sort d'un nombre aléatoire entre 0 et 1 est utilisée.

L'électron étant dévié de sa trajectoire, l'angle de déviation est alors déterminé, puis le vecteur d'onde est modifié et enfin l'énergie réactualisée en prenant en compte d'un éventuel échange de phonon. Le pas  $\delta t$  est choisi de manière à ce que la probabilité d'interaction soit très inférieure à 1 pour une grande gamme d'énergie. Une fois les boucles exécutées, le programme calcule les moyennes des grandeurs physiques et les sauvegarde sur le disque dur.

### **III.8-Description du logiciel :**

Les programmes utilisés au cours de notre simulation sont écrits en langage FORTRAN, chaque programme correspond à un type d'interaction dont on calcule son taux en fonction de l'énergie. Le programme utilisé simule la trajectoire de Vingt mille quasi-particules. Les particules se déplacent dans le matériau sous l'influence des forces externes et d'événements aléatoires de diffusion.

Donc, ce logiciel permet de faire deux choses essentielles : La première est destinée au calcul des probabilités à partir de leurs expressions usuelles en se basant sur un modèle à trois vallées isotropes et non parabolique, alors que la deuxième fonction est consacrée au calcul des grandeurs instantanées tel que l'énergie, la vitesse, la position par la procédure Self Scattering pour laquelle, les durées de vol libre sont distribuées pour chaque électron.

Les étapes utilisées sont classées comme suite :

- Lecture du fichier de données contenant les paramètres du matériau ainsi que le nombre des particules simulés et le pas du temps ...
- L'exécution du logiciel.

L'obtention des résultats des différentes valeurs des taux d'interactions en fonction de l'énergie ainsi que les résultats de la vitesse en régime stationnaire et du régime non stationnaire.

**Conclusion :**

Après avoir fait une étude générale sur les phénomènes de transport dans les semi-conducteurs avec le calcul de probabilité de chaque type d'interaction et de donner l'idée générale sur la simulation Monte Carlo, nous allons dans le chapitre suivant exploiter les résultats obtenus dans notre simulation.

## Chapitre IV

Résultat de simulation et interprétation

**Introduction :**

Dans les chapitres précédents, nous avons fait une étude générale sur les semi-conducteurs III-V, ainsi qu'une étude sur les différents types d'interactions que subissent les électrons durant leurs mouvements et leurs influences sur leur comportement et sur le transport à l'intérieur du semi-conducteur.

Nous avons aussi présenté le principe général de la méthode Monte Carlo ainsi que les différentes étapes de simulation utilisées dans la modélisation du transport de particule dans les semi-conducteurs.

Dans ce chapitre, nous allons présenter les résultats obtenus dans notre simulation et de les comparer avec d'autres résultats existant dans la littérature.

**IV.1-Propriétés de transport dans les matériaux III-V :**

Le développement de la recherche dans le domaine des semi-conducteurs III-V se caractérise par l'étude des phénomènes de transport des électrons dans le matériau en particulier dans les champs électriques et les températures élevés.

Cette étude a connu une progression énorme ces dernières décennies. Parmi les modèles les plus efficaces pour étudier les caractéristiques de transport électronique dans des matériaux et dispositifs semi-conducteurs, le modèle microscopique de transport basé sur la méthode de Monte Carlo.

L'objectif principal de notre travail, est d'étudier le phénomène de transport électronique dans le matériau III-V ternaire  $Ga_xIn_{1-x}Sb$  ; avec  $x=0.5$  est le coefficient stœchiométrique et qui par la suite doit être utilisés pour la conception des dispositifs électroniques pour diverses conditions en fonction de ses capacités. Grace à son gap direct et petit ( $E_g=0.34525$  ev pour  $x=0.5$ ), l'alliage ternaire  $Ga_xIn_{1-x}Sb$  fait à l'heure actuelle l'objet de plusieurs recherches dans l'électronique et l'optoélectronique.

Les propriétés de transport électroniques dans les champs élevés dans ce type de matériaux sont contrôlées par les effets de structure de bande, c'est-à-dire, le transfert d'électron aux vallées satellites de la bande de conduction, notre travail consiste à calculer les probabilités d'interactions que subissent les électrons en fonction de l'énergie et de calculer la vitesse de dérive en régime stationnaire et non stationnaire, et nous étudierons par la suite, l'influence de la température sur la vitesse de dérive pour différents champs électriques.

Les détails des paramètres de bande de conduction et le modèle utilisé de simulation sont présentés ci-dessous, et les résultats pour la simulation effectuée sont également interprétés.

#### IV.2- Model de simulation :

Pour faciliter les calculs et de diminuer les temps des simulations, certaines approximations ont été introduites dans le programme ; par exemple pour la structure de bande, le modèle utilisé est celui de Littlejohn qui considère le modèle à trois vallées ( $\Gamma$ , L, X) isotropes et non paraboliques :

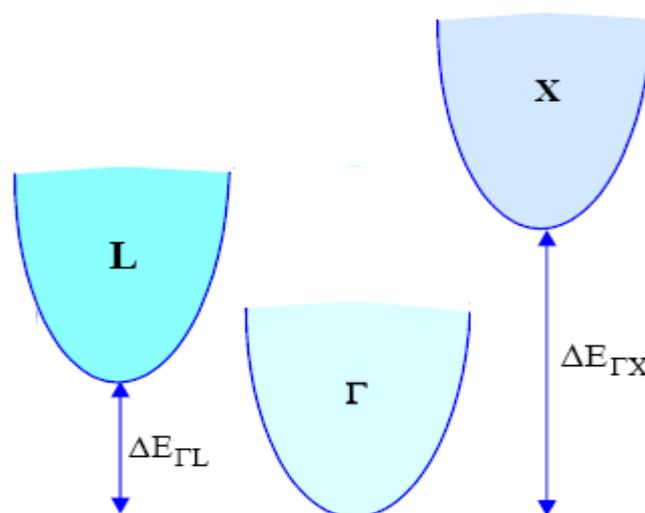


Figure (IV.1) : Modèle à trois vallées

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

Les types d'interactions utilisées dans notre simulation sont les interactions acoustiques, les interactions optiques polaires, les interactions inter-vallée et les interactions intra-vallées. Ces interactions sont les plus prépondérants qui affectent le mouvement d'électron dans le matériau.

Nous allons par la suite étudier les deux régimes, stationnaire et non stationnaire :

- Dans le régime stationnaire, nous calculons les différentes interactions en fonction de l'énergie, la vitesse en fonction du champ électrique pour plusieurs températures et pour plusieurs concentrations d'électrons ainsi que le taux d'occupations d'électrons.
- Dans le régime non stationnaire, nous étudions l'évolution de la vitesse en fonction du temps pour plusieurs champs électriques et températures.

### **IV.3-Résultats de la simulation :**

Les résultats obtenus au cours de notre simulation pour le matériau  $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$  sont donnés et expliqués dans l'ordre suivant :

- Les probabilités d'interactions acoustiques.
- Les probabilités d'interactions inter-vallées (d'émission et d'absorption).
- Les probabilités d'interactions intra-vallées (d'émission et d'absorption).
- Les probabilités d'interactions optiques polaires.
- La vitesse de dérive des électrons en fonction du champ électrique.
- La vitesse de dérive des électrons en fonction du champ électrique pour différentes températures.
- Le taux d'occupation des électrons en fonction du champ électrique.
- La vitesse de dérive des électrons en fonction du temps.

- La vitesse de dérive des électrons en fonction du temps pour différents champs électriques appliqués.
- La vitesse de dérive des électrons en fonction du temps pour différentes températures.

### IV.3.1-Différents types d'interactions :

#### IV.3.1.1-Interactions élastiques :

Ce type d'interaction n'a pas généralement une grande influence sur le comportement des électrons car ils ne sont pas déviés de leur trajectoire, mais elles sont quand même étudiées pour obtenir une description aussi quantitative que possible de la dynamique électronique.

#### IV.3.1.1.1-Interactions acoustiques :

L'évolution de ces types d'interactions dans les trois vallées en fonction de l'énergie est représentée sur la figure (IV.2) :

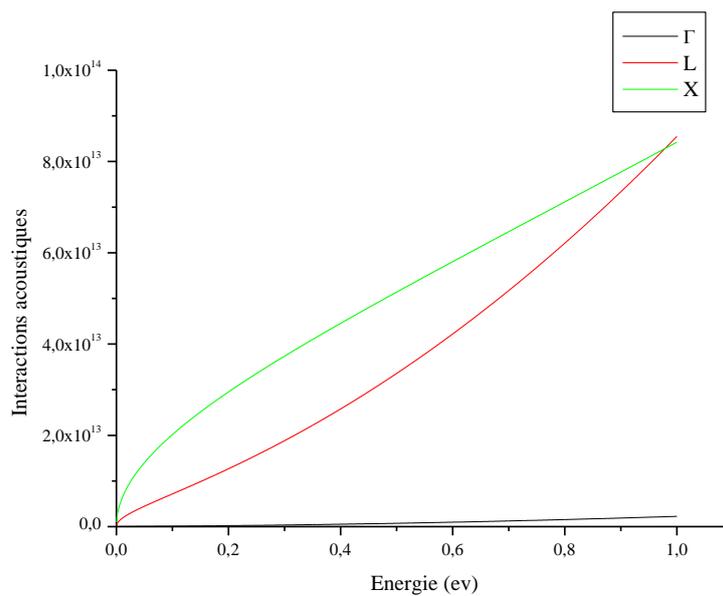


Figure (IV.2) : interactions acoustiques

Etant provoquées par les effets du dopage de type N, ces interactions sont les plus dominantes des interactions élastiques. Elles se produisent lorsque les ions à travers le cristal vibrent dans la même direction que les atomes voisins.

Ce type d'interactions est très faible dans la vallée  $\Gamma$ . A faible énergie, la probabilité augmente peu dans la vallée L par rapport à la vallée X, alors qu'à grande énergie elle augmente considérablement avec l'énergie, elle est équivalente à celle de la vallée X.

Ce type d'interaction devient prédominant dans les températures et les champs élevés, car l'énergie d'électron devient plus grande que celle d'un phonon optique. Donc, l'électron doit transmettre au réseau une partie de l'énergie que lui a fournie le champ électrique.

#### **IV.3.1.2-Interactions inélastiques :**

Ce type de diffusions est dû généralement aux transitions inter-vallées qui permettent de provoquer le transfert des porteurs de la bande centrale aux bandes supérieures, elles sont accompagnées d'absorption ou d'émission d'un phonon dont la valeur dépend de l'écart d'énergie entre la vallée de départ et la vallée d'arrivée.

##### **IV.3.1.2.1-Interactions inter-vallées d'absorptions et d'émissions:**

Les différentes transitions possibles entre les trois vallées  $\Gamma$ , L et X (absorptions et émissions) sont représentées dans les figures (IV.3) et (IV.4) :

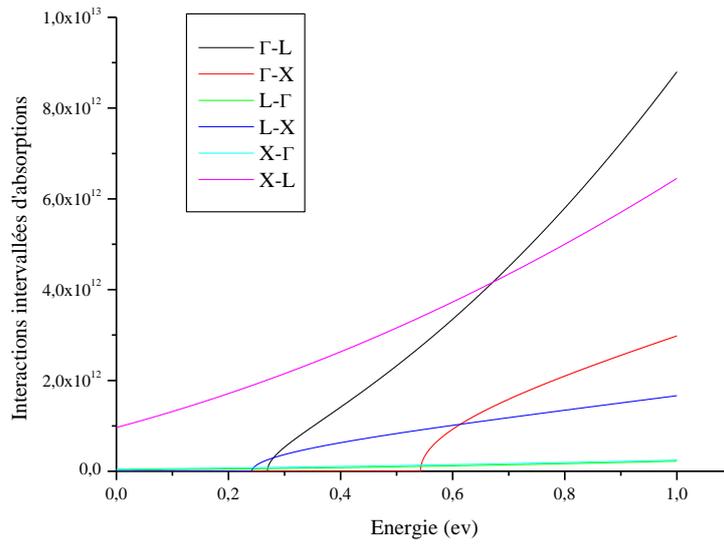


Figure (IV.3) : Interactions inter-vallées d'absorptions

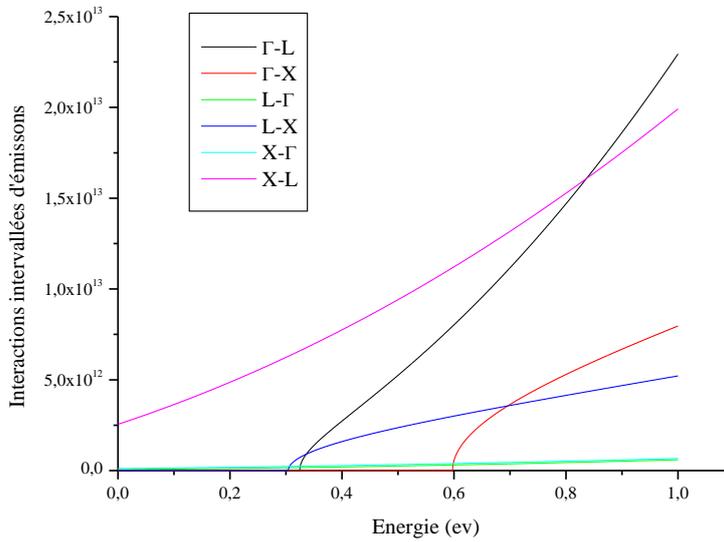


Figure (IV.4) : Interactions inter-vallées d'émissions

Ce type d'interactions ne peut se produire que lorsque l'énergie des porteurs est supérieure à un certain seuil, c'est-à-dire à la différence d'énergies entre les différentes bandes, donc à faible champ ces interactions sont peu probables.

En effet, pour des petites énergies ( $E < 0.25\text{eV}$ ), c'est l'interaction X-L qui est la plus dominante car les électrons n'ont pas besoin d'énergie pour descendre à des niveaux inférieurs. Quand l'énergie augmente ( $E > 0.25\text{eV}$ ), c'est l'entrée en jeu des interactions L-X et  $\Gamma$ -L respectivement car les électrons ont acquis une énergie supérieure à l'énergie de séparation  $\Delta E_{LX}$  et  $\Delta E_{\Gamma L}$ , et que  $\Delta E_{LX}$  est très proche de  $\Delta E_{\Gamma L}$  et nettement moins qu'à  $\Delta E_{\Gamma X}$ , mais l'interaction  $\Gamma$ -L augmente plus rapidement que l'interaction L-X car la vallée L est presque vide donc, elle reçoit les électrons de la vallée centrale plus qu'elle émet vers la vallée X. Les électrons vont ainsi pouvoir émigrer dans la vallée L, qui est la vallée la plus proche par rapport à la vallée  $\Gamma$ .

Quand l'énergie augmente un peu plus ( $E > 0.55\text{eV}$ ), l'interaction  $\Gamma$ -X qui était nulle commence à augmenter rapidement.

On remarque alors que :

- Les interactions  $\Gamma$ -L sont les plus importantes dans notre cas (absorptions comme émissions)
- Les probabilités d'émissions sont plus grandes que celles d'absorptions.

#### IV.3.1.2.2-Interactions intra-vallées :

Les différentes transitions dans la vallée L et la vallée X d'absorptions et d'émissions en fonction de l'énergie sont représentées dans la figure (IV.5) :

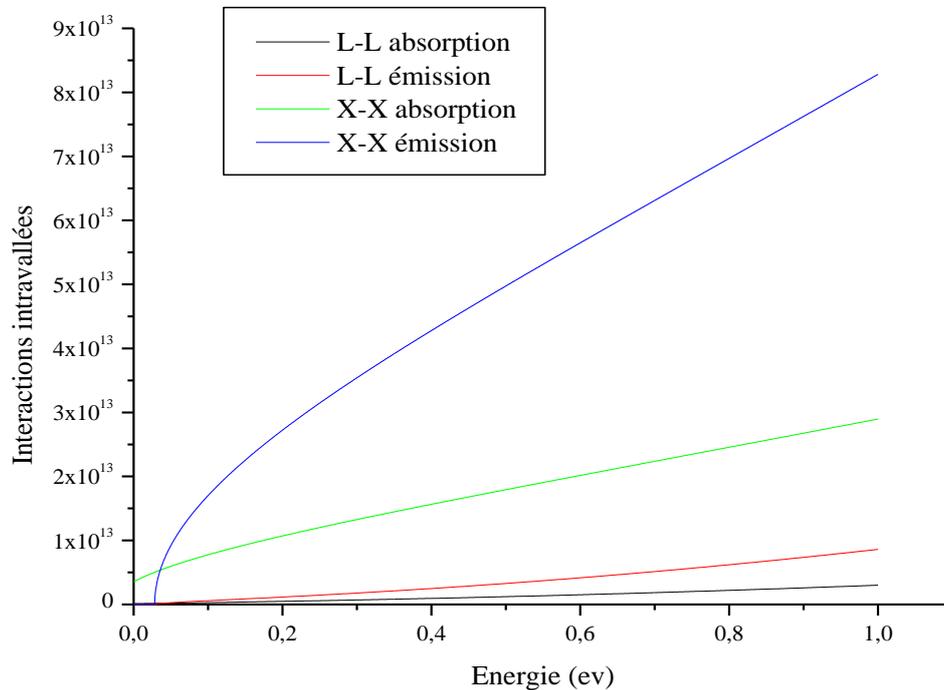


Figure (IV.5) : Interactions intra-vallées

Comme pour le cas des interactions précédentes, les interactions intra-vallées augmentent proportionnellement avec l'énergie des porteurs et deviennent plus importantes dans la vallée X car la masse effective des électrons dans cette vallée est très élevée. On remarque aussi que les probabilités d'émissions sont plus grandes que celles d'absorptions.

#### IV.3.1.2.3-Interactions optiques polaires :

L'évolution des interactions optiques polaires dans les trois vallées dans le cas d'émissions et d'absorptions sont représentées par la figure (IV.6) :

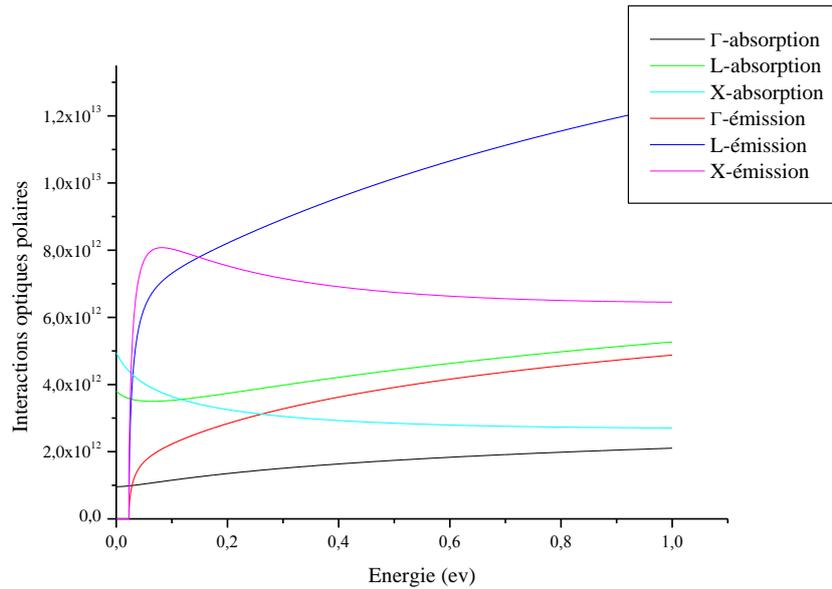


Figure (IV.6) : Interactions optiques polaires

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 27 meV, et comme pour les autres types de diffusion, les probabilités d'interactions d'émission sont plus importantes que celles d'absorption, et leur valeur augmente considérablement quand l'énergie des électrons augmente. 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.

Notre premier bilan sur les interactions est donc : pour les électrons à faible énergie, les interactions optiques polaires (émissions et absorptions) et les interactions acoustiques sont les plus dominantes et influent sur le comportement des porteurs. Mais dès que les électrons ont acquis une énergie supérieure à l'énergie de séparation  $\Delta E_{LX}$  et  $\Delta E_{\Gamma L}$ , le transfert vers les autres vallées est possible. On conclue que les interactions d'émissions sont plus importantes devant celles d'absorptions.

### **IV.3.1.3-Influence de la température sur les interactions :**

Les probabilités d'interactions des électrons varient généralement avec la température dans les semi-conducteurs à cause des vibrations des phonons et de l'énergie thermique. Dans le cas des interactions inter-vallées d'absorption l'influence de la température est plus importante que dans le cas d'émission car, dans le cas d'absorption et quand la température augmente, le gap devient plus petit et les électrons peuvent être transférés dans les vallées supérieures, mais le cas d'émission est indépendant de la température car à n'importe quelle température, l'électron peut revenir aux vallées plus basses.

Dans le cas des interactions optiques polaires, la probabilité d'interactions augmente avec la température à cause des vibrations des phonons qui deviennent importantes.

L'effet de la température est plus important dans le cas des interactions inter-vallées d'absorption que dans le cas interactions optiques polaires.

### **IV.3.2-Caractéristiques du transport dans les différents régimes:**

#### **IV.3.2.1-Caractéristiques du transport en régime stationnaire :**

Après avoir calculé le taux des différentes interactions que subissent les porteurs durant leur parcours dans le semi-conducteur, on présente 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 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.

**IV.3.2.1.1-Caractéristique Vitesse-champ électrique :**

L'évolution de la vitesse en fonction du champ électrique pour une température  $T = 300\text{ K}$  est tracée sur la figure (IV.7) :

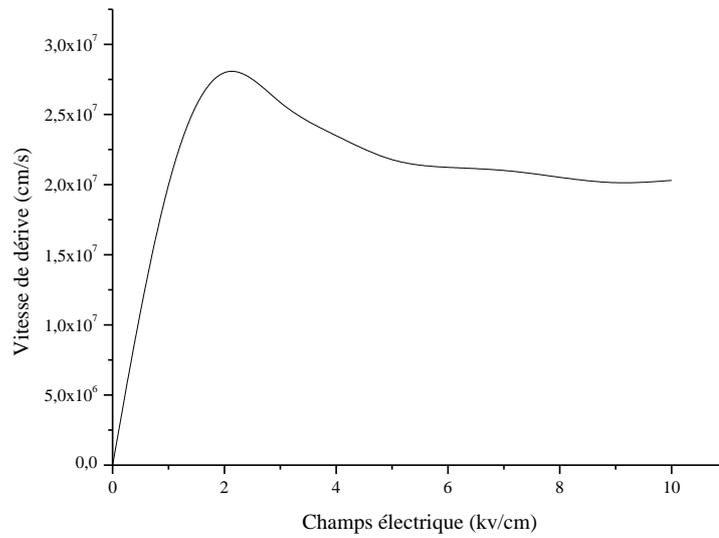


Figure (IV.7) : Vitesse de dérive des électrons en fonction du champ électrique

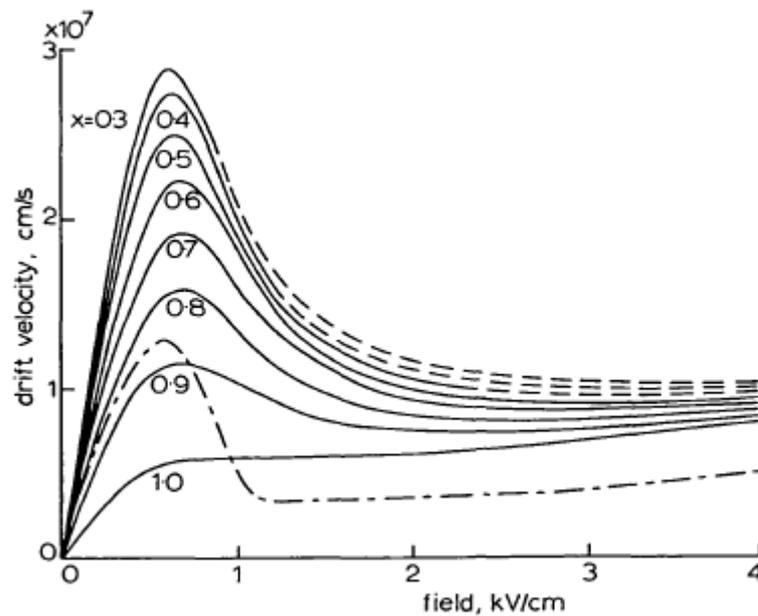


Figure (IV.8) : Comparaison de nos résultats avec ceux de la littérature [46]

On remarque que la courbe donnant la vitesse de dérive en fonction du champ électrique à la température ambiante est divisée sur quatre domaines :

- Le premier domaine ( $E < 1.25$  KV/cm), les électrons se trouvent dans la vallée centrale qui est définie par sa très faible masse effective donc forte mobilité, les électrons ont une énergie inférieure à  $\hbar\omega_0$  alors, les interactions se font avec les phonons acoustiques qui n'influent pas sur la vitesse des électrons, donc la vitesse augmente rapidement.
- Le deuxième domaine ( $1.25 < E < 2$  KV/cm), la vitesse continue d'augmenter mais moins rapidement par rapport au premier domaine jusqu'à atteindre son maximum ( $V = 2.8 \cdot 10^7$  cm/s). Dans cette partie, l'énergie des électrons est supérieure à  $\hbar\omega_0$  donc, les interactions se font avec les phonons optiques.
- Le troisième domaine ( $2 < E < 6$  KV/cm), les électrons ont gagné une énergie qui devient supérieure à  $\Delta E_{TL}$  et commencent à diffuser vers la vallée L de la bande de conduction, or, dans cette vallée, la masse effective est élevée donc, la vitesse diminue considérablement dans cette partie.
- Le quatrième domaine ( $E > 6$  KV/cm), la vallée X commence à se remplir petit à petit et la vitesse se stagne et reste constante. Le champ qui correspond au maximum de vitesse de dérive est appelé champ critique, dans notre cas il est de l'ordre de 2 kv/cm.

Les mécanismes d'interactions que nous les avons vu, ainsi que l'augmentation de la masse effective des électrons dans les vallées latérales nous montre que la courbe représentant les variations de la vitesse de dérive en fonction du champ électrique n'est pas linéaire et présente une partie de résistance différentielle négative, conduisant à des applications spécifiques (effet Gunn). Cette courbe montre que si on conserve la définition habituelle de la mobilité comme étant le rapport entre la vitesse électronique et le champ électrique appliqué :

$$V = \mu E$$

Donc on conclue que la mobilité n'est pas constante et varie fortement avec l'énergie des électrons.

#### IV.3.2.1.2-Influence de la température sur la caractéristique Vitesse-champ électrique :

La courbe montrant l'influence de la température sur la vitesse de dérive dans le régime stationnaire est représentée dans la figure (IV.9):

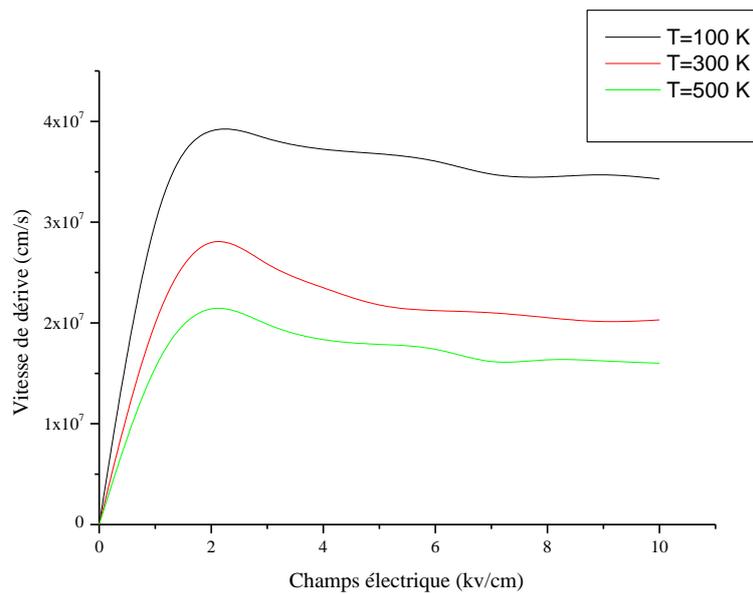


Figure (IV.9) : Vitesse de dérive des électrons en fonction du champ électrique pour différentes températures

On remarque dans cette figure qu'en augmentant la température, la valeur maximale de la vitesse de dérive diminue à cause de l'augmentation générale du taux de diffusion total avec la température.

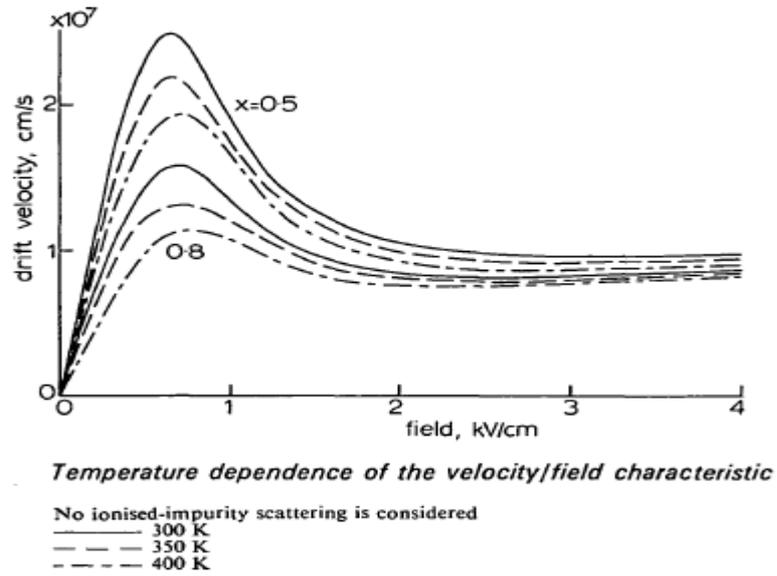


Figure (IV.10) : Comparaison de nos résultats avec ceux de la littérature [46]

**IV.3.2.1.3-Taux d'occupations d'électrons :**

Le transfert inter-vallées des électrons en fonction du champ électrique est illustré dans la figure (IV.11) :

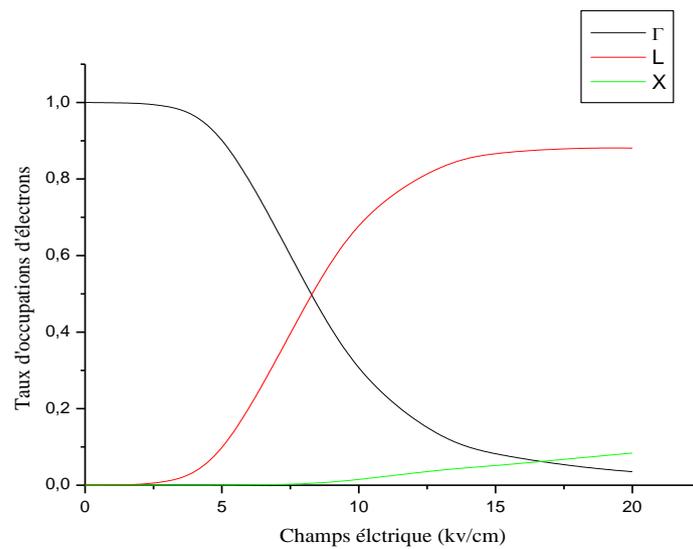


Figure (IV.11) : Taux d'occupation des électrons en fonction du champ électrique

Le taux d'occupation des électrons est représenté sur les trois vallées satellites  $\Gamma$ , L et X avec au début et à faible champs, les électrons sont majoritaires dans la vallée  $\Gamma$  car les électrons n'ont pas une énergie suffisante pour pouvoir quitter cette vallée pour rejoindre les vallées supérieures. Le transfert d'électron vers la vallée L commence seulement à se produire quand l'énergie des électrons a atteint la valeur de seuil, c'est-à-dire l'énergie de séparation  $\Delta E_{\Gamma L}$ , alors que le transfert vers la vallée X reste très faible car  $\Delta E_{\Gamma X}$  est grande donc il faut fournir aux électrons une énergie importante pour effectuer le transfert.

#### **IV.3.2.2-Caractéristiques du transport en régime non stationnaire :**

Le régime transitoire est étudié pour voir le comportement des électrons quand ils sont brusquement soumis à l'effet d'un champ électrique constant, par rapport au temps :

##### **IV.3.2.2.1-Vitesse en fonction du temps :**

Lorsqu'un matériau est libre et n'est soumis à aucun champ électrique, les porteurs sont en équilibre thermique, c'est-à-dire que la vitesse moyenne est nulle. Alors que lorsque les porteurs sont soumis à des champs électriques élevés, la vitesse moyenne est non nulle et on l'appelle vitesse de dérive, d'où, au tout premier instant, peu d'interactions ont lieu alors que l'accélération dans le champ est effective, il apparaît alors le phénomène de survitesse. Il en résulte que la vitesse est plus importante dans le régime transitoire par rapport au régime stationnaire.

La courbe qui illustre la vitesse de dérive en fonction du temps à  $T=300^{\circ}\text{K}$  pour un champ électrique constant  $E=10\text{ kv/cm}$  est représentée sur la figure (IV.12) :

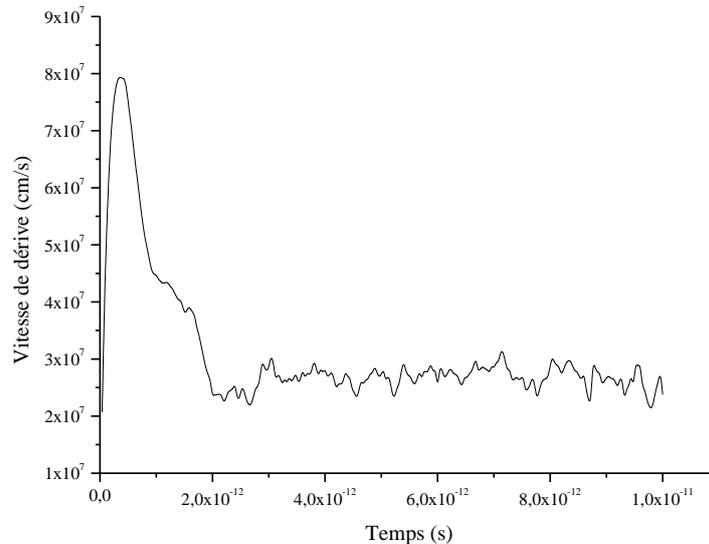


Figure (IV.12) : Vitesse de dérive des électrons en fonction du temps

On remarque que la courbe donnant la vitesse de dérive en fonction du temps pour un champ électrique constant à la température ambiante est divisée sur quatre intervalles :

- Dans le premier intervalle ( $t < 0.125\text{ ps}$ ), la vitesse augmente très rapidement et varie proportionnellement avec le temps.
- Dans le deuxième intervalle ( $0.125 < t < 0.35\text{ ps}$ ), la vitesse augmente mais moins rapidement par rapport au premier domaine jusqu'à atteindre son maximum ( $V = 8 \cdot 10^8\text{ cm/s}$ ). Cette valeur est très supérieure à la valeur stationnaire correspondant au champ  $E_0$  : c'est le phénomène de survitesse qui apparaît.
- Dans le troisième intervalle ( $0.35 < t < 2\text{ ps}$ ), la vitesse décroît brusquement pour atteindre la valeur qui correspond au régime stationnaire.

- Dans le quatrième et dernier intervalle ( $t > 2$  ps), la vitesse reste constante est égale à la vitesse correspondant au régime stationnaire.

Dans cette étude, nous avons vu que les électrons effectuent une partie de leurs parcours en régime de survitesse, car la vallée centrale est caractérisée par une faible masse effective et par des interactions qui sont élastiques. Alors, dès que les électrons acquièrent de l'énergie sous l'effet d'un champ électrique, ils sont propulsés en masse vers le haut, alors il devient possible de les transférer vers les vallées hautes. Mais le nombre des électrons transférés est limité par la valeur de la probabilité de transfert, il reste donc dans la vallée une partie importante d'électrons légers rapidement portés à des vitesses de plus en plus élevées surtout dans les forts champs électriques.

#### **IV.3.2.2.2-Vitesse en fonction du temps pour différent champs électriques :**

L'étude est répétée pour plusieurs champs électriques pour voir l'influence de ce dernier sur la vitesse de dérive et ces conséquences jusqu'à l'existence de la survitesse :

La figure (IV.13) illustre la variation de la vitesse de dérive par rapport au temps pour différents champs électriques à  $T=300K$  :

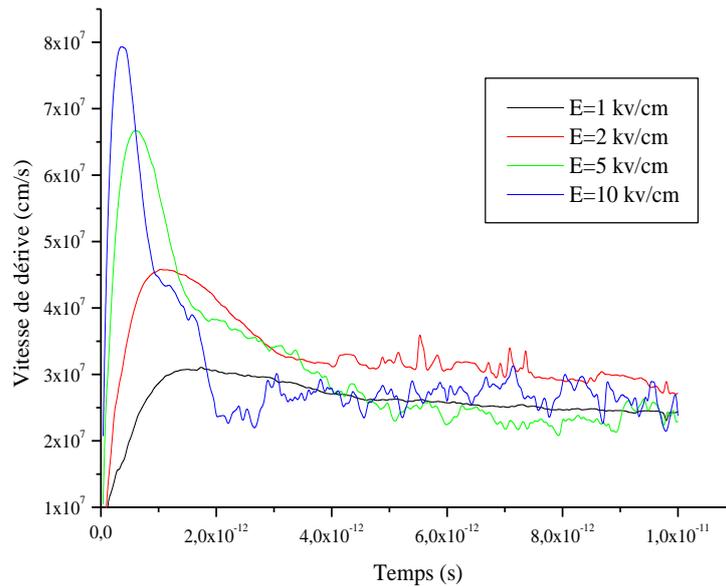


Figure (IV.13) : Vitesse de dérive des électrons en fonction du temps pour différents champs électriques

On conclue après cette étude qu'en augmentant le champ électrique, les pics de survitesse deviennent de plus en plus importants et qu'ils se déplacent vers les temps faibles et que le régime stationnaire est atteint plus vite par rapport aux champs électriques faibles. Dans notre cas, les pics de survitesse apparaissent à partir de 2 kV/cm.

#### IV.3.2.2.3-Vitesse en fonction du temps pour différent températures :

L'étude est aussi répétée pour plusieurs températures car il est intéressant d'étudier le comportement des électrons sous l'effet de cette dernière et de déterminer son influence sur la vitesse de dérive :

La figure (IV.14) représente les courbes relatives aux vitesses de dérive à différentes valeurs de la température pour un champ électrique  $E = 10$  Kv/cm :

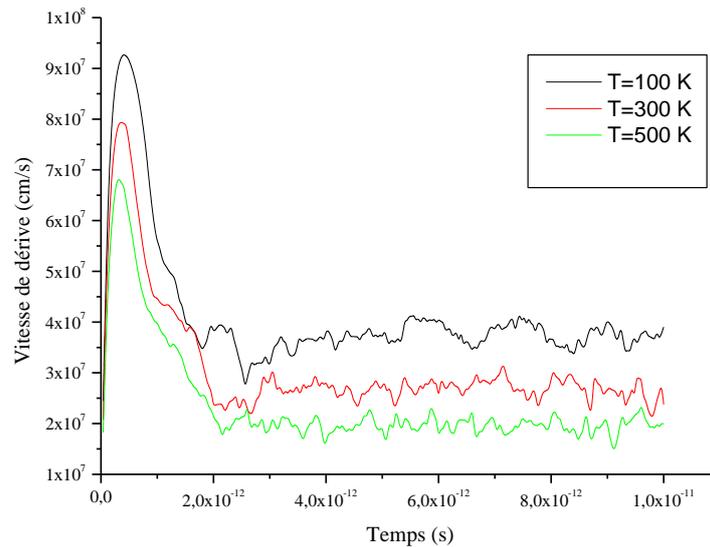


Figure (IV.14) : Vitesse de dérive des électrons en fonction du temps pour différentes températures

Lorsque la température augmente et pour un champ électrique constant, la vitesse de dérive critique diminue en gardant la même durée des pics de survitesse pour l'ensemble des températures. Cette décroissance est due à l'augmentation des vibrations du réseau par agitation thermique favorisant ainsi l'effet des interactions en particulier les interactions optiques polaires qui deviennent dominantes.

### Conclusion :

Les résultats obtenus dans cette simulation nous donnent seulement l'allure de la courbe représentés, il faut toujours les comparés avec des résultats existant dans la littérature pour voir leurs similitude. Mais parfois ils ne sont pas toujours exacts, car ils reposent sur des lois de probabilité et restent purement théoriques. Alors on doit toujours trouver le problème qui se pose et de refaire la simulation jusqu'à avoir le bon résultat.

## Conclusion Générale

Dans le but d'étudier les phénomènes de transport dans les semi-conducteurs ternaires et en particulier dans le matériau  $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ , nous avons adopté un modèle numérique basé sur la méthode Monte Carlo. Ce modèle consiste à simuler le comportement des électrons dans les semi-conducteurs qui se fait en deux étapes successives ; le libre parcours moyen et les collisions avec le réseau, et de tirer par la suite les fonctions de distribution des électrons la bande de conduction qui sont similaires à ceux trouvés par la résolution de l'équation de Boltzmann.

Pour faciliter les calculs et de diminuer les temps des simulations, certaines approximations ont été introduites comme pour la structure de bande, le modèle utilisé considère trois vallées  $\Gamma$ , L, et X isotopes et non paraboliques dans la bande de conduction. Les résultats obtenus sont classés en deux grandes parties :

Dans la première partie, nous avons présentés les variations des différents types d'interactions utilisées dans notre simulation en fonction de l'énergie ainsi que l'influence de la température sur ces interactions, on a conclue que :

- ✓ Les interactions acoustiques sont négligeables dans la vallée  $\Gamma$ , et sont plus Importantes dans les vallées X et L.
- ✓ Les interactions optiques polaires sont Importantes dans toutes les vallées.
- ✓ Les interactions inter-vallées sont les plus importantes parmi toutes les interactions considérées. Ils sont possibles dès que les électrons ont acquis une énergie supérieure à l'énergie de séparation  $\Delta E_{\Gamma L}, \Delta E_{\Gamma X}$  et  $\Delta E_{LX}$  c'est-à-dire que quand le transfert vers les autres vallées est possible.
- ✓ Les interactions inélastiques d'émissions (inter-vallées, intra-vallées et Optiques polaires) sont plus importantes que celles d'absorptions.

Dans la seconde partie, nous avons présenté les caractéristiques du transport dans deux régimes différents. Dans le régime stationnaire, nous avons tracé l'évolution de la vitesse de dérive en fonction du champ électrique pour différentes températures, on a tracé aussi le taux d'occupation des électrons en fonction du champ électrique. Alors que dans le régime transitoire, nous avons présenté l'évolution de la vitesse en fonction du temps pour différentes températures et différents champs électriques.

Les résultats obtenus par cette simulation dépendent fortement des propriétés du semi-conducteur surtout de la structure de bande ainsi que les paramètres constituant cet alliage. Pour certains paramètres, il ya aussi plusieurs méthodes de leurs calcul et chaque calcul aboutit à des résultats qui sont dès fois différents des résultats obtenus par d'autre méthode. Alors dans ce cas, le choix de ces paramètres s'avère très difficile.

Donc ces résultats ne sont pas toujours exacts et restent purement théoriques car ils reposent sur des lois de probabilités, alors il faut toujours les comparés avec des résultats existant dans la littérature.

Les recherches sur notre matériau reste très vaste et son domaine d'application n'est pas encore fixe et peut être utilisés dans plusieurs domaines comme par exemple le domaine de l'optoélectronique. En attendant des travaux expérimentaux sur cet alliage, nous espérons dans le futur faire des applications par la méthode Monte Carlo pour l'étude des caractéristiques et les propriétés électroniques dans les dispositifs microélectroniques tel que les transistors.

## Références bibliographiques

[1] : <http://www.polytech-lille.fr/cours-transistor-effet-champ/hemt/Hemtc1b.htm>

[2] : R.CASTAGNE, J.P.DUCHEMIN, M.GLOANEC, CH.RUMELHARD, « Circuits intégrés en GaAs », Paris, 1989.

[3] : P.KIREEV, « Physique des semi-conducteurs », Edition Mir, Moscou, 1975.

[4] : <http://www.techniques-ingenieur.fr/base-documentaire/archives-th12/archives-electronique-tiaea/materiaux-semi-conducteurs-a-grand-gap-iii-v-a-base-de-gan-e1995/#>

[5] : OTFRIED MADELUNG, « Semiconductor data handbook » 3ème édition.

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

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

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

[9] : <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/index.html>.

[10] : A.PHILIPPON-MARTIN, « Etude d'une nouvelle filière de composants sur technologie GaN : Conception et réalisation d'amplificateurs distribués de puissance large bande à cellule cascade en montage flip-chip et technologie MMIC », Docteur en Télécommunication, Université de Limoges, 2007.

[11] : O.BONNAUD, « physique des Solides, des Semi conducteurs et Dispositifs », juin 2003.

[12] : K.P.O'DONNELL, X.CHEN, « Temperature dependence of semiconductor band gaps», Appl. Phys. Lett. 58 (25), 24 June 1991.

[13] : R.Quay, « Analysis and simulation of high electron mobility transistors », Université de Vienne, 1969.

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

[15] : 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.

[16] : V.PALANKOSVSKI, « Simulation of heterojunction bipolar transistors », Université de Vienne, 1969.

[17] : <http://www.semiconductors.co.uk/>

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

[19] : : D.A.ANDERSON, N.APSLEY, P.DAVIES, P.L.GILES, « Compensation in heavily doped n-type InP and GaAs », j.appl.phys vol.58, no.10, pp.3059-3067, October 1985.

[20] : JASON HARRIS AND DRAGIGA VASILESKA, « Monte Carlo simulation of GaAs devices using high generality object-oriented code and encapsulated scattering tables », department of electrical engineering, Arizona state university, Tempe, AZ85257-5706, USA.

[21] : O.MANASREH « Semiconductor heterojunctions and nanostructure », McGraw-Hill Companies, 2005.

[22] : 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.

[23] : P.LUGLI, « Electron- Electron effects in semiconductors », thesis dissertation, Colorado state university 1985.

[24] : J.SAINT-MARTINY, «Etude par simulation Monte Carlo d'architectures de MOSFET ultracourts a grille multiple sur soi», thèse de Doctorat, UNIVERSITÉ DE PARIS-SUD, 2005.

[25] : N. MASSOUM, «Simulation des phénomènes de transport dans les matériaux III-V ternaires par la méthode Monte Carlo : Application à GaInP», Thèse de Magister, université de Tlemcen, 2010.

[26] : Y.BELHADJI, «Simulation des phénomènes de transport électronique dans les dispositifs microélectroniques par la méthode de Monte Carlo. Application au matériau SiC », thèse de Magister, université de Tlemcen 2009.

[27] : M.FADEL, « contribution à l'étude du bruit et du transport en régime d'électrons chauds dans l'InP », thèse de Docteur de 3<sup>ème</sup> cycle électronique, université des sciences et techniques du Languedoc 1983.

[28] : C.MOGLESTUE, «Monte Carlo simulation semiconductor devices», CHAPMAN & Hall, New York, 1993.

[29] : M.ABOU KHALIL, «Modélisation du transport des porteurs de charge dans les dispositifs actifs à hétéro-structures et à puits quantiques par la méthode Monte carlo», Ph.D université de Montréal, 15 juillet 1996.

[30] : S.S.LI, « semiconductor physical electronics», Springer 2006.

[31] : A.KASZYNSKY, «Etude des phénomènes de transport dan les matériaux semi-conducteurs par la méthode Monte Carlo : Application a l'arséniure de gallium de type N», thèse de docteur ingénieur, université des sciences et techniques de Lille, juillet 1979.

[32] : H.SHICHIGO, «Theoretical studies of high field transport in III-V semiconductors », thesis dissertation, electrical engineering department, university of Illinois at Urbana-Champaign, 1980.

[33] : A.K. HAMDOUNE, B. BOUAZZA, A. GUEN-BOUAZZA, A.E. LALLAM, N.E. CHABANE-SARI, « Développement de la méthode de Monte Carlo pour le calcul des interactions et du transport électrique dans les semi conducteurs ternaires », Afrique science, 03-02-2007, 186-200.

[34] : C.JACOBONI and L.REGGIANI, «THE Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials», Review of modern physics, vol.55, No.3, pp.645, July 1983.

[35] : C.JACOBONI and P.LUGLI, «THE Monte Carlo method for semiconductors device simulation», Computational microelectronics, Selberherr, SpringerVerlag Wien, New York, 1989.

[36] : L.SHIFREN, «Ensemble Monte Carlo study ultrafast phenomena due to hot photo-excited carriers in bulk GaAs», thesis for the degree master of science, Arizona state university, 1998.

[37] : B. BOUAZZA, « Etude du transport électronique dans le substrat InAs de type N par la simulation de Monte Carlo», Afrique science, 01(1), 55-67, 2005.

[38] : K.MEYNARD, « Polymérisation radio-induite: calcul de dose et modélisation dans le cas d'irradiations prolongées de sources non-scellées», Thèse de Doctorat, université de Toulouse, 2009.

[39] : B.LUTCHI and P.WYDER, Phys. Acta, Vol 33, pp 667, 1960.

[40] : T.KUROSAWA, « Monte Carlo calculation of hot electron problems », Journal of the physical society of Japan, Vol 21, pp 424-426, 1966.

[41] : W.FAWCETT, A.D.BOARDMAN, and S.SWAIN, « Monte Carlo determination of electron transport properties of Gallium Arsenide », Journal of the physical solides, Vol 31, pp 1963,1970.

[42] : P.S.PRICE, « Semi-conductors and semi-metals » Vol 14, PP 249, 1972.

[43] : R.W.HOCKNEY and EASTWOOD, « Computer simulation using particles », Adam Higler, Bristol and New York, 1989.

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

[45] : H.D.REES, « Journal of physics and Chemistry of solids », Vol 30, pp 643, 1969.

[46] : T.IKOMA, K.SAKAI, Y.ADACHI, H.YANAI, « Velocity/field characteristic of  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$  calculated by Monte Carlo method », Electronics Letters, Vol. 10, No.19, pp 402, 1974.

## Résumé :

Le développement qu'a connu le domaine de la micro-électronique est dû en grande partie aux évolutions techniques et en particulier à la miniaturisation des dispositifs semi-conducteurs, mais aussi à l'utilisation de nouveaux matériaux tel que les matériaux composés III-V pour les applications dans l'optoélectronique et l'électronique de puissance. Dans le but d'étudier les caractérisations du phénomène du transport électronique dans les matériaux composés ternaires et plus précisément dans le matériau  $Ga_xIn_{1-x}Sb$ , on a utilisé la simulation numérique basée sur les méthodes de Monte Carlo. Ce modèle consiste à simuler le comportement des électrons dans les semi-conducteurs qui se fait en deux étapes successives ; le libre parcours moyen et les collisions avec le réseau, et de tirer par la suite les fonctions de distribution des électrons de la bande de conduction qui sont similaires à ceux trouvés par la résolution de l'équation de Boltzmann. Pour cela, on a employé un modèle qui tient compte que de trois vallées isotropes et non paraboliques de la bande de conduction  $\Gamma$ , L, et X. Les résultats obtenus sont satisfaisants après leurs comparaisons avec d'autres résultats expérimentaux existant dans la littérature. Ils nous renseignent sur la dynamique électronique ainsi que le comportement dans les hauts champs électriques et hautes températures de ce matériau.

## Mots clés :

Semi-conducteurs, Matériaux  $Ga_xIn_{1-x}Sb$ , Structure de bande, Transport électronique, Méthode Monte Carlo.

## Abstract:

The development which has known the field of the micro-electronics is due mainly to the technical evolutions and in particular to the miniaturization of the semiconductor devices, but also to the use of new materials such as materials made up III-V for the applications in optoelectronics and electronics of power. In order to study the characterization of the electron transport phenomena in the ternary compounds materials and more specifically in the  $Ga_xIn_{1-x}Sb$  material, we used numerical simulations based on Monte Carlo methods. This model consists in simulating the electrons behavior in the semiconductors which is done in two successive stages; the mean free path and collisions with the network, and take then the distribution functions of electrons from the conduction band that is similar to those found by solving the Boltzmann equation. For that, we used a model which takes account that of three isotropic and no parabolic valleys of the band of conduction G, L, and X. The obtained results are satisfactory after their comparison with other experimental results existing in the literature. They inform us about electronic dynamics and the behavior in high electric fields and high temperatures of this material.

## Keywords:

Semiconductors,  $Ga_xIn_{1-x}Sb$  materials, Band structure, Electronic transport, Monte Carlo method.

## المخلص :

التنمية التي يعرفها مجال الهايكرو-إلكترونيك ترجع إلى حد كبير إلى التطورات التقنية وخاصة التصغير من أجهزة الأشباه النواقل، ولكن أيضا لاستخدام مواد جديدة مثل المواد المركبة III-V للتطبيقات في مجال الإلكترونيك البصرية و إلكترونيك الطاقة. من أجل دراسة توصيف ظاهرة النقل الإلكتروني في المواد المركبة الثلاثية وأكثر تحديدا في المواد  $Ga_xIn_{1-x}Sb$ ، استخدمنا المحاكاة العددية القائمة على أساليب مونت كارلو. يعتمد هذا النموذج على محاكاة سلوك الإلكترونات في الأشباه النواقل الذي يتم على مرحلتين، المسار الحر والتصادم مع الشبكة، وبعد ذلك يأخذ وظائف توزيع الإلكترونات من حزام التوصيل التي تشبه تلك التي عثر عليها عن طريق حل معادلة بولتزمان. لهذا، استخدمنا نموذجا يأخذ في الاعتبار إلا ثلاثة أودية غير مكافئة من حزام التوصيل  $\Gamma$ ، L، X. تعتبر النتائج المحصل عليها مرضية بعد مقارنتها مع النتائج التجريبية الأخرى، ففي تخبرنا عن ديناميكي الإلكترون والسلوك في الحقول الكهربائية العالية ودرجات الحرارة المرتفعة لهذه المواد.

## كلمات المفتاح :

أشباه الموصلات، أساليب مونت كارلو، النقل الإلكتروني، بنية الأحزمة .