

REMERCIEMENT

Je Remercie, En Premier Lieu, Mon Dieu - Allah - Qui

A

*Fait Que Nous
Soyons Des Musulmans Et Qui A Illuminé Notre
Chemin De La
Lueur Du Savoir Et De La Science*

Nous souhaitons ici remercier.

*Nous tenons d'abord à remercier très chaleureusement
Mme. BACHIR NADIA, qui nous a permis de bénéficier de son
encadrement.*

*Mes cordiales remerciements vont à remercier Monsieur
M.A.MERED, professeur à la faculté des sciences et technologie
de l'université de tlemcen pour m'avoir fait l'honneur d'être le
président de jury. Mes vifs remerciements aux membres de jury
Monsieur le professeur R.BENMOUNA, et Monsieur le docteur
A.CHIALI pour avoir accepté de juger la qualité de ce travail.*

*Mes grands remerciements vont, à toute ma famille et
mes amis qui m'ont soutenu jusqu'à la dernière minute.*

*Finalement, je remercie toute personne ayant participé
de près ou de loin à la réalisation de ce travail.*

Dédicace

A la mon père, A ma mère,

A ma petite famille, ma Femme et mes petits anges

A mes sœurs et frères

A toute ma famille,

A mes amis,

A tous mes collègues

A mes camarades de la promotion 2017-2018.

Je vous dédie mon travail en témoignage de votre affection et vos encouragements.

H. Benabdelmale

Sommaire

Introduction Générale

Chapitre 1: Généralités sur les nitrures

| | |
|---|----|
| <i>1.1 Introduction</i> | 8 |
| <i>1.2 Propriétés structurales</i> : | 8 |
| 1.2.1 Structure cristalline et zone de Brillouin: | 8 |
| 1.2.1.1 Présentation des deux structures des nitrures : | 8 |
| 1.2.1.2 Zone de Brillouin : | 9 |
| 1.2.2 Paramètres de maille des binaires InN et AlN et du ternaire InAlN : | 10 |
| 1.2.2.1 Paramètres de maille des binaires InN et AlN : | 10 |
| 1.2.2.2 Paramètre de maille pour l'alliage InAlN : | 11 |
| 1.2.3 Coefficients élastiques : | 11 |
| 1.2.4 Coefficients de dilatation thermique : | 12 |
| 1.2.5 Contraintes dans les couches de nitrure : | 13 |
| <i>1.3 Propriétés chimiques des deux binaires</i> : | 14 |
| 1.3.1 Propriétés chimiques du nitrure d'aluminium | 14 |
| 1.3.2 Propriétés chimiques du nitrure d'Indium | 14 |
| <i>1.4 Propriétés électriques des deux binaires</i> : | 15 |
| 1.4.1 Propriétés électriques du nitrure d'aluminium : | 15 |
| 1.4.2 Propriétés électriques du nitrure d'indium : | 15 |
| <i>1.5 Effet de la température sur la mobilité des porteurs libres</i> | 15 |
| <i>1.6 Propriétés piézoélectriques des nitrures</i> : | 16 |

Chapitre 2 : Propriétés optoélectroniques des nitrures

| | |
|---|----|
| <i>2.1 Introduction</i> | 19 |
| <i>2.2 Situation des trois nitrures dans la famille des semi-conducteurs</i> | 19 |
| <i>2.3 Energie de l'alliage InAlN</i> | 20 |
| <i>2.4 Structure des bandes d'énergie</i> | 21 |
| 2.4.1 Allure générale des bandes d'énergie | 21 |
| 2.4.2 Forme de la bande de conduction au voisinage des minima : | 21 |
| <i>2.5 Concentration des électrons libres dans la bande de conduction, et niveaux d'impuretés (pièges) [3]:</i> | 22 |
| <i>2.6 Semi-conducteurs à l'équilibre : statistique d'occupation des niveaux profonds, compensation</i> : | 23 |

| | |
|---|----|
| <i>2.7 Effet de la température sur la bande interdite</i> | 24 |
| <i>2.8 Phonons dans les nitrures</i> | 24 |
| <i>2.9 Emission de lumière</i> | 25 |
| <i>2.10 Propriétés optoélectroniques</i> | 26 |
| 2.10.1 Structure de bande, propriétés optiques et effets de contrainte..... | 26 |
| AlN..... | 26 |
| InN | 27 |
| <i>2.11 Croissance d'InAlN</i> | 28 |

Chapitre 3: Etude théorique du transport électrique

| | |
|--|----|
| <i>3.1 Introduction</i> | 32 |
| <i>3.2 Equation de Boltzmann pour un gaz d'électrons</i> | 32 |
| 3.2.1 Approximation semi-classique..... | 32 |
| 3.2.2 Formulation de l'équation de Boltzmann | 32 |
| 3.2.3 Equation de Boltzmann dans l'approximation du temps de relaxation | 34 |
| <i>3.3 Probabilités d'interactions</i> | 34 |
| <i>3.4 Les interactions subies par les électrons durant leur mouvement :</i> | 35 |
| 3.4.1 Vibrations réticulaires dans les composés III-V | 35 |
| 3.4.2 Description générale des interactions électrons-phonons | 35 |
| 3.4.3 Interactions élastiques | 37 |
| 3.4.3.1 Interactions acoustiques | 37 |
| 3.4.3.2 Interactions piézoélectriques..... | 37 |
| 3.4.4 Interactions inélastiques | 37 |
| 3.4.4.1 Interactions optiques polaires | 37 |
| 3.4.4.2 Interactions optiques intervalées équivalentes et non équivalentes | 37 |
| 3.4.4.3 Interactions optiques non polaires | 38 |
| 3.4.5 Interactions des électrons avec les centres coulombiens | 38 |
| <i>3.5 Phénomène d'ionisation par impact</i> | 39 |
| <i>3.6 Interactions prépondérantes dans les alliages ternaires</i> | 39 |
| <i>3.7 Influence de la position de l'électron sur la nature de l'interaction</i> | 40 |
| <i>3.8 Rendement de la luminescence d'un semi-conducteur :</i> | 41 |
| 3.9 Les recombinaison Auger | 42 |
| <i>3.10 Mobilité électronique</i> | 43 |
| 3.10.1 Temps de relaxation du courant..... | 43 |
| 3.10.2 Calcul de la mobilité | 44 |

| | |
|---|----|
| 3.11 Transport de charges en régime stationnaire : caractéristique vitesse-champ..... | 44 |
| 3.11.1 Vitesse et mobilité différentielles | 44 |

Chapitre 4: Méthode de simulation de Monté Carlo

| | |
|--|----|
| 4.1 Introduction | 46 |
| 4.2 Principe de la méthode..... | 46 |
| 4.3 Approche et mise en œuvre de la méthode | 47 |
| 4.4 Présentation du logiciel :..... | 48 |
| 4.5 Méthode du self scattering..... | 49 |
| 4.6 Temps de vol libre | 50 |
| 4.7 Mouvement des électrons..... | 51 |
| 4.8 Procédure du choix d'interaction | 51 |
| 4.9 Génération des nombres aléatoires..... | 52 |
| 4.10 Génération des nombres aléatoires, avec une loi de probabilité..... | 52 |
| 4.10.1 Méthode directe | 52 |
| 4.10.2 Méthode du rejet | 53 |
| 4.10.3 Méthode combinée | 54 |
| 4.11 Etapes de calcul | 54 |
| 4.11 Description du logiciel | 56 |

Chapitre 5 : Résultats de la simulation Monte Carlo dans InAlN

| | |
|--|----|
| 5.1 Introduction :..... | 59 |
| 5.2 Vitesse et énergie en fonction du champ électrique..... | 59 |
| 5.3 Résultats de la simulation Monte Carlo | 60 |
| 5.3.1 Energie en fonction du champ électrique :..... | 60 |
| 5.3.2 Vitesse en fonction du champ électrique : | 62 |
| 5.3.3 Comparaison entre la vitesse dans InAln et celle des autres alliages AlGaN et InGaN : .. | 63 |
| 5.3.4 Vitesse des électrons en fonction du champ électrique pour différentes températures : .. | 65 |
| 5.4 Conclusion :..... | 68 |
| Conclusion générale..... | 70 |
| Annexe..... | 71 |

Introduction générale :

Au cours des 50 dernières années, la recherche et les avancées technologiques dans les matériaux semi-conducteurs ont considérablement modifié notre mode de vie. Les outils tels que les ordinateurs personnels, les téléphones portables et les diodes électroluminescentes (LEDs) ne sont que quelques exemples de la multitude de dispositifs électroniques utilisés au quotidien. Les LEDs et diode laser à base de nitrures semi-conducteurs sont le résultat d'une percée technologique qui a provoqué une révolution dans l'optoélectronique dès 1994. Les nitrures d'éléments III: InN, GaN, AlN et leurs alliages se sont imposés pour le développement de dispositifs optoélectroniques de très bonne efficacité. La récente réévaluation de la bande interdite d'InN de 1.89 eV à seulement ~0.65 eV a permis d'envisager la production de dispositifs luminescents émettant dans le rouge et le proche infrarouge (IR) et couvrir l'ensemble du spectre visible (de l'infrarouge à l'ultraviolet). Ces matériaux trouvent aussi des applications dans la réalisation de transistors à haute mobilité électronique (HEMTs). Bien évidemment, la production de dispositifs nitrures efficaces dépendra principalement de la qualité structurale des couches disponibles. La croissance des couches minces de nitrures pose encore de très nombreux problèmes. En effet, l'absence de substrats adaptés en paramètres de maille et/ou coefficients de dilatation thermique constitue un problème majeur pour la croissance d'hétérostructures de ces composés et de leurs alliages.[1]

Ces semi-conducteurs sont particulièrement utilisés dans la fabrication des diodes électroluminescentes vertes, bleues et violettes ; ainsi que dans les diodes lasers bleues. Ils trouvent aussi une grande place dans le domaine militaire.

En raison de leurs applications prometteuses dans les domaines de l'optoélectronique et de l'électronique, les semi-conducteurs III-V à base d'azote: les nitrures (AlN, GaN, InN) et leurs alliages (InAlN, InGaN, AlGaIn), font l'objet, depuis les années 1990, d'une activité intense en recherche et développement

Dans notre travail ; nous nous intéressons à l'étude du transport électrique dans le composé ternaires InAlN, en utilisant la méthode de simulation de Monte Carlo.

Nous présentons notre travail selon les étapes suivantes :

Dans le premier chapitre, nous donnons des généralités sur les composés III-N, en particulier les deux nitrures AlN et InN : nous présentons leurs propriétés structurales, chimiques et électriques,

Dans le second chapitre, nous nous intéressons aux propriétés optoélectronique des deux nitrures ainsi que l'énergie de l'alliage InAlN, Structure des bandes d'énergie, Concentration des électrons libres dans la bande de conduction, Croissance d'InAlN

Dans le troisième chapitre, nous étudions le phénomène de transport et les interactions dans l'alliage.

Au quatrième chapitre, nous présentons la méthode de simulation de Monte Carlo ainsi que ses différentes étapes.

Enfin dans le dernier chapitre, nous utilisons cette méthode pour déterminer l'énergie et la vitesse des électrons en fonction du champ électrique, dans le composé ternaire InAlN cubique, dans le régime stationnaire pour différentes températures.

[1]Arantxa VILALTA-CLEMENTE, Structure des Couches d'InN et d'alliages (In,Al)N, Arrêté du 07août 2006.

1.1 Introduction

Dans les premières années du vingtième siècle les propriétés essentielles des semi-conducteurs ont été découvertes. Beaucoup de ces propriétés ont été exploitées dans les dispositifs en micro-électronique. Les semi-conducteurs se trouvaient encore au cœur de cette révolution.

L'un des grands domaines d'utilisation des semi-conducteurs est l'optoélectronique, qui se caractérise par l'interaction complexe des électrons et des photons à une échelle nanométrique, la diminution de la taille de ces dispositifs rend leurs performances en nette augmentation. Ces dispositifs sont nécessaires pour le transfert de signaux électriques en signaux optiques et vice-versa.

Parmi les semi-conducteurs les plus utilisés en optoélectronique, les nitrures III-N, dans ce chapitre nous allons donner les propriétés de ces matériaux, en particulier InN et AlN

1.2 Propriétés structurales :

1.2.1 Structure cristalline et zone de Brillouin:

1.2.1.1 Présentation des deux structures des nitrures :

Les nitrures cristallisent sous deux formes : cubique et hexagonale.

- La structure cubique dite "Zinc Blende", thermodynamiquement métastable, est présentée sur la figure 1.1. Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant (C, Ge, Si, etc.), est formée de deux sous réseaux cubiques faces centrées (cfc), Dans l'un, il y a des atomes de la colonne III et dans l'autre des atomes de la colonne V, interpénétrés et décalés du quart de la diagonale principale, c'est-à-dire de $a\sqrt{3}/4$ [1], avec a représente le paramètre de maille du matériau.

Cela entraîne que dans les matériaux III-N, les liaisons atomiques ne sont pas simplement covalentes comme dans le silicium. Elles reposent sur le transfert d'électrons des atomes du groupe V sur ceux du groupe III. Dans le cas de AlN et InN, l'azote possède cinq électrons dans la couche périphériques et l'indium ou l'Aluminium, trois. Dans le cristal, chaque atome d'azote est entouré de quatre atomes d'indium ou l'Aluminium, et chaque atome d'indium ou l'Aluminium est entouré de quatre atomes d'azote. Il se produit alors un échange d'électrons, et le cristal se construit avec les ions N⁻ et In⁺ ou Al⁺, qui ont tous quatre électrons périphériques. Cette répartition est à l'origine du caractère partiellement ionique et partiellement covalent des liaisons. On les appelle les semi-conducteurs polaires [3].

- La phase hexagonale dite « wurtzite », est thermodynamiquement stable. Elle est composée de deux réseaux hexagonaux comprenant chacun un type d'atomes, interpénétrés et décalés de $5/8^{\text{ème}}$ de la maille élémentaire.

Les deux structures hexagonale et cubique diffèrent uniquement au niveau de la séquence d'empilement des plans cristallins : l'entourage cristallographique des atomes diffère uniquement à partir du troisième voisin [4].

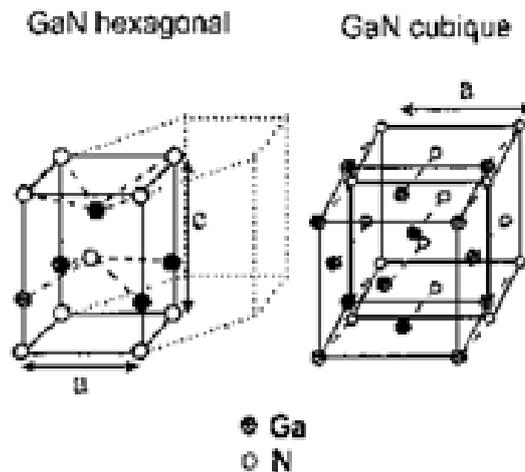


Figure 1.1 Arrangement des atomes dans la maille élémentaire de GaN [5].

La forme cubique des nitrures, a été trouvée la première fois sous forme d'inclusions dans la structure hexagonale. Cependant, cette découverte n'a pas été prise au sérieux. Mais les calculs théoriques faites sur ses paramètres électriques et optiques, ont montré qu'elle a une grande symétrie, ce qui lui donne des avantages par rapport à l'hexagonale. Du point de vue technologique ; elle est plus facile à cliver pour réaliser des cavités lasers ; et son élaboration sur substrats conducteurs permettrait son intégration microélectronique. Alors que, les nitrures hexagonaux sont couramment élaborés sur substrat saphir, qui est un isolant thermique et électrique, ils sont alors difficiles à intégrer dans la microélectronique.

Plusieurs études se sont intéressées à l'élaboration des nitrures cubiques et la recherche de leurs paramètres. Mais, le problème majeur dans la forme cubique est son instabilité thermodynamique ; ce qui la rend difficile à obtenir. Les récents progrès de croissance : l'épitaxie en phase vapeur aux organométalliques (EPVOM) et l'épitaxie par jets moléculaires (EJM) ont permis de déposer des couches épaisses de bonne qualité, et de fabriquer des dispositifs à base des nitrures cubiques.

1.2.1.2 Zone de Brillouin :

Pour un cristal périodique, les paramètres internes ont la périodicité du réseau. Le réseau direct est défini par la première zone de Brillouin.

Les grandeurs physiques dans le cristal sont périodiques dans l'espace direct, pour les reconnaître dans tout le cristal, il suffit de les connaître dans la maille élémentaire du réseau. Il est de même dans l'espace réciproque, il suffit de les avoir pour la première zone de Brillouin.

La zone de Brillouin des réseaux cfc a la forme d'un octaèdre tronqué par les six faces d'un cube (figure 1.2).

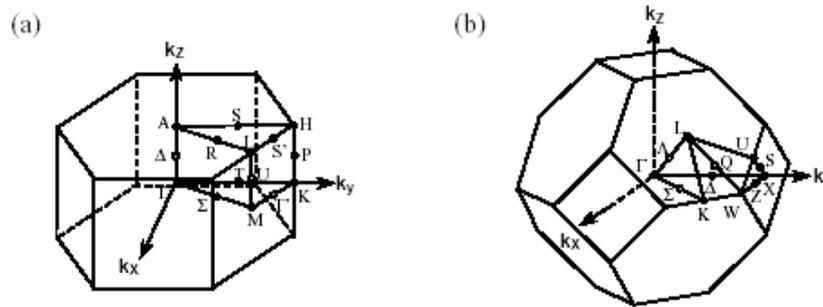


Figure 1.2: Les zones de Brillouin des deux structures : (a) wurtzite et (b) zinc blende [5].

1.2.2 Paramètres de maille des binaires InN et AlN et du ternaire InAlN :

1.2.2.1 Paramètres de maille des binaires InN et AlN :

Dans la structure hexagonale, il y a deux paramètres de maille : “a” dans le plan et “c” hors plan. Dans la structure cubique, à cause de la symétrie, la distance entre les plans atomiques est la même. Le tableau I.1 résume quelques paramètres des nitrures dans leur structure hexagonale.

| Phase hexagonale | a en Å | c en Å | c/a expérience | c/a calcul | u en Å |
|------------------|---------------|---------------|----------------|------------|--------|
| AlN | 3.110 ± 0.003 | 4.980 ± 0.003 | 1.601 | 1.619 | 0.38 |
| InN | 3.54 ± 0.01 | 5.70 ± 0.01 | 1.610 | 1.627 | 0.377 |

Tableau 1.1 : Valeurs expérimentales et théoriques des paramètres de maille et de la distance u entre les anions et les cations pour les nitrures d'élément III en phase hexagonale [6].

La valeur du paramètre du réseau de la structure cubique est donnée en fonction de celle de la structure hexagonale par la formule suivante [4] :

$$a_{ZB} = \sqrt{2}a_{WZ} \quad (1.1)$$

Le tableau I.2 donne les paramètres de maille des deux nitrures dans leur phase cubique.

| Matériau | Valeur théorique a_0 (Å) calculée par les méthodes empiriques [7] | | | Valeur expérimentale a_0 (Å) |
|----------|---|-------|-------|--------------------------------|
| | | | | |
| AlN | 4.301 | 4.392 | 4.34 | 4.38 [9] 4.3996 [10] |
| InN | 4.996 | 4.392 | 4.981 | 4.98 [11] 4.97 [12] |

Tableau 1.2 Paramètre de maille a , des structures dans la phase cubique, théorique et expérimental [4].

La différence entre les valeurs expérimentales et théoriques est due aux différences dans la qualité structurale et les contraintes existantes dans les couches.

1.2.2.2 Paramètre de maille pour l'alliage InAlN :

Les paramètres de maille pour le ternaire InAlN, sont retirés en fonction des paramètres de maille des binaires InN et AlN selon la loi de Vegard donnée par l'équation suivante :

$$a(\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}) = a(\text{AlN})(1-x) + a(\text{InN}) = 3.112((1-x)) + 3.545x \quad (1.2)$$

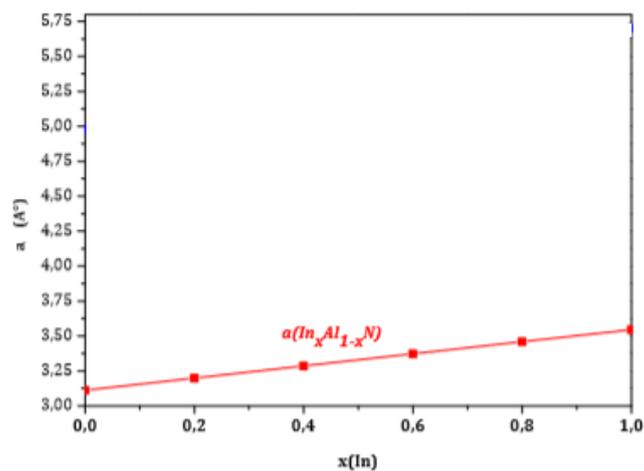


Figure 1.3: Variation du paramètre de maille en fonction de la composition de l'alliage x

1.2.3 Coefficients élastiques :

Les coefficients élastiques des nitrures cubiques ont été calculés par plusieurs chercheurs ; ils sont donnés par le tableau 1.3

| Matériau | Coefficients élastiques (GPa) | | | | Module de compression élastique |
|----------|-------------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|---------------------------------|
| | C ₁₁ | C ₁₂ | C ₁₃ | C ₁₄ | B |
| AlN | 304 | 160 | 193 | 237 | 208 |
| | 304 | 152 | 199 | 230 | 203 |
| | 348 | 168 | 135 | | |
| InN | 187 | 125 | 86 | 138 | 146 |
| | 184 | 116 | 177 | 209 | 139 |

Tableau 1.3 Constantes élastiques des nitrures dans la phase cubique [4].

Les coefficients élastiques de l'AlN sont les plus grands que ceux de l'InN. Il est à noter aussi que le module de compression élastique B de l'InN est plus petit à celui de l'AlN. Cela signifie que l'AlN est plus rigide que l'InN.

Pour AlN et InN hexagonaux : les coefficients élastiques sont donnés dans le tableau 1.4.

| Matériau | C ₁₁ (GPa) | C ₁₂ (GPa) | C ₁₃ (GPa) | C ₃₃ (GPa) | C ₄₄ (GPa) | C ₆₆ (GPa) |
|----------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|
| AlN | 396 | 137 | 108 | 373 | 116 | 207 |
| InN | 223 | 115 | 92 | 224 | 48 | 141 |

Tableau 1.4 Coefficients élastiques des nitrures dans la phase hexagonale [13].

Dans la structure hexagonale, les coefficients élastiques de l'InN et du GaN sont proches, tandis que ceux de l'AlN sont plus petits.

1.2.4 Coefficients de dilatation thermique :

Les paramètres de maille changent si les coefficients de dilatation thermique de la couche épitaxiée et ceux du substrat sont différents. Pour cela, il faut connaître les coefficients de dilatation thermique du réseau cristallin de chaque matériau. Dans le cas des nitrures cubiques, ces coefficients n'ont pas été déterminés expérimentalement. Si on considère que la longueur des liaisons est la même dans les deux phases cubique et hexagonale, on pourra supposer que les coefficients trouvés pour la forme hexagonale sont valables pour la phase cubique. Le tableau 1.5 résume ces paramètres.

| Matériau | $\Delta c/c$ ($\times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$) |
|----------|--|
| AlN | 1.583 (Linéaire entre 293 et 1700°K) |
| InN | 3.75- 5.7 (260- 800 °K) |

Tableau 1.5 Coefficient de dilatation thermique des nitrures dans la phase hexagonale [4].

Le tableau 1.6 résume les paramètres de maille et les coefficients de dilatation thermique des deux nitrures et des différents substrats.

| | a (Å) | c (Å) | α (a) ($\times 10^{-6}/K$) | α (c) ($\times 10^{-6}/K$) |
|----------------------------------|----------------|--------|-------------------------------------|-------------------------------------|
| AlN | 3.111 | 4.980 | 5.3 | 4.2 |
| InN | 3.544 | 5.718 | | |
| Al ₂ O ₃ | 4.758 | 12.991 | 7.5 | 8.5 |
| 3C-SiC | 4.358 | | 4.7 | |
| 6H-SiC | 3.080 | 15.12 | 4.2 | 4.0 |
| Si | 5.430 | | 2.59 | |
| MgAl ₂ O ₄ | 8.083 | | 7.45 | |
| γ -LiAlO ₂ | 5.169 | 6.267 | 7.1 | 7.5 |
| β -LiGaO ₂ | 5.402, b=6.372 | 5.007 | | |
| ZnO | 3.252 | 5.213 | 2.90 | 4.75 |

Tableau 1.6 Paramètres de maille et coefficients de dilatation thermique des nitrures et de divers substrats utilisés pour leur épitaxie [2].

Les paramètres de maille des nitrures sont proches, avec une légère hausse pour InN. Les coefficients de dilatation thermique de l'InN ne sont pas encore bien définis, à cause de la difficulté de son élaboration. La différence du coefficient de dilatation thermique α (c) et $\Delta c/c$ dans les deux tableaux 1.5 et 1.6, est due à la qualité du matériau et la température pour laquelle le coefficient est mesuré.

1.2.5 Contraintes dans les couches de nitrure :

Pendant la croissance épitaxiale, la couche (de nitrure) peut être déformée après une certaine épaisseur s'il y a un désaccord entre les paramètres de maille ou entre les coefficients de dilatation thermique, de la couche et du substrat. A partir des lois de l'élasticité, nous pouvons calculer l'état de contrainte d'un film en utilisant les constantes élastiques [4].

Le désaccord de maille entre la couche et le substrat se traduit par l'équation :

$$\frac{\Delta a}{a} = \frac{a_0 - a_s}{a_s} \quad (1.3)$$

où a_0 et a_s sont les paramètres de maille hors plan de la couche entièrement relaxée et du substrat, respectivement.

$$a_0 = \frac{a_{\perp} + \left(\frac{2\nu}{1-\nu}\right)a_{//}}{1 + \left(\frac{2\nu}{1-\nu}\right)} \quad (1.4)$$

$a_{//}$ et a_{\perp} sont les valeurs des paramètres de maille dans le plan et hors plan, de la couche non relaxée.

Le coefficient de poisson dans l'axe de croissance (la direction $\langle 111 \rangle$) est donné par :

$$\nu = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \quad (1.5)$$

Les contraintes résiduelles dans le film, dans le plan et hors plan, sont données par les relations :

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_{\text{dans le plan}} = \frac{a_{//} - a_0}{a_0} \\ \varepsilon_{\text{hors plan}} = \frac{a_{\perp} - a_0}{a_0} \end{array} \right. \quad (1.6)$$

La contrainte thermo-élastique emmagasinée par la couche pendant un refroidissement ou un changement de température, est donnée par la formule :

$$\frac{\Delta a}{a} = \Delta T (\alpha_s - \alpha_{\text{couche}}) \quad (1.8)$$

où $\Delta T = (T_i - T_f)$ représente la différence de température, et α_s , α_{couche} sont les coefficients de dilatation thermique du substrat et de la couche, respectivement. T_i et T_f sont les températures de l'état initial et de l'état final.

Il est nécessaire de prévoir ces contraintes et les connaître pour mieux interpréter les résultats.

1.3 Propriétés chimiques des deux binaires [8] :

1.3.1 Propriétés chimiques du nitrure d'aluminium

AlN présente une résistance à la gravure chimique comme GaN. Il y a eu un grand nombre d'expériences de gravures d'AlN, mais la plupart n'ont pas donné de l'AlN de bonne qualité. La chimie de surface de l'AlN a été étudiée en utilisant de nombreuses techniques, (spectroscopie d'électrons d'Auger, spectroscopie de photoémission des rayons X (x-ray Photoemission Spectroscopy) (XPS), spectroscopie de photoélectrons de rayons ultraviolets, et spectroscopie d'électrons). Les chercheurs Slack et McNelly [14] ont indiqué que l'AlN développe en surface de l'oxyde d'épaisseur 50 - 100 Å lorsqu'on le laisse exposé pendant une journée à température ambiante. Cette couche d'oxyde sert comme protection, et aucune décomposition des échantillons de l'AlN n'a été observée.

1.3.2 Propriétés chimiques du nitrure d'Indium

Les études faites sur l'InN ont indiqué sa dissociation rapide à des températures supérieures à 500 °C. Depuis il n'y a pas eu de l'InN de haute qualité développé, la résistance du matériau à la gravure

chimique est inconnue. Les chercheurs Wakahara et al [14] ont réussi à faire la gravure des films de l'InN dans une solution chaude de H_3PO_4 : H_2SO_4 .

1.4 Propriétés électriques des deux binaires [15] :

1.4.1 Propriétés électriques du nitrure d'aluminium :

La caractérisation électrique a généralement été limitée par la résistivité due à la faible concentration des porteurs intrinsèque et la concentration des défauts et les niveaux d'énergie des impuretés dans l'AlN. Les chercheurs ont observé que le cristal de l'AlN pur transparent, a une résistivité $\rho = 10^{11}$ - $10^{13} \Omega \text{ cm}$ [16, 17]. Ils ont constaté aussi, que les cristaux impurs bleus à cause de la présence de Al_2O_3 , ont une résistivité beaucoup plus faible $\rho = 10^3$ - $10^5 \Omega \text{ cm}$ [16, 17]. Les chercheurs Chu et al. [18] ont réussi à obtenir l'AlN de type n et p en introduisant de Hg et du Se, respectivement, mais la résistivité de leur produit est trop élevée pour permettre la détermination des concentrations des porteurs [15].

1.4.2 Propriétés électriques du nitrure d'indium :

Il y a peu d'études sur les propriétés électriques de l'InN. La plupart des échantillons de l'InN étudié à ce jour ont des concentrations d'électrons n supérieure à $10^{18}/\text{cm}^3$ [4]. Les postes vacants de l'azote sont la cause de la grande concentration d'électrons. Les études sur l'effet de la température sur la concentration des porteurs et la mobilité des électrons dans l'InN polycristallin ont indiqué que : A la température ambiante, la concentration des porteurs est de $5 \times 10^{16}/\text{cm}^3$, qui diminue à un minimum de $3 \times 10^{16}/\text{cm}^3$ à 150 K. La mobilité des électrons à la température ambiante, est de $2700 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, et elle atteint une valeur maximale de $5000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ à 150 K [15].

1.5 Effet de la température sur la mobilité des porteurs libres

Les chercheurs Chin et al. [19] ont calculé les mobilités électroniques dans InN et AlN, en fonction de la compensation. A basse température ($T < 200 \text{ K}$), les principaux mécanismes de diffusion sont la diffusion sur les phonons acoustiques par effet piézoélectrique, et sur les impuretés ionisées. Quand la température augmente, la diffusion par phonons optiques polaires domine. Le maximum de mobilité est entre 100 et 200K. A 300K, la mobilité électronique maximum est de $1000 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ [19] ce qui est proche des résultats expérimentaux, qui sont de l'ordre de $900 \text{ cm}^2/\text{V.s}$, pour des échantillons hétéroépitaxiés par EPVOM [20] (Epitaxie en phase vapeur par pyrolyse d'organo-métalliques) ou EPVH [21] (Epitaxie en phase vapeur par la méthode des halogénures) pour des couches épaisses de $74 \mu\text{m}$ dans dernier cas.

Dans les nitrures, il est aussi nécessaire de prendre en compte un mécanisme supplémentaire de diffusion : la diffusion par les lignes de dislocations chargées [22]. Les dislocations, créent des niveaux dans le gap, qui peuvent être peuplés d'électrons [23], ce qui limite la mobilité transversale.

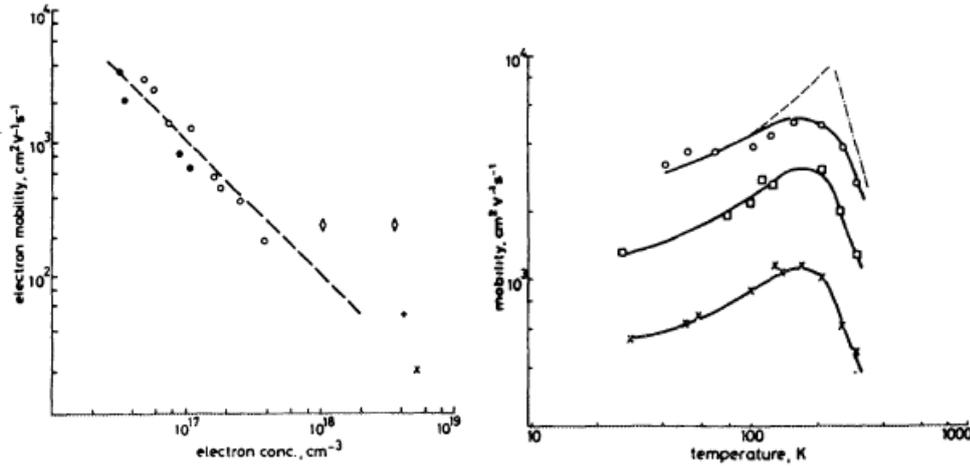


Figure 1.4 : la mobilité en fonction de la concentration et la température [15].

1.6 Propriétés piézoélectriques des nitrures :

Le coefficient piézoélectrique des nitrures est grandes par rapport aux composés semi-conducteurs III-V traditionnels, et c'est le cas des deux autres nitrures qui ont des constantes piézoélectriques très élevées devant les autres matériaux surtout l'AlN (tableau 1.7).

| Matériau | e_{33} (C/m ²) | e_{31} (C/m ²) |
|----------|------------------------------|------------------------------|
| AlN | 1.46 [24] | -0.60 [24] |
| InN | 0.97 [24] | -0.57 [24] |
| GaAs | -0.12 [24] | 0.06 [24] |
| AlAs | -0.01 [24] | 0.01 [24] |
| InAs | -0.03 [24] | 0.01 [24] |
| GaP | 0.07 [25] | -0.03 [25] |
| ZnS | -0.1 [26] | 0.05 [26] |
| CdTe | 0.03 [27] | -0.01 [27] |

Tableau 1.7 : les constantes piézoélectriques dans les deux nitrures

Les valeurs théoriques de ces coefficients sont en bon accord avec les valeurs mesurées expérimentalement. Les travaux de F. Bernardini et al. [28] mettent en évidence la non linéarité de la polarisation avec la déformation dans les couches. Pour l'alliage Al_xIn_{1-x}N, la loi de Vegard s'applique de la façon suivante :

$$P^{PZ}_{Al(x)In(1-x)N}(\xi(x)) = x P^{PZ}_{AlN}(\xi(x)) + (1-x) P^{PZ}_{InN}(\xi(x)) \quad [6] \quad (1.9)$$

Avec :

$$P^{PZ}_{AlN} = 1.808 \xi - 5.624 \xi^2 \text{ pour } \xi < 0 \quad [6] \quad (1.10)$$

$$P^{PZ}_{AlN} = 1.808 \xi + 7.888 \xi^2 \text{ pour } \xi > 0 \quad [6] \quad (1.11)$$

$$P^{PZ}_{InN} = 1.373 \xi - 7.5591 \xi^2 [6] \quad (1.12)$$

Références :

- [1] Johnson W.C., Parsons J.B., Crew M.C., J. Phys. Chem. 234 (1932) 2651.
- [2] M. Leroux, Matériaux pour l'Optoélectronique, Traité EGEM série Optoélectronique, tome 7, édité par G.Roosen, (Hermes Science Publications, Paris, 2003).
- [3] Laure Siozade, étude expérimentale et théorique de structure semi-conducteur à base de Nitrure De Gallium, Ecole doctorale des Sciences Fondamentales, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand II.
- [4] Martinez_Guerrero, Esteban Elaboration en épitaxie par jets moléculaires des nitrures d'éléments III en phase cubique, Institut nationale des sciences appliquées Lyon, 2002.
- [5] Philippe Agnès, Caractérisation électrique et optique du nitrure de gallium hexagonal et cubique en vue de l'obtention d'émetteurs bleus (Thèse) : Institut national des sciences appliquées de Lyon, 1999.
- [6] Stéphanie Anceau, Etude des propriétés physiques des puits quantiques d'alliages quaternaires (Al,Ga,In)N pour la conception d'émetteurs ultraviolets, thèse de doctorat de l'université Montpellier , 2004
- [7] Pugh S. K, Dugdale D. J, Brand S and Abram R.A, Electronic structure calculation on nitride semiconductors. Semicond. SCI, Technol, 1999, VOL 14, p23-31.
- [8] XuD.P, Whang, Y.T, Yang, H, Li, S F, Zho, D.G, Fu, Y.Zhang, Sm, Wu, RHJia, S.J Zheng, WL and Jiang XM. Anomalous strans in the cubic phase GaN films grown on GaAs (001) by metalorganic chemical vapour deposition , J.Appl, Phys, 2000, Vol 88, No 6, P3762-3764.
- [9] Petrov I, Majob E, Powell R.C and Greene J.E. Synthesis nof metastable epitaxial zinc blende structure AlN by solid reaction. Appl, Phys Letters 1992. Vol 60. No 20. P 2491-2493
- [10] Okumaru H, Hamagushi H, Koizumi T, Balakrishnan K, Ishida Y, Akita M, Chichibu S, Nakanishi H, Nagatoma T, Yoshida S. Growth of cubic III- nitrides by gas source MBE using atomic nitrogen plasma : GaN AlGaN and AlN. J.Gryst. Growth 1998.Vol 198/190.P 390-394.
- [11] Strites S., Chandrasekhr D., Smith D. J., Sariel J., Chen H.,Terhguch N., and Morkoç H. structural proprieties of InN films grown on GaAs subtracts: observations of the Zincblende polytype. J. Gryst. Growth 1993, vol 127, p 204-208.
- [12] Tabata A., Lima A. P., Teles L. K., Scolfaro L. M. R., Lette J. R., Lemos V., Schottekter B., Frey T., Schikora D. and Lischka K. Structural proprieties and Raman modes of Zincblende epitaxial layers. Apply. Phys. Lett. 1999, vol 74, N°3, p. 362-364.

- [13] Fabrice ENJALBERT, Etude des hétérostructures semi-conductrices III-nitrides et application au laser UV pompé par cathode à micropointes, thèse pour obtenir le grade de Docteur de l'Université Joseph Fourier – Grenoble 1, 2004.
- [14] N.Bachir, A. Hamdoune, b.Bouazza, N. E. Chabane Sari, Effect of the temperature and doping on electron transport in $Al_xGa_{1-x}N$ alloy by monte carlo, IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering **13** (2010)
- [15] S. Strite and H. Morkoç , GaN, AlN, and InN: A Review, Materials Research Laboratory and Coordinated Science Laboratory, University of Illinois at Urbana-Champaign, Urbana, Illinois 61801, 1992.
- cubic GaN epilayers on GaAs, Phys. Rev. B 1996, vol.54, No. 16,p R11118-R11120.
- [16] K.Kawabe, R.H. Tredgold, and Y. Inuishi, Elect. Eng. Jpn. 87, 62 (1967)
- [17] J. Edwards, K. Kawabe, G. Stevens, and R. H. Trdgold, Solid State Commu.3, 99 (1965).
- [18] T. L. Chu, D. W. Ing. And A. j. Noreika, Solid State electron 10, 1023 (1967).
- [19] Chin V.W.L., Tansley T.L., Osotchan T., J. Appl. Phys. 75, (1994) 7365.
- [20] Nakamura S., Senoh M., Iwasa N., Nagahama S., Yamada T., Mukai T., Nakamura Jpn. J. Appl. Phys. 34, (1995) L1332.
- [21] Götz W., Romano L/T., Walker J., Johnson N.M., Molanar R.J., Appl. Phys. Lett. 72, (1998) 1214.
- [22] Look D.C., Szelove J.R., Phys. Rev. Lett. 82, (1999) 1237.
- [23] Leung K., Wright A.F., Stechel E.B., Appl. Phys. Lett. 74, (1999) 2495.
- [24] F. Bernardini, V. Fiorentini and D. Vanderbilt, Phys. Rev. B 56, R10024 (1997).
- [25] S. de Gironcoli, S. Baroni and R. Resta, Phys. Rev. Lett. 62, 2853 (1989)
- [26] A. Dal Corso, R. Resta, and S. Baroni, Phys. Rev. B 47, 16252 (1993)
- [27] S. De Gironcoli, S. Baroni, R. Resta, Ferroelectrics, 111, 19 (1990)
- [28] F. Bernardini, V. Fiorentini, Phys. Rev. B 64 n° 085207, (2001).

2.1 Introduction

Les composés nitrurés d'élément III, en particulier GaN, AlN, InN et leurs alliages, sont des matériaux très en vue dans le monde de l'optoélectronique à cause de leur bande interdite relativement grande par rapport aux autres semi-conducteurs (surtout pour le cas de l'AlN), ce qui permet de générer de la lumière dans le spectre visible et l'ultraviolet. Par conséquent ; on dispose d'un large éventail de possibilités pour les applications optiques. En dépit d'une percée dans le domaine des dispositifs, beaucoup reste à faire sur le plan de la physique fondamentale de ces systèmes.

Ces nitrures permettent de réaliser des dispositifs optoélectroniques qui présentent de très bonnes performances, malgré une densité de dislocations très élevée ($>10^8\text{cm}^{-2}$) et des champs électriques intrinsèques géants (plusieurs MV/cm).

2.2 Situation des trois nitrures dans la famille des semi-conducteurs

En optoélectronique, les matériaux à gap direct comme les nitrures cubiques ont une force d'oscillateur très importante et l'émission lumineuse se fait généralement à une énergie proche de celle du gap. La majorité des semi-conducteurs ont une énergie de gap située dans le visible ou dans le proche infrarouge. La famille des nitrures se détache dans le domaine UV (figure 2.1).

AlN, InN et leurs alliages, sont donc des semi-conducteurs aux propriétés remarquables. La plus importante est sans conteste leur bande interdite directe qui varie de 0,65 eV (InN) à 6,25 eV (AlN), (figure 2.1) [1]. Grâce aux concepts de l'ingénierie de bande interdite, Les dispositifs peuvent en principe être conçus pour émettre une lumière de n'importe quelle couleur dans le spectre visible et du proche infrarouge (650 nm) aux UV profonds A (320-400 nm) et B (280-320 nm). Ces nitrures et leurs alliages sont à l'origine de la réalisation de diodes électroluminescentes industrielles (DELs) bleues et vertes de haute brillance, et de diodes laser (DLs) émettant à 0,4 μm .

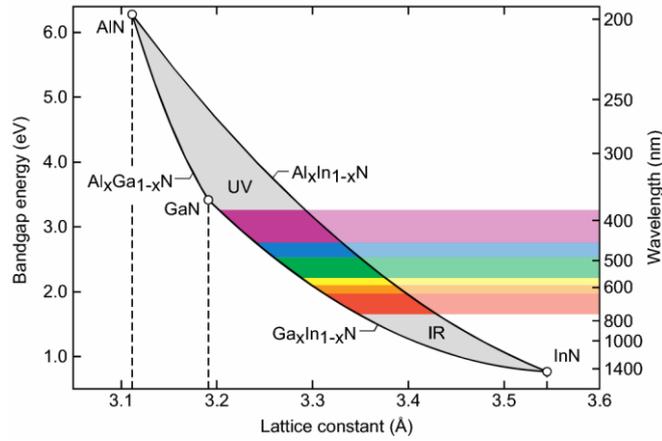


Figure 2.1 Bande interdite et longueur d'onde des divers composés semi-conducteurs en fonction de leurs paramètres de maille [1].

2.3 Energie de l'alliage InAlN

La variation de gap et des paramètres de maille et le spin orbital son calculés à partir de l'équation de la loi de Vegard:

$$E_g(\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}) = (1-x)E_g(\text{InN}) + xE_g(\text{AlN}) - x(1-x)b \quad (2.1)$$

La dépendance compositionnelle de la bande interdite d'InAlN peut être exprimée avec l'expression suivante en utilisant un paramètre d'inclinaison, b_{InAlN} comme suit:

$$E_g(\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}) = 6.1(1-x) + 0.7x - x(1-x)b \quad (2.2)$$

où E_g est l'énergie de bande interdite, et b est le bowing, c 'est le paramètre d'inclinaison, qui décrit l'écart d'une interpolation linéaire entre les valeurs de bande interdite des deux matériaux InN et AlN.

Les valeurs de bowing de l'alliage $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$ sont : la valeur théorique 2.53 eV, et la valeur expérimentale $16-9.1x$ [23]

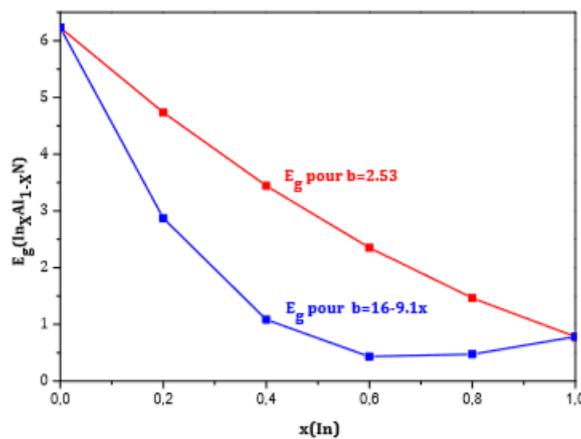


Figure 2.2 :Variation du gap de $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$ en fonction de la composition de l'alliage x

2.4 Structure des bandes d'énergie

2.4.1 Allure générale des bandes d'énergie

Dans les figures 2.2 ; sont données les structures de bandes des deux nitrures, pour la phase cubique.

Structure Cubique

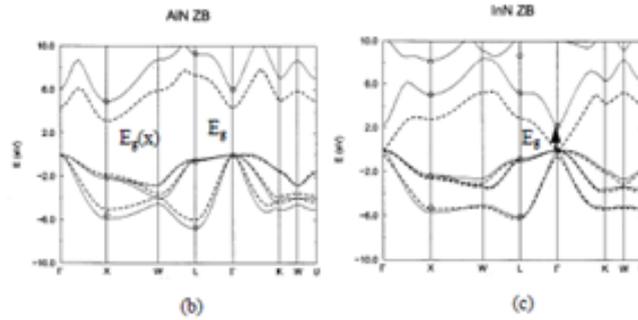


Figure 2.3 Structures de bandes des deux nitrures (AlN et InN) dans leurs phases cubiques. Les lignes pointillées correspondent aux résultats obtenus par la méthode "first-principles" en utilisant l'environnement VASP. Les lignes continues sont celles de la méthode "semi-empirical pseudopotential" [2].

Dans l'AlN cubique, Il existe deux minima entre la bande de conduction et la bande de valence. La structure de bande présente une transition directe entre les points Γ correspondant au gap. Alors que, dans l'InN cubique, il y a deux minima entre la bande de conduction et la bande de valence, présentent une très faible différence.

2.4.2 Forme de la bande de conduction au voisinage des minima [3] :

Les bandes de conduction ne sont pas parfaitement paraboliques. La méthode de perturbation appliquée à l'Hamiltonien de l'électron, permet de mettre en évidence cette non-parabolicité et de donner la relation entre l'énergie ε et le module du vecteur d'onde k comme suit :

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = E(1 + \alpha E) \quad (2.3)$$

Où m^* est la masse effective des électrons, et α est le coefficient de non parabolicité de la vallée considérée. Cette formule n'est valable qu'au voisinage du minimum considéré. Elle indique qu'au-delà d'un certain point d'inflexion, la cavité de la bande de conduction s'inverse. C'est à ce point que la vitesse arrive au maximum pour un champ électrique appliqué. La masse effective de l'électron dans la vallée Γ est liée à l'énergie de gap E_g et l'énergie Δ qui sépare les sous-bandes de valence au centre de la zone de Brillouin. Elle est donnée par la formule (2.4).

$$\frac{m_0}{m^*} = 1 + \theta_0 \left(\frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta} \right) \quad (2.4)$$

m_0 est la masse de l'électron libre dans le vide, m^* sa masse effective, θ_0 (en eV) est un coefficient et E_g est l'énergie du gap.

Les vallées L et X ne présentent pas une symétrie sphérique ; donc la masse transversale des électrons m_t^* est différente de la masse longitudinale m_l^* .

La masse effective de densité d'état est donnée par l'équation (2.5) :

$$m^* = \left(m_l^* (m_t^*)^2 \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.5)$$

2.5 Concentration des électrons libres dans la bande de conduction, et niveaux d'impuretés (pièges) [3]:

La densité des électrons libres est donnée par l'intégrale de Fermi :

$$n = \int_0^{\infty} n_c(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \quad (2.6)$$

ε est l'énergie de l'électron par rapport au bas de la bande de conduction, et $n_c(\varepsilon)$ est la densité d'état dans la bande. Pour une bande parabolique, cette dernière est donnée par :

$$n_c(E) = \frac{4\pi}{h^3} (2m^*)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} \quad (2.7)$$

$f(\varepsilon)$ est la fonction de distribution de Fermi, donnée par l'équation :

$$f(\varepsilon) = \left(1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - E_F}{k_B T}\right) \right)^{-1} \quad (2.8)$$

Pour les faibles densités d'états (n faible), la différence d'énergie entre le niveau d'énergie ε et le niveau de Fermi E_F est très grande devant le produit $k_B.T$ ($\varepsilon - E_F \gg k_B.T$), on peut donc utiliser l'approximation de Boltzmann pour déterminer la densité d'état :

$$n = N_C \exp((E_F - E_C)/k_B T) \quad (2.9)$$

N_C étant la densité effective d'états dans la bande de conduction, donnée par :

$$N_C = \frac{2\pi}{h^3} (2m^* k_B T)^{\frac{3}{2}} \quad (2.10)$$

Dans ces matériaux, il est difficile d'obtenir de très fortes concentrations sans la pénétration du niveau de Fermi dans la bande de conduction.

$$\text{Pour InN : } N_C = 4.82 \times 10^{15} \times (m_{\Gamma}/m_0)^{3/2} \times T^{3/2} \text{ cm}^{-3} = 1.76 \times 10^{14} \times T^{3/2} \text{ cm}^{-3} [4] \quad (2.11)$$

$$N_V = 10^{16} \times T^{3/2} \text{ cm}^{-3} [6]. \quad (2.12)$$

$$\text{Pour AlN : } N_C \cong 4.82 \times 10^{15} \times (m_{\Gamma}/m_0)^{3/2} \times T^{3/2} \text{ cm}^{-3} \cong 1.2 \times 10^{15} \times T^{3/2} \text{ cm}^{-3} [4] \quad (2.13)$$

$$N_V = 9.4 \times 10^{16} \times T^{3/2} (\text{cm}^{-3}) [4]. \quad (2.14)$$

L'AlN, qui est un semi-conducteur à grand gap, est sensible à la présence des impuretés et des défauts introduisant des niveaux d'énergie profonds situés dans la bande interdite. Ces impuretés et défauts peuvent se manifester de deux façons :

- A l'équilibre ; ils interviennent sur la position du niveau de Fermi, et donc sur la concentration des porteurs libres : c'est le phénomène de compensation.
- En régime transitoire ou permanent ; ce sont les phénomènes de piégeage ou d'émission de porteurs.

Ces effets ont une grande influence sur le comportement des dispositifs. Pour cela, il faut connaître ces mécanismes et leur caractérisation pour l'élaboration des circuits intégrés.

2.6 Semi-conducteurs à l'équilibre : statistique d'occupation des niveaux profonds, compensation :

Pour déterminer les concentrations des porteurs libres et l'état d'occupation des centres introduisant des niveaux profonds, il faut connaître la position du niveau de Fermi. Cette position peut être déterminée par le diagramme de Shockley qui traduit la neutralité électrique.

a) Présence d'un accepteur profond :

Ce niveau a une concentration N_{TA} et un niveau d'énergie E_{TA} , l'équation de neutralité électrique s'écrit :

$$n + N_{TA}^- = p + N_D^+ \quad (2.15)$$

N_{TA}^- est la concentration des accepteurs ionisés, donnée par l'équation :

$$N_{TA}^- = N_{TA} f(E_{TA}) \quad (2.16)$$

N_D^+ est la concentration des donneurs ionisés positivement, donnée par l'équation :

$$N_D^+ = N_D (1 - f(E_D)) \quad (2.17)$$

n et p sont les concentrations des électrons et des trous, respectivement.

$f(E_j)$ est la fonction d'occupation de Fermi du niveau E_j

Le niveau de Fermi se situe au voisinage du niveau profond. C'est le phénomène de compensation par piège profond. La concentration des électrons est inférieure à N_D . Tant que N_{TA} est inférieur à N_D , on a $p < N_D^+$ et donc :

$$n \cong N_D - N_{TA} \quad (2.18)$$

b) Cas de deux impuretés de types opposés :

L'une des impuretés est de type donneur avec une densité N_{TD} et l'autre de type accepteur avec une densité N_{TA} voisine de N_{TD} .

$$p + N_D^+ + N_{TD}^+ = n + N_{TA}^- \quad (2.19)$$

Dans le cas où $N_D < N_{TD} < N_{TA}$, le matériau se trouve fortement compensé et le niveau de Fermi se trouve au milieu de la bande interdite.

2.7 Effet de la température sur la bande interdite [5]

La dépendance en température de la bande interdite, est décrite par la loi de Varshni [5] :

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{\beta} \quad (2.20)$$

Où $E_g(0)$ est l'énergie de bande interdite à température nulle ; α et β sont des constantes déterminées expérimentalement (tableau 2.1).

| Matériau | E_g (0K) | E_g (300K) | α (eV/K) | β (K) |
|-------------|------------|--------------|-----------------|-------------|
| AlN Cubique | 6 [6] | 5.94 [7] | 0.593[6] | 600 [6] |
| InN Cubique | 0.69 [8] | 0.64 [8] | 0.41 [8] | 454 [8] |

Tableau 2.1 L'énergie de gap à $T=0$ et les paramètres α et β des deux nitrures cubiques.

2.8 Phonons dans les nitrures

Les modes de phonons dans l'AlN, ont été très étudiés par de nombreuses équipes ; un bon accord a été trouvé entre les expériences et les calculs. Ces différents modes (nombre d'onde et énergie correspondante) sont donnés par le tableau 2.2.

| Mode | AlN |
|-----------|---|
| E2 (low) | 241-252 cm^{-1} / 29.9-31.2meV |
| B1 (low) | 580 cm^{-1} / 71.9meV (théorique) |
| A1 (TO) | 607-614 cm^{-1} / 75.3-76.1meV |
| E1 (TO) | 657-673 cm^{-1} / 81.5-83.4meV |
| E2 (high) | 655-660 cm^{-1} / 81.2-81.8meV |
| B1 (high) | 765 cm^{-1} / 94.8meV (théorique) |
| A1 (LO) | 888-910 cm^{-1} / 110-113meV |
| E1 (LO) | 895-924 cm^{-1} / 111-115meV |

Tableau 2.2 Les modes de dispersion dans AlN [5].

Pour InN, les modes de phonons et leurs nombres d'ondes à 300K, sont groupés dans le tableau 2.3.

| Modes | Longueur d'onde |
|-----------------------------|--|
| $\nu_{\text{TO}}(\Gamma)$. | 478 cm^{-1} [11] 694 cm^{-1} [11] |
| $A_1 - \text{LO}$ | 586 cm^{-1} [12] |
| $A_1 - \text{TO}$ | 447 cm^{-1} [12] |
| $E_1 - \text{LO}$ | 593 cm^{-1} [12] |
| $E_1 - \text{TO}$ | 476 cm^{-1} [12] |
| E_2 (low) | 87 cm^{-1} [12] |
| E_2 (high) | 488 cm^{-1} [12] |

Tableau 2.3 Les modes de dispersions de phonons dans InN.

2.9 Emission de lumière

En optoélectronique, un semi-conducteur peut être schématisé par un système à deux bandes d'énergie séparées par un intervalle d'énergie représentant l'énergie de gap (E_g) comme le montre la figure 2.4.

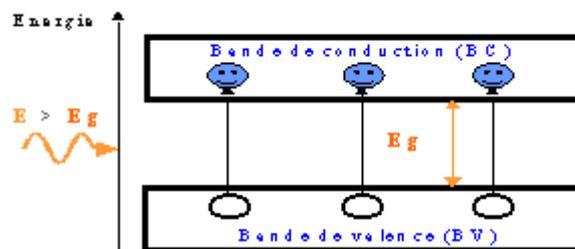


Figure 2.4 Représentation schématique de la structure de bande d'un semi-conducteur soumis à une énergie lumineuse ϵ [13].

En absence d'énergie extérieure, les électrons sont localisés dans le niveau de plus basse énergie (bande de valence) et ne pourront atteindre la bande d'énergie supérieure (bande de conduction) que si un flux lumineux de photons leur fournit l'énergie nécessaire pour le faire. En effet, si l'on soumet ce matériau à un flux lumineux d'énergie $E < E_g$, les électrons restent dans la bande de valence et n'arrivent pas à la bande de conduction. Si l'énergie incidente $E > E_g$, les électrons passeront dans la bande de conduction. Ce phénomène est appelée « l'absorption induite » et le système sera dans un état excité.

Le retour à la bande de valence (état fondamental) s'accompagne de l'émission d'un photon d'énergie E_g . Ce phénomène est appelé « émission spontanée ». C'est le processus d'émission le plus fréquemment rencontré et qui est à l'origine de la majorité des éclairages traditionnels. En particulier, l'émission des diodes électroluminescentes. L'énergie du rayonnement émis (E_g) est inversement proportionnelle à la longueur d'onde λ qui, comprise entre 206 et 620 nm (dans l'alliage InAlN), est caractéristique d'une couleur visible et Ultraviolet. La couleur, ou en d'autres

termes la longueur d'onde d'émission, est donc une caractéristique du matériau semi-conducteur utilisé dans le dispositif.

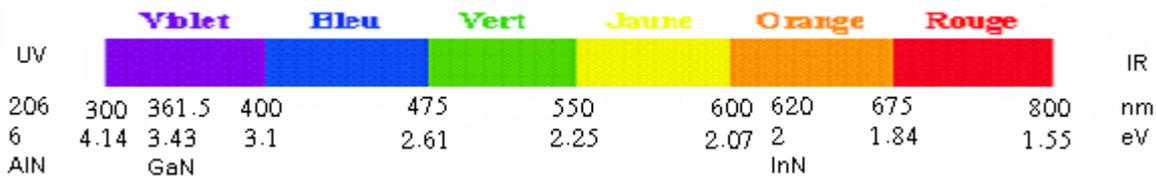


Figure 2.5 Correspondance entre longueur d'onde d'émission (en nm) et couleur dans le domaine du spectre visible [14].

Les énergies de bande interdite des nitrures d'indium (InN) et d'aluminium (AlN) sont respectivement égales à 6 eV (émission dans l'ultra-violet : $\lambda = 206$ nm) et 2 eV (émission dans le rouge : $\lambda = 620$ nm). On peut alors espérer couvrir toute la gamme du spectre visible avec des matériaux semi-conducteurs à base de nitrure.

2.10 Propriétés optoélectroniques

AlN est connu et employé en tant que céramique pour sa stabilité thermique et chimique. InN quant à lui, semble être un des semi-conducteurs III-V les moins bien connus, à cause des difficultés posées par sa croissance.

2.10.1 Structure de bande, propriétés optiques et effets de contrainte

AlN

Le gap d'AlN est de 6.2 eV à 300 K [15], et de 6.28 eV [16] à basse température, il est donc situé dans les UV durs. Les valeurs du coefficient de couplage spin-orbite δ et du champ cristallin Δ_{cr} , donnés dans le tableau 2.4, sont théoriques [17]. Il faut noter l'inversion du signe de Δ_{cr} entre GaN et AlN. C'est pourquoi la valeur du gap donnée est dans la ligne correspondant à E_B dans ce tableau, et ne correspond pas en fait à un gap excitonique. Il y a des valeurs théoriques différentes pour le champ cristallin, mais toutes sont en accord sur le signe. La valeur du coefficient de couplage spin-orbite est voisine de celle de GaN [18].

| | GaN | AlN | InN |
|--|---------------|------------|-------------|
| E_A (eV) | 3.477 | | 1.91 |
| E_B (eV) | 3.482 | | |
| E_C (eV) | 3.497 | 6.28 | |
| Δ_{cr} (meV) | 8.4 | -210 | 41 |
| ϵ_0 (// ; \perp) | 10.4 ; 9.5 | 9 | |
| ϵ_∞ (// ; \perp) | 5.01 ; 5.04 | 4.84 | 9.3 |
| m_e/m_0 (// ; \perp) | 0.228 ; 0.237 | 0.32 | 0.11 ; 0.10 |
| m_{hh}/m_0 (// ; \perp) | 2.0 ; 0.33 | 3.53 | 1.67 ; 1.61 |
| m_{lh}/m_0 (// ; \perp) | 1.19 ; 0.35 | 3.53 | 1.67 ; 0.11 |
| M_0/m_0 (// ; \perp) | 0.17 ; 1.27 | 0.25 | 0.10 : 1.67 |
| ω_{TO} (// ; \perp) (cm^{-1}) | 537 ; 561 | 614 ; 673 | 436 ; 471 |
| ω_{LO} (// ; \perp) (cm^{-1}) | 735 ; 743 | 893 ; 916 | 593 ; 572 |
| ω_{E2} (l ; h) (cm^{-1}) | 144 ; 569 | 252 | high : 488 |
| C_{11} (GPa) | 390 | 396 | 223 |
| C_{12} (GPa) | 145 | 137 | 115 |
| C_{13} (GPa) | 106 | 108 | 92 |
| C_{33} (GPa) | 398 | 373 | 224 |
| C_{44} (GPa) | 105 | 116 | 48 |
| C_{66} (GPa) | 123 | 207 | 141 |

Tableau 2.4 Quelques grandeurs physiques des nitrures GaN, AlN et InN à basse température. Les symboles // et \perp signifient parallèlement et perpendiculairement à k_z [9].

Les masses effectives d'électrons et des trous sont aussi calculées. Comme dans GaN, l'interaction spin-orbite rend la dispersion des bandes de valence non parabolique. AlN est considéré comme isolant, et peu d'éléments sont connus sur ses propriétés de transport. Les valeurs des énergies de phonons, données dans le tableau 2.4, sont déduites d'expériences de diffusion Raman [19].

InN

Le composé InN est très difficile à synthétiser, et ses propriétés ont donc été principalement étudiées sur des échantillons polycristallins orientés. Quelques grandeurs physiques données dans le tableau 2.4 ; comme dans le cas d'AlN, le gap a été mesuré par des mesures de coefficient

d'absorption, et il ne correspond donc pas à un gap excitonique. Les valeurs du couplage spin-orbite, du paramètre de champ cristallin [20], des masses effectives de trous [21] sont théoriques.

Très peu de spectres de luminescence d'InN ont été publiés, à cause des difficultés de croissance de ce composé.

Nous donnons au tableau 2.5, les transitions bord de bande E_g (eV) des nitrures cubiques et le paramètre spin orbite Δ_{so} .

| Matériau | | Valeur de E_g (en eV) [24] calculée par : | | | Eg expérimentale (en eV) |
|----------|---------------|---|------------------------|-----------------|--------------------------|
| | | Current first principes | Current semi empirical | Autres méthodes | |
| AlN | E_g | 4.3 | 6.02 | 6-5.94 | 5.34 [22] |
| | Δ_{so} | | 11 | 19 | |
| InN | E_g | | 2.18 | 2.2 | |
| | Δ_{so} | | 11 | 6 | |

Tableau 2.5 transitions de bord de bande E_g (eV) des nitrures cubiques. (Δ_{so} est le paramètre spin orbite donné en meV) [2].

2.11 Croissance d'InAlN

InAlN est le moins caractérisé des alliages de nitrure ternaire: beaucoup moins connu sur ses propriétés, comparé à AlGaN et InGaN, en raison de son instabilité aux conditions de croissance. Les caractéristiques attrayantes d'InAlN sont le large gamme de gap de 0,65 eV à 6,2 eV et l'appariement en réseau de $In_{0,18}Al_{0,82}N$ à GaN. Cet alliage présente un grand contraste d'indice de réfraction par rapport à GaN et une bande interdite directe d'environ 5 eV, plus grande que celle de GaN (3,5 eV).

La première croissance d'InAlN par pulvérisation cathodique magnétron a été rapportée par Starosta en 1981, plus tard, Teles et al. ont utilisé les premières techniques ab initio pour calculer le diagramme de phase pour $In_xAl_{1-x}N$ cubique, et le résultat peut être vu sur la figure 1.12 où est porté la température de croissance en fonction de la composition (x).

La courbe spinodale dans le diagramme de phase marque la limite de solubilité à l'équilibre, et comme on peut le voir, il existe un grand écart de miscibilité dans lequel aucune solution solide ne peut être obtenue. Par exemple, si la croissance devait être effectuée à 800 ° C, une forte tendance à la décomposition est observée entre 9% et 85%.

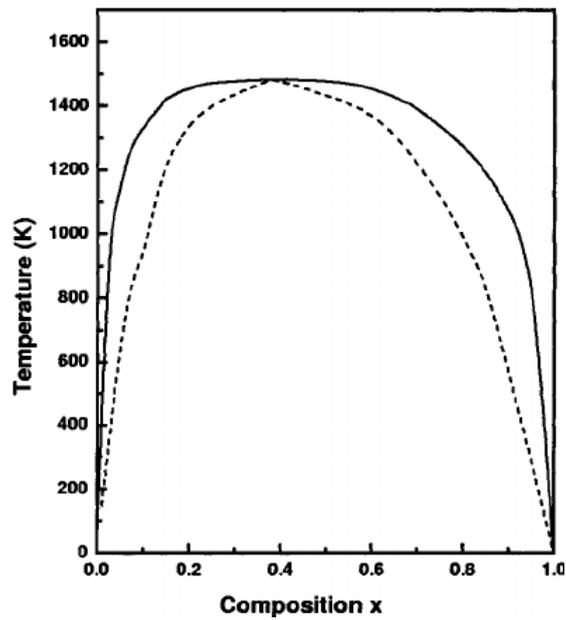


Figure 2.7 Diagramme de phase des alliages cubiques $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$ non contraints. La ligne en trait plein indique la courbe binodale et la ligne pointillée indique la courbe spinodale.⁸⁸ Le pointillé vert indique $T = 800$ ° C, température à laquelle la décomposition spinodale est prévue pour les alliages dont la teneur en In est comprise entre 0,09 et 0,85%.

Références :

- [1] Nakamura (S.) and Fasol (G), The Blue Laser Diode, Springer – Berlin, 1997
- [2] Martinez Guerrero, Esteban Elaboration en épitaxie par jets moléculaires des nitrures d'éléments III en phase cubique, thèse de doctorat, INSA Lyon, 2002.
- [3] R. Castagné, J.P Duchemin, M.Gloanie, Ch.Rhumelhard, Circuits integrs en Arsenic de Gallium, Physique, technologie et conception, édition Masson, Mars 1989.
- [4] NSM Archives, Semiconductors on NSM, 2003.
- [5] Laurent Nevou, Emission et modulation intersousbande dans les nanostructures de nitrures, thèse de doctorat, Faculté des sciences d'Orsay, 2008.
- [6] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, et L. R. Ram-Mohan, Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys, J. Appl. Phys. 89, 5815 (2001)
- [7] François Dessene, Etude thermique et optimisation des transistors à effet de champ de la filière InP et de la filière GaN, thèse de doctorat, U. de Lille 1, 1998.
- [8] Languy Fabian, Caractérisation de nanocolonnes d'In(1-x)Ga(x)N en vue d'étudier l'origine de la haute conductivité de l'InN, 2007
- [9] S. L. Chuang, C. S. Chang, k· p method for strained wurtzite semiconductor, Phys. Rev. B 54, 2491 (1996)
- [10] Pugh, S.K., Dugdale D.J., Brand S., Abram R.A., Semicond. Sci. Techn. 14 (1999), 23-31.
- [11] Osamura, K., Naka, S., Murakami, Y., J. Appl. Phys. 46 (1975), 3432-3437
- [12] Davydov, V.Yu., Klochikhin A.A., Emtsev V.V., Kurdyukov D.A., Ivanov S.V., Vekshin V.V., Bechstedt F., Furthmuller J., Aderhold J., Graul J., Mudryi A.V., Harima H., Hashimoto A., Yamamoto A., Haller E.E., Band Gap of Hexagonal InN and InGaN Alloys. Phys. Stat. Solidi (b) 234(3), (2002 c), 787-795
- [13] Laure Siozade, étude expérimentale et théorique de structure semi-conducteur à base de nitrure de gallium, Ecole doctorale des Sciences Fondamentales, U. Clermont-Ferrand II.
- [14] Hamdoune AEK, Elaboration du nitrure de gallium ; Etude de ses propriétés et Applications". U. Tlemcen, 2006.
- [15] Yim W.M., Stofko E.J., Zanzucchi P.J., Pankove J.I., Ettenberg M., Gilbert S.L., J. Appl. Phys. 44, (1973) 292.
- [16] Perry P.B., Rutz R.F., Appl. Phys. Lett. 33, (1978) 319.
- [17] Suzuki M., Uenoyama T., Gallium Nitride and Related Semiconductors, Edited by J.H.Edgar, S.Strite, I.Akasaki, H.Amano and C.Wetzel, EMIS Datareviews series n°23 (INSPEC, IEE, Londres, 1999) p.175.

- [18] Kim K., Lambrecht W.R.L., Segall B., Van Schilfgaarde M., Phys. Rev. B 56, (1997)763.
- [19] Yoshida A., Gallium Nitride and Related Semiconductors, Edited by J.H.Edgar, S.Strite, I.Akasaki, H.Amano and C.Wetzel, EMIS Datareviews series n°23 (INSPEC, IEE, Londres, 1999 p.35.
- [20] Wei S.H., Zunger A., Appl. Phys. Lett. 69, (1996) 2719.
- [21] Yeo Y.C., Chong T.C., Li M.F., J. Appl. Phys. 83, (1998) 1429.
- [22] M.P Thompson, G.W. Auner, T.S. Zheleva, K.A. Jones, S.J. Simko and N.J. Hilfiker, Deposition factors and band gap of zincblende AlN, J. Appl. Phys. 2001, Vol. 89, No.6 p3331- 3336
- [23] N.Bouteldja E. A.Kadri, Etude ab-initio des propriétés Electronique de GaN/InN/AlN: Effets de polarization (2014)

3.1 Introduction

Le phénomène de transport dans les semi-conducteurs ternaires à base de nitrures, résulte du comportement des électrons qui se trouve dans la bande de conduction et la bande interdite. Une étude analytique du problème nécessite la connaissance de la fonction de distribution de l'énergie des électrons, une fonction obtenue en résolvant l'équation de Boltzmann. Cette équation, aux dérivées partielles, n'admet de solutions analytiques que dans un nombre de cas limité.

3.2 Equation de Boltzmann pour un gaz d'électrons [1]

3.2.1 Approximation semi-classique

Dans l'approximation semi-classique, l'électron est repéré par sa position r , par son vecteur d'onde \vec{k} et par un indice de bande n . En présence d'un champ électrique $E(r, T)$ et d'un champ magnétique $B(r, T)$; n , r et \vec{k} évoluent de la manière suivante :

- L'indice de bande est une constante de mouvement : il n'y a pas de transition inter-bandes.
- Le mouvement d'un électron entre deux collisions dans une bande, est donné par les équations semi classiques du mouvement :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial r}{\partial t} = v_k = \frac{1}{\hbar} \nabla_k \varepsilon_k \end{array} \right. \quad (3.1)$$

$$\hbar k = e[\varepsilon(r, T) + v_k \times B(r, T)] \quad (3.2)$$

Où e est la charge de l'électron, v_k et ε_k étant sa vitesse moyenne et son énergie dans l'état k .

La fonction de distribution des électrons dans une bande, est donnée par :

$$n = \frac{2}{(2\pi)^3} \int f(r, k, t) dk \quad (3.3)$$

$\frac{2}{(2\pi)^3} f(r, k, t) dr dk$ est le nombre moyen d'électrons qui se trouvent, à l'instant t , dans l'élément de volume dr centré en r ayant un vecteur d'onde dans l'élément dk centré en k . Le facteur 2 désigne les deux orientations du spin.

3.2.2 Formulation de l'équation de Boltzmann [1]

La difficulté de l'étude du transport électronique dans les semi-conducteurs est due au fait qu'il faut étudier un ensemble d'électrons dont on ignore la distribution.

En absence de collisions, le théorème de Liouville prouve que le volume d'un élément de l'espace de phase reste constant :

$$f_k(\mathbf{r} + d\mathbf{r}, t + dt) = f_k(\mathbf{r}, t) \quad (3.4)$$

En présence des collisions ; la variation de $f_k(\vec{r}, t)$ dans le volume $d\vec{r}.d\vec{k}$ à l'instant t , est due aux collisions avec les impuretés. Elle est donnée par l'équation différentielle :

$$f_k(\mathbf{r} + d\mathbf{r}, t + dt) - f_k(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (3.5)$$

En passant à la dérivé de $f_k(\mathbf{r}, t)$ par rapport à toutes les variables du système, on obtient :

$$d f_k(\vec{r}, t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) dt + \left(\frac{\partial f}{\partial k} \right) dk + \left(\frac{\partial f}{\partial r} \right) dr \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial f_k(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) + \left(\frac{\partial f}{\partial k} \right) \frac{dk}{dt} + \left(\frac{\partial f}{\partial r} \right) \frac{dr}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{V} \vec{\nabla}_r f + \vec{F} \vec{\nabla}_k f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (3.8)$$

Où $F(\mathbf{r}, t) = e[\mathcal{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{v}_k \times B(\mathbf{r}, t)]$ est la force de Lorentz.

Cette équation est celle du transport de Boltzmann. L'intégrale de collisions $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$ est valable pour les différentes collisions que peuvent subir les électrons.

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

$$f_0(\varepsilon_k) = \left[1 + \exp\left(\frac{\varepsilon_k - \mu}{K T} \right) \right]^{-1} \quad (3.9)$$

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

3.2.3 Equation de Boltzmann dans l'approximation du temps de relaxation [1]

Le terme $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}$ a un rôle de relaxer la fonction de distribution vers une fonction de distribution d'équilibre local, qui est une distribution de Fermi-Dirac que l'on écrit :

$$f^{(0)}(r, k, t) = \left[1 + \exp \frac{\varepsilon_k - \mu(r, t)}{K_B T} \right]^{-1} \quad (3.10)$$

Dans cette expression, T et $\mu(r, t)$ sont les valeurs de la température et du potentiel chimique, respectivement.

Dans l'approximation du temps de relaxation, la dérivée de collision est exprimée par :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} \approx \frac{f - f^{(0)}}{\tau} \quad (3.11)$$

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

3.3 Probabilités d'interactions [1]

Les paramètres nécessaires pour décrire une collision sont : le vecteur d'onde de l'électron \vec{k} , la position r et le temps t.

La probabilité conditionnelle, pour réaliser la transition entre k et k', dans l'intervalle du temps dt, est obtenue par la formule de Fermi :

$$W_{k, k'} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle k | v_i | k' \rangle|^2 \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}) \quad (3.12)$$

$|\langle k | v_i | k' \rangle|$ présente le module de l'élément de la matrice de potentiel (V_i) perturbateur d'un centre diffuseur entre les états k et k'.

La probabilité d'une transition d'un état k vers un état k' qui était initialement vide, dans l'intervalle du temps dt, est le produit de $W_{k, k'}$ par f_k avec f_k est la probabilité pour que l'état k soit occupé.

• Dans le cas de collision avec les impuretés : l'intégrale de collision est donnée par :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \sum [W_{k, k'} f_{k'} (1 - f_k) - W_{k', k} f_k (1 - f_{k'})] \quad (3.13)$$

Ou encore

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int [W_{k,k'} f_{k'}(1-f_k) - W_{k',k} f_k(1-f_{k'})] dk' \quad (3.14)$$

Où V est le volume de l'échantillon considéré.

3.4 Les interactions subies par les électrons durant leur mouvement :

3.4.1 Vibrations réticulaires dans les composés III-V [2]

Dans les composés ternaires à base de nitrure, le couplage entre un électron et un mode de vibration peut être polaire ou non polaire :

- Couplage polaire s'effectue par des interactions coulombiennes. Il apparaît par des déplacements des barycentres positifs et négatifs à l'intérieur de la maille élémentaire.
- Couplage non polaire s'effectue à travers une déformation locale du potentiel cristallin, induite par la vibration des distances inter atomiques.

Chaque mode de vibration j associé à une fréquence $\omega_j(q)$, peut être considéré comme un oscillateur harmonique avec une énergie quantifiée $\varepsilon_j(q,n)$ qui peut prendre des valeurs :

$$\varepsilon_j(q,n) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_j(q) \quad (3.15)$$

(Où n est la concentration des électrons)

Cette quantification montre que le mode ne peut perdre ou gagner de l'énergie, que par un quantum $\hbar \omega_j$ appelé « phonon »

L'émission ou l'absorption d'un phonon par un électron, est régie par une probabilité qui dépend de la densité des phonons présents à la température T.

3.4.2 Description générale des interactions électrons-phonons [2]

Quand les électrons se déplacent, dans un matériau, leur mouvement est perturbé par des collisions sur les imperfections du réseau cristallin. Les perturbations les plus efficaces sont celles dues à la vibration du réseau donnant naissance aux collisions électrons-phonons.

L'analyse de ces collisions, nous permet de connaître l'état de l'électron après le choc.

L'électron possède au début, un vecteur d'onde \vec{k} et une énergie ε . Après collision, ces grandeurs changent et deviennent \vec{k}' et ε' . Le phonon est caractérisé par son énergie $\varepsilon_q = \hbar\omega_j(q)$ et son vecteur d'onde \vec{q} .

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

$$\begin{cases} \varepsilon' = \varepsilon \pm \hbar\omega_j(q) \\ \vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q} \end{cases} \quad (3.16)$$

Ces transitions doivent être compatibles avec la structure des bandes d'énergie du matériau.

Au cours de la collision, l'électron se déplace dans son diagramme de bandes. Il y a deux types de transitions :

- Les transitions intravallées : elles concernent les phonons de faible vecteur d'onde qui occupent le centre de la zone de Brillouin. L'électron, dans ce cas, reste dans la vallée où il se trouvait avant le choc.
- Les transitions intervallées : elles provoquent le passage de l'électron d'une vallée à une autre qui peut être équivalente à la première (transition $X \longleftrightarrow X$ ou $\Gamma \longleftrightarrow L$) ou non équivalente ($\Gamma \longleftrightarrow X$, $\Gamma \longleftrightarrow L$ ou $X \longleftrightarrow L$). Ces transitions nécessitent des phonons ayant un grand vecteur d'onde dont le point représentatif est situé au bord de la zone de Brillouin.

Chaque processus de collisions possède une densité de probabilité $s_j(k, k')$ qui caractérise la probabilité, par unité de temps, pour que le processus j fasse passer l'électron de l'état défini par le vecteur d'onde \vec{k} , à un autre état défini par le vecteur d'onde \vec{k}' . La probabilité par unité de temps, pour avoir l'interaction j, est donnée par [4] :

$$\lambda_j(\vec{k}) = \int_{\substack{\text{sur tous les états} \\ k' \text{ possibles}}} s_j(\vec{k}, \vec{k}') d_3k' \quad (3.17)$$

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

3.4.3 Interactions élastiques [5]

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

3.4.3.1 Interactions acoustiques [6]

Ces interactions sont élastiques et très importantes dans les vallées latérales. Leurs effets peuvent être masqués par les interactions intervalles qui prédominent en vallées latérales.

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

3.4.3.2 Interactions piézoélectriques [1]

Ces interactions existent dans les cristaux piézoélectriques, mettant en jeu un phonon acoustique de faible longueur d'onde. Elles n'ont pas un grand effet sur le comportement de l'électron car elles sont élastiques et ne provoquent aucune déviation.

3.4.4 Interactions inélastiques [5]

Ces interactions sont dues essentiellement aux transitions intervalles, qui permettent le transfert des porteurs d'une vallée à une autre vallée équivalente ou non-équivalente ; elles sont s'accompagnent d'absorption ou d'émission d'un phonon intervalle dont la valeur dépend de la vallée de départ et de la vallée d'arrivée [7].

Une interaction intervalle ne peut avoir lieu que si l'énergie après absorption ou émission du phonon, est plus grande que l'énergie du fond de la vallée d'accueil ; les énergies étant repérées par rapport au bas de la vallée centrale Γ .

3.4.4.1 Interactions optiques polaires [5]

Ce sont des interactions très importantes dans toutes les vallées. L'énergie du phonon $\hbar\omega$ est comparable à celle de l'électron, à température ambiante. Ce type d'interactions a une grande influence sur l'évolution de la mobilité, à faible champ électrique.

3.4.4.2 Interactions optiques intervalles équivalentes et non équivalentes [1]

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

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

3.4.4.3 Interactions optiques non polaires [2]

Elles sont inélastiques, et leurs effets sur l'électron sont pareils que ceux causés par les interactions optiques intervallées équivalentes.

Elle n'a lieu que dans les vallées de symétrie L (L ou M-L), et elle est accompagnée d'une absorption ou d'une émission d'un phonon optique non polaire. Le traitement de ce type d'interaction est alors le même que celui des interactions optiques polaires intervallées avec $j=i$.

3.4.5 Interactions des électrons avec les centres coulombiens [2]

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

La figure (3.1) donne la déviation de l'électron ayant une vitesse initiale \vec{v} , par un centre coulombien de charge Q .

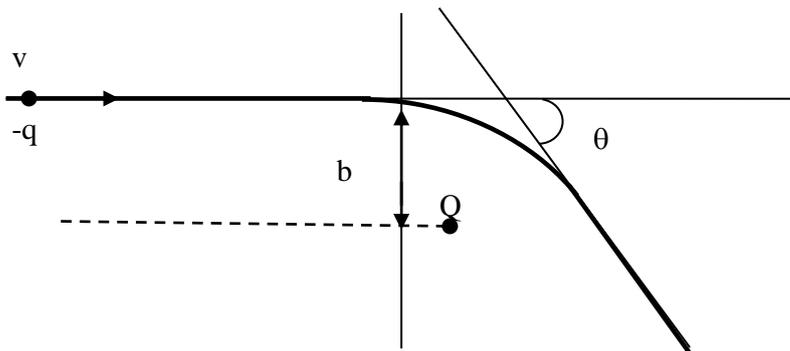


Figure 3.1: La déviation d'un électron par un centre coulombien [2].

L'interaction électron-impureté ionisée, est élastique (elle conserve l'énergie de l'électron). Cette interaction provoque une perturbation des impuretés ionisées dans un semi-conducteur. Elle est plus importante lorsque la densité des centres coulombiens est plus grande et l'énergie des électrons est plus petite.

Les collisions électrons-électrons, sont dans le groupe des diffusions coulombiennes. Elles sont moins importantes car elles conservent l'énergie totale de la population électronique. Elles ont le

rôle de redistribuer l'énergie dans cette population. Elles agissent sur la forme de la fonction de distribution. L'interaction électron-électron n'est importante que si la densité des électrons dépasse 10^{18}cm^{-3} .

Dans les deux nitrures qui sont des matériaux à grande densité d'électrons libres, ce type d'interaction a un grand effet sur l'énergie et le moment.

3.5 Phénomène d'ionisation par impact [7]

L'ionisation par impact (ou par choc) apparaît dans un matériau, pour des champs électriques intenses. En effet ; un électron qui dérive dans un solide sous l'effet d'un champ électrique, acquit de l'énergie sous forme cinétique et la transmet progressivement au cristal en effectuant des collisions avec les phonons du réseau. Ce processus assure la dissipation thermique de l'énergie potentielle perdue par les électrons. Cependant ; si le champ électrique est suffisamment grand, il y a des électrons qui peuvent, au cours d'un vol libre, acquérir une énergie de sorte que leur impact sur un atome du réseau cristallin, provoque la rupture d'une liaison et il y aura la création d'une paire électron-trou. Ce processus, illustré sur la *figure 3.2*, peut provoquer un phénomène d'avalanche. Ce phénomène devient plus important lorsque le gap du matériau est plus petit (l'énergie de seuil de l'ionisation par choc est approximativement égale à $3/2 E_g$). Le gap d'InN est plus petit que celui de l'AlN, ce phénomène y est donc plus important.

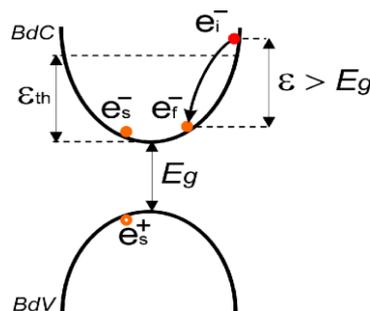


Figure 3.2 [8] : Phénomène d'ionisation par choc (e_i^- : électron à l'état initial, e_f^- : électron à l'état final, e_s^- : électron secondaire créé, e_s^+ : trou créé).

3.6 Interactions prépondérantes dans les alliages ternaires [3]

Parmi toutes les interactions subies par l'électron au cours de son évolution ; certaines ont un effet plus important sur son comportement: ce sont principalement les interactions optiques polaires en vallée centrale à faible champ, et les interactions intervalles en champ fort. Ces interactions sont inélastiques, et la probabilité d'émission est supérieure à la probabilité d'absorption dès que l'électron possède une énergie suffisante pour émettre un phonon.

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

3.7 Influence de la position de l'électron sur la nature de l'interaction [1]

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

Dans la vallée Γ , à faible énergie :

Si l'énergie ε de l'électron est plus faible que l'énergie d'émission $\hbar\omega_0$ du phonon optique polaire, les interactions acoustiques ou piézoélectriques sont dominantes. Ce sont des collisions élastiques et isotopes. La direction du vecteur-vitesse des électrons devient aléatoire.

Sous l'effet d'un champ électrique, ces interactions ont une grande influence sur le transport de charges, Leur probabilité totale est $\lambda \approx 10^{12} \text{ s}^{-1}$. Dans le cas d'absorption d'un phonon, cette probabilité décroît rapidement avec la température.

Dans la vallée Γ , à plus forte énergie :

Lorsque l'énergie ε de l'électron est supérieure à $\hbar\omega_0$, l'émission d'un phonon optique polaire est possible (OPE). Cette interaction a une probabilité de l'ordre de $5 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$. Elle provoque une déviation du vecteur-vitesse de l'électron, qui décroît quand l'énergie ε augmente.

L'émission d'un phonon optique polaire devient le processus dominant quand l'énergie cinétique de l'électron dépasse ($\hbar\omega_0$) [9] ; soit 99.2 meV pour AlN et 89 meV pour InN. Quand son énergie augmente et le module de sa vitesse augmente, l'électron est de moins en moins dévié de sa trajectoire. En dépit de la perte d'énergie due à l'émission de phonon, l'électron se transporte de plus en plus vite dans la direction du champ électrique qui l'accélère. Ce qui explique les valeurs élevées de la mobilité électronique dans les nitrures.

Les transferts d'électrons de la vallée Γ dans les vallées L ou X :

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

Les transferts intervallés mettent en jeu les phonons du bord de la zone de Brillouin, dont le vecteur d'onde k_0 est grand devant celui de l'électron dans la vallée Γ . Les transferts s'accompagnent d'une variation d'énergie ($\hbar\omega_0$) qui s'ajoute à la transformation de l'énergie cinétique en énergie potentielle $\Delta E_{\Gamma L}$ ou $\Delta E_{\Gamma X}$.

Electrons dans les vallées supérieures :

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

- Intervallés mettant en jeu des phonons acoustiques ou piézoélectriques, ou l'absorption d'un phonon optique polaire.
- Intervallés équivalentes qui consistent en un transfert d'une vallée X ou L dans l'une des autres vallées équivalentes.
- Intervallés non équivalentes qui consistent en un transfert dans les vallées non équivalentes ($\Gamma \longleftrightarrow X$, $\Gamma \longleftrightarrow L$ ou $X \longleftrightarrow L$).

Ces interactions sont isotropes et d'une probabilité élevée. Elles ont une grande influence sur le mouvement des électrons sous l'effet d'un champ électrique. L'augmentation de la masse effective, peut réduire la mobilité des électrons dans les vallées satellites.

3.8 Rendement de la luminescence d'un semi-conducteur [11] :

Le rendement est limité par les transitions non radiatives comme la transition par transfert d'énergie avec les phonons du réseau cristallin. Puisque l'énergie des phonons est généralement plus faible que celle du gap, pour une seule transition, il faut effectuer des échanges d'énergie avec plusieurs phonons. On peut estimer que pour descendre tout le gap (soit une énergie de l'ordre de 1eV), l'électron doit céder son énergie à 30-40 phonons. Ceci ne se fait pas en une seule fois car la probabilité d'interaction entre un tel nombre de particules est infime. En pratique, cet échange a lieu par étape grâce à l'existence de niveaux électroniques intermédiaires (Figure 3.3). Si de tels niveaux intermédiaires n'existaient pas, une telle émission de phonons en cascade ne peut pas se faire et les transitions radiatives seront alors privilégiées. Cela explique l'importance des défauts et des impuretés dans ce type de Semi-Conducteurs destinés aux applications optiques. En pratique, on cherchera à éviter les dislocations, les lacunes, les impuretés chimiques et les interactions avec les surfaces de ces matériaux.

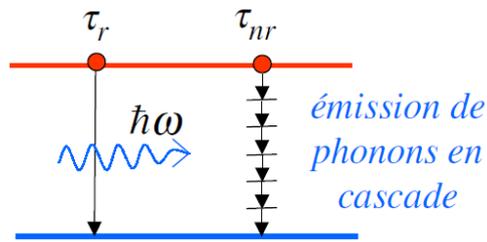


Figure 3.3 : émission des phonons par cascades (Niveaux intermédiaires nécessaires et rôle essentiel des impuretés et des défauts) [11].

3.9 Les recombinaison Auger

La recombinaison Auger est un mécanisme très important de recombinaisons non radiatives. Lors d'une recombinaison Auger, l'électron cède son énergie à un autre électron de la bande de conduction. Ce dernier monte dans la bande mais il est très vite thermalisé (10^{-13} sec) par les interactions avec le réseau cristallin (cascade de phonons). L'énergie est donc perdue sous forme de phonons (échauffement) et aucun photon n'est émis. Ce mécanisme de recombinaison non radiative est représenté schématiquement à la figure 3.4 a. On notera que l'interaction entre l'électron qui descend et l'électron Auger doit respecter la conservation de la quantité de mouvement.

La figure 3.4b illustre le même phénomène avec un électron Auger dans la bande de valence : l'électron qui descend donne son énergie et sa quantité de mouvement à un électron profond de la bande de valence, celui-ci est thermalisé par cascade de phonons. Ce mécanisme s'accompagne par une transition de trous. L'électron qui descend est vu comme un trou qui monte grâce à un échange d'énergie avec un trou de la bande de valence. Ce trou « Auger » est alors thermalisé et remonte dans la bande par cascade de phonons.

Le premier effet « Auger eet » : recombinaison électron-trou par l'intermédiaire d'un électron Auger.

Le second effet « Auger ett » : recombinaison électron-trou par l'intermédiaire d'un trou Auger (la particule Auger étant représentée par les lettres du milieu e et t dans eet et ett, respectivement).

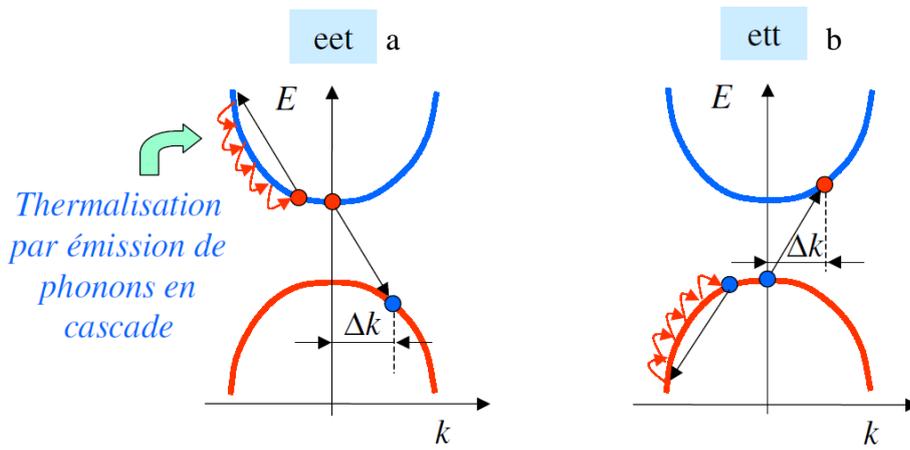


Figure 3.4 : Mécanisme de recombinaison Auger a- recombinaison électron-trou par l'intermédiaire d'un électron Auger (Auger eet), b- recombinaison électron-trou par l'intermédiaire d'un trou Auger (Auger ett) [11].

3.10 Mobilité électronique [2]

3.10.1 Temps de relaxation du courant

La connaissance de la probabilité totale des interactions subies par les électrons avec les phonons, est insuffisante pour déterminer la mobilité électronique, car on doit tenir compte des déviations des trajectoires au cours des collisions. Pour calculer la vitesse électronique ou la mobilité électronique, il faut connaître aussi la fréquence des chocs et l'angle de déviation. En effet, ces deux paramètres sont regroupés en un seul appelé « temps de relaxation du courant τ_m ».

Pour un choc élastique en une bande d'énergie parabolique, I étant le courant associé à un groupe de porteurs dont l'énergie est ε , on peut établir une équation de relaxation :

$$\frac{dI}{dt} = -\frac{I}{\tau_m} \quad (3.18)$$

Schrockley a montré que τ_m peut être donnée par l'équation :

$$\tau_m = (\lambda_j(\varepsilon) \langle 1 - \cos \theta_j(\varepsilon) \rangle)^{-1} \quad (3.19)$$

θ_j est l'angle de déviation de la trajectoire de l'électron, et $\langle 1 - \cos \theta_j(\varepsilon) \rangle$ est la valeur moyenne sur un grand nombre d'interactions.

L'expression du temps de relaxation fait apparaître la fréquence des chocs $\lambda(\varepsilon)$ et les déviations angulaires. La durée de relaxation s'accroît pour des collisions à petits angles de déviation.

3.10.2 Calcul de la mobilité [2]

La vitesse moyenne d'entraînement de la population électronique soumise à un champ électrique E , est donnée par :

$$v_e = q \frac{\tau_m}{m^*} E \quad (3.20)$$

La mobilité « sécante » est le facteur de proportionnalité de la vitesse d'entraînement au module de champ. Elle s'écrit :

$$\mu = q \frac{\tau_m}{m^*} \quad (3.21)$$

et l'on a : $v_e = \mu E$ (3.22)

Pour une population d'électrons ayant une énergie distribuée autour d'une valeur moyenne $\bar{\varepsilon}$; la notion du temps de relaxation, affectée à une valeur déterminée ε de l'énergie, doit être remplacée par le temps de relaxation moyen. Le calcul doit être fait pour l'ensemble des collisions et pour chaque valeur d'énergie ε , pour tenir compte de la distribution.

3.11 Transport de charges en régime stationnaire : caractéristique vitesse-champ

3.11.1 Vitesse et mobilité différentielles [2]

Quand le matériau semi-conducteur est soumis à un champ électrique, les électrons sont accélérés ; une composante d'entraînement s'ajoute à leur vitesse aléatoire. Après une phase transitoire très brève, due à l'apparition du champ, un régime stationnaire est atteint, caractérisé par le fait qu'en tout point et à tout instant, l'énergie gagnée par les électrons dans le champ est exactement compensée par l'énergie perdue lors des collisions.

La distribution de l'énergie des électrons, est déplacée dans le sens des énergies croissantes, par rapport à la maxwellienne de l'équilibre. L'écart entre la valeur moyenne de l'énergie stationnaire ε_{st} de cette distribution, et l'énergie moyenne d'agitation thermique $\frac{3}{2}k_B T$, est plus important quand le champ est plus intense. Lorsque cet écart atteint plusieurs fois $\frac{3}{2} k_B \cdot T$, on dit que les électrons sont « chauds ».

La fréquence et l'efficacité des chocs sur les phonons, croient avec l'énergie des électrons. Pour l'ensemble des électrons, cette croissance se traduit par la variation non linéaire de la vitesse stationnaire d'entraînement, en fonction de l'intensité du champ électrique appliqué.

Références :

- [1] Fatima Zohra Othmani, Etude du transport par la méthode de Monte Carlo : application :Silicium, Germanium, $Si_{1-x}Ge_x$, Mémoire de magister, U. de Tlemcen, 2003.
- [2] R.castagné, J.P Duchemin, M.Gloanie, Ch.Rhumelhard, Circuits integrs en Arsenic de Gallium, Physique, technologie et conception, edition Masson, Mars 1989.
- [3] Abdel Hafid Lallam, Simulation des propriétés électriques des composés ternaires par la méthode de Monte Carlo , Mémoire de magister, U. de Tlemcen, 2005.
- [4] Jerome Saint-Martin, Etude par simulation Monte Carlo d'architectures de MOSFET ultracourts a grille multiple sur SOI, These de Doctorat, U.Pris-Sud (2005).
- [5] Wassila Debbal, Simulation des propriétés électriques des composés ternaires par la méthode de Monte Carlo.Application à l'InAlAs, Mémoire de magister, U.de Tlemcen, 2007.
- [6] C. Sayah «Application de la méthode de Monte Carlo aux composés III-V», Mémoire de magister, U. de Tlemcen,(2002).
- [7] A.E.K Hamdoune, B. Bouazza, A. Guen-Bouazza, A. Lallam et N.E. Chabane-Sari, Développement de la méthode de Monte Carlo pour le calcul des interactions et du transport électrique dans les semiconducteurs ternaires, Afrique Science 03(2),(2007)186– 200
- [8] V. W. L. Chin, T. L. Tansley, and T. Osotchan,&J. Appl. Phys. **75**, 7365 (1994).F
- [9] *Pascal CHEVALIER*, Propriétés des matériaux III-V chapitreI B U. de Lille (1999).
- [10] “Optoélectronique”, Cours de Mr A. –HAM

4.1 Introduction

La simulation par la méthode de Monte Carlo est l'une des techniques les plus utilisées pour étudier le fonctionnement physique des composants électroniques. Cette méthode offre la possibilité de reproduire les phénomènes microscopiques qui se produisent dans les matériaux semi-conducteurs [1].

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

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

4.2 Principe de la méthode

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

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

$$\frac{\partial \vec{k}}{\partial t} = \frac{q \vec{E}}{\hbar} \quad (4.1)$$

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

$$\varepsilon(\vec{K}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m^*} \quad (4.2)$$

- b. Des collisions subies par ces porteurs entraînant des transitions brutales entre les états.

En connaissant la position d'un porteur de charge dans l'espace des vecteurs d'onde \vec{K} , il est possible de la connaître dans l'espace géométrique réel ; et la connaissance de la structure de bande d'énergie $\varepsilon(\vec{K})$ permet de calculer la vitesse des porteurs à chaque instant :

$$\vec{v} = \frac{\partial \varepsilon}{\hbar \partial \vec{k}} \quad (4.3)$$

Par intégration, nous calculons la position des porteurs, au cours du temps.

Il est possible d'accéder à toutes les grandeurs moyennes ; énergie moyenne, vitesse de dérive...Celles-ci peuvent être déduites de deux façons différentes : soit en observant un grand nombre de particules, ce qui permet de calculer les moyennes d'ensemble (cette définition est utile quand les conditions d'étude changent dans le temps), soit en observant un seul électron pendant une durée suffisamment grande. La trajectoire de chaque électron est formée d'une suite de vols

libres effectués sous l'influence de la force externe, puis des chocs sur les différents obstacles qui se trouvent dans le milieu où évolue le porteur.

L'avantage de la méthode de Monte Carlo est de pouvoir obtenir à la fois la durée de vol libre, et les états du porteur après les chocs en utilisant un procédé basé d'une part sur le tirage de nombres aléatoires et d'autre part sur la connaissance des densités de probabilités des interactions subies par le porteur.

Cette méthode permet d'étudier les manifestations des porteurs chauds quelque soient les régimes de champ appliqué. Elle tient compte de façon complète, des formes de bandes d'énergie même complexes ; et des alliages ternaires et de tous les détails de la dynamique microscopique.

Pour améliorer la précision de la méthode, on augmente la durée d'observation t . Cependant, l'amélioration de l'erreur n'évolue qu'en $1/\sqrt{t}$; et ceci peut être un gêne important quand on étudie des comportements fins : estimation d'une mobilité différentielle négative ou vitesse de pic en fonction de certains paramètres (température ou dopage du matériau, par exemple). Ce problème nécessite un soin particulier en absence d'une relation analytique. Il découle que cette méthode nécessite parfois des moyens de calcul importants.

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

4.3 Approche et mise en œuvre de la méthode [3]

L'approche de la méthode de Monte Carlo consiste à suivre le comportement de chaque électron dans l'espace réel et dans l'espace des vecteurs d'ondes. Considérons un électron d'énergie $\varepsilon(t)$ et de vecteur d'onde $k(t)$, placé en $r(t)$ où règne un champ électrique $E(r, t)$. Sous l'action du champ électrique E , les échanges d'énergie et d'impulsion de l'électron avec le réseau cristallin, et la déviation de sa trajectoire par les impuretés, vont modifier son énergie, son vecteur d'onde et sa position. En appliquant les lois de la mécanique et de l'électrodynamique, nous pouvons déterminer théoriquement le comportement de chaque électron dans le temps et dans l'espace des vecteurs d'ondes. Mais, une telle approche, compte tenu de la très grande densité d'atomes dans les cristaux, est irréaliste avec ces moyens de calcul [4]. Afin de rendre le problème plus réaliste :

a)- Nous faisons une étude statistique des échanges d'énergie possibles, entre les électrons, les modes de vibrations du réseau et les impuretés, ce qui nous permet de calculer la probabilité de ces interactions et leur action sur l'énergie et le vecteur d'onde de l'électron. Chaque processus de

collision a une densité $s(\vec{k}, \vec{k}')$ qui caractérise la probabilité par unité de temps pour qu'un électron passe de l'état défini par le vecteur d'onde k vers un autre état défini par le vecteur d'onde k' . La probabilité pour qu'un électron, se trouvant dans l'état k , ait une interaction par unité de temps, est donnée par l'équation (4.4) [5] :

$$\lambda(k(t)) = \int_{\substack{\text{surtous les états} \\ k' \text{ possibles}}} s(\vec{k}, \vec{k}') dk' \quad (4.4)$$

b)- Nous supposons que ces interactions sont instantanées, les électrons sont alors déplacés en vol libre sous le seul effet du champ électrique, entre deux chocs. La probabilité d'avoir un vol libre de durée Δt , suivi d'un choc, est donnée par l'équation (4.5) [6] :

$$p(\Delta t) = 1 - \exp\left[-\int_0^{\Delta t} (\lambda k(t)) \partial t\right] \quad (4.5)$$

La procédure adoptée initialement par Kurosawa [7] pour déterminer les temps de libre parcours Δt , est de tirer au sort des nombres aléatoires r à distribution uniforme entre 0 et 1 [8], et de résoudre l'équation intégrale (4.6) :

$$\int_0^{\Delta t} (\lambda k(t)) \partial t = -\ln(r) \quad (4.6)$$

c)- Lorsqu'une interaction a lieu, nous déterminons sa nature par tirage au sort, et nous modifions, en conséquence, l'énergie et le vecteur d'onde de l'électron et aussi la répartition des électrons; nous calculons alors le champ électrique qui en résulte à des intervalles de temps suffisamment petits, pour pouvoir supposer ce champ constant entre deux calculs [4],[9].

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

$$\alpha = (1 - m^*/m_0) \times \varepsilon \quad (4.7)$$

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

4.4 Présentation du logiciel :

Le logiciel de cette méthode permet de remplir deux fonctions essentielles :

La première est consacrée au calcul des probabilités à partir des expressions usuelles.

La deuxième fonction est destinée à déterminer les grandeurs instantanées définies sur un ensemble d'électrons (l'énergie, la vitesse, la position) par la procédure « Self-Scattering » [2] pour laquelle, les durées de vol libre sont distribuées pour chaque électron.

La mise en œuvre a été adoptée initialement par Kurosawa [11], puis améliorée par d'autres auteurs [12]. Elle est basée sur un processus de tirage au sort à partir de lois de probabilités d'interactions subies par les porteurs durant leur mouvement dans le composé [13].

4.5 Méthode du self scattering

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

4.1). Ceci fournit une expression particulièrement simple pour $p(\Delta t)$:

$$p(\Delta t) = \Gamma e^{-\Gamma \Delta t} \quad (4.8)$$

Si r est un nombre aléatoire à distribution uniforme entre 0 et 1, on aura d'après (4.6) :

$$\Delta t = -\frac{1}{\Gamma} \cdot \text{Lnr} \quad (4.9)$$

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

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

Etant donné que pour utiliser la relation (4.8), il faut se fixer à l'avance la valeur de Γ . Une fois la durée de vol libre Δt déterminée, on calcule l'ensemble des probabilités des interactions susceptibles de se produire à l'instant considéré. Comme on a par définition :

$$\sum_{i=0}^N \lambda_i(\vec{k}) = \Gamma \quad (4.10)$$

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

$$r < \sum_{i=0}^m \lambda_i(\vec{k}) = \lambda_{SC} + \sum_{i=1}^m \lambda_i(\vec{k}) \quad (4.11)$$

Pour toute valeur m , il y a un processus d'interaction choisi qui interviendra. Il apparaît dans ce test que la collision choisie peut être une collision fictive dont la probabilité est λ_{SC} . Si c'est le cas, elle laissera le vecteur d'onde inchangé et le mouvement se poursuivra directement pour le Δt suivant. Dans le cas contraire ; de nouveaux nombres aléatoires permettent de définir la position du vecteur d'onde, après le choc. L'avantage de cette procédure est le choix de la valeur de Γ de manière à minimiser le nombre de collisions fictives. [2].

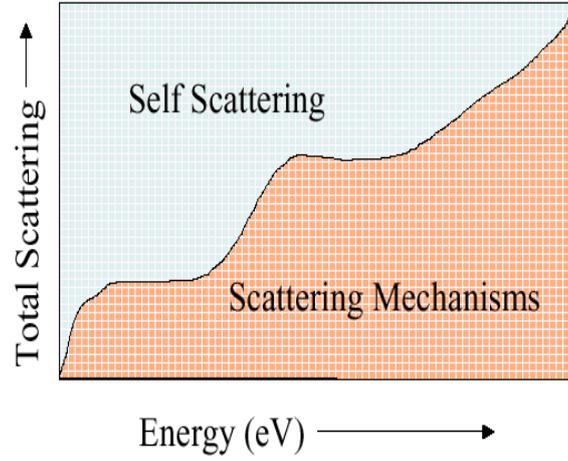


Figure 4.1 : Probabilité totale d'interactions et Self Scattering [14].

4.6 Temps de vol libre [15]

Le mouvement des particules est décrit comme étant une succession de vols libres (sous l'action du seul champ électrique), entrecoupée d'interactions instantanées [16].

$\lambda(k(t))\partial t$ Présente la probabilité pour qu'un électron ait une interaction entre t et $t+\partial t$. la probabilité $P_f(t)$ pour que l'interaction ne se produise pas au temps t , est donnée par [17] :

$$p_f(t) = \prod_i (1 - \lambda(k(t))\partial t) \quad (4.12)$$

$$\text{En prenant } t = \sum_i \partial t_i \quad (4.13)$$

On a alors :

$$p_f(t) = \exp\left(-\int_0^t \lambda(k(t'))\partial t'\right) \quad (4.14)$$

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

$$p(\Delta t) = \int_0^{\Delta t} \lambda(k(t)) \cdot \exp\left[-\int_0^t \lambda(k(t'))\partial t'\right] \partial t \quad (4.15)$$

$$p(\Delta t) = 1 - \exp\left[-\int_0^{\Delta t} \lambda(k(t))\partial t\right] \quad (4.16)$$

La relation (4.16) nous donne les durées de vol libre qui seront effectivement suivies d'un choc. La procédure adoptée initialement par Kurosawa pour déterminer les temps de libre parcours est de tirer des nombres r à distribution uniforme entre 0 et 1 et de résoudre l'équation intégrale suivante :

$$\int_0^{\Delta t} \lambda(k(t))\partial t = -Lnr \quad (4.17)$$

Dans le cas général, l'expression (4.16) est assez complexe, et l'équation (4.17) n'est pas intégrable analytiquement. Pour simplifier l'expression (4.17), Rees a suggéré d'ajouter à l'ensemble des mécanismes de collisions réelles, le processus du Self Scattering [2].

4.7 Mouvement des électrons

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

$$k(t) = k(0) - \frac{e.E}{\hbar} . t \quad (4.18)$$

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

$$\frac{\hbar^2 . k^2(t)}{2m^*} = \varepsilon(t) . (1 + \alpha . \varepsilon(t)) \quad (4.19)$$

D'où l'on tire son énergie :

$$\varepsilon(t) = \frac{1}{2\alpha} \left[\sqrt{1 + \frac{2\alpha . \hbar^2 . k^2(t)}{m^*}} - 1 \right] \quad (4.20)$$

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

$$v(t) = \frac{1}{\hbar} . \frac{\partial \varepsilon(t)}{\partial k} = \frac{\hbar . k(t)}{m^* (1 + 2\alpha . \varepsilon(t))} \quad (4.21)$$

4.8 Procédure du choix d'interaction [20]

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

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

4.9 Génération des nombres aléatoires

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

$$r_i = pr_{i-1} \pmod{q} \quad (4.22)$$

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

4.10 Génération des nombres aléatoires, avec une loi de probabilité

Les nombres aléatoires x suivant une loi de probabilité $f(x)$ dans l'intervalle $[a,b]$, peuvent être obtenus à partir des nombres aléatoires r distribués dans l'intervalle $[0,1]$, par plusieurs méthodes [19].

4.10.1 Méthode directe [18].

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

$$r = F(x_r) = \int_a^{x_r} f(x) dx \quad (4.23)$$

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

$$r = \int_a^{x_r} f(x) dx \bigg/ \int_a^b f(x) dx \quad (4.24)$$

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

$$x_r = a + (b-a)r \quad (4.25)$$

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

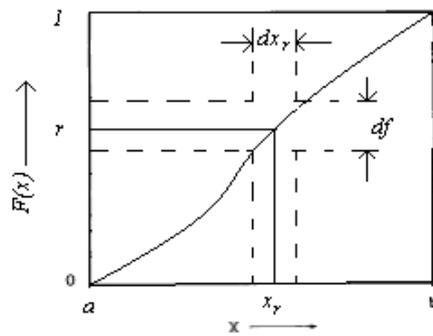


Figure 4.2 : Technique directe : génération de la variable aléatoire x_r avec une fonction de probabilité $f(x)=dF(x)/dx$ [19]

4.10.2 Méthode du rejet [18].

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

$$x_1 = a + (b-a)r_1 \text{ et } f_1 = r_1' C \quad (4.26)$$

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

$$\text{Si } f_1 \leq f(x_1), \text{ alors } x = x_1 \quad (4.27)$$

Dans le cas contraire, on prend une nouvelle paire r_2 et r_2' ; et les itérations sont poursuivies jusqu'à avoir l'équation $f_i \leq f(x_i)$.

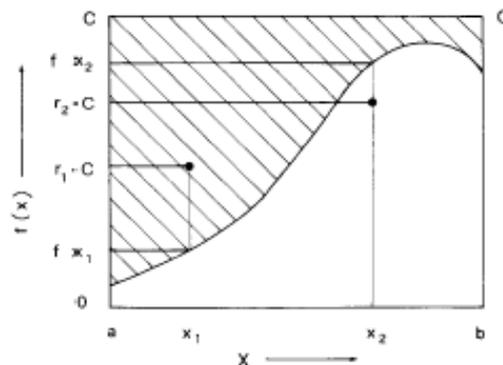


Figure 4.3 : Technique de rejet, génération de la variable aléatoire x_r , avec une fonction de probabilité $f(x)$ [19].

4.10.3 Méthode combinée [18]

Soit x_1 un nombre aléatoire généré par la méthode directe de loi de probabilité $g(x)$ et soit K une constante telle que $K g(x) \geq f(x)$ pour $x \in [a, b]$ et r_1 un nombre aléatoire $\in [0, 1]$; x_1 n'est pas rejeté si $r_1 \cdot K \cdot g(x_1) \geq f(x_1)$

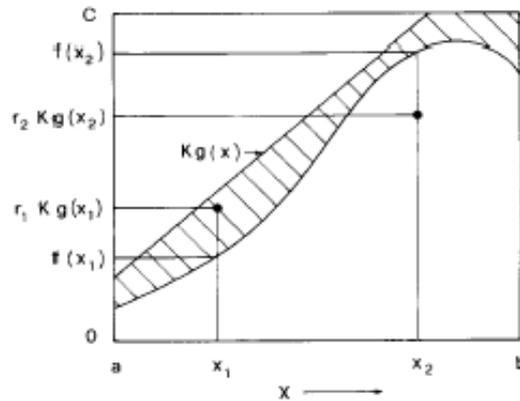


Figure 4.4 : Technique combinée, génération de la variable aléatoire x , avec une fonction de probabilité $f(x)$ [19].

4.11 Etapes de calcul [15]

Pour permettre une meilleure compréhension de la méthode de Monte Carlo utilisée, nous présentons son organigramme sur la figure 4.5.

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

1. Une étape de vol libre entre l'instant t et $t+\Delta t$, pendant laquelle l'état du porteur est donné par les lois de la dynamique, compte tenu de son état à l'instant t . Pour le porteur p , on connaît donc la position du vecteur d'onde $\vec{k}_p(t)$, sa position \vec{r}_p à l'instant t et son énergie ε qui est fonction de la position du vecteur d'onde [19] :

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

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

- S'il y a eu interaction, on place l'interaction précisément à l'instant $t+\Delta t$ et on cherche le nouveau vecteur d'onde \vec{k}_p après le choc, par tirage au sort

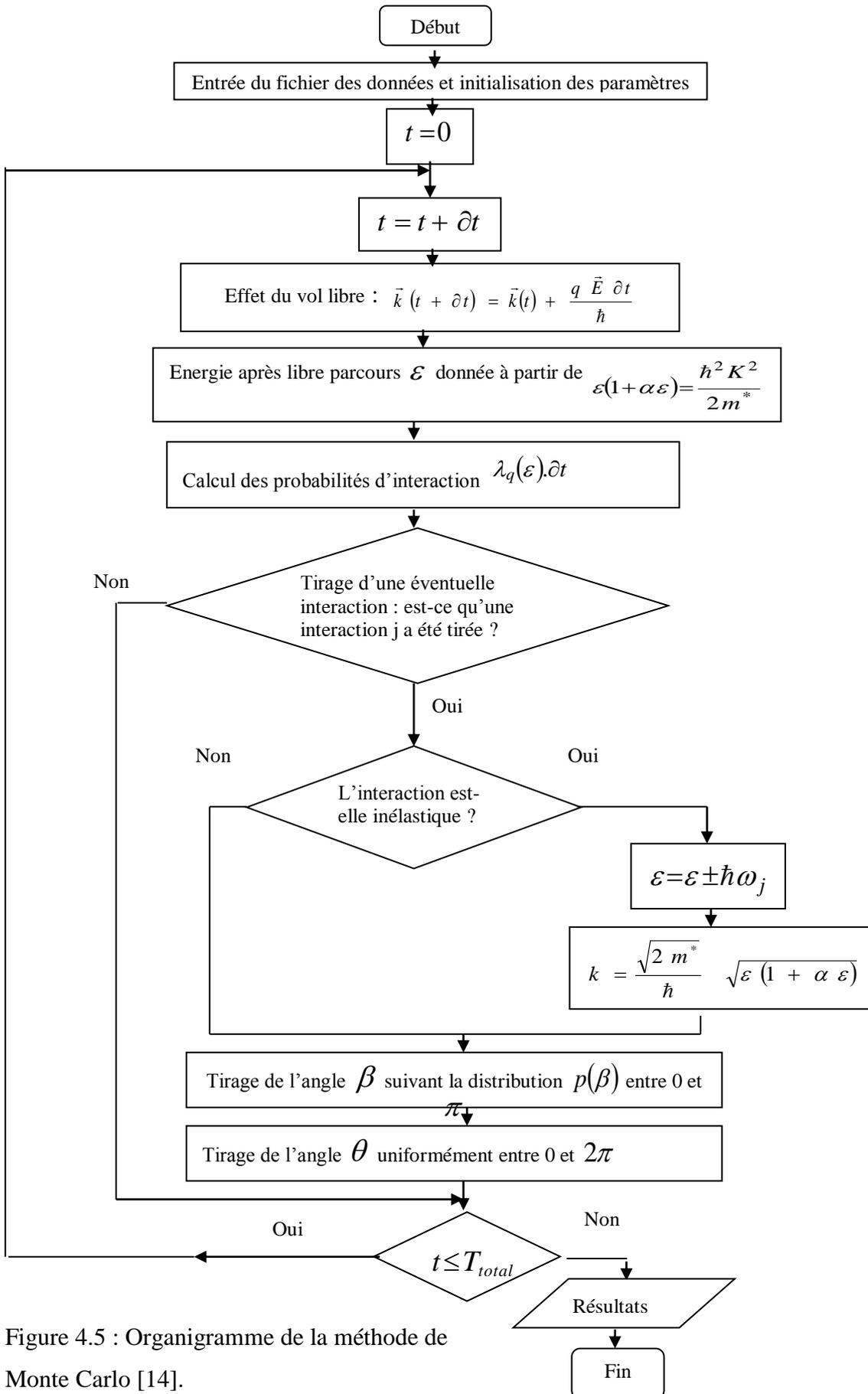


Figure 4.5 : Organigramme de la méthode de Monte Carlo [14].

4.11 Description du logiciel [14]

Dans notre travail, nous utilisons un programme écrit en langage Fortran 90 MSDEV, afin de simuler 20000 électrons.

Ce logiciel permet de remplir deux fonctions essentielles. La première est consacrée au calcul des probabilités à partir des expressions usuelles, en considérant dans notre cas, un modèle à trois vallées (Γ , L, X), isotropes mais non paraboliques. Les interactions prises en compte sont dues aux phonons acoustiques, aux phonons optiques polaires intervallées et aux impuretés. La deuxième fonction est destinée à déterminer les grandeurs instantanées définies sur un ensemble d'électrons (l'énergie, la vitesse, la position) par la procédure « Self Scattering » pour laquelle les durées de vol libre sont distribuées pour chaque électron.

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

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

1. Lecture du fichier de données concernant les paramètres du matériau utilisé, tels que les énergies du gap, les masses effectives, les potentiels de déformation, les coefficients de non parabolicité, la vitesse du son, la concentration des impuretés, la température du réseau, les champs électrique appliqués, etc...., dans un fichier.txt.
2. Exécution du logiciel.
3. Fourniture des fichiers de sorties : les valeurs des probabilités d'interaction, les vitesses dans les différentes vallées, les énergies...

Références

- [1] A.Negol, A.Guyot, J.Zimmermann, A dedicated circuit for changed particles simulation using the Monte Carlo, Proceeding of IEEE International conference on application specific systems, architectures and processors (AASAP 97), IEEE, 1997.
- [2] J. Zimmermann, étude par la méthode de Monte Carlo des phénomènes de transport électronique dans le Silicium de type N en régimes stationnaire et non stationnaire. Application à la simulation des composants submicroniques, Thèse de doctorat d'état, U.de Lille 1,1980.
- [3] A.E.K Hamdoune, B. Bouazza, A. Guen-Bouazza, A. Lallam et 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(2), (2007), 186 - 200
- [4] J.L.Thobel, simulation Monte Carlo du transport électronique et des phénomènes de diffusion dans les systèmes à base de semi-conducteurs III-V, Thèse d'habitation à diriger des recherches en science physique, U de Lille 1, 2000.
- [5] Jérôme Saint-Martin, "Etude par simulation Monte Carlo d'architectures de MOSFET ultracourts a grille multiple sur SOI", Thèse de doctorat, U.Pris-Sud (2005).
- [6] S. Galden "Etude du transistor bipolaire a double heterojonction Si/SiGe/Si par la simulation Monte Carlo", These de doctorat, U. Paris sud (1992).
- [7] P. J. Price, IBM Journal of Research and Development, Vol 17 (1973) 39
- [8] O. Mouton, J. L. Thobel, and R. Fauquemberg "Monte Carlo simulation of high-field electron transport in GaAs using an analytical band structure model", J. Appl.Phys., 74 (10) (1993).
- [9] W. Fawcett, A. D. Roardman and S. Swain, Journal of Physics and Chemistry of solids, Vol 31 (1970)
- [10] A. F. M. Anwar, Wu. Shangli and T. Richard, "Temperature dependent transport properties in GaN, Al_xGa_{1-x}N, and In_xGa_{1-x}N semiconductors", IEEE Transactions on Electron Devices, Vol.48, N°3 (2001) 567-572.
- [11] T. Kurosawa, Journal of the physical society of Japan, supplement 21 (1966) 424
- [12] P. J. Price, IBM Journal of Research and Development, Vol 17 (1973) 39
- [13] O. Mouton, J. L. Thobel, and R. Fauquemberg "Monte Carlo simulation of high-field electron transport in GaAs using an analytical band structure model", J. Appl.Phys., 74 (10) (1993)
- [14] Josan harris Dragica Vasileska, « Monte Carlo simulation of GaAs devices using high generality object-oriented code and encapsulated scattering tables » department of electrical

engineering , Arizona state university. Tempe, AZ85287-5706 USA.

[15] Sayah Choukria, Application de la méthode de Monte Carlo aux composés III-V, Mémoire de magister U. de Tlemcen, 2002.

[16] S.Galden, étude du transistor dipolaire à double hétérojonction Si/SiGe/Si par simulation Monte Carlo, Thèse de doctorat, U. de Paris sud, 1992.

[17] O.Mouton, J.L Thobel, and R. Fauquemberg, "Monte Carlo simulation of high-field electron transport in GaAs using an analytical band structure model "J.Apl.Phys. 74, (10), 1993.

[18] P.Arifin, E.M Glodys, T.L. Tansley, Electron mobility in low temperature grown gallium arsenide, semiconductor science and technology Laboratories, physics Department, Macqarie University, NSW 2109, Australia, 1995.

[19] Abdel Hafid Lallam, Simulation des propriétés électriques des composés ternaires par la méthode de Monte Carlo, Mémoire de magister U. de Tlemcen, 2005.

5.1 Introduction :

Pour simuler le phénomène de transport électrique dans l'alliage InAlN, nous utilisons méthode de simulation de Monte Carlo écrite en langage Fortran. Ce langage n'est pas nécessairement le meilleur en programmation scientifique, mais il est certainement le plus répandu : les programmes et sous-programmes existants et relatifs a cette méthode, sont en Fortran.

L'alliage ternaire InAlN fait, à l'heure actuelle, l'objet de plusieurs investigations à cause de ses avantages dans l'électronique et l'optoélectronique.

La structure de bande des nitrures AlN, InN et leurs alliages, peut être classiquement décrite par le modèle de "Littlejohn" qui considère trois vallées Γ , L et X quasi paraboliques, et qui est suffisant pour décrire le comportement électrique des composés.

Pour calculer le transport électrique dans ces ternaires, nous utilisons la méthode de simulation de Monte Carlo en tenant compte de tous les mécanismes de dispersions dans les alliages.

Nous allons examiner les deux régimes, permanent et transitoire :

- Dans le régime stationnaire, nous calculons l'énergie en fonction du champ électrique appliqué ainsi que la vitesse en fonction du champ électrique pour plusieurs températures.

Lorsque les électrons sont portés à une température T, ils sont soumis à l'effet de l'agitation thermique et ils sont animés d'un mouvement brownien dont la vitesse moyenne est nulle. Sous l'effet d'un champ électrique, les électrons sont accélérés. Leur énergie augmente et ils peuvent passer aux niveaux supérieurs, dans la bande de conduction. Cependant, les collisions inélastiques vont faire diminuer cette énergie et leur modifier la direction de propagation. En effet ces collisions vont ralentir leur mouvement parallèle au champ électrique.

5.2 Vitesse et énergie en fonction du champ électrique

La vitesse des électrons est un des paramètres essentiels pour décrire le comportement d'un composé. Dans notre étude ; nous nous intéressons à la vitesse de dérive des électrons, qui est une vitesse moyenne de parcours. En effet ; les électrons, sous l'influence de l'énergie thermique, vont avoir un parcours aléatoire et par conséquent nul (la somme est nulle) ; mais quand ils sont soumis à l'action d'un champ électrique, leur chemin n'est plus aléatoire et la distance parcourue n'est pas nulle. Après un choc subi par un électron, ce dernier va avoir une composante de vitesse nulle dans le sens parallèle au champ électrique, mais l'effet de l'agitation thermique fait que l'électron reprend de la vitesse. Les électrons se déplacent dans le sens contraire de celui du champ électrique. Les effets des collisions perturbent le mouvement de l'électron. Einstein, dans son modèle, a supposé que chaque atome est constitué d'un oscillateur harmonique vibrant d'une manière indépendante. Ces oscillateurs ont un mouvement sinusoïdal et une énergie quantifiée.

Le libre parcours moyen est la distance moyenne parcourue par l'électron entre deux collisions successives (la distance traversée par l'électron). Elle s'approche de la distance d'équilibre entre les ions avec lesquels les électrons entrent en collision dans un gaz d'électrons. La vitesse instantanée est donnée par l'équation :

$$v = \frac{l \cdot e}{t} \quad (5.1)$$

Avec l est le libre parcours moyen et t est temps entre deux collisions.

La mobilité est définie comme le rapport de la vitesse de dérive sur le champ électrique, et elle dépend des collisions :

$$\mu = \frac{V}{E} \quad (5.2)$$

Dans un cristal parfait à $T=0$ K, il y a des directions où l'électron peut se déplacer sans subir de chocs. Lorsque la température augmente, il apparaît l'effet de l'agitation thermique qui va perturber cet ordre. En effet ; les atomes vont se mettre à vibrer autour de leur position d'équilibre, ce qui va réduire leur libre parcours moyen et par conséquent, la vitesse et la mobilité des électrons libres vont diminuer.

5.3 Résultats de la simulation Monte Carlo

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

5.3.1 Energie en fonction du champ électrique :

Les énergies en fonction du champ électrique dans l'alliage InAlN, pour différentes fractions molaires sont illustrées par la figure 5.1.

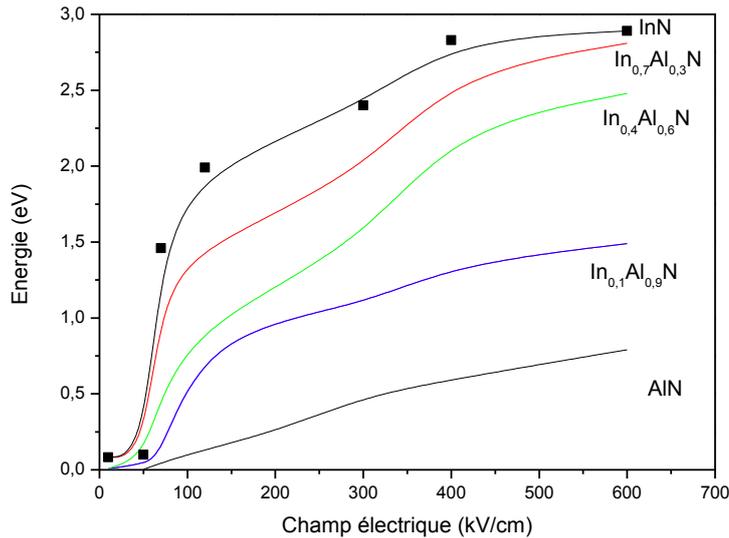


Figure 5.1 : L'énergie dans $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$, en fonction du champ électrique pour différentes fractions molaires.

Si nous examinons la moyenne d'énergie d'électrons en fonction du champ électrique appliqué, nous voyons qu'il y a une augmentation soudaine, à environ 100 kV / cm dans des différents fractions molaires. Initialement, la moyenne d'énergie des électrons reste faible, à peine plus élevé que l'énergie thermique, $3/2 K_B T$ (K_B désigne la constante de Boltzmann).

Afin de comprendre les raisons de cette augmentation, nous notons que le mécanisme dominant de perte d'énergie pour un grand nombre de composés III-V, y compris les nitrures est du aux interactions des phonons optiques polaires. Lorsque le champ électrique appliqué est inférieure à 100 kV/cm, toute l'énergie que les électrons gagnent de l'application de champ électrique est perdue par interactions des phonons optiques polaires. Les autres mécanismes de dispersion : les interactions des impuretés ionisées, les interactions piézoélectriques, acoustiques et potentielles de diffusion de déformation, ne suppriment pas l'énergie de l'électron, c'est-à-dire, ils sont des mécanismes de diffusion élastique. Au-delà d'un certain champ électrique critique, le mécanisme des interactions des phonons optiques polaires ne peut plus supprimer l'ensemble de l'énergie tirée de l'application de champ électrique. D'autres mécanismes de diffusion commencent à jouer un rôle. La moyenne d'énergie d'électrons augmente jusqu'à ce que la dispersion intervallée commence et un équilibre est rétabli. Comme le champ électrique appliqué est augmentée au-delà de 150 kV/cm, la moyenne d'énergie des électrons augmente jusqu'à ce qu'une fraction des électrons ont acquis assez d'énergie en vue d'un transfert dans la vallée la plus haute (c'est-à-dire une énergie qui correspond à l'énergie intervallée entre la vallée Γ et X).

Pour des fractions molaires importante en Al, l'énergie de gap augmente, donc il faut appliquer un champ électrique plus fort, par conséquent le champ électrique critique (pour lequel l'énergie commence à augmenter) devient plus grand, il est de 300 kV/cm pour l'AlN. Par ailleurs, l'énergie intervallée diminue en augmentant la fraction molaire de l'Al, ce qui fait que l'énergie moyenne diminue, elle ne dépasse pas 1 eV dans le cas de l'AlN

Par contre, pour des fractions molaires importante en In, l'énergie de gap diminue, donc le champ électrique critique (pour lequel l'énergie commence à augmenter) est plus petit dans ce cas, il est de 50 kV/cm pour l'InN. D'autre part, l'énergie intervallée en augmentant la fraction molaire de l'In, devient un peu plus grande et donc l'énergie moyenne augmente légèrement, elle est autour de 2.85 eV pour l'InN.

En augmentant la fraction molaire d'In dans l'alliage InAlN, l'énergie des électrons devient plus importante pour des champs électriques relativement petits, donc il suffit donc d'une petite excitation pour que l'électron ait une énergie importante, ce qui est un point important dans le domaine de l'optoélectronique.

5.3.2 Vitesse en fonction du champ électrique :

Pour le composé ternaire InAlN Zinc Blende, nous entreprenons une étude en fonction du champ électrique de la vitesse des électrons pour différentes fractions molaires d'Indium, pour une température 300 k (la température ambiante) et une concentration d'électrons de 10^{17} cm^{-3} . Les résultats sont données dans la figure 5.2.

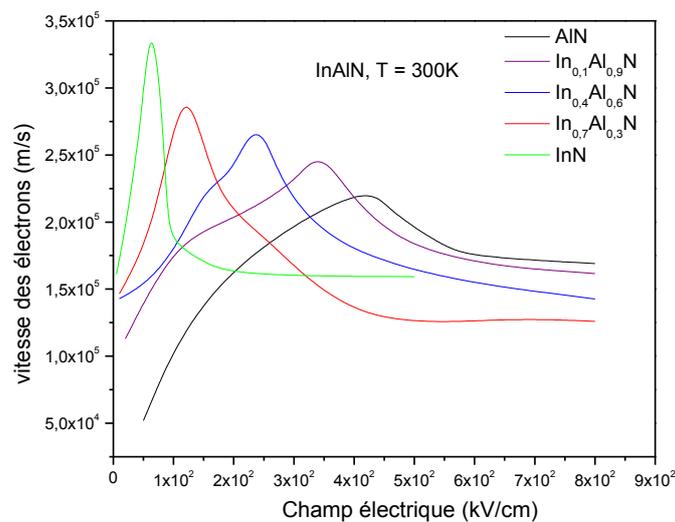


Figure 5.2: La vitesse de dérive des électrons en fonction du champ électrique appliqué dans $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$, pour différentes fractions molaires d'indium, à $T = 300\text{K}$.

Les mécanismes de diffusion inclus dans notre simulation sont les suivants: phonon acoustique, phonon optique polaire et non polaire (intervallée équivalent et non équivalent), impuretés ionisées et diffusion piézoélectrique.

L'augmentation la fraction molaire de l'Indium dans $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$ donne une diminution de l'énergie du gap, et l'énergie qui sépare les vallées Γ et L, et de la masse effective. La diminution de la masse de l'électron dans la vallée centrale, en augmentant la fraction molaire (x), entraîne une croissance de la mobilité et une augmentation de la vitesse de dérive des électrons. Quand la fraction molaire augmente, l'énergie qui sépare les vallées Γ et L diminue, il y a alors une diminution du champ électrique critique pour lequel la vitesse atteint son pic. La diminution de cette énergie entraîne aussi une augmentation du taux de dispersion des électrons, et donc une croissance de la population dans les vallées supérieures et des grandes vitesses pour les petits champs électriques.

5.3.3 Comparaison entre la vitesse des électrons dans InAlN et celle des autres alliages AlGaN et InGaN :

Les vitesses en fonction du champ électrique dans les alliages AlGaN et InGaN, pour une température 300 k (la température ambiante) et une concentration d'électrons de 10^{17} cm^{-3} pour différentes fractions molaires sont illustrées par les figures 5.3 et 5.4 respectivement.

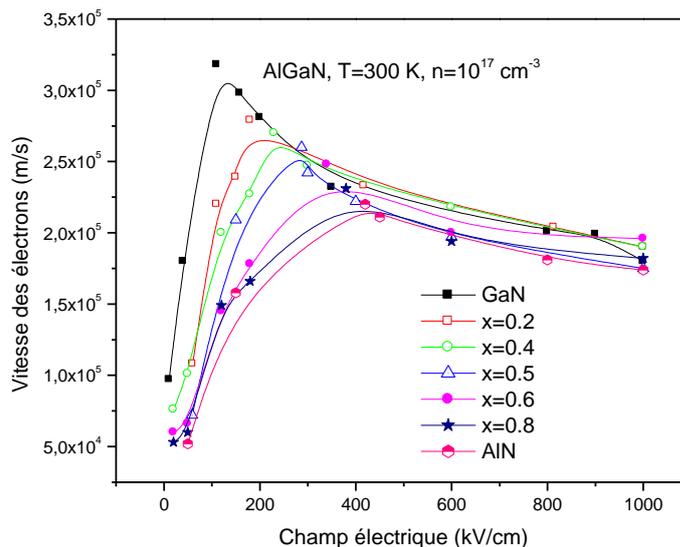


Figure 5.3 : Vitesse des électrons dans AlGaN, en fonction du champ électrique pour différentes fractions molaires (x=0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1) à une température de 300K [1].

L'augmentation la fraction molaire de l'aluminium dans l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ donne une croissance de l'énergie du gap, de l'énergie qui sépare les vallées Γ et L, et de la masse effective. La croissance

de la masse de l'électron dans la vallée centrale, en augmentant la fraction molaire (x), entraîne une décroissance de la mobilité et une diminution de la vitesse de dérive des électrons. Quand la fraction molaire augmente, l'énergie qui sépare les vallées Γ et L augmente, il y a alors une augmentation du champ électrique critique pour lequel la vitesse atteint son pic.

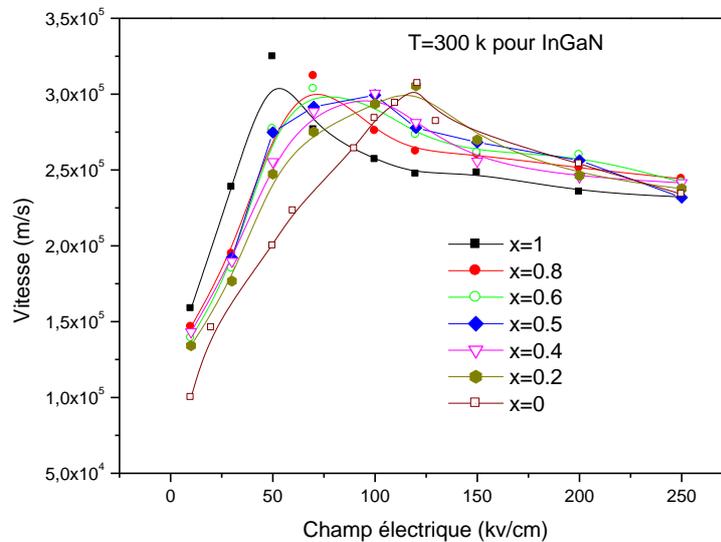


Figure 5.4 : La vitesse des électrons dans InGaN, en fonction du champ électrique pour différentes fraction molaires ($x=0, 0.2, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8, 1$) à une température de 300 K [2].

La vitesse de dérive pour InGaN est tracée en fonction du champ électrique et pour différentes fractions molaires de l'Indium. Avec l'augmentation de la fraction de l'indium, la vitesse augmente d'abord puis diminue progressivement, cela peut s'expliquer comme suit :

Avec l'augmentation de la fraction molaire de l'In ; l'énergie séparant les vallées Γ et L, et la masse effective des électrons dans la vallée centrale diminuent, tandis que la masse effective des électrons dans les vallées supérieures augmente. La diminution de la masse effective des électrons dans la vallée centrale, entraîne une augmentation de la vitesse de ces électrons. Toutefois, en raison de la diminution de l'énergie séparant les vallées Γ et L et l'augmentation des collisions intervallées qui est due à l'augmentation de la population dans les vallées supérieures, on a une baisse de la vitesse de dérive.

De ces deux processus, l'augmentation de la vitesse de dérive est due à la réduction de la masse effective dans la vallée centrale pour des fractions molaires de l'In jusqu'à 0.8 ($x \leq 0.8$). Pour une fraction molaire supérieure ($x > 0.8$), la réduction de la vitesse de dérive est due à la forte densité de population dans les vallées supérieures. Il est important de signaler que la population dans la haute

vallée pour un champ électrique de 500KV/cm, augmente de 58% dans GaN, à 85.7% dans InN. Pour InGaN, la vitesse de saturation dépend faiblement du dopage.

En conclusion, en comparant la vitesse des électrons dans les trois alliages, nous remarquons que la vitesse est plus importante en augmentant la fraction molaire d'In dans les alliages InGaN et InAlN, mais les électrons arrivent à la vitesse de saturation pour des champs électriques relativement petits ($E \leq 500$ kV/cm) dans InGaN par contre la vitesse de saturation dans AlGaN est atteinte pour des champs beaucoup plus importants comme le cas de l'alliage AlGaN.

Dans l'alliage InAlN, en changeant les fractions molaires d'Indium 0 (qui correspond à AlN), à 1 (qui correspond à InN), nous avons les avantages des autres alliages c'est-à-dire une grande vitesse et une vitesse de saturation pour un grand champ électrique.

5.3.4 Vitesse des électrons en fonction du champ électrique pour différentes températures :

Quand on porte le cristal à des températures très basses, l'énergie de l'agitation thermique des électrons ($\frac{3}{2}k_B T$) devient nettement plus petite que l'énergie du phonon optique polaire ($\hbar\omega_0 = 91.2$ meV). A $T=77$ K qui est la température de l'azote liquide, l'énergie de l'agitation thermique ne dépasse pas 9.96 meV. Pour les électrons de basses énergies, les interactions dominantes se produisent avec les phonons acoustiques ou par absorption d'un phonon optique. Dans les deux cas, la densité des phonons est très réduite, les probabilités d'interactions sont alors très faibles. Les vitesses des électrons pour différentes températures et différentes fraction molaires d'In sont données par les figures 5.3 à 5.6.

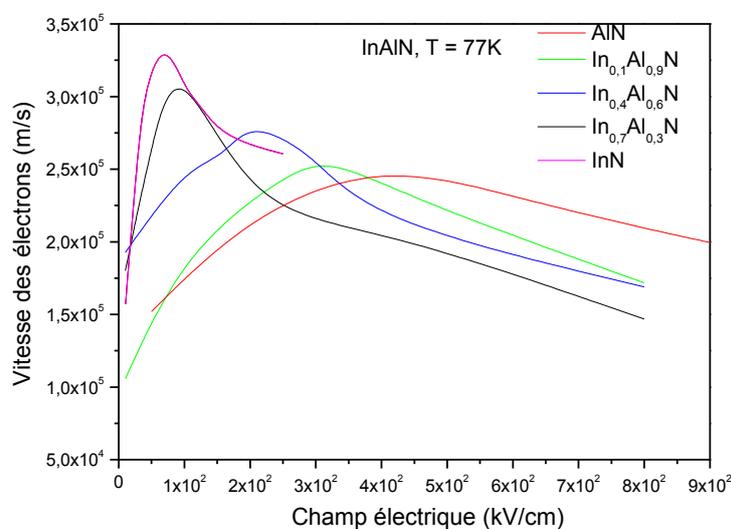


Figure 5.5 : La vitesse de dérive des électrons en fonction du champ électrique appliqué dans $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$, pour différentes fractions molaires d'indium, à $T = 77$ K.

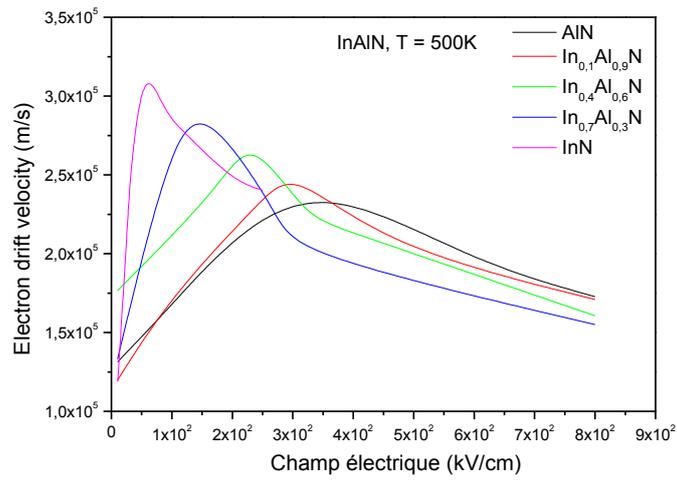


Figure 5.6: La vitesse de dérive des électrons par rapport au champ électrique appliqué dans $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$, pour différentes fractions molaires d'indium, à $T = 500\text{K}$.

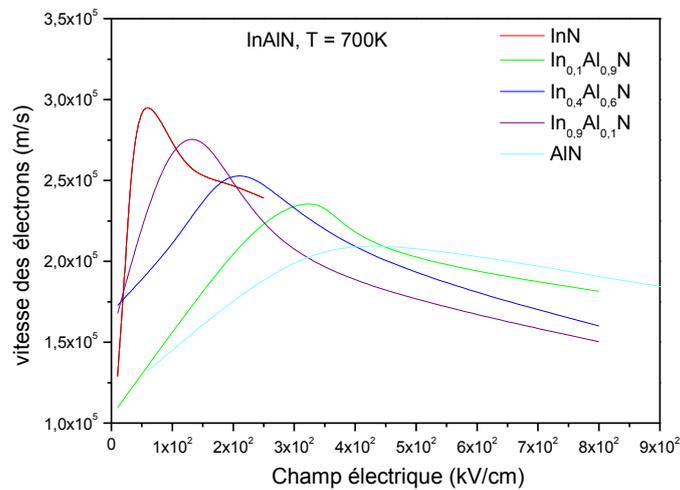


Figure 5.7: La vitesse de dérive des électrons en fonction du champ électrique appliqué dans $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$, pour différentes fractions molaires d'indium, à $T = 700\text{K}$.

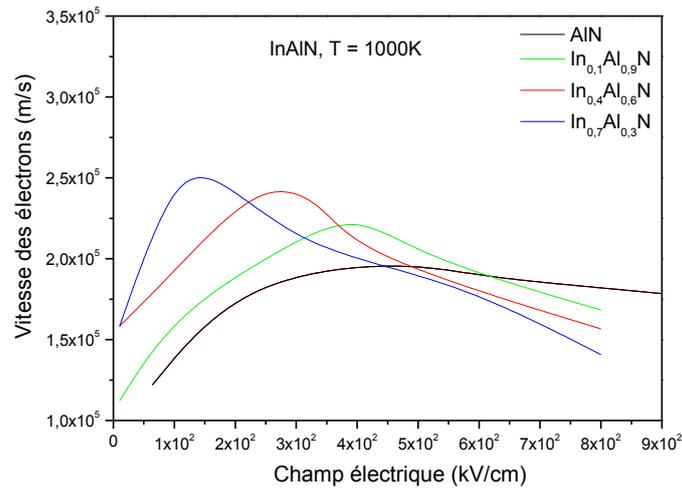


Figure 5.8 : La vitesse de dérive des électrons en fonction du champ électrique appliqué pour AIN, In_{0.1}Al_{0.7}N, In_{0.6}Al_{0.4}N, In_{0.7}Al_{0.3}N.

Avec l'augmentation de la fraction molaire d'indium, la vitesse augmente d'abord puis diminue progressivement, ceci peut s'expliquer comme suit:

Les deux énergies entre les vallées Γ et L, et la masse effective des électrons dans la vallée centrale, diminuent. Les électrons ont alors une grande mobilité et une grande vitesse jusqu'à ce que le champ appliqué atteigne une valeur critique ; ils atteignent leur vitesse maximale. À ce stade, ils sont transférés dans la haute vallée où leur population et leur masse effective augmentent ; les collisions intervallées augmentent. Pour cette raison, leur vitesse commence à diminuer jusqu'à la saturation.

Pour toutes les températures, lorsque la fraction molaire de l'indium augmente, le dépassement des électrons augmente, par rapport aux changements de champ critiques pour abaisser les champs et la vitesse de saturation diminue.

Ce dernier est obtenu pour un champ électrique inférieur ou égal à 800kV / cm.

Lorsque la température est très basse, l'énergie d'agitation thermique électronique ($3/2 kBT$) devient beaucoup plus faible que l'énergie du phonon optique polaire ($\hbar \omega_0 = 91.2\text{meV}$).

À $T = 77\text{K}$ qui est la température de l'azote liquide, l'énergie du mouvement thermique ne dépasse pas 9,96 meV. Pour les électrons de basse énergie, l'interaction phonon acoustique ou phonon optique polaire dominant. Dans les deux cas; la densité des phonons est très faible et les probabilités d'interaction sont très faibles. Cette température correspond à la meilleure vitesse électronique.

La diffusion d'électrons est dominée par des collisions de phonons acoustiques, des impuretés ionisées et l'absorption de phonons optiques polaires sont faibles à des températures très basses, ce qui améliore la mobilité et la vitesse.

Lorsque la température augmente il y a une croissance, l'augmentation de l'énergie cinétique des électrons, ils se déplacent plus et ensuite entrent en collision avec d'autres atomes en transférant leurs énergies. Cela entraînera une diminution du taux d'électrons libres.

À faible champ électrique et pour des températures jusqu'à 300K, la dispersion d'impureté domine et ainsi il y a une augmentation de la vitesse. À haute température, la bosse disparaît à cause de la dominance de la collision de phonons optiques polaires avec une réduction de la collision des impuretés. Pour les grands champs, la dispersion est dominée par la collision de phonons optiques polaires, avec une dépendance à basse température.

5.4 Conclusion :

- L'énergie des électrons dans l'alliage InAlN varie des petites énergies pour AlN vers les grandes énergies d'InN
 - Pour la vitesse, elle est plus importante pour les grandes fractions d'indium et arrive à la vitesse de saturation pour un faible champ et elle est moins importante pour les petites fractions d'indium mais la vitesse de saturation est atteinte pour un champ plus grand
 - Dans l'alliage InAlN, on peut appliquer des températures allant au-delà de 1000 K comparé à l'alliage InGaN, la température ne peut pas dépasser 700 K.

L'alliage InAlN présente les avantages de l'alliage InGaN pour les grandes fractions d'indium, en revanche la grande vitesse pour les faibles champs électriques et les petites températures et aussi les avantages de l'alliage AlGaIn pour les grandes fractions d'aluminium, en particulier, les grands champs de saturation et la résistance aux grandes températures. Ça qui met en évidence l'intérêt de cet alliage dans le domaine de l'optoélectronique.

Références

- [1] N.Bachir, A. Hamdoune, b.Bouazza, N. E. Chabane Sari, Effect of the temperature and doping on electron transport in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alloy by monte carlo, IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering 13 (2010)
- [2] A. Hamdoune, N. Bachir, “Effects of Temperature and Concentration of Indium within Bulk Cubic $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$: Calculation of Steady State Electron Transport by Method of Monte Carlo Simulation”, International Journal of Computer and Electrical Engineering, Vol. 2, No. 5, October, 201

CONCLUSION GENERALE

Dans ce travail, nous avons rappelé les principales propriétés des nitrures binaires InN et AlN dans le type de structures cubique ; puis nous avons étudié le phénomène de transport électrique dans le composé ternaire à base de nitrures : InAlN, nous avons utilisé la méthode de simulation de Monte Carlo, qui consiste à simuler le comportement des électrons dans la bande de conduction en se basant sur l'évolution de la vitesse et le changement de l'énergie en fonction du champ électrique, pour différentes températures et différentes fractions molaires d'indium.

Les résultats obtenus nous ont permis de conclure que:

➤ Dans l'alliage $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$, la vitesse des électrons peut atteindre des grandes valeurs pour des faibles champs électriques, dans le cas des grandes fractions molaires d'indium, et nous avons aussi, la vitesse de saturation est atteinte pour des champs électriques élevés pour les grandes fractions molaires d'aluminium

➤ Cet alliage est plus intéressant pour les petites valeurs de champs électriques et les petites températures, et il est aussi bon pour les grandes températures et il peut résister à des grandes températures allant jusqu'à 1000 K.

➤ Pour les températures basses l'Alliage InAlN, devient plus intéressant car pour cette température il possède la meilleure vitesse électronique

➤ Le même alliage résiste à des températures hautes pour les grandes fractions molaires d'Aluminium, cette propriété aide le transport des électrons et elle réserve l'alliage dur.

➤ Le ternaire InAlN présente :

- une tension de claquage élevée grâce à la grande bande interdite, permettant des impédances de sortie élevées.
- Grande linéarité, résistance aux pulses électromagnétiques, stabilité à haute température, stabilité chimique, surtout pour les grandes fractions molaires d'aluminium

➤ L'alliage n'est pas encore très bien maîtrisé, et on trouve beaucoup de contradictions parfois considérables dans la littérature. Les recherches sur cet alliage sont loin d'être terminées, elles sont

toujours en course pour tout savoir sur ce composé surtout dans le domaine de l'optoélectronique car en utilisant cet alliage, on peut couvrir tout le spectre visible et l'UV.

