



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

**UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCCEN**

# THÈSE

Présentée à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

**DOCTORAT EN SCIENCES**

Spécialité: Physique énergétique et matériaux

Par :

**Mme BOUCHEFRA YASMINA ep.BOUABDALLAH**

Sur le thème

---

## **Etude morphologique et caractérisation des alliages à base de nitrure**

---

Soutenue publiquement le 23/06/2018 à Tlemcen devant le jury composé de :

Mme GUEN Ahlam ép.BOUAZZA  
Mr CHABANE SARI Nasr-Eddine  
Mr LASRI Boumediene  
Mme BENSAOULA Amaria  
Mme SAYAH Choukria

Professeur Université de Tlemcen  
Professeur Université de Tlemcen  
Professeur Université de Saida  
Professeur Université de Tlemcen  
MCA C.U. d'Ain Témouchent

Présidente  
Directeur de thèse  
Examinateur  
Examinatrice  
Examinatrice

*Unité de Recherche Matériaux et Energies Renouvelables (URMER)  
BP 119, 13000 Tlemcen - Algérie*

## **Remerciements**

*Je remercie ALLAH le Tout-puissant de m'avoir donné le courage, la volonté et la patience de mener à terme ce présent travail.*

*Le travail présenté dans cette thèse a été réalisé au sein de l'Unité de Recherche Matériaux et Energies Renouvelables de l'Université de Tlemcen. Je remercie Pr A.BENMANSOUR, son ex-directeur, et Mr S.AMARA, son directeur actuel, de m'avoir accueilli au sein de l'unité.*

*Je tiens à exprimer mes sincères remerciements et ma reconnaissance à mon directeur de thèse Monsieur Chabane Sari Nasr-Eddine, Professeur à l'Université Abou Bekr Belkaïd. Tlemcen d'avoir dirigé cette thèse. Je lui suis également reconnaissante pour le temps conséquent qu'il m'a accordé, ses qualités pédagogiques et scientifiques, sa franchise et sa sympathie. Je lui adresse ma gratitude pour tout cela.*

*Mes plus vifs remerciements vont à madame Guen Ahlem ép. Bouazza, Professeur à l'Université de Tlemcen pour l'honneur qu'elle me fait en présidant le Jury de cette thèse.*

*Toute ma gratitude va également pour Mr. Lasri Boumediene, professeur à l'Université de Saida, Mme. Bensaoula Amaria, Professeur à l'Université de Tlemcen et Mme. Sayah Choukria maître de conférence (A) au Centre Universitaire d'Ain Témouchent pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail, et d'avoir accepté d'être membres et examinateurs de cette thèse.*

*A titre plus personnel, Je remercie Monsieur Benmoussat Boumediene, professeur à l'université de Tlemcen, pour son soutien sur le plan humain et pour son intérêt permanent à mon égard. Je lui serai toujours redevable pour la confiance qu'il m'a montré.*

*Enfin, je tiens à remercier mes parents qui méritent une mention très spéciale pour leur soutien éternel, leurs prières, leur amour et leurs encouragements. Ainsi Je remercie pour la vie mon époux pour tout son soutien, sa patience, sa fidélité durant les phases finales de cette thèse.*

*A mes chers parents*

*A mon cher mari*

*A mon adorable enfant Mohamed Racim*

*A toute ma famille*

---

## *Résumé*

---

Dans ce travail l'objectif principal est l'étude du transport des porteurs de charge dans les matériaux semi-conducteurs spécifiquement le nitrure de bore (BN), le nitrure de gallium (GaN), le nitrure d'aluminium (AlN) et leurs alliages ternaires B<sub>x</sub>Ga<sub>(1-x)</sub>N et B<sub>x</sub>Al<sub>(1-x)</sub>N par la méthode de Monté Carlo qui permet de reproduire les phénomènes microscopiques dans les matériaux semi-conducteurs. Le phénomène de transport dans ces semi-conducteurs résulte du comportement des électrons de 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. A cause de sa complexité, cette équation aux dérivées partielles pas de solution analytique sauf dans un nombre de cas limité. C'est pourquoi il a été fait appel à d'autres procédés et en particulier aux méthodes de Monte Carlo pour traiter ce problème dans toute sa généralité. Pour cela nous avons développé un programme écrit en langage Fortran basé sur le principe de cette méthode. Ce logiciel permet de calculer les probabilités à partir des expressions usuelles, en considérant dans notre cas, un modèle à trois vallées ( $\Gamma$ , L, X) , isotropes mais non paraboliques, et pour déterminer l'évolution des différentes interactions ainsi que la vitesse de dérive et l'énergie des porteurs dans les deux matériaux ternaire B<sub>x</sub>Ga<sub>(1-x)</sub>N et B<sub>x</sub>Al<sub>(1-x)</sub>N qui n'influent pas de façon essentielle sur le comportement de l'électron. Elles sont néanmoins introduites pour obtenir une description aussi quantitative que possible de la dynamique électronique.

**Mots-clés:** B<sub>x</sub>Ga<sub>(1-x)</sub>N et B<sub>x</sub>Al<sub>(1-x)</sub>N, simulation de Monte Carlo, phénomène de transport, température, champ électrique, énergie électronique, vitesse de dérive.

## **Liste des symboles**

$a, c$	[Å]	Paramètre de maille du réseau cubique
$\alpha_a, \alpha_c$	[K <sup>-1</sup> ]	coefficients de dilatation thermiques
$m^*$	[Kg]	masse effective du porteur
$m_0$	[Kg]	masse du porteur libre
$m_{nl}$	[Kg]	masse longitudinale dans les vallées L et X
$m_{nt}$	[Kg]	masse transverses dans les vallées L et X
$\rho$	[Kg]	masse volumique du matériau
$\vec{E}$	[V.m]	Champ électrique
$\vec{B}$	[Tesla (T)]	Champ magnétique
$\vec{F}$	[N]	force extérieure
$\vec{K}$	[ J/r]	moment de la force
$E(k)$	[eV]	Energie de bandes, structure de bandes
$E_g$	[eV]	Energie de gap (bande interdite)
$x$		coefficient stœchiométrique du matériau.
$E_{A_xB_{1-x}C}$	[eV]	Energie de la bande interdite du semi-conducteur ternaire $A_xB_{1-x}C$
$E_{AC}$	[eV]	Energie de la bande interdite du semi-conducteur ternaire $E_{AC}$
$E_{BC}$	[eV]	Energie de la bande interdite du semi-conducteur ternaire $E_{BC}$
$\hbar\omega_0$	[eV]	Energie du phonon échangé.
$f(k, r, t)$		fonction de distribution à un instant t, un porteur positionné dans l'espace aux coordonnées r et présentant un vecteur d'onde k
$N_{ij}$		fonction de répartition des phonons
$N_{no}$		fonction d'occupation des phonons

b		paramètre de courbure (bowing parameter)
h	[m <sup>2</sup> kg / s]	constante de Planck = 6,62607004 × 10 <sup>-34</sup>
K <sub>B</sub>	[m <sup>2</sup> kg s <sup>-2</sup> K <sup>-1</sup> ]	constante de Boltzmann= 1,38064852 × 10 <sup>-23</sup>
q	[c]	charge de l'électron = -1,602 × 10 <sup>-19</sup>
E <sub>ac</sub>		constante acoustique
e <sub>31</sub> et e <sub>33</sub>	[C/m <sup>2</sup> ]	constantes piézoélectriques
c <sub>13</sub> et c <sub>33</sub>	[GPa]	constantes élastiques
c <sub>11</sub> , c <sub>12</sub> , et c <sub>44</sub>	[GPa]	Coefficients élastiques
σ <sub>ij</sub>	[Pa]	tenseurs de contraintes
ε <sub>kl</sub>	[Pa]	tenseurs de déformation
C <sub>ijkl</sub>	[Pa]	tenseurs de d'élasticité
P <sub>sp</sub>	[m/v]	polarisation spontanée
P <sub>PZ</sub>	[m/v]	polarisation piézoélectrique
P	[m/v]	polarisation total
p(t)	[m <sup>-3</sup> ]	la densité de probabilité
λ[k(t)]	[m <sup>2</sup> s]	Le taux de diffusion,
τ <sub>e</sub>	[s]	Temps de collision élastique
τ <sub>i</sub>	[s]	Temps de collision inélastique
l <sub>e</sub>	[m]	libre parcours moyen élastique
l <sub>i</sub>	[m]	libre parcours moyen inélastique :
T	[K]	température du réseau
λ <sub>ac</sub>		probabilité d'interaction acoustique
λ <sub>pi</sub>		probabilité d'interaction piézo-électrique
U <sub>all</sub>	[eV]	potentiel d'alliage
P <sub>pi</sub>	[eV]	potentiel piézo-électrique
E <sub>ij</sub>	[eV]	potentiel de déformation intervallée entre la vallée i et la vallée j,

$\Delta_i$	[eV]	l'écart d'énergie entre le bas de la vallée de départ $i$ et celui de la vallée $\Gamma$
$\Delta_j$	[eV]	l'écart d'énergie entre le bas de la vallée d'arrivée $j$ et celui de la vallée $\Gamma$
$Z_{ij}$		nombre de vallée d'arrivée de type $j$ quand on part de la vallée $i$ .
$\lambda_p(\varepsilon)$		Probabilité d'interaction des électrons avec les phonons optiques polaires
$\lambda_{np}(\varepsilon)$		Probabilité d'interaction des électrons avec les phonons optiques non Polaires
$\lambda_{ij}$		probabilité d'interaction intervallée
$S_i(\vec{k}', \vec{k})$		probabilité de transition d'un état $\vec{k}'$ vers un état $\vec{k}$ par une interaction de nature $i$
$p_f(t)$		probabilité de la diffusion
$\lambda_{sc}$		La probabilité « Self Scattering »
$\Delta t$	[s]	durée de vol libre
$\alpha$		coefficient de non parabolicité
$\vec{k}_p(t)$		la position du vecteur d'onde à l'instant $t$ , sa position $\vec{r}_p$
$V$	[m/s]	vitesse d'électron
$V_d$	[m/s]	Vitesse de dérive
$V_{sat}$	[m/s]	Vitesse de saturation
$\theta$		fréquence moyenne des phonons
$a_B$	[N]	force d'interaction
$\beta$		L'angle de déviation
$\Delta E_s$		la différence des affinités des matériaux binaires
$N_s$		la densité des sites d'alliages

# Table des matières

<b>Introduction générale</b> .....	1
<b>CHAPITRE I : Propriétés physiques des nitrures III-V</b> .....	4
<b>I.1. L'évolution des nitrures d'élément III</b> .....	4
<b>I.2. Propriétés générales des nitrures III-N</b> .....	7
I.2.1. Propriétés structurales.....	7
I.2.1.1. Structure cristalline.....	7
I.2.1.2. Les différentes formes allotropiques du nitrure de bore BN.....	8
I.2.1.3. Les paramètres de maille.....	12
I.2.1.4. Réseau réciproque. La zone de Brillouin .....	14
I.2.2. Propriétés optiques.....	15
I.2.2.1. Structures de bandes des binaires GaN, AlN et BN.....	15
• Influence de la température sur la structure de bande .....	17
• Notion de masse effective.....	17
• Notion du coefficient de non-parabolicité .....	18
I.2.2.2 propriétés optiques des composés ternaires B <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> N et B <sub>x</sub> Al <sub>1-x</sub> N.....	19
I.2.3. Propriétés mécaniques.....	20
I.2.3.1. Coefficients élastiques.....	20
I.2.3.2. Coefficients de dilatation thermique.....	22
I.2.4. Les Propriétés Electroniques.....	23
I.2.4.1. Origine du dopage résiduel.....	23
I.2.4.2. Dopage intentionnel.....	24
• Dopage de type n.....	24
• Dopage de type p.....	25
<b>I.3. Procédure de calcul de la propriété physique des matériaux ternaires III-N</b> .....	25
• Variation linéaire des paramètres en fonction du coefficient x.....	26
• Variation non linéaire des paramètres en fonction du coefficient x .....	26
<b>I.4. Polarisation spontanée et effet piézoélectrique</b> .....	27
I.4.1. polarisation spontanée.....	27
I.4.2. polarisation piézoélectrique.....	28
I.4.3. Polarisation totale.....	30

<b>I.5. Voies d'élaboration des matériaux III-V</b> .....	31
I.5.1. Les substrats .....	31
I.5.2. Principales techniques d'élaboration des nitrures .....	32
I.5.2.1. L'épitaxie par jet moléculaire (EJM) .....	32
I.5.2.2. L'épitaxie en phase liquide .....	34
I.5.2.3. Le transport physique en phase gazeuse (PVT) .....	35
I.5.2.4. Epitaxie en phase vapeur aux organométalliques (EPVOM) .....	36
I.5.2.5. L'Epitaxie sélective .....	37
<b>I.6. Conclusion</b> .....	41
<b>Références</b> .....	43
<b>Chapitre II Phénomènes de transport électrique dans les semi-conducteurs</b> .....	51
<b>II.1. Différents régimes de transport électronique</b> .....	52
II.1.1. Transport dans le régime balistique .....	52
II.1.2. Transport dans le régime stationnaire .....	52
II.1.3. Transport dans le régime non-stationnaire .....	53
<b>II.2. Notion de fonction de distribution</b> .....	53
<b>II.3. Equation de transport de Boltzmann</b> .....	53
• Intégrale de collision .....	54
• Génération de vol libre .....	55
• Domaine de validité .....	56
II.3.1. Modèles de résolution de l'équation de Boltzmann .....	56
II.3.1.1. Modèle hydrodynamique .....	57
II.3.1.2. Modèle Monte-Carlo .....	58
<b>II.4. Les différents types de collisions</b> .....	58
II.4.1. avec le réseau cristallin .....	58
II.4.2. avec les autres porteurs .....	59
II.4.3. avec les impuretés ionisées .....	59
II.4.4. avec les alliages .....	59
<b>II.5. Libre parcours moyen élastique et inélastique</b> .....	60
<b>II.6. Mécanismes d'interaction</b> .....	61
II.6.1. Interactions élastiques .....	61
II.6.1.1. interaction acoustique .....	61

II.6.1.2. Interaction piézo-électrique.....	62
II.6.1.3. Interactions avec les impuretés ionisées.....	63
II.6.1.4. Interactions avec les alliages .....	64
II.6.2. Interactions inélastiques.....	64
II.6.2.1. Interaction intervallée équivalente et non équivalente.....	64
II.6.2.2. Interactions optiques.....	65
a) Interactions avec un phonon optique polaire.....	65
b) Interactions avec un phonon optique non polaire.....	66
<b>II.7. Interactions prépondérantes dans les semi-conducteurs .....</b>	<b>66</b>
II.7.1. Champ électrique faible.....	67
II.7.2. Champ électrique moyen .....	67
II.7.3. Champ électrique fort.....	68
II.7.4. Champ électrique très fort.....	68
<b>II.8. Le phénomène d'ionisation par impact.....</b>	<b>68</b>
<b>II.9. Conclusion .....</b>	<b>69</b>
<b>Références .....</b>	<b>71</b>
<b>Chapitre III Présentation de la simulation de Monte Carlo.....</b>	<b>74</b>
<b>III.1. Simulation Monte Carlo.....</b>	<b>74</b>
III.1.1. Principe de la méthode.....	76
III.1.2. Temps de vol libre.....	78
III.1.3. Méthode du self scattering .....	79
<b>III.2. Mouvement des électrons.....</b>	<b>80</b>
III.2.1. Les équations du mouvement.....	80
III.2.2. Procédure et choix d'interaction.....	83
III.2.3. Choix des angles de déviation .....	84
<b>III.3. Étapes de calcul.....</b>	<b>85</b>
<b>III.4. Description du logiciel.....</b>	<b>89</b>
<b>III.5. Conclusion.....</b>	<b>89</b>
<b>Références .....</b>	<b>91</b>
<b>Chapitre IV : Discussions sur les résultats de la simulation.....</b>	<b>93</b>
<b>IV.1. Modèle de simulation.....</b>	<b>93</b>
<b>IV.2. Simulation numérique.....</b>	<b>94</b>

<b>IV.3 Evolution des probabilités d'interactions</b> .....	95
IV.3.1 Les interactions élastiques.....	95
IV.3.1.1. les interactions acoustiques.....	95
• Effet de la teneur en bore, de la température et du champ électrique sur les interactions acoustiques .....	97
IV.3.1.2. les interactions piézoélectriques.....	99
• Effet de la teneur en bore, de la température et du champ électrique sur les interactions piézoélectriques .....	101
IV.3.2 Les interactions inélastiques .....	102
IV.3.2.1 Les interactions intervalles d'absorption et d'émission.....	102
• Effet de la teneur en bore, sur les interactions intervalles d'absorption et d'émission .....	105
• Effet de la température et du champ électrique sur les intervalles d'émission.....	106
IV.3.2.2 Les interactions intravalles d'absorption et d'émission.....	108
• Effet de la teneur en bore, de la température et du champ électrique sur les interactions intravalles d'absorption et d'émission .....	109
IV.3.1.5 Les interactions optiques polaires.....	111
• Effet de la teneur en bore, de la température et du champ électrique sur les interactions optiques polaires d'émission.....	113
<b>IV.4 Propriétés de transport dans les différents régimes</b> .....	115
IV.4.1 Caractéristiques du transport en régime stationnaire.....	115
IV.4.1.1 Energie en fonction du champ électrique.....	116
IV.4.1.2. La vitesse en fonction du champ électrique.....	117
IV.4.1.2.1 Effet de la teneur en bore sur la vitesse de dérive .....	117
IV.4.1.2.2 Effet de la température sur la vitesse de dérive.....	120
IV.4.1.2.3 Influence de la concentration d'électron sur la vitesse de dérive.....	121
IV.4.2 Caractéristiques du transport en régime transitoire.....	123
IV.4.2.1 Energie en fonction du temps pour différentes champ.....	123
IV.4.2.2 La vitesse en fonction du temps et en fonction de la distance pour différentes valeurs du champ électrique .....	125
<b>IV.5 Conclusion</b> .....	128
<b>Références</b> .....	129
<b>Conclusion générale</b> .....	130

---

# *Introduction générale*

---

## *Introduction générale*

Dans l'ensemble des matériaux, les semi-conducteurs constituent une classe bien définie, avec des propriétés physiques particulières qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et à celui des applications. De nombreuses études ont montré l'intérêt des semiconducteurs à grand gap, et notamment des composés III-V, pour des applications optoélectroniques. La connaissance et la compréhension de leurs propriétés optiques sont donc nécessaires dans ce contexte. Les composés nitrures (III-N : BN, GaN, AlN, InN,...) présentent l'avantage d'une bande interdite directe, d'une remarquable stabilité chimique, de bonnes propriétés mécaniques, ce qui les rendent attractifs pour les émetteurs bleu et UV et également pour l'électronique à haute température, haute puissance et haute fréquence. Leur large bande interdite permet leur utilisation pour les lasers, les LEDs et les photodétecteurs UV, donc le champ d'application des nitrures des éléments III s'avère très large, des diodes électroluminescentes (vertes, bleu), panneaux d'affichage géants et des LEDs blanches commercialisées pour le public et utilisées pour l'éclairage. L'intérêt des lasers bleus est notamment d'augmenter la densité d'informations sur les disques compacts car cette dernière est proportionnelle à l'inverse du carré de la longueur d'onde du laser utilisé pour la lecture.

La compréhension de la dynamique des porteurs dans les matériaux semi-conducteurs est nécessaire pour l'amélioration des performances des composantes. En effet, ce sont les propriétés du matériau qui délimitent leurs performances. Ainsi, l'étude des propriétés physiques des matériaux, et les conditions améliorant à la fois les performances de la vitesse, et le temps de réponse à toute variation du champ électrique, permet le développement au sens large dans le domaine des semi-conducteurs. Il est donc nécessaire d'effectuer une étude des possibilités offertes par les matériaux et déterminer l'influence des conditions extérieures et les effets qu'elles génèrent, rendant ainsi possible une utilisation rationnelle de ces matériaux.

L'objectif principal de ce travail porte sur l'étude du transport des porteurs de charge dans les matériaux semi-conducteurs spécifiquement le nitrure de bore (BN), le nitrure de

gallium (GaN), le nitrure d'aluminium (AlN) et leurs alliages ternaires B<sub>GaN</sub> et B<sub>AlN</sub>, en utilisant la méthode de simulation de Monte Carlo. Cette méthode a effectivement connu un grand développement au cours des dernières décennies notamment dans l'application aux problèmes de la dynamique électronique. Le modèle apporte un complément aux outils de modélisation numérique existant à l'unité de recherche des matériaux et des énergies renouvelables, il a été développé par Dr. A. SAYAH et Pr. B. BOUAZZA.

La présente étude est organisée en quatre chapitres :

Le premier chapitre de cette thèse présente l'état de l'art sur ce sujet. Cette partie est consacrée à la présentation des matériaux semiconducteurs III-V, en particulier le BN, GaN, AlN et leurs alliages ternaires B<sub>GaN</sub> et B<sub>AlN</sub>, où nous décrivons les propriétés physiques, optiques et électroniques fondamentales de ces nitrures III-N ainsi que les différentes techniques de croissances et les différents substrats utilisés.

Dans le deuxième chapitre, nous étudions de manière aussi physique que possible le phénomène de transport dans les semi-conducteurs en présentant une approche analytique de l'équation de Boltzmann, appliquée à la dynamique des charges dans un semi-conducteur.

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

Le quatrième et le dernier chapitre est destiné à l'exploitation des différents résultats obtenus par notre simulation dans les composés ternaires B<sub>GaN</sub> et B<sub>AlN</sub> cubiques. Nous présentons en premier lieu, les résultats de différents types d'interactions en fonction de l'énergie. Ensuite on présente les caractéristiques du transport électronique dans les différents régimes où la vitesse de dérive est le paramètre le plus important. Dans le régime stationnaire ; nous calculons l'évolution de la vitesse et de l'énergie

des électrons en fonction du champ électrique, pour différentes températures, et différentes concentrations d'électrons. Dans le régime transitoire ; nous calculons la variation de la vitesse en fonction du temps, et de la distance pour différentes valeurs de champ électrique.

Enfin, nous terminons notre thèse par une conclusion générale.

---

*Chapitre I*

*Propriétés physiques des  
nitrides III-V*

---

# *Chapitre I*

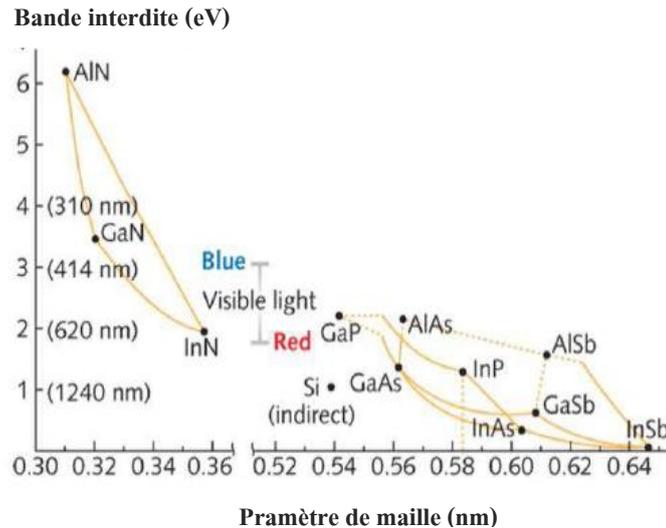
## *Propriétés physiques des nitrures III-V*

*La croissance des nitrures III/V a largement été étudiée au cours des 20 dernières années. Principalement orientée vers l'InN à ces débuts, la recherche s'est progressivement portée vers les matériaux GaN, AlN puis BN. Ce premier chapitre est consacré aux rappels des propriétés structurales, optiques, mécaniques et électroniques des matériaux nitrures à large bande interdite. Les notions de polarisation piézoélectrique et spontanée sont décrites par la suite. Enfin nous effectuerons un rappel général des différentes techniques de croissances utilisées à ce jour pour la synthèse de matériaux III-N.*

### **I.1. L'évolution des nitrures d'élément III**

On commence par présenter brièvement l'histoire des nitrures III-V, matériaux composés d'un élément de la colonne III et d'un élément de la colonne V du tableau périodique. Elle introduit aussi les notions utiles sur leur structure cristalline et les propriétés qui en découlent. Les nitrures III/V sont une nouvelle gamme de semi-conducteurs dont les propriétés uniques permettent l'utilisation dans divers domaines tels que l'optoélectronique, l'électronique de puissance et les applications piézoélectriques. Si les premiers travaux sur la synthèse de ces matériaux remontent à la fin du XIX<sup>ème</sup> siècle [1] [2] [3], les années 80 et 90 marquent le début d'une recherche intense sur les nitrures III/V ouvrant la porte à de nombreuses perspectives. Dès les années 60, les « Light Emitting Diodes » (LED) sont utilisées pour le développement des réseaux de communication, pour le stockage d'information numérique, les imprimantes lasers et l'éclairage. Les semi-conducteurs utilisés à l'époque ne permettent pas un large choix de longueurs d'onde (de l'infrarouge au début des couleurs du visible) (figure I.1). La maîtrise de la croissance de matériaux à plus large bande d'énergie interdite (GaN notamment dès

1969) va permettre le développement de LED émettant dans un plus large domaine spectral (entre 400 et 700 nm). La recherche sur les dispositifs LED s'oriente alors vers deux axes majeurs : d'une part l'émission vers le domaine des longueurs d'onde bleues (de 400 à 440 nm) et ultra-violet (UV) proche (de 320 nm à 400 nm) pour des applications de stockage de l'information et d'autre part les dispositifs émettant dans le visible et la lumière blanche pour des applications de type éclairage.

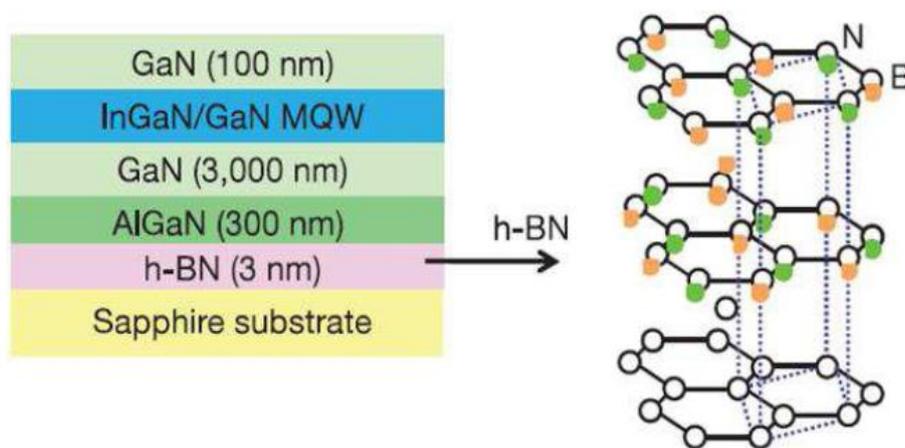


**Figure I.1** : valeur de des nitrures III/V en fonction du paramètre de maille  $a$  [4].

En comparant le développement des nitrures à large bande interdite avec celui des autres matériaux III/V étudiés avant les années 80 (les binaires ou ternaires à base de In, Ga et As présentés sur la figure I.1), on peut constater qu'une industrialisation progressive et rapide de ces technologies a été effectuée depuis les années 90. L'intérêt pour l'AlN n'est venu que tardivement. La perspective d'aboutir à la fabrication de LEDs émettant dans l'UV proche (longueur d'onde de 200 à 380 nm) a poussé la recherche vers l'élaboration des composés ternaires AlGa<sub>1-x</sub>N (Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N émet théoriquement dans des longueurs d'onde allant de 220 à 400 nm) (figure I.1). L'émission dans l'UV proche est intéressante pour des dispositifs de stérilisation et de purification, la longueur d'onde d'absorption maximale de l'ADN étant située entre 240 et 260 nm (effet germicide optimal). De tels dispositifs émissifs à semi-conducteurs rendraient obsolètes les systèmes de stérilisation à vapeur de mercure.

Le nitru de bore quant à lui occupe une place bien à part dans la famille des nitrures III/V. c'est un composé qui n'existe pas dans la nature. Il a été synthétisé pour la

première fois en 1842 par Balmain et Prakt [5,6]. Du fait de la proximité du bore et de l'azote avec le carbone (celui-ci intercalé entre les deux autres dans la même rangée) dans le tableau périodique. Cette céramique de synthèse est un matériau dont la structure cristalline et les propriétés sont proches de celles des composés à base de carbone (diamant et graphite). La phase hexagonale de ce matériau est principalement utilisée pour des lubrifiants hautes performances (le BN est chimiquement inerte et son utilisation à haute température est possible) et comme support ou couche de protection pour des applications à haute température (forme pyrolytique de BN). Le BN sous forme cubique est le second matériau le plus dur après le diamant ce qui en fait un parfait revêtement pour divers outils de coupe [7]. La maîtrise de l'hétéroépitaxie de BN, sous sa forme cubique ou hexagonale, devrait permettre le développement de nouvelles applications pour ce matériau dans les domaines de l'optoélectronique et des capteurs piézo-électriques. Un premier exemple est l'utilisation du BN hexagonal comme couche sacrificielle dans la structure de LED à base de GaN, permettant le transfert du dispositif optoélectronique d'un support de haute qualité cristalline à un support bien moins onéreux (figure I.2) [8].



**Figure I.2** : schéma d'un dispositif LED III/V émettant dans la couleur bleu (434nm) avec l'utilisation de BN hexagonal comme couche tampon.

## I.2. Propriétés générales des nitrures III-N

Parmi tous les composés (binaires ou ternaires) possibles, tous n'ont pas le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés, et en particulier de la structure des bandes, montre notamment que les éléments les plus légers donnent des composés à large bande interdite, dont les propriétés se rapprochent de celles des isolants. Les composés incluant du bore, de l'aluminium, ou de l'azote entrent dans cette catégorie. Ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs, ou pour l'optoélectronique où une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces. La formation d'alliages ternaires comme  $B_xGa_{1-x}N$  ou  $B_xAl_{1-x}N$  permet d'ajuster certaines propriétés comme la largeur de la bande interdite (pour les applications optoélectronique), la mobilité des porteurs (pour les applications électroniques) ou encore la constance de réseau, importante pour la croissance épitaxiale sur des substrats silicium par exemple.

### I.2.1. Propriétés structurales

#### I.2.1.1. Structure cristalline

Les nitrures d'éléments III sont formés par l'association d'un élément de la colonne III (Gallium, Aluminium et bore) et de l'élément Azote de la colonne V de la classification de Mendeleïev. Leurs alliages ternaires et quaternaires sont également définis comme des nitrures d'éléments III. Ces matériaux peuvent cristalliser selon deux phases: zinc-blende, de symétrie cubique, ou wurtzite, de symétrie hexagonale. Les nitrures en phase zinc-blende (cubique), présentent une alternative à la phase wurzite (hexagonale) couramment utilisée pour la fabrication de dispositifs optoélectroniques, haute fréquence et haute température.

La structure wurtzite, formée de deux réseaux hexagonaux compacts, l'un occupé par les atomes III et l'autre occupé par les atomes d'azote, décalés suivant l'axe  $c$  d'une valeur de  $3c/8$  (figure I.3. (b)). Le groupe d'espace de cette forme cristalline est  $P63mc$ , et elle est définie par deux paramètres, les paramètres de maille  $a$  et  $c$ .

La structure zinc-blende s'apparente à celle du diamant (C, Ge, Si, etc.), est constituée de deux sous réseaux cubiques faces centrées (cfc), l'un comprenant des atomes de la colonne III et l'autre des atomes d'Azote (figure I.3.(a)), interpénétrés et décalés l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale, c'est-à-dire de  $a/4$  [111],

où  $a$  représente le paramètre de maille du matériau. La phase Zinc-blende est métastable alors que la seconde est en équilibre d'un point de vue thermodynamique.

L'élaboration de c-AlN [9, 10] et de c-GaN [11] est possible dans des conditions très particulières de travail ou par des techniques de croissance phase gaz spécifique (Épitaxie par Jet Moléculaire (MBE) par exemple). La croissance du polytype cubique type NaCl (groupe d'espace F-3m) a elle aussi été recensée dans la littérature [12]. Cette phase est cependant métastable et n'a été obtenue que par transformation de w-AlN sous haute pression et haute température.

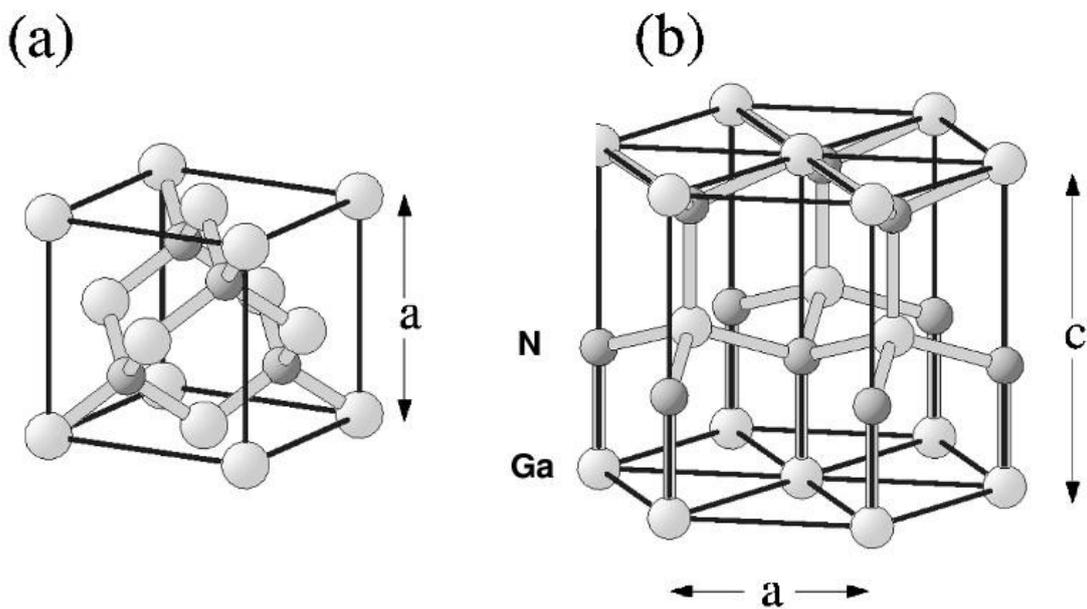


Figure I.3 : (a) Structure zinc- blende et (b) structure wurtzite

### I.2.1.2. Les différentes formes allotropiques du nitrure de bore BN

Contrairement aux précédents nitrures III/V présentés, le BN présente quatre polytypes stables : le BN hexagonal (h-BN), le BN cubique (c-BN), le BN wurtzite (w-BN) et le BN rhomboédrique (r-BN). Alors que la phase hexagonale est la phase stable à pression atmosphérique, la phase cubique est stable à haute température, comme indiqué dans le diagramme de phase du BN présenté sur la Figure I.4. Les deux autres phases sont métastables à haute pression.

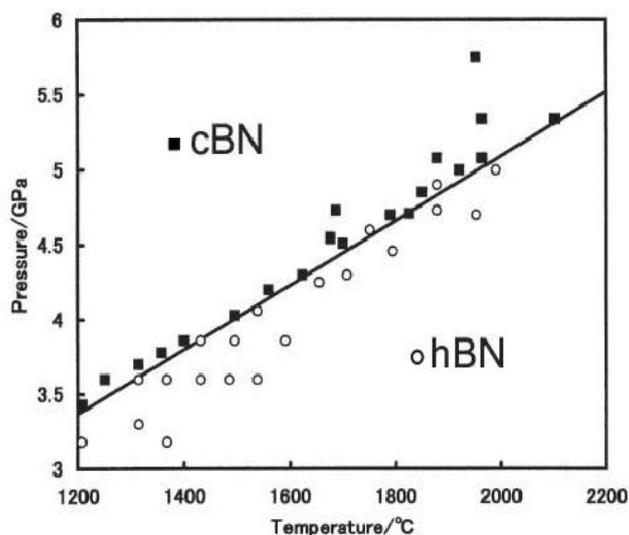
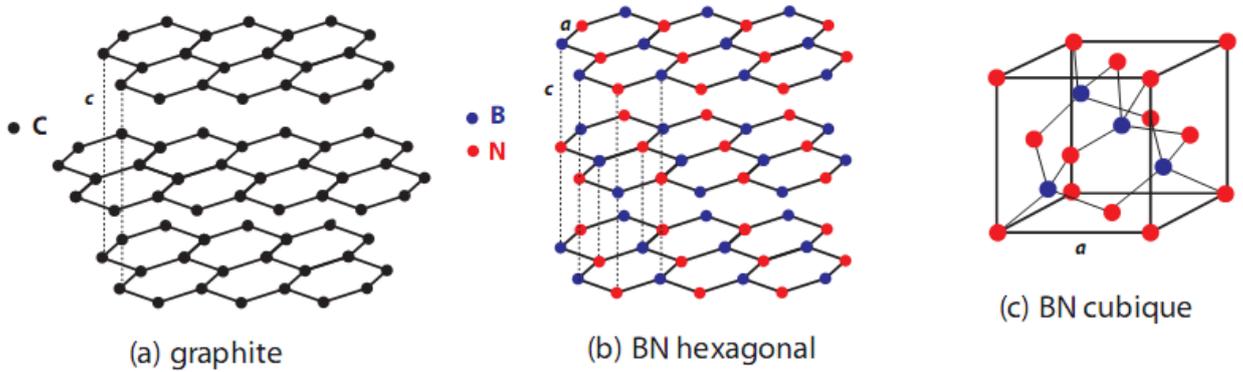


Figure I.4 : Diagramme de phase du nitrure de bore [13].

Les structures de nitrure de bore dites à densité légère (hexagonale, rhomboédrique et turbostratique) dans lesquels les orbitales atomiques  $sp^2$  des atomes forment trois liaisons covalentes avec leurs atomes voisins dans le plan, et les structures à densité plus compacte (cubique et wurtzite) où les orbitales atomiques  $sp^3$  de chaque atome forment quatre liaisons covalentes avec leurs plus proches voisins dans l'espace. Comme le bore ( $Z=5$ ) et l'azote ( $Z=7$ ) entourent le carbone ( $Z=6$ ) dans la classification périodique, BN a un comportement cristallographique très proche du carbone, et ses polymorphes sont comparables : le h-BN a une structure similaire au graphite et le c-BN au diamant (Figure I.5). Les phases hexagonale et cubique de type zinc blende sont les formes allotropiques les plus stables pour ces matériaux. La phase hexagonale est stable à pression atmosphérique alors que la phase cubique est stable à haute pression et haute température [14] mais métastable à température ambiante.



**Figure I.5 :** Comparaison des structures cristallines du graphite (a), du BN hexagonal (b) et du BN cubique(c).[15]

- La phase hexagonale (h-BN) est similaire au graphite de par sa structure et ses paramètres cristallins très proches ( $a=0.2464$  nm et  $c=0.6738$  nm pour le graphite). Ces deux composés présentent une structure dite en feuillets, formée de l'empilement de type ABAB de plans de BN pour le h-BN et de carbone pour le graphite. Cependant, la différence de nature chimique des éléments B et N dans les plans a pour conséquence que les hexagones se superposent parfaitement d'un plan à l'autre alors qu'ils sont décalés dans le graphite, comme on peut le voir sur les Figures 1.5 (a) et (b). De plus, les différentes couches de BN sont superposées de telle manière que les atomes de bore des hexagones de la couche inférieure font face aux atomes d'azotes de la couche supérieure. Les liaisons entre les différents plans sont de type Van der Waals dans le graphite et présente un certain caractère ionique dans le h-BN; les plans sont espacés de  $3.3 \text{ \AA}$ . Les hexagones constituant les feuillets sont formés de liaisons covalentes BN d'une distance de  $1.45 \text{ \AA}$  (hybridation  $sp^2$ ). La force de la liaison BN dans le plan est donc beaucoup plus forte que celle entre les plans. C'est la particularité de cette structure qui est à l'origine des propriétés électroniques, vibrationnelles et optiques du h-BN.
- La phase cubique (zinc blende) de BN, cristallise selon une maille de type blende (sulfure de zinc) et présente un empilement de type ABCABC (Figure I.5 (c)). Dans cette structure, les atomes aux orbitales atomiques  $sp^3$  forment des liaisons B-N de distance  $1.565 \text{ \AA}$  dans l'espace. Cette faible distance interatomique

confère à ce matériau une grande dureté et une résistivité électrique importante. Le c-BN est un semiconducteur à très grande bande interdite (ou gap) indirecte (6.4 eV) [16,17]. Il a une très bonne conductivité thermique, il est le deuxième matériau après le diamant pour la dureté, et il est très inerte chimiquement. Toutes ces propriétés confèrent à ce matériau un intérêt industriel et technologique.

- Les phases wurtzite (w-BN) et rhomboédrique (r-BN) ont des structures cristallines qui sont respectivement similaires au c-BN et au h-BN. Le w-BN est formé de l'empilement de plans ABAB avec des liaisons BN présentant une hybridation  $sp^3$ . Le r-BN est formé de l'empilement de plans ABCABC avec des liaisons BN  $sp^2$ , comme dans le h-BN [18]. Les synthèses de ces composés sont toutes réalisées à hautes pressions : le w-BN est obtenu par compression statique de h-BN, à des températures inférieures à celles appliquées pour la formation de c-BN; le r-BN, phase du BN la moins étudiée à ce jour, est formé par réaction du bore et de l'ammoniac à haute pression et haute température (HPHT).
- D'autres phases du BN existent mais elles sont désordonnées. Il est cependant intéressant de les décrire car certaines d'entre elles possèdent des propriétés optiques comparables à celles du h-BN. Outre la phase amorphe, il existe une phase dite turbostratique (t-BN). Cette forme structurale présente un empilement aléatoire des feuillets et une désorientation de ces plans les uns par rapport aux autres, induite par des angles de rotation aléatoires selon l'axe c [18, 19]. Ainsi, les interactions entre les hexagones dans le plan sont très différentes du h-BN et la distance entre ces plans est supérieure à celle observée dans le h-BN.

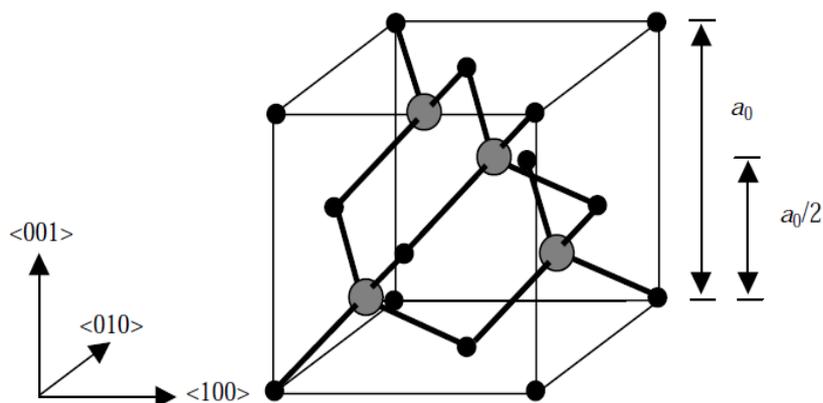
Dans ce travail, nous nous intéresserons exclusivement à La phase Zinc-blende. Notons que la phase cubique du GaN a été observée pour la première fois sous forme d'inclusions dans la phase hexagonale. Cependant, son obtention n'a pas été intentionnelle et n'a pas été prise au sérieux. Mais les calculs théoriques qui ont été faits sur ses paramètres électriques et optiques, ont montré qu'elle présente plusieurs avantages par rapport à l'hexagonale grâce à sa haute symétrie. 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. Dans le but d'explorer tous ces avantages, quelques groupes ont focalisé leurs recherches sur l'obtention des matériaux en phase cubique et l'étude de leurs propriétés. Cependant, la phase cubique est instable du point de vue énergétique. Cela

rend la croissance plus difficile que sa contrepartie hexagonale. Dans diverses études expérimentales, il a été montré que la stabilité et la qualité de la phase dépendent de plusieurs facteurs liés à la croissance, aux substrats et aux précurseurs utilisés. Dans les dernières années quelques groupes ont largement étudié les nitrures en phase cubique et de nombreux progrès ont été faits.

### ***1.2.1.3. Les paramètres de maille***

Contrairement à la phase hexagonale où les paramètres de maille dans le plan **a** et hors le plan **c** sont différents, dans la structure zinc blende la distance entre plans atomiques est identique dans le plan de croissance et perpendiculaire à ce plan. Cette caractéristique de symétrie de la structure zinc-blende rend nul le champ piézo-électrique dans la direction  $\langle 100 \rangle$ . La seule direction polaire dans la structure zinc-blende est la direction  $\langle 111 \rangle$  où l'empilement consiste en des couches alternatives cation anion séparées d'une distance 1 :3.

Le paramètre de maille hors plan  $a_{\perp}$  (dans la direction  $\langle 001 \rangle$ ) est proportionnel au paramètre de maille dans le plan  $a_{\parallel}$  (dans la direction  $\langle 100 \rangle$ ). Pour un film entièrement relaxé, les deux paramètres de maille dans le plan et hors plan sont égaux ( $a_0 = a_{\perp} = a_{\parallel}$ ). L'existence d'une contrainte dans un film épitaxié est donc révélée par l'écart entre ces deux valeurs. D'où l'importance qu'il y a à déterminer expérimentalement les valeurs de paramètre de maille. Le paramètre de maille  $a_{\perp}$ , est mesuré à partir de la raie de diffraction symétrique (004) en diffraction de rayons X alors que le paramètre  $a_{\parallel}$  est mesuré à partir d'une raie de diffraction asymétrique (113). Ces mesures sont faites soit par la méthode de Bond [20], soit par une configuration triple-axis du diffractomètre [21]. Le schéma de la figure I.6 illustre le paramètre de maille dans la structure zinc blende.



**Figure I.6** : paramètre de maille  $a_0$  de la structure zinc blende.  $a_0/2$  représente la distance inter plans. Les cercles gris représentent des cations et les cercles noirs les anions.

En première approximation, la valeur du paramètre du réseau de la structure cubique est donnée en fonction de celle de la structure hexagonale par la formule suivante [22] :  $a_{zB} = \sqrt{2} a_{wZ}$

Le tableau I.1 donne les paramètres de maille des trois nitrures dans leur phase cubique et hexagonale.

Nitrures III-V	Groupe d'espace	Paramètre de maille $a$ (Å)	Paramètre de maille $c$ (Å)
<b>h-GaN</b>	P6 <sub>3</sub> mc	3.189	5.186
<b>c-GaN</b>	F-43m	3.184	-
<b>h-AlN</b>	P6 <sub>3</sub> mc	3.111	4.979
<b>c-AlN</b>	F-43m	4.375	-
<b>h-BN</b>	P6 <sub>3</sub> mc	2.55	4.215
<b>c-BN</b>	F-43m	3.615	-

**Tableau I.1** : données cristallographiques des différentes structures des nitrures III/V GaN, AlN[23] et BN [24].

**1.2.1.4. Réseau réciproque. La zone de Brillouin :**

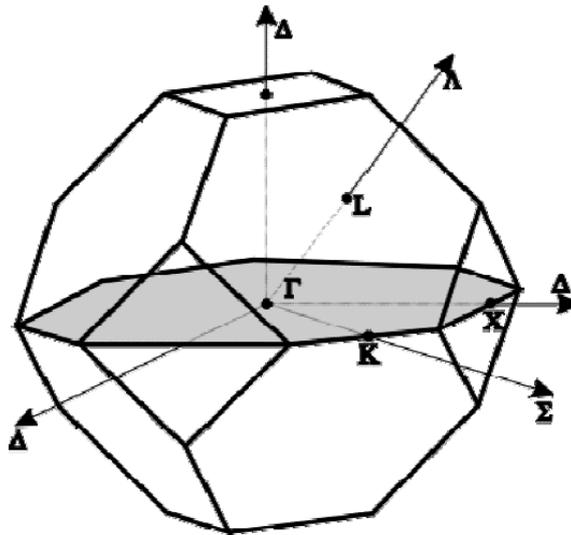
Les fonctions d'ondes électroniques et les énergies correspondantes sont fonction du vecteur d'onde de l'électron. Ainsi la structure de bandes d'énergie du semi-conducteur doit être représentée dans l'espace réciproque et dans les différentes directions des vecteurs d'onde  $\vec{k}$ . Le réseau réciproque associé à la structure de type zinc blende est cubique centré. Sa maille élémentaire qui correspond à la première zone de Brillouin à la forme d'un octaèdre tronqué par les six faces d'un cube. Figure I.7 [25].

Elle présente un centre d'un symétrique à l'origine (noté  $\Gamma$ ) et des axes de symétrie:

Les axes  $\langle 100 \rangle$  à symétrie d'ordre 4( $\Delta$ )

Les axes  $\langle 111 \rangle$  à symétrie d'ordre 6( $\Lambda$ )

Les axes  $\langle 011 \rangle$  à symétrie d'ordre 2( $\Sigma$ )



**Figure I.7 :** Première zone de Brillouin d'un cristal Zinc blende.

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

Points X de coordonnées  $(2\pi/a, 0, 0)$  sur les axes  $\langle 100 \rangle$ .

Points L de coordonnées  $(\pi/a, \pi/a, \pi/a)$  sur les axes  $\langle 111 \rangle$ .

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

La forme et le volume de la zone de Brillouin ne dépendent que de la géométrie du réseau de Bravais, sans égard à la composition chimique ou au nombre d'atomes dans la

cellule unitaires. La zone de Brillouin est une cellule unitaire primitive de réseau réciproque d'importance fondamentale pour l'étude des propriétés électroniques des cristaux, en particulier dans les semi-conducteurs.

## **I.2.2. Propriétés optiques**

### ***I.2.2.1. Structures de bandes des binaires GaN, AlN et BN***

La plupart des nitrures d'éléments III sont des semi-conducteurs à large bande interdite directe, ce qui en fait d'excellents candidats pour l'optoélectronique. Du point de vue technologique, les nitrures cubiques sont attractifs pour les dispositifs optoélectroniques en raison des divers avantages prédits sur les propriétés optiques. Par exemple, dû au fait de champ piézo-électrique nul, on peut attendre une force d'oscillation de l'exciton supérieure à celle obtenue dans les structures wurzite. Dans cette section nous présentons l'état de l'art des propriétés optiques des binaires ainsi que de ses alliages ternaires correspondant. Des divergences sont souvent trouvées sur les données publiées par les divers groupes et leur interprétation a été discutable en raison de divers facteurs ; notamment dû à la différence en qualité, à l'homogénéité des couches et à la contrainte résiduelle présente.

La connaissance de la structure de bande d'un semiconducteur est le paramètre essentiel pour la réalisation de dispositifs. Les binaires GaN, AlN, InN et BN possèdent en général un gap direct, un des points importants de la structure de bande est la valeur de l'énergie séparant le maximum de la bande valence du minimum de la bande de conduction ("gap" du matériau). De nombreux calculs basés sur diverses méthodes ont été réalisés pour déterminer la structure de bande de ces binaires, et particulièrement pour le GaN et l'AlN. Nous présentons dans la Figure I.8 [26, 27] les structures de bandes obtenues pour GaN, AlN et BN dans la phase cubique par la méthode empirique des pseudo-potentiels, cette méthode fournissant les meilleurs résultats en termes de comparaison avec les mesures expérimentales du gap. Les nitrures d'éléments III possèdent en général un gap direct c'est à dire que le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence se trouve alignés dans "l'espace des k" au centre de la zone de Brillouin. Les études expérimentales nous donnent les valeurs des largeurs de bande interdite pour les binaires (Al,Ga)N Zinc blende à 300K qui sont reportées dans le tableau I.2. Ces valeurs de gap direct correspondent à des longueurs d'onde, permettant de concevoir des composants

optoélectroniques de nouvelles générations dans la gamme spectrale de l'ultraviolet (LEDs, Lasers, Photodétecteurs).

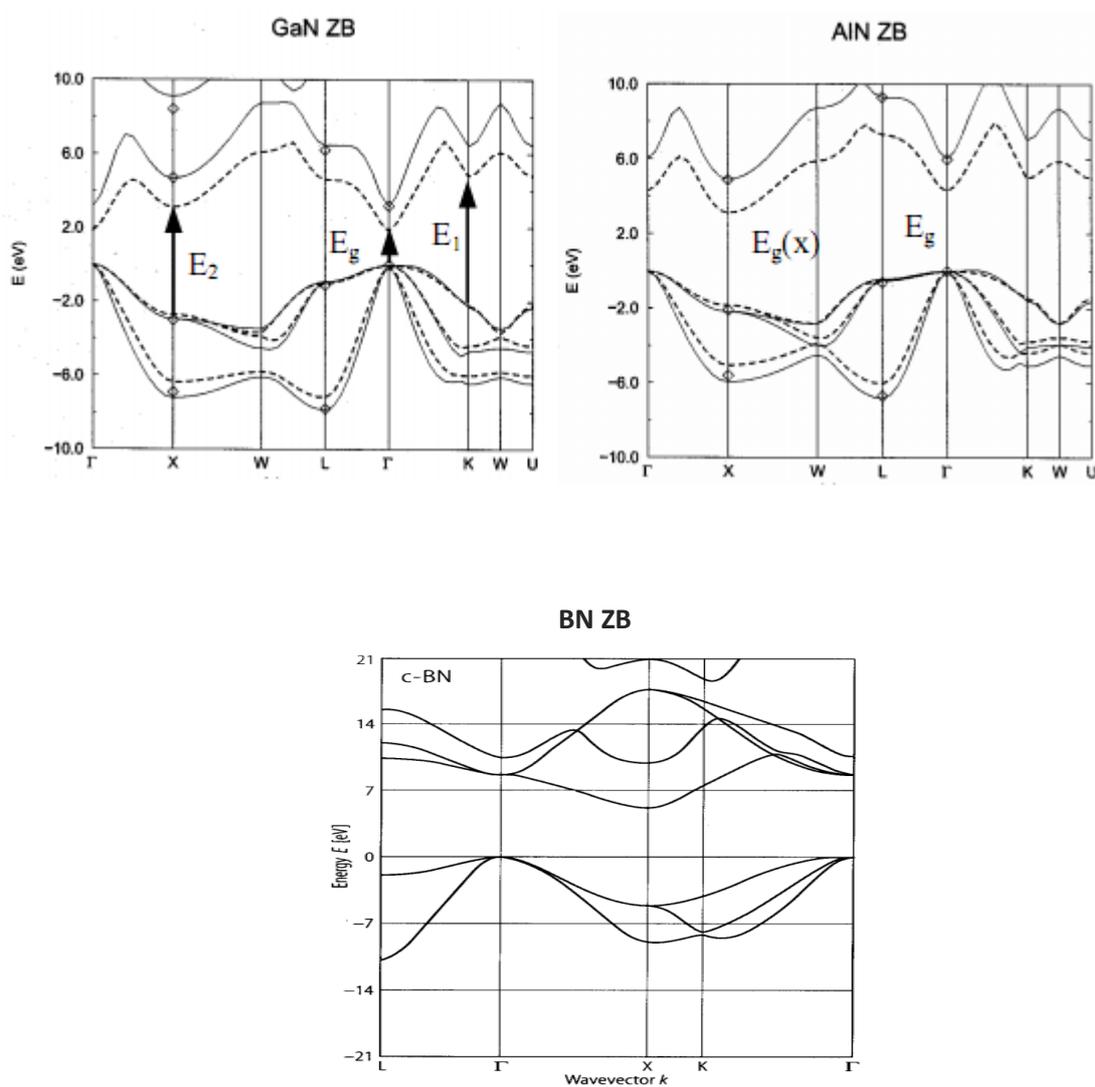


Figure 1.8: Structures de bandes de GaN, AlN et BN calculé dans la phase cubique

	Gap	références
GaN	3.227 eV	[28]
AlN	5.34 eV	[29]
BN	6.4 eV	[17]

Tableau 1.2: Largeur de bande interdite pour les nitrures binaires d'éléments III en phase cubique

- **Influence de la température sur la structure de bande :**

La largeur de la bande interdite ou l'énergie de gap n'est pas constante. En effet, elle présente une variation avec la température. La relation qui nous donne cette variation est donnée par l'équation pseudo-empirique de Varshni [30]:

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{\beta + T} \quad (\text{I.1})$$

Où  $E_g(0)$  est le gap de la bande d'énergie à 0 K,  $\alpha$  est en électronvolts par degré Kelvin, et  $\beta$  est proportionnel à la température de Debye (en kelvins). sans compter que les changements de la structure de bande induits par la dilatation thermique du réseau, la dépendance de la température de  $E_g$  est principalement due aux interactions de phonon-électron. Lautenschlager et al [31], ont récemment proposé une dépendance de la température avec une équation contenant le facteur d'occupation des phonons de Bose-Einstein.

$$E_g(T) = E_B - a_B \left(1 + \frac{2}{e^{\frac{T}{\theta}} - 1}\right) \quad (\text{I.2})$$

Où le paramètre  $\theta$  décrit la fréquence moyenne des phonons impliqués et  $a_B$  est la force d'interaction.

- **Notion de masse effective:**

La masse effective des électrons qui est calculée par rapport à la masse de l'électron dans le vide est donnée par les relations suivantes [32]:

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

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

rapport à la masse de l'électron dans le vide est donnée par :

$$m_p^* = (m_{pl}^{(3/2)} + m_{ph}^{(3/2)})^{2/3} \quad (I.4)$$

Le tableau ci-dessous donne les valeurs de la masse effective des trois matériaux nitrure en phase cubique :

Masses effectives relatives de fond de vallée	GaN	AlN	BN
$m_{\Gamma}^*(m_0)$	0.15	0.21	$0.752m_0$
$m_L^*(m_0)$	0.70, 0.6	0.70	$0.55m_0$
$m_X^*(m_0)$	0.58 (//), 0.3 ( $\perp$ )	0.51 (//), 0.31 ( $\perp$ )	0.30 1.42

*Tableau 1.3 : Masse effectives de GaN[33], AlN [34] et BN[35] en pahase cubique*

- **Notion du coefficient de non-parabolicité :**

La forme de la bande de conduction près des minima n'est parfaitement parabolique, en effet, la relation de dispersion  $E(k)$  qui relie l'énergie  $E$  et le vecteur d'onde du cristal  $k$  est modifiée et donnée par [36]:

$$\gamma(E) = E(1 + \alpha E) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (I.5)$$

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

Les coefficients de non parabolicité sont donnés dans chaque vallée par les relations [37]:

$$\alpha_n = \begin{cases} \alpha_{\Gamma} = \frac{1}{E_{\Gamma}} \left(1 - \frac{m_{\Gamma}^*}{m_e}\right)^2 \\ \alpha_L = \frac{1}{E_{L'_{3v}} - E_{Llc}} \\ \alpha_X = \frac{1}{2(E_{X'_{2c}} - E_{Xlc})} \left(1 - \frac{m_{\Gamma X}^*}{m_e}\right) \end{cases} \quad (I.6)$$

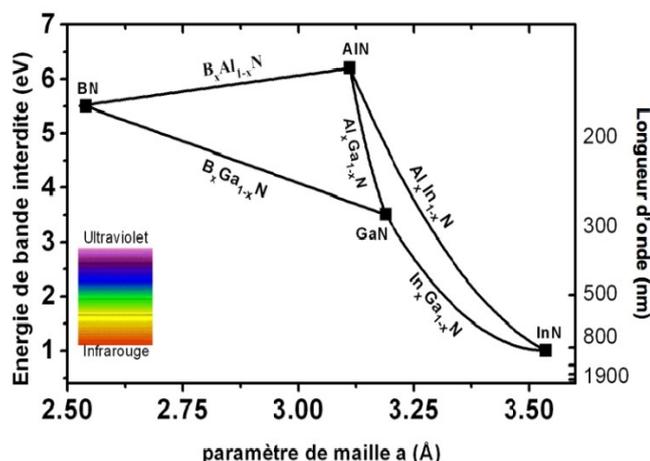
Avec  $E_{\Gamma}$  est l'énergie de gap du semi-conducteur et  $m_0$  la masse du porteur libre,  $L'_{3v}$  et  $L_{1c}$  sont les états des bandes de valence et de conduction avec la symétrie donnée, et  $X'_{2c}$  et  $X_{1c}$  sont les états de la bande de conduction avec la symétrie donnée.

### ***1.2.2.2 propriétés optiques des composés ternaires BGaN et BAlN***

La plupart des nitrures d'éléments III sont des semi-conducteurs à large bande interdite directe, ce qui en fait d'excellents candidats pour l'optoélectronique [38]. En effet, l'incorporation de Bore dans les Binaires AlN et GaN permet d'éliminer le désaccord de paramètre de réseau en formant respectivement les alliages  $B_xGa_{(1-x)}N$  et  $B_xAl_{(1-x)}N$ . Ces alliages à base de Nitrure de Bore possèdent des propriétés physiques très intéressantes comme une forte conductivité thermique, une grande robustesse, une excellente stabilité thermique et une transparence optique dans une gamme spectrale très importante, qui les rendent très attractifs pour un grand nombre d'applications. Comme nous l'avons déjà vu précédemment, les binaires GaN, AlN et BN, ont respectivement comme valeur de bande interdite 3,4eV, 5,3eV et 6,4 eV. Les alliages ternaires qui en découlent offrent donc la possibilité d'évoluer entre ces valeurs (figure I.9), en particulier, l'alliage BGaN formé à partir des binaires GaN et BN et le BAlN formé à partir des binaires BN et AlN, dont respectivement la largeur de la bande interdite pour les deux ternaires peut varier entre 3,4 et 6,4 eV et 5.3 et 6.4 eV. En effet, la valeur de la bande interdite d'un semi-conducteur ternaire peut être approchée d'une manière générale par la somme d'une combinaison linéaire des bandes interdites des binaires qui le composent (loi de Vegard) et d'un terme quadratique.

$$E_{A_xB_{1-x}C} = X E_{AC} + (1 - X)E_{BC} + X(1 - X)b \quad (I.7)$$

Ou  $E_{AC}$  et  $E_{BC}$  sont les valeurs de bande interdite de BNet GaN pour le  $B_xGa_{1-x}N$  et BN et AlN pour le  $B_xAl_{1-x}N$ ,  $x$  est le coefficient stœchiométrique du matériau, et  $b$  est un paramètre de courbure (bowing parameter) définit pour chaque paramètre.



**Figure I.9 :** Valeur de bande interdite pour les alliages de nitrures GaN, AlN, BN et InN en fonction du paramètre de maille  $a$  [39]

Les valeurs d'énergie de gap des nitrures d'éléments III et de leurs alliages ternaires (dans la phase (wurtzite) sont reportées sur le graphe de la figure I.9 en fonction du paramètre de maille  $a$ . Les valeurs de gap des composés ternaires sont représentées par des segments de droite joignant les deux points correspondants aux deux composés binaires constituants de l'alliage. Les valeurs de gap de ces alliages couvrent une très large bande spectrale allant de l'infrarouge jusqu'à l'ultra-violet lointain. Il est dès lors possible d'élaborer des composants optoélectroniques avec ces alliages capables d'émettre de la lumière dans toute cette gamme de longueurs d'ondes. Comme nous venons de le voir, la bande d'énergie interdite des nitrures d'éléments III couvre une zone très étendue: de 0.7 et 1.2 eV pour l'InN jusqu'à 6.2 eV pour l'AlN, avec comme valeurs particulières 3.4 eV pour le GaN, 5.5eV pour le w-BN [37] à température ambiante. Ces alliages ternaires ouvrent de fait l'accès à une grande diversité d'empilements caractérisés par des structures de bande différentes.

## I.2.3. Propriétés mécaniques

### I.2.3.1. Coefficients élastiques

Les propriétés des semi-conducteurs dépendent dans une large mesure de leur état de contrainte et des déformations locales ou globales du réseau cristallin qui y sont liées. En effet, toute déformation entraîne une modification des positions relatives des atomes les

uns par rapport aux autres. Il s'ensuit alors une modification des propriétés des semi-conducteurs : par exemple les propriétés vibrationnelles ou électroniques (largeur de la bande interdite).

Dans le domaine d'élasticité, contraintes et déformations sont reliées par la loi de Hooke :

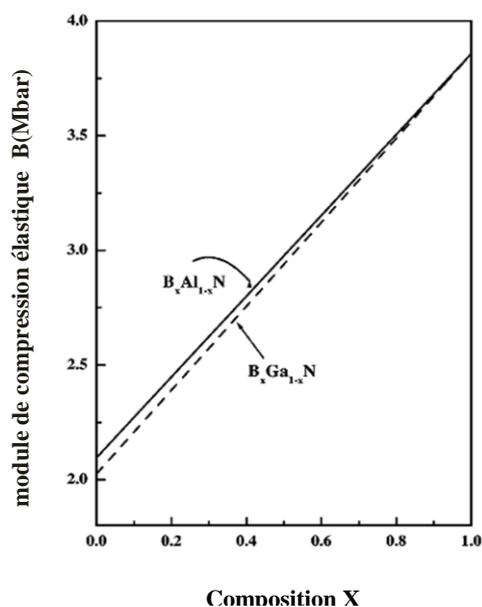
$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l} c_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (I.8)$$

où  $\sigma_{ij}$ ,  $\varepsilon_{kl}$  et  $C_{ijkl}$  sont les tenseurs respectifs de contraintes, de déformation et d'élasticité. Les coefficients élastiques des nitrures cubiques ont été calculés par plusieurs groupes de théoriciens [40, 41] pour les trois binaires cubiques avec des différences notables entre les résultats. Les valeurs sont résumées dans le tableau I.4

Matériaux	Coefficients élastiques (GPa)			Module de compression élastique
	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{44}$	$\alpha$
<b>GaN</b>	390	145	105	201
<b>AlN</b>	396	137	116	208
<b>BN</b>	820	190	480	400

**Tableau 1.4 :** Constantes élastiques des nitrures dans la phase cubique [40], [41].

En regardant les différentes valeurs du module de compression élastique  $\alpha$ , on peut donc déduire que le  $\beta$ -AlN et le  $\beta$ -GaN sont plus souple que  $\beta$ -BN. Donc, une petite quantité de bore ajouté à GaN ou AlN peut considérablement augmenter la dureté du matériau ternaire BGaN et BAlN, puisque le module de compression élastique est une propriété qui est directement liée à la dureté et la valeur de nitrure de bore BN est très élevé par rapport à ceux attribués aux autres nitrures binaires GaN et AlN (voir tableau 1.4). Les modules de compression élastique par rapport à la composition  $x$  pour le  $B_xGa_{1-x}N$  et le  $B_xAl_{1-x}N$  sont tracés dans la figure I.10 [42].



**Figure I.10** : module de compression élastique par rapport à la composition  $x$  pour le  $B_xGa_{1-x}N$  et le  $B_xAl_{1-x}N$  à  $T=1100K$

### 1.2.3.2. Coefficients de dilatation thermique

Tout matériau soumis à un changement de température se déforme : c'est le phénomène de la dilatation thermique. Il convient d'en tenir compte lorsque l'on étudie les propriétés des semiconducteurs à des températures différentes mais également lors de la croissance du matériau car celle-ci se fait à haute température. Ainsi une couche hétéroépitaxiée complètement relaxée à la température de croissance peut être contrainte à la température ambiante. Les paramètres de maille  $a$  et  $c$  des nitrures dépendent de la température dont l'évolution peut être décrite par les coefficients de dilatation thermique  $\Delta a/a$  et  $\Delta c/c$ . On rappelle que le paramètre  $a$  représente le paramètre de maille selon la direction  $[1120]$ , tandis que  $c$  est le paramètre de maille selon la direction  $[0001]$ . Le Tableau I.5 présente les coefficients de dilatation thermiques ( $\alpha_a$ ,  $\alpha_c$ ) et de conductivité thermique ( $\lambda$ ) du w-GaN, w-AlN et w-BN.

Matériaux	w-GaN	w-AlN	w-BN
$\alpha_a$ ( $10^{-6}\text{K}^{-1}$ )	5.6	4.2	2.7
$\alpha_c$ ( $10^{-6}\text{K}^{-1}$ )	3.2	5.3	2.3
$\lambda$ ( $\text{W}\cdot\text{cm}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ )	1.3	2.9	0.6

*Tableau 1.5 : Coefficients de dilatation thermique des nitrures dans la phase hexagonale à  $T=300\text{K}$ . D'après la similitude des longueurs des liaisons des deux structures, il est espéré qu'ils seront aussi valables pour les nitrures dans la phase cubique [43]*

## I.2.4. Les Propriétés Electroniques

Les propriétés électriques d'un semi-conducteur sont directement liées à la quantité de porteurs libres, électrons et trous présents dans la couche. La densité de porteurs libres est, dans le meilleur des cas, pilotée par le dopage intentionnel des couches, mais il existe toujours un niveau de dopage résiduel lié à la présence d'impuretés et de défauts structuraux qu'il est difficile de contrôler.

### I.2.4.1. Origine du dopage résiduel

Les couches de GaN, non intentionnellement dopées, sont systématiquement de type n résiduel avec une concentration en porteurs variant de l'ordre de  $10^{14}$  à  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Il existe plusieurs théories qui s'opposent pour expliquer ce fort dopage n résiduel. Ces théories font intervenir les défauts structuraux si nombreux dans les nitrures. P. Perlin a montré par le calcul [44] que les lacunes d'azote peuvent être à l'origine d'un niveau donneur léger simple dans le matériau GaN et par conséquent peuvent fournir le dopage résiduel n observé. D'autres calculs [45] ont montré cependant que l'énergie de formation de ces lacunes d'azote est de 4 eV impliquant qu'elles ne devraient pas être assez nombreuses à température ambiante pour expliquer une telle concentration de porteurs. Ces calculs aboutissent également à une faible énergie de formation des lacunes de gallium (accepteurs profonds) dans une couche de type n et une faible énergie de formation des lacunes d'azote dans une couche de type p. Les lacunes semblent donc être de bons candidats pour expliquer le phénomène de compensation observé dans GaN. Une autre explication du dopage résiduel pourrait venir de la présence d'impuretés telles que le silicium, l'oxygène ou

encore le germanium. Il a été effectivement montré que ces espèces peuvent induire une conductivité de type n dans le matériau GaN [45].

Différentes mesures expérimentales ont été mises à profit afin de lever l'incertitude entre l'une ou l'autre des deux hypothèses. Popovici et al [46] ont mis en évidence par des mesures SIMS (Spectroscopie de masse d'ions secondaires) que la concentration de porteurs résiduels n'était pas corrélée avec la concentration d'impuretés dans la couche. Ils ont également mis en évidence une diminution de la concentration des porteurs lorsque la concentration en azote dans la couche augmente. Ces deux observations tendent donc à confirmer l'hypothèse des lacunes d'azote comme source de dopage résiduel. Cependant des résultats contradictoires ont été rapportés par Abernathy et al. [47]. Ils ont observé une large concentration d'électrons pour des conditions de croissance riche en azote. Peut être est ce, comme le suggère X.Xu et al [48], une contribution des deux phénomènes qui est à l'origine de ce résiduel n. La question reste toujours soumise à controverse.

#### ***1.2.4.2. Dopage intentionnel***

Un dopant doit être choisi grâce à son faible coefficient de diffusion pour avoir des jonctions abruptes. Il doit aussi permettre une large gamme de dopage et l'absence d'effet mémoire afin d'éviter la contamination de la couche suivante.

- **Dopage de type n**

Le dopage de type n est plus facile à contrôler que celui de type p, d'une part parce que le dopage résiduel du matériau GaN est de type n et d'autre part parce qu'il y a beaucoup d'éléments bien adaptés. Le dopant utilisé en général pour le dopage de type n du matériau GaN est l'élément silicium (Si) du groupe VI du tableau périodique où les atomes de Si se logent principalement sur les sites du Ga, car Si a un rayon de covalence plus proche de celui de Ga que de celui de N. Il est connu pour son efficacité à atteindre une large gamme de dopage dans le matériau GaN. En effet, plusieurs travaux ont rapporté des taux de dopage de  $10^{17}$  à  $10^{20}\text{cm}^{-3}$  avec une énergie d'ionisation de 12 à 25 meV [48][49]. Le précurseur le plus courant en EPVOM, comme nous l'avons vu dans la partie précédente de ce chapitre, est le silane ( $\text{SiH}_4$ ). Pour l'EJM, c'est une source solide de silicium.

- **Dopage de type p**

Le dopage P est utilisé particulièrement pour les dispositifs optoélectroniques. Les dopants de type p pour le dopage du matériau GaN sont généralement les éléments du groupe II-A tels que le beryllium (Be), le calcium (Ca) et le magnésium (Mg). Mais ceux sont aussi les éléments du groupe II-B tels que le zinc (Zn) et le cadmium (Cd). mais le seul efficace semble être le magnésium du fait de sa plus grande solubilité dans les nitrures III-N. Le problème majeur du magnésium est que son énergie d'activation est élevée et augmente avec la concentration en aluminium dans l'AlGaN . Ainsi à température ambiante, seulement quelques pourcents des atomes de Mg sont ionisés. Par ailleurs, les atomes de magnésium ont tendance à s'accumuler au centre des dislocations ce qui laisse autour de celles-ci des régions appauvries en magnésium, dont les propriétés électriques sont altérées.

### **I.3. Procédure de calcul de la propriété physique des matériaux ternaires III-N**

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

$$Y_{A_xB_{1-x}C} = X Y_{AC} + (1 - X)Y_{BC} + X(1 - X)b \quad (I.9)$$

Avec :

x est le coefficient stœchiométrique du matériau.

$Y_{AC}$  et  $Y_{BC}$  sont deux semi-conducteurs, dans le cas de  $B_xGa_{1-x}N$ ,  $Y_{AC}$  et  $Y_{BC}$  sont BN et GaN et pour  $B_xAl_{1-x}N$  se sont les deux binaires BN et AlN.

b est un paramètre de courbure (bowing parameter) défini pour chaque paramètre.

Il existe deux types de variations des paramètres en fonction du coefficient  $x$ , variation linéaire et variation non linéaire.

- **Variation linéaire des paramètres en fonction du coefficient  $x$  :**

Dans le cas où le paramètre de courbure est nul, la variation des paramètres d'alliage en fonction du paramètre de composition est linéaire. On trouve ce cas dans le calcul de la variation du paramètre de la maille cristalline, Variation de l'affinité électronique, variation de l'énergie de séparation entre les différentes vallées... Dans le cas des matériaux ternaires  $B_xGa_{1-x}N$  et  $B_xAl_{1-x}N$  le paramètre de maille est décrit par une relation linéaire reliant la composition et les valeurs des constantes  $a$  des trois binaires GaN, AlN et BN, comme le montre les expressions suivantes.

$$a_{B_xGa_{1-x}N} = X a_{BN} + (1 - X)a_{GaN} \quad (I.10)$$

$$a_{B_xAl_{1-x}N} = X a_{BN} + (1 - X)a_{AlN} \quad (I.11)$$

Avec  $a_{BN}$ ,  $a_{GaN}$  et  $a_{AlN}$  sont les paramètres de mailles des semiconducteurs binaires BN, GaN et AlN respectivement, le paramètre de courbure  $b$  est nul.

- **Variation non linéaire des paramètres en fonction du coefficient  $x$  :**

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

$$Y_{A_xB_{1-x}C} = X Y_{AC} + (1 - X)Y_{BC} + X(1 - X)b \quad (I.12)$$

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

- Soit d'une fonction prédéfinie pour chaque alliage ternaire, par exemple dans le cas du  $B_xGa_{1-x}N$  avec  $x \in [0,1]$ , elle est donnée par [50]:

$$E_{B_xGa_{1-x}N} = 3.39 - 7.09x + 9.2x^2 \quad (I.13)$$

- Soit par la loi de Végard en comparant les énergies obtenues dans les différentes vallées ( $\Gamma$ , L et X) et en prenant leurs minimums, dans le cas de  $B_xGa_{1-x}N$  et  $B_xAl_{1-x}N$ . La relation est donnée par [50] :

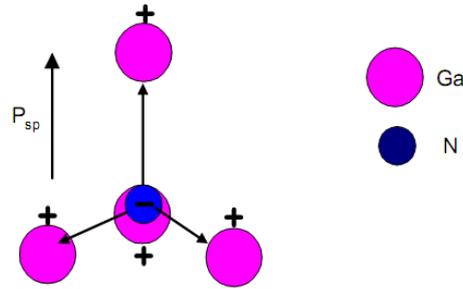
$$\begin{cases} E_{A_xB_{1-x}C}^{\Gamma} = X E_{AC}^{\Gamma} + (1 - X)E_{BC}^{\Gamma} + X(1 - X)b_{\Gamma} \\ E_{A_xB_{1-x}C}^L = X E_{AC}^L + (1 - X)E_{BC}^L + X(1 - X)b \\ E_{A_xB_{1-x}C}^X = X E_{AC}^X + (1 - X)E_{BC}^X + X(1 - X)b \\ E_{A_xB_{1-x}C} = \min( E_{A_xB_{1-x}C}^{\Gamma}, E_{A_xB_{1-x}C}^L, E_{A_xB_{1-x}C}^X ) \end{cases} \quad (I.14)$$

Les paramètres de courbures dans chaque vallée sont des constantes qui existent dans la littérature. ( $b = 4.30$  eV pour le BGaN et  $b = 5.45$ eV pour BAlN) [51].

## I.4. Polarisation spontanée et effet piézoélectrique

### I.4.1. polarisation spontanée

Dans les matériaux III-N, l'élément N (azote) possède une électronégativité plus importante que celle de l'élément III (gallium, aluminium, bore). La polarisation spontanée va séparer spatialement les électrons et les trous et créer ainsi une accumulation de charges aux extrémités de la couche perpendiculairement à l'axe c (interface substrat/couche épitaxiée ou surface de la couche épitaxiée) qui peut modifier les propriétés électriques du matériau. Il est donc important de connaître le sens de cette polarisation afin de pouvoir la contrôler. La répartition des électrons de valence le long de la liaison métal-azote se concentre essentiellement autour de l'atome d'azote. Il en résulte un fort moment dipolaire lié à cette asymétrie de charges. La contribution des moments dipolaires propre à chaque tétraèdre du réseau forme au niveau microscopique un moment dipolaire parallèle à l'axe c (Figure I.11) [52].



**Figure I.11 :** Polarisation spontanée , Résultante des moments dipolaires pour un tétraèdre w-GaN.

La somme vectorielle de tous ces dipôles élémentaires génère en volume une polarisation macroscopique dite "spontanée". En l'absence d'un champ extérieur, celle-ci induit un champ électrique interne de signe contraire à la polarisation spontanée. Selon les cas, la polarisation spontanée sera orientée soit de sens direct soit de sens opposé à l'axe de croissance  $c$  du matériau.

Dans le cas des matériaux ternaire  $B_xGa_{1-x}N$  et  $B_xAl_{1-x}N$  , la polarisation spontanée est décrite par une relation non linéaire reliant la composition et les valeurs des constantes  $P_{sp}$  des deux binaires BN et GaN pour le matériau B<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N et BN et AlN pour le matériau B<sub>x</sub>Al<sub>1-x</sub>N, dont le troisième terme correspond à une correction quadratique liée à une constante  $b$  (paramètre de courbure) comme le montre l'expression suivante [52] :

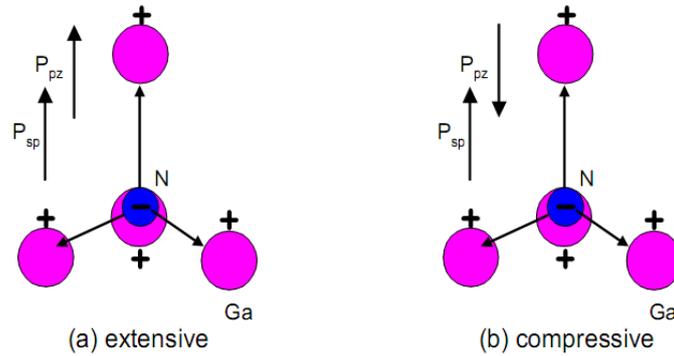
$$P_{sp} (BGaN) = X P_{sp}(BN) + (1 - X)P_{sp}(GaN) + X(1 - X)b \quad (I.15)$$

$$P_{sp} (BAlN) = X P_{sp}(BN) + (1 - X)P_{sp}(AlN) + X(1 - X)b \quad (I.16)$$

#### I.4.2. polarisation piézoélectrique

La polarisation piézoélectrique trouve essentiellement son origine dans la symétrie du cristal. L'effet piézoélectrique peut se définir comme l'apparition d'une polarisation électrique dans une couche semi-conductrice lorsque celle-ci est soumise à une contrainte  $\sigma$  qui modifie la maille du cristal en brisant sa symétrie. Les deux phases : zinc-blende (cubique) et wurtzite (hexagonale) sont non centrosymétriques. Ceci induit l'existence en leur sein de l'effet piézoélectrique. Le désaccord en paramètre de maille entre le substrat

et le GaN génère une contrainte mécanique dans le plan perpendiculaire à la direction de croissance du matériau. Cette contrainte biaxiale entraîne une déformation structurale du cristal tétraédrique qui modifie le rapport de paramètre de maille ( $c/a$ ) de la structure. Il en résulte une non-superposition des barycentres de charges positives (gallium, aluminium ou bore) et négatives (azote) qui donne lieu à une polarisation piézoélectrique suivant la direction de l'axe  $c$  (Figure I.12) [53].



**Figure I.12 :** sens de la polarisation piézoélectrique dans  $w$ -GaN.  
Il en est la même pour  $w$ -AlN et  $w$ -BN.

La polarisation piézoélectrique peut être calculée à partir des coefficients piézoélectriques  $e_{33}$  et  $e_{31}$  suivant l'équation [54]:

$$P_{PZ} = 2E_{xx} \left( e_{31} - \frac{e_{33}c_{13}}{c_{33}} \right) \quad (I.17)$$

Avec :  $E_{xx}$  allongement relatif du matériau dans le plan de croissance,  $E_{xx} = \frac{a-a_0}{a_0}$

$e_{31}$  et  $e_{33}$  constantes piézoélectriques [ $C/m^2$ ]

$c_{13}$  et  $c_{33}$  constantes élastiques [GPa]

$a$  et  $a_0$  paramètres de maille dans le plan de la structure contrainte et à l'équilibre [Å]

Donc

$$P_{PZ} = 2 \left( \frac{a-a_0}{a_0} \right) X \left( e_{31} - \frac{e_{33}c_{13}}{c_{33}} \right) \quad (I.18)$$

Au regard des valeurs des constantes piézoélectriques et élastiques du GaN et de l'AlN reportées dans le tableau 1.6, on remarque que l'expression  $(e_{31} - \frac{e_{33}c_{13}}{c_{33}})$  est toujours négative, mais BN est positive. La polarisation piézoélectrique des nitrure d'élément III est donc négative si la structure est en tension sur son substrat ( $a < a_0$ ) et positive dans le cas contraire ( $a > a_0$ ).

Matériaux	AlN	GaN	BN
$e_{31}(\text{C/m}^2)$	-0.60	-0.49	0.31
$e_{33}(\text{C/m}^2)$	1.46	0.73	-0.94
$C_{13}(\text{C/m}^2)$	108	103	61
$C_{33}(\text{C/m}^2)$	373	405	1061

**Tableau I.6 :** Constantes piézoélectrique du GaN, AlN et BN [40], [41].

D'après les études théoriques menées par Bernardini et al [55], et contrairement à la polarisation spontanée, la polarisation piézoélectrique de l'alliage III-N pourrait être décrite par une loi de Vegard du type [55] :

$$\text{pour le B GaN} \quad P_{pz}(B_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}, E_{xx}) = x P_{pz}(\text{BN}, E_{xx}) + (1-x) P_{pz}(\text{GaN}, E_{xx}) \quad (\text{I.19})$$

$$\text{pour le B AlN} \quad P_{pz}(B_x \text{Al}_{1-x} \text{N}, E_{xx}) = x P_{pz}(\text{BN}, E_{xx}) + (1-x) P_{pz}(\text{AlN}, E_{xx}) \quad (\text{I.20})$$

La polarisation piézoélectrique de l'alliage III-N est assez surprenant et provient, selon les auteurs, de la forte importance de l'effet piézoélectrique du second ordre des binaires AlN, GaN et BN.

### I.4.3. Polarisation totale

En l'absence de polarisation externe, la polarisation totale dans un matériau à structure wurtzite est égale à la somme des polarisations spontanée et piézoélectrique :

$$\vec{P} = \vec{P}_{sp} + \vec{P}_{pz} \quad (\text{I.21})$$

Elle peut être positive ou négative et son orientation est elle-même définie selon que la structure est en tension ou en compression. En effet, dans le cas où le cristal est en tension, la polarisation spontanée et la polarisation piézoélectrique sont de même sens et la polarisation totale s'en trouve augmentée. Par contre, si le cristal est en compression, les deux polarisations sont de sens opposés et la polarisation totale diminue.

La polarisation totale du matériaux ternaire  $B_xGa_{1-x}N$  est donnée par [56] :

$$P_{pz} + P_{sp} = 3 \times 10^{-6} + 1.502 \times 10^{-5}x + 3.491 \times 10^{-5}x^2 \text{ C/m}^2 \quad (\text{I.22})$$

Avec  $x \in [0,1]$ .

## I.5. Voies d'élaboration des matériaux III-V

### I.5.1. Les substrats

Le développement plus récent des nitrures d'éléments III par rapport aux autres semi-conducteurs des filières IV-IV, III-V et II-VI est lié en grande partie à l'absence de substrats adéquats pour la croissance épitaxiale. Les caractéristiques de la croissance de GaN sur différents substrats sont largement traitées dans la littérature [57] et nous n'allons donner dans la suite que quelques considérations générales.

- Le saphir est le substrat le plus couramment utilisé pour l'épitaxie des nitrures. La croissance s'effectue généralement sur le plan  $c$  avec une rotation de  $30^\circ$  de la maille de GaN par rapport à celle du saphir. Le désaccord de maille est alors de 14%. Les principaux inconvénients sont la faible conductivité thermique du saphir et le caractère isolant. Les couches de GaN et d'AlN épitaxiées directement sur le saphir ont une densité de dislocations très élevée, typiquement entre  $10^9$  et  $10^{10}/\text{cm}^2$ . Ceci est dû aux effets combinés du désaccord de maille et de la différence de coefficient de dilatation thermique (-25% en compression pour le GaN) [58].

- Le deuxième substrat est le carbure de silicium dont le polytype hexagonal le plus couramment utilisé est le 6H-SiC. Il a une bonne conductivité thermique, ce qui est particulièrement important pour les applications aux dispositifs de puissance. Le désaccord de maille est de 3.5% avec le GaN. La densité de dislocations des couches de GaN épitaxiées est de l'ordre de  $10^9$ - $10^{10}/\text{cm}^2$ , comparable à celle sur substrat saphir. La contrainte résiduelle est généralement une contrainte en tension, due à la différence de

coefficient thermique [57]. L'épitaxie effectuée sur la face Si (C) détermine la polarité Ga (N) de la couche déposée [59].

Le désaccord de maille par rapport au GaN est de -17% et l'état de l'art pour la densité de dislocations de l'ordre de  $5 \cdot 10^9/\text{cm}^2$  [60, 61].

- Le GaN massif est a priori le meilleur substrat, mais sa fabrication reste difficile et coûteuse. Des substrats de haute qualité d'épaisseur de  $\sim 60 \mu\text{m}$  et de  $1 \text{ cm}^2$  de surface sont produits par dissolution d'azote sous haute température ( $\sim 1500 \text{ }^\circ\text{C}$ ) et haute pression (1.5 GPa) dans le gallium fondu [62]. Néanmoins, ces substrats sont fortement dopés n par la présence d'impuretés d'oxygène avec des concentrations qui peuvent atteindre  $10^{20}/\text{cm}^3$ .

- L'AlN est aussi très prometteur comme substrat pour les nitrures. Ses avantages sont une bonne conductivité thermique, une bonne résistivité électrique et un coefficient de dilatation thermique adapté au GaN. Plusieurs techniques basées sur la sublimation, l'évaporation ou les réactions en solution sont utilisées pour la fabrication des cristaux massifs. Un des problèmes majeurs reste la contamination par l'oxygène, qui est présent à des concentrations supérieures à  $4.3 \cdot 10^{19}/\text{cm}^3$  et dégrade les propriétés structurales et thermiques [57].

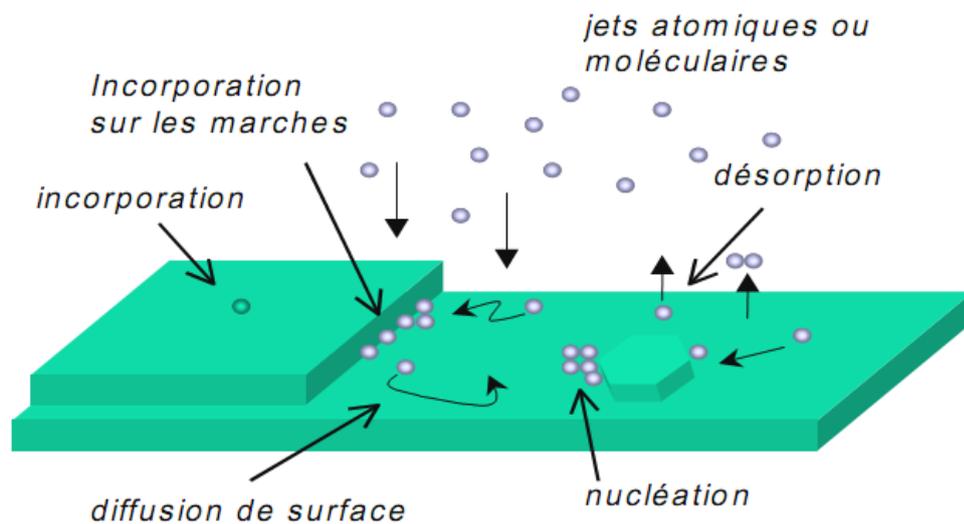
## **I.5.2. Principales techniques d'élaboration des nitrures**

Pour fabriquer des dispositifs électroniques et optoélectroniques à partir des matériaux nitrures, l'élaboration de couches minces de bonne qualité est nécessaire. L'épitaxie des matériaux nitrures se fait en général par des techniques d'élaboration bien précises telles que l'EJM, l'EPVH et l'EPVOM. L'épitaxie est une étape technologique consistant à faire croître du cristal sur du cristal. Etymologiquement, "épi" signifie "sur" et "taxis", "arrangement". La technique consiste à utiliser le substrat comme germe cristallin de croissance et à faire croître la couche par un apport d'éléments constituant la nouvelle couche.

### ***I.5.2.1. L'épitaxie par jet moléculaire (EJM)***

Lors d'une croissance par EJM les éléments constituant du matériau à épitaxier viennent de déposer sur un substrat porté à haute température. Ces éléments issus de l'évaporation ou de la sublimation de sources solides sont véhiculés jusqu'au substrat sous

forme de jets moléculaires. Cette technique nécessite donc la mise en œuvre d'un ultra vide dans le bâti. Les particules arrivant avec une certaine énergie sont adsorbées à la surface, sur laquelle elles vont pouvoir se mouvoir (voir Figure I.13) [63]. Le temps pendant lequel les atomes restent sur la surface du substrat dépend de la température de celui-ci : une température trop élevée va favoriser la désorption des atomes. Les atomes en surface se déplacent pour rejoindre soit un autre petit groupe d'atomes et former un nucleus, soit un bord de marche déjà existant. La phase de nucléation vise une densité critique à partir de laquelle on assiste à la formation de petits îlots. Les îlots vont ensuite coalescer pour former une mono-couche épitaxiale. Le processus ainsi répété donne le film épitaxié final.



**Figure I.13** : Schéma de principe de la croissance en épitaxie par jets moléculaires

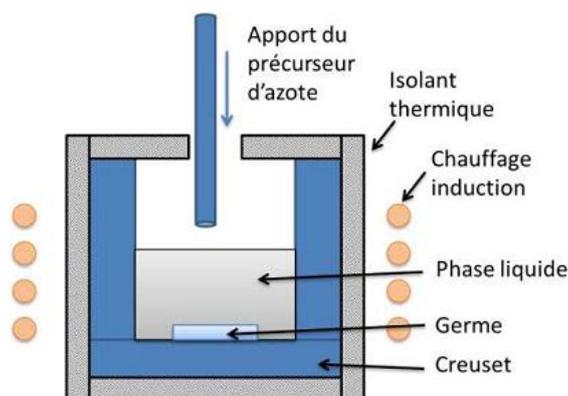
Dans le cas des nitrures, le gallium et l'aluminium atomiques sont obtenus par sublimation de sources solides. L'azote quant à lui est obtenu à partir d'un précurseur gazeux qui peut être soit de l'ammoniac ( $\text{NH}_3$ ) soit la molécule  $\text{N}_2$ . Dans ce dernier cas la molécule  $\text{N}_2$  très stable chimiquement est dissociée soit par radio fréquence (source d'azote RF) ou par résonance électron-cyclotron (ECR). La température de substrat pour le dépôt de nitrures par EJM est classiquement comprise entre  $450^\circ\text{C}$  et  $850^\circ\text{C}$ . Pour la croissance de h-BN est possible par cette technique [63]. En 2009, Tsai et al. [64] étudient le dépôt de h-BN d'orientation (0001) à des températures de  $890^\circ\text{C}$  sur substrat nickel d'orientation (111). La vitesse de croissance

de cette couche est de 65 nm.h<sup>-1</sup> pour une épaisseur de 100 nm et sa qualité cristalline est de 2200 arcsec (mesure effectuée par X-ray rocking curve sur la raie (0002) de h-BN).

Les avantages de la EJM sont les faibles températures nécessaires pour la croissance et les qualités structurales des couches obtenues. Aussi cette technique présente cependant l'inconvénient de fournir des vitesses de croissance relativement basses (quelques monocouches par minute). Un autre inconvénient est le coût élevé de l'entretien d'un bâti.

### 1.5.2.2. L'épitaxie en phase liquide

Une des premières techniques utilisées pour la cristallogénèse des nitrures III/V est la croissance en phase liquide. L'objectif est d'épitaxier des couches assez épaisses et massives pouvant servir de substrat par la suite pour la croissance d'autres matériaux. Cette technique présente en réalité de multiples variantes qui seront listées de façon non exhaustive. Cette méthode consiste à faire fondre un solvant dans un creuset (figure I.14). Ce solvant sert à dissoudre les éléments constitutifs du matériau à cristalliser. Dans le cas de la croissance en solution de nitrures III/V, les solvants peuvent être des métaux (Cu, Ga), des solvants minéraux (LiN) ou le mélange des deux [65]. Les éléments constitutifs peuvent soit être sous forme de poudre de BN ou d'AlN, soit sous forme gazeuse NH<sub>3</sub> ou N<sub>2</sub> [66]. Dans ce dernier cas, le solvant doit contenir l'élément III (Al ou B). Cette technique porte le nom de méthode Vapeur –Liquide – Solide (VLS) [67].

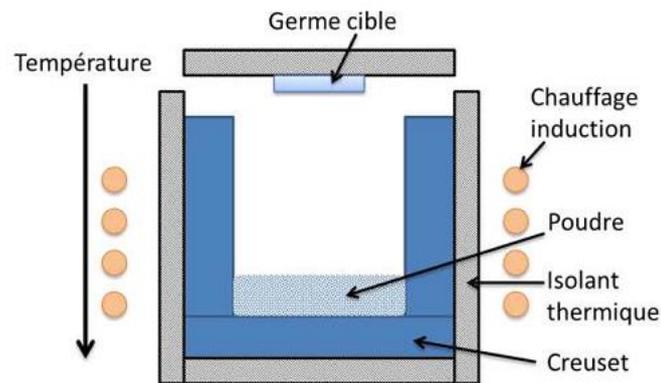


**Figure I.14 :** schéma type d'un réacteur d'épitaxie phase liquide pour nitrures III/V avec chauffage induction.

La croissance en phase liquide permet d'obtenir des cristaux de très haute qualité structurale. En revanche, la vitesse de croissance reste généralement moyenne (inférieur à  $1 \mu\text{m.h}^{-1}$ ), en raison de la faible solubilité de l'élément N dans la phase liquide. Enfin, d'un point de vue technique, le choix du solvant est essentiel mais peut s'avérer limité (réactivité avec le creuset, évaporation, toxicité possible). Des substrats mono cristallins, ou germes comme ils sont nommés pour ce type de méthode, peuvent être disposés au fond du creuset [43], la couche formée étant censé bénéficier de la relation épitaxie apportée par le germe. Une variante consiste à tremper des germes disposés sur une nacelle directement dans la phase liquide. Une croissance de couche mince est alors possible à la surface du substrat, ce qui rend ce procédé plus facilement industrialisable. Les résultats obtenus pour la croissance de w-AlN et h-BN sont décrits à la thèse de Nicolas COUDURIER [24]. Pour résumer, cette technique présente plusieurs avantages. Les températures de croissance nécessaires sont inférieures à celles des autres techniques de croissance de nitrures [68]. Les qualités cristallines obtenues sont comparables voire meilleures que celle des dépôts en phase gazeuse, comme aussi présente l'avantage d'être très rapide, la vitesse de croissance peut être de l'ordre du micron par minute mais n'a pas du tout la même précision que l'EJM, et d'un faible coût et d'un appareillage simple.

### ***1.5.2.3. Le transport physique en phase gazeuse (PVT)***

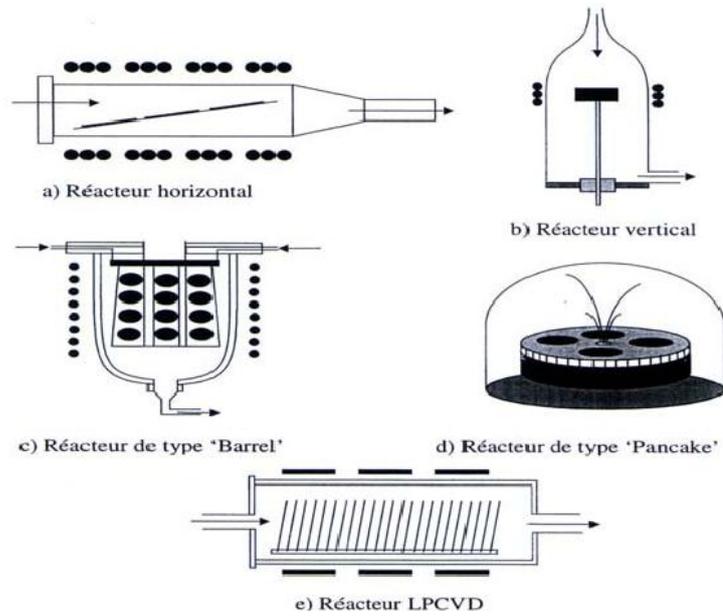
Le transport physique en phase vapeur (PVT) est une technique consistant à sublimer une poudre afin de l'amener à se condenser par la suite sur une cible où est placé un germe de haute qualité cristalline (figure I.15) [24]. La source de matériau est placée dans un creuset et l'ensemble du dispositif est placé sous vide partiel avec un flux contrôlé de gaz neutre. Le transport physique est assuré par le gradient thermique existant entre la partie du creuset contenant la poudre (partie chaude) et le germe cible (partie froide). La géométrie du réacteur est un facteur essentiel à la réussite de cette technique. Une modélisation complète du transfert thermique et des transports de matière pour chaque appareillage facilite l'obtention de bons rendements ou de croissances homogènes. Des cristaux peuvent ainsi être synthétisés et utilisés par la suite comme substrat massif pour diverses applications. Cette technique a d'abord été utilisée pour la croissance du SiC. La commercialisation de substrats de haute qualité cristalline de SiC, polytypes 4H et 6H obtenus par PVT démontre d'ailleurs le succès de cette méthode.



*Figure I.15 : schéma type d'un procédé de transport physique en phase gazeuse.*

#### ***1.5.2.4. Epitaxie en phase vapeur aux organométalliques (EPVOM)***

La technique d'Epitaxie en Phase Vapeur à partir de composés Organométalliques a été introduite à la fin des années 60 par H Manasevit. Durant les années 1969-1975 Manasevit a réussi à épitaxier par cette technique à peu près tous les semi-conducteurs III-V et II-VI. L'EPVOM se distingue de l'EPV aux hydrures par la nature des précurseurs d'éléments III utilisés, qui sont des composés organométalliques contenant l'atome à épitaxier, mais également par le fait que la croissance se déroule dans un réacteur à parois froides, hors équilibre thermodynamique. La chambre de croissance est la pièce maîtresse de l'équipement d'EPVOM. Il existe différentes géométries verticales ou horizontales (voir figure I.16) [69]. L'EPVOM qui présente l'intérêt d'une mise en œuvre très souple à coût raisonnable, est très majoritairement utilisée aujourd'hui dans l'industrie des semi-conducteurs, pour la fabrication de composants.

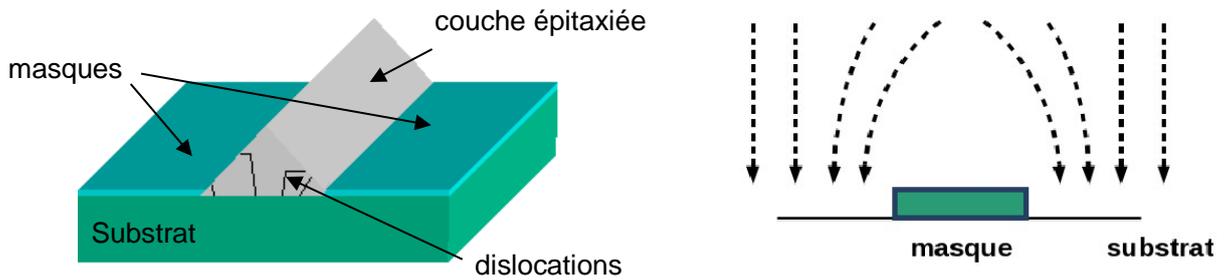


**Figure 1.16 :** Différents types de réacteurs d'épitaxie en phase gazeuse.

La diversité des techniques existantes, associée à des vitesses de croissance cristalline pouvant atteindre plus de  $10 \mu\text{m}/\text{min}$ , explique pourquoi l'épitaxie en phase vapeur est à l'heure actuelle la technique la plus répandue au sein de l'industrie des semi-conducteurs.

#### **1.5.2.5. L'Épitaxie sélective**

En fonction des gaz en présence dans les réacteurs et en fonction de la nature du matériau en surface du substrat, le phénomène d'épitaxie se produit ou non. En d'autres termes, il est possible de trouver des conditions pour lesquelles on effectue une croissance sélective, c'est-à-dire qui ne se produit qu'en certains endroits sur la surface du substrat, et ce d'une manière contrôlée. L'épitaxie sélective est une croissance par EPVOM sur un substrat partiellement masqué par des bandes de diélectrique. Le masque introduit une perturbation locale de la croissance car les espèces réactives ne peuvent pas cristalliser dessus. Celles-ci migrent alors au proche voisinage du masque et augmentent alors localement la vitesse de croissance.

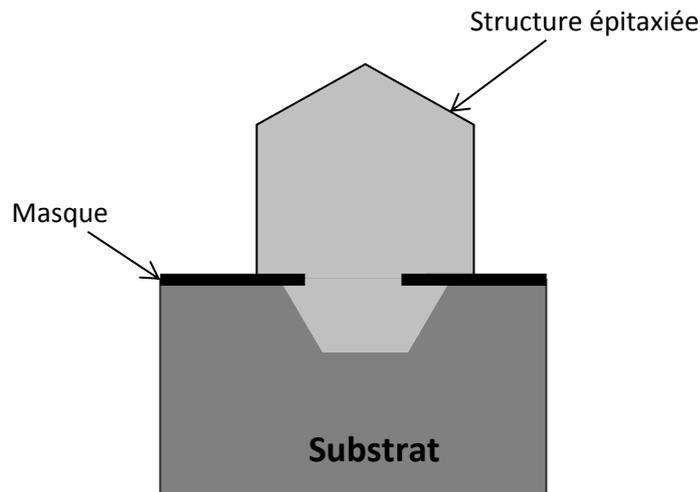


*Figure 1.17 : Schéma de principe de l'épitaxie sélective*

On remarque sur la figure I.17 [70] : à gauche est présenté des masques en diélectrique recouvrent partiellement le substrat (La croissance ne s'opère alors pas sur ces derniers mais seulement entre). A droite une vue en coupe sur laquelle le flux de matière dans la phase vapeur (représenté par les flèches) supplémentaire au voisinage du masque est visible.

L'épitaxie sélective correspond donc à une croissance localisée spatialement sur le substrat de façon contrôlée. Pour ce faire, un masque en diélectrique (généralement le dioxyde de silicium  $\text{SiO}_2$  ou le nitrure de silicium  $\text{Si}_3\text{N}_4$ ) est déposé au préalable sur le substrat. Ensuite des ouvertures sont formées dans le masque par lithographie optique et gravure chimique. La croissance se fait ainsi seulement dans ces ouvertures et non sur les masques grâce au phénomène de sélectivité. La nature de cette sélectivité est extrêmement importante: elle doit être parfaite et aucun dépôt ne doit être visible sur les masques en diélectrique après la croissance. Ceci dépend principalement des conditions de croissance: pression [71], température [72], fraction molaires des espèces réactives [73]. Dans le cas du nitrure de gallium des couches épaisses de GaN HVPE sur des templates de GaN MOCVD sont réalisables dans de bonnes conditions. Cependant, le passage par l'élaboration d'une couche de quelques micromètres en MOCVD augmente la complexité du processus d'obtention de quasi-substrats ainsi que leur prix de revient. Afin d'optimiser la conception et le coût des quasi-substrats de GaN, il est nécessaire de minimiser les étapes technologiques conduisant à leur élaboration. La solution réside dans la fabrication de quasi-substrats directement sur le substrat saphir.

L'EPL n'est pas une technique bien adaptée à la croissance, sélective. Il est en effet difficile d'éviter les dépôts de matériau sur les parties masquées de l'échantillon et la morphologie des zones épitaxiées sélectivement est souvent très perturbée. En EPV la vitesse de croissance élevée de cette technique conduise à l'extension de la structure épitaxiée sur la surface même du masquage (voir figure I.18), et ceci sur plusieurs microns.

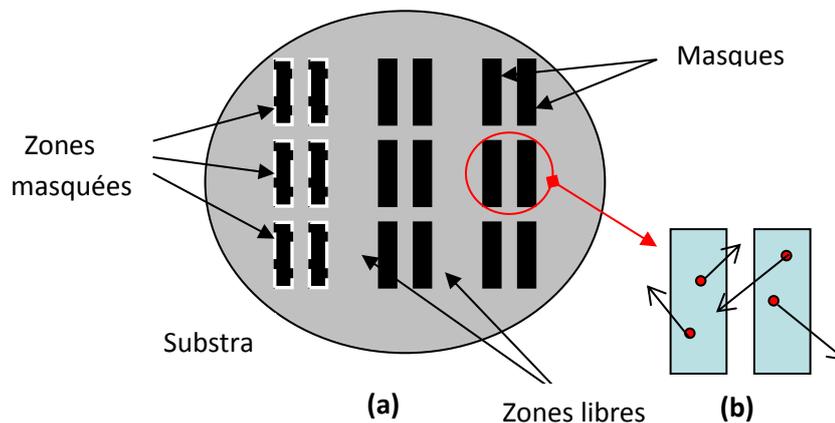


*Figure I.18 : Représentation schématique d'une structure épitaxiée sélectivement par EPV montrant l'extension latérale de la croissance sur la surface du masque.[74]*

L'EPVOM se prête facilement à la réalisation de croissances sélectives. En effet, avec des conditions appropriées, la sélectivité s'obtient pour des températures habituellement utilisées par cette technique d'épitaxie. Donc le principe de l'épitaxie sélective permet d'obtenir un excellent couplage optique entre les différentes sections. En effet, il n'y a pas d'interface abrupte, mais une variation graduelle d'épaisseur pour passer d'une région à l'autre. Cependant, c'est une technique assez délicate à mettre en œuvre car la préparation de surface avant la croissance est très critique et influence fortement la qualité de la croissance.

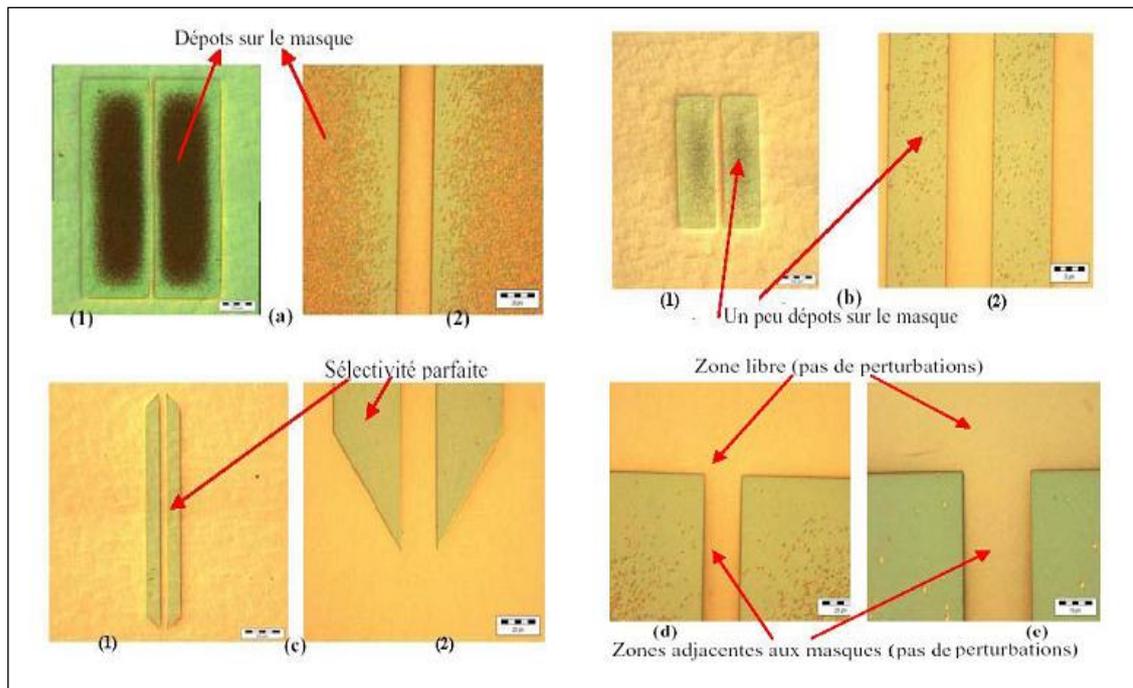
Dans le cas du B GaN (déposé par épitaxie sélective sur substrat GaN sur lesquels est gravée une matrice de masques en silice présentant diverses dimensions), ces masques sont élaborés par lithographie, ils sont de forme rectangulaire et alignés deux à deux parallèlement à un axe cristallographique principal (figure I.19). La nature de la sélectivité en fonction des dimensions des masques, ainsi que la morphologie de surface, relié au

phénomène de diffusion des espèces de bore (d'après la loi de Fick) qui a une longueur caractéristique de diffusion supérieure à celle du gallium. Le bore diffuse 'loin' au-dessus des masques, et ne s'incorpore plus de manière homogène entre les masques. Ceci induit une croissance avec sans doute moins de bore entre les masques, donc moins de désaccord de maille, ce qui induit une amélioration cristalline visible à l'optique. Cette hypothèse est confortée par le fait que l'amélioration est d'autant plus importante pour les petits gaps, indépendamment de la largeur du masque, car le bore diffuse d'autant plus loin de la zone entre les masques que ceux-ci sont rapprochés (figure I.19). Les atomes de bore (en rouge) qui arrivent à la surface des masques diffusent au loin, et ne s'incorporent plus de manière homogène entre les masques



**Figure I.19 :** (a) représentation schématique des différentes zones définies sur le substrat (en vue du dessus) (b) explication du phénomène d'amélioration de la morphologie de surface entre les masques [74].

Plus la surface de masque est grande, plus il y a de probabilité de dépôt sur celui-ci, donc la sélectivité est obtenue uniquement pour des masques de faible longueur (figure I.20).



**Figure I.20:** Cliché de microscopie optique montrant le degré de la sélectivité et l'amélioration de l'échantillon B GaN [74]

L'étude de la croissance sélective peut permettre de mieux comprendre certains aspects de la MOVPE car elle révèle des différences de comportement entre les espèces actives et permet d'avoir accès à certaines caractéristiques des précurseurs utilisés tels que leurs caractéristiques de diffusion et d'incorporation.

## I.6. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons rappelé les propriétés physiques remarquables des matériaux III-N à large bande interdite, spécifiquement le nitrure de bore (BN), le nitrure de gallium (GaN), le nitrure d'aluminium (AlN) et leurs alliages ternaires B GaN et B AlN. La connaissance de ces propriétés physiques ainsi que la structure de bande est une étape indispensable avant toute simulation et utilisation du matériau, car elle permet de décrire le comportement des électrons à l'intérieur du semi-conducteur. Les notions de polarisations piézoélectrique et spontanée ont été définies en vue de mieux comprendre et de maîtriser les différents mécanismes de transport dans les hétérostructures. Nous avons terminé ce chapitre par une brève revue des substrats

employés dans la croissance de couches nitrures en décrivant les principales techniques d'élaboration des nitrures, afin de comparer leur pouvoir de dissipation thermique respectif. Dans le chapitre suivant nous traitons de manière détaillée les phénomènes de transport électrique se produisant dans les semi-conducteurs considérés.

### Références

- [1] W. C. Johnson, J. Parson et M. Crew, «Nitrogen compounds of gallium. iii,» The Journal of Physical Chemistry, vol. 36, n° 110, pp. 2651-2654, 1932.
- [2] R. Juza et H. Hahn, «Über die kristallstrukturen von Cu<sub>3</sub>N, GaN und InN metallamide und metallnitride,» Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie, vol. 239, n° 13, pp. 282- 287, 1938.
- [3] P. Pascal, Nouveau traite de Chimie minerale - Tome VI (B, Al, Ga, In, Th), 1961.
- [4] J. Hecht, «The quest for practical green laser diodes,» Laser focus world, vol. 46, n° 112, pp. 65-67, 2010.
- [5] W.H. Balmain and J. Prakt. . Phil. Mag., 21 :170, 1842.
- [6] W.H. Balmain and J. Prakt. . Chem., 27 :422, 1842.
- [7] S. Veprek, «The search for novel, superhard materials,» Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films, vol. 17, n° 15, pp. 2401-2420, 1999.
- [8] Y. Kobayashi, K. Kumakura, T. Akasaka et T. Makimoto, «Layered boron nitride as a release layer for mechanical transfer of GaN-based devices,» Nature, vol. 484, n° 17393, pp. 223-227,2012.
- [9] I. Petrov, E. Mojab, R. Powell, J. Greene, L. Hultman et J.-E. Sundgren, «Synthesis of metastable epitaxial zinc-blende structure AlN by solid-state reaction,» Applied physics letters, vol. 60, n° 120, pp. 2491-2493, 1992.
- [10] N. Norrby, H. Lind, G. Parakhonskiy, M. Johansson, F. Tasnadi, L. Dubrovinsky, N. Dubrovinskaia, I. Abrikosov et M. Odën, «High pressure and high temperature stabilization of cubic AlN in Ti<sub>0.60</sub>Al<sub>0.40</sub>N,» Journal of Applied Physics, vol. 113, n° 15, pp. 53515-53515, 2013.

- [11] M. Paisley, Z. Sitar, J. Posthill et R. Davis, «Growth of cubic phase gallium nitride by Modified molecular-beam epitaxy,» *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, vol. 7, n° 13, pp. 701-705, 1989.
- [12] P. Van Camp, V. Van Doren et J. Devreese, «High-pressure properties of wurtzite- and rocksalt-type aluminum nitride,» *Physical Review B*, vol. 44, n° 116, p. 9056, 1991.
- [13] O. Fukunaga. The equilibrium phase boundary between hexagonal and cubic boron nitride. *Diamond Relat. Mater.*, 9 :7, 2000.
- [14] F. Bundy et R. Wentorf Jr, «Direct transformation of hexagonal boron nitride to denser forms,» *The Journal of Chemical Physics*, vol. 38, p. 1144, 1963.
- [15] Périne JAFFRENNOU, these de doctorat « Etude des propriétés optiques du nitrure de bore hexagonal et des nanotubes de nitrure de bore », Ecole normale supérieure de cachan, Octobre 2008.
- [16] T. Taniguchi ; K. Watanabe. Synthesis of high purity boron nitride single crystals under high pressure by using Ba-BN solvent. *J. Cryst. Growth*, 303 :525, 2007.
- [17] D. A. Evans ; A. G. McGlynn ; B. M. Towlson ; M. Gunn ; D. Jones ; T. E. Jenkins ; R. Winter ; N. R. J. Poolton. Determination of the optical band gap energy of cubic and hexagonal boron nitride using luminescence excitation spectroscopy. *J. Phys. : Cond. Matter.*, 20 :075233, 2008.
- [18] J. Huang ; Y. T. Zhu. Advances in the synthesis and characterization of boron nitride. *Defect and diffusion Forum*, 186-187 :1, 2000.
- [19] L. Museur ; A. Kanaev. Near band-gap photoluminescence properties of hexagonal boron nitride. *J. Appl. Phys.*, 103 :103520, 2008.
- [20] BOND, W.L. Precision lattice constant determination *Acta Crystallogr.* 1960, Vol. 13

part. 10 p 814 – 818.

- [21] GEHRSTZ, S., SIGG, H., HERRES, N., BACHEM, K., KÖHLER, K., AND REINHART. Compositional dependence of the elastic constants and the lattice parameter of  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  Phys. Rev. B 1999, Vol. 60, No. 16, p 11601 – 11610.
- [22] Martinez\_Guerrero, Esteban Elaboration en épitaxie par jets moléculaires des nitrures d'éléments III en phase cubique, Institut nationale des sciences appliquées Lyon, 2002.
- [23] 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'habilitation à diriger des recherches en science physique, U de Lille 1, 2000.
- [24] Nicolas COUDURIER, these de doctorat, « Contribution à l'épitaxie des nitrures d'aluminium et de bore par dépôt chimique en phase vapeur à haute température », université de grenoble, août 2006.
- [25] Peter Y.YU,Manuel Cardona. Fundamentals of semiconductors Physics and materials properties. Springer (2001).
- [26] PUGH, S.K., DUGDALE, D.J., BRAND, S. and ABRAM, R.A. Electronic structure calculations on nitride semiconducteurs Semicond. Sci. Technol. 1999, Vol. 14,p 23 – 31.
- [27] Furthmüller, J., Hafner, J., Kresse, G.: Phys. Rev. B 50 (1994)
- [28] LEI, T., FANCIULLI, M., MOLNAR, R.J., MOUSTAKAS, T.D., GRAHAM, R.J., and SCANLON J. Epitaxial growth of zinc blende and wurzitic gallium nitride thin films on (001) silicon Appl. Phys. Lett. 1991, Vol. 59 No. 8, p 944 – 946.
- [29] THOMPSON, M.P., AUNER, G.W., ZHELEVA, T.S., JONES, K.A., SIMKO, S.J., and HILFIKER, J.N. Deposition factors and band-gap of zincblende AlN J Appl. Phys. 2001, Vol. 89 No. 6, p 3331 – 3336.

- [30] K.P.O'DONNELL, X.CHEN, « Temperature dependence of semiconductor band gaps», Appl. Phys. Lett. 58 (25), 24 June 1991.
- [31] D. K. Ghosh, L. K. Samanta and G. C. Bhar, Infrared Phys. 24 (1984) 34.
- [32] M.LEVINSHTEIN, S.RUMYANSEV, M.SHUR, « Handbook series on semiconductor parameters : Ternary and quaternary III-V compounds», volume 2.
- [33] Farahmand M, Garetto C, Bellotti E, Brennan K F, Goano M, Ghillino E, Ghione G, Albrecht J.D. and Ruden PP 2001 IEEE Trans. Elect. Dev. 48 535
- [34] Suzuki M and Uenoyama T 1996 J. Appl. Phys. 80 6868
- [35] L.ERamos, L.K.Teles, L.M.R.Scolfaro, J.L.P.Castineira, A.L.Rosa and J.R.Leite, phys. Rev. B63, 165210 (2001)
- [36] C.SAYAH, « études des effets du champ électromagnétique sur les propriétés des composés III-V par la méthode de Monte Carlo et l'équation de Poisson couplées », thèse de doctorat, université de Tlemcen, 2010.
- [37] M.E. Levinshtein, S.L. Rumyantsev, and M.S. Shur. Properties of advanced Semiconductor Materials. Wiley interscience, 2001.
- [38] S. Nakamura S and Fasol G 1997 Blue laser diode (Berlin: Springer).
- [39] Tewfik Beghdadlit, Etude des propriétés structurales et électroniques des nouveaux matériaux à bases d'alliages III-N pour l'optoélectronique, thèse de doctorat , U.de Tlemcen, 2009.
- [40] WRIGHT, A.F. Elastic properties of zincblende and wurzite AlN, GaN, and InN. J.Appl. Phys. 1997, Vol. 82 No. 6, p 2833 – 2839.

- [41] KIM, K., LAMBRECHT, W.R.L., and SEGALL, B. Elastic constants and related properties of tetrahedrally bonded BN, AlN, GaN, and InN Phys. Rev. B 1996, Vol. 53 No. 24, p 16310 – 16326
- [42] L. K. Teles, L. M. R. Scolfaro, and J. R. Leite « Spinodal decomposition in  $B_xGa_{(1-x)}N$  and  $B_xAl_{(1-x)}N$  alloys » Universidade de Sao Paulo, Instituto de Física, Caixa Postal 66318, 05315-970 Sao Paulo, Brazil, APPLIED PHYSICS LETTERS VOLUME 80, NUMBER 7, 18 FEBRUARY 2002
- [43] OKUMURA, H., OTHA, K., FEUILLET, G., BALAKRISHNAN, K., CHICHIBU, S., HAMAGUCHI, H., HACKE, P., and YOSHIDA S. Growth and characterization of cubic GaN J. Cryst. Growth 1997, Vol. 178, p 113 – 133
- [44] Perlin et al. Towards the identification of the dominant donor in GaN Phys. rev. Lett. vol. 75, n°2, pp. 296-299 (1995)
- [45] Popovici et al. Deposition and properties of group III nitrides by molecular beam epitaxy Group III nitride semiconductors compounds édité par B. Gil. Oxford : Clarendon press, p. 19-69 (1998).
- [46] Popovici et al. Deposition and properties of group III nitride by molecular beam epitaxy in Group III nitride semiconductors compounds Physics and applications. Édité par B. GIL. Oxford: Clarendon press PP. 19-69 (1998)
- [47] Abernathy, C.R. Growth of group III nitrides from Molecular Beams in GaN and related materials Gordon and Breach, New York, pp. 11-51 (1997).
- [48] Xu, X et al. Residual donors and compensation in metalorganic chemical vapour deposition as-grown n-GaN J. Appl. Phys., vol. 90, n°12, pp. 6130-6134 (2001)
- [49] Z. Benzarti, I. Halidou, O. Tottereau, T. Boufaden et- b. El Jani Microelectron. J., 33 :995 (2002)

- [50] A. Ougazzaden, S. Gautier, T. Moudakir, Z. Djebbour, Z. Lochner, S. Choi, H. J. Kim, J. H. Ryou, R. D. Dupuis, and A. A. Sirenko, "Bandgap bowing in BGaN thin films," *Applied Physics Letters*, vol. 93, August 2008.
- [51] Laurian Escalanti and Gus L. W. Hart, "Boron alloying in GaN", *applied physics letters* volume 84, number 5, february 2004.
- [52] F. Bernardini, V. Fiorentini, D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* 56 (1997) R10024.
- [53] Bernardini (F.), Fiorentini (V.) and Vanderbilt (D.), *Phys. Rev.B* 56, R10024 (1997).
- [54] M. Maghnia 2008, thèse, Sidi Bel Abbès (Algérie)
- [55] F. Bernardini and V. Fiorentini. Nonlinear Behavior of Spontaneous and Piezoelectric Polarization in III-V Nitride Alloys. *physica status solidi (a)*, 190(1) :65–73, 2002.
- [56] Vinod Ravindran "design and fabrication of boron-containing iii-nitrides based high electron mobility transistors", thèse de doctorat, UMI Georgia Tech-CNRS, 2013.
- [57] L. Liu et J. H. Edgar, Substrates for gallium nitride epitaxy, *Materials Science & Engineering R: Reports* R37, 61-127 (2002).
- [58] O. Ambacher, Growth and applications of group III-nitrides, *Journal of Physics D Applied Physics* 31, 2653-710 (1998).
- [59] E. S. Hellman, The polarity of GaN: a critical review, *MRS Internet Journal of Nitride Semiconductor Research* 3, 1-11 (1998).
- [60] F. Semond, Y. Cordier, N. Grandjean, F. Natali, B. Damilano, S. Vezian, et J. Massies, Molecular beam epitaxy of group-III nitrides on silicon substrates: growth, properties and device applications, *Phys. stat. sol. A* 188, 501-10 (2001).

- [61] F. Semond, B. Damilano, S. Vezian, N. Grandjean, M. Leroux, et J. Massies, GaN grown on Si(111) substrate: From two-dimensional growth to quantum well assessment, *Appl. Phys. Lett.* 75, 82-4 (1999).
- [62] I. Grzegory, High pressure growth of bulk GaN from solutions in gallium, *Journal of Physics: Condensed Matter* 13, 6875-92 (2001).
- [63] Stéphane FANGET, these de doctorat, « matériaux et hétérostructures à base de nitrures d'éléments iii en phase cubique et hexagonale pour l'optoélectronique », Université Joseph Fourier (Grenoble), 2002.
- [64] C. Tsai, Y. Kobayashi, T. Akasaka et M. Kasu, «Molecular beam epitaxial growth of hexagonal boron nitride on Ni (111) substrate,» *Journal of Crystal Growth*, vol. 311, n° 110, pp. 3054-3057, 2009.
- [65] H. Matsubara, K. Mizuno, Y. Takeuchi, S. Harada, Y. Kitou, E. Okuno et T. Ujihara, «Direct Growth of AlN Single Crystal on Sapphire by Solution Growth Method,» *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 52, n° 18, p. 08JE17, 2013.
- [66] K. Kamei, S. Inoue, Y. Shirai, T. Tanaka, N. Okada et A. Yauchi, «LPE growth of AlN from Cu-Al-Ti solution under nitrogen atmosphere,» *physica status solidi (a)*, vol. 203, n° 17, pp. 1720-1723, 2006.
- [67] M. Soueidan, G. Ferro, B. Nsouli, M. Roumie, E. Polychroniadis, M. Kazan, S. Juillaguet, D. Chaussende, N. Habka, J. Stoemenos et others, «Characterization of a 3C- SiC single domain grown on 6H-SiC (0001) by a vapor – liquid - solid mechanism » *Crystal growth & design*, vol. 6 n° 111, pp. 2598-2602, 2006.
- [68] H. Isobe, F. Kawamura, M. Kawahara, M. Yoshimura, Y. Mori et T. Sasaki, «Synthesis of AlN Grains and Liquid – Phase - Epitaxy (LPE) Growth of AlN Films Using Sn-Ca Mixed Flux,» *Japanese journal of applied physics*, vol. 44, pp. L488--L490, 2005.

- [69] Bourdais S. Etude du dépôt et des propriétés physiques du silicium polycristallin obtenu par le procédé RTCVD sur substrats de mullite. Applications aux cellules photovoltaïques en couches minces. Thèse. Strasbourg : Université L. Pasteur, 2000.
- [70] J. MARTIN, Etude par EPVOM de la Nano Hétéro Epitaxie (NHE) du GaN sur substrat Silicium, LMOPS unité de recherche commune à l'Université de Metz et Supélec CNRS UMR-7132, 2006
- [71] Hideto Miyake, Keisuke Nakao, Kazumasa Hiramatsu, Superlattices and Microstructures 41 (2007) 341–346.
- [72] S. Kitamura, K. Hiramatsu, N. Sawaki, Jpn. J. Appl. Phys. 24 (1995) L1184.
- [73] Akasaka, Y. Kobayashi, S. Ando, N. Kobayashi, M. Kumagai, J. Cryst. Growth 189–190 (1998) 72.
- [74] Y.Boucheffa, N.Chabane Sari, B.Benyoucef, A.ouggazaden, J.P.Charles, J.Martin « Etude expérimentale de l'épitaxie sélective en phase vapeur aux organométalliques d'alliages à base de nitrure de gallium », congrès international sur les énergies renouvelables et le développement durable (ICRESD\_07) université de Tlemcen 21, 22,23&24 May 2007.

---

## *Chapitre II*

# *Phénomènes de transport électrique dans les semi- conducteurs*

---

## **Chapitre II**

### **Phénomènes de transport électrique dans les semi-conducteurs**

*Dans les semi-conducteurs, le courant résulte du déplacement des porteurs libres (électrons ou trous) sous l'action d'une force extérieure. L'origine de cette force peut être soit une excitation par champ électrique (le courant est dit de conduction) soit par un gradient de concentration dans le semiconducteur (le courant est dit de diffusion) [1] : Le courant de conduction apparaît lorsqu'on applique au semiconducteur un champ électrique (ou magnétique), on a tendance à déplacer les porteurs de charge, électrons et trous. La conduction par champ électrique dans le matériau pourra se faire à deux niveaux : par les électrons de la bande de conduction qui remontent le champ électrique appliqué. Et par les trous de la bande de valence qui se déplacent dans le même sens que le champ électrique. Le courant de diffusion apparaît lorsque la densité des porteurs libres est modifiée localement à l'intérieur du semiconducteur, soit par des variations de température ou de lumière, soit généralement par une technologie appropriée comme un dopage non uniforme. Ce gradient de concentration va provoquer un déplacement des porteurs de la région la plus peuplée à la région la moins peuplée, ce phénomène est appelé processus de diffusion. Dans le cas général, le courant résulte des deux phénomènes (présence d'un champ électrique et d'un gradient de concentration).*

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

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

### **II.1. Différents régimes de transport électronique**

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

#### ***II.1.1. Transport dans le régime balistique***

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

#### ***II.1.2. Transport dans le régime stationnaire***

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

thermodynamique, les électrons sont animés d'un mouvement brownien d'où une vitesse moyenne qui en résulte nulle.

### **II.1.3. Transport dans le régime non-stationnaire :**

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

## **II.2. Notion de fonction de distribution**

L'étude classique du transport électronique consiste en la détermination de l'évolution temporelle de l'état des porteurs dans le dispositif. Les approches classiques reposent sur l'hypothèse d'une fonction de distribution  $f(k, r, t)$  qui décrit complètement le système étudié [2]. Ainsi, la grandeur  $f(k, r, t)$  représente la probabilité de trouver à un instant  $t$ , un porteur positionné dans l'espace aux coordonnées  $r$  et présentant un vecteur d'onde  $k$ . La population de porteurs est donc représentée par un gaz de porteurs 3D, dont la position et le moment sont parfaitement connus. La connaissance de la fonction de distribution permet alors d'accéder à toutes les grandeurs caractéristiques du système comme la concentration de porteurs, l'énergie des porteurs, la densité de courant ..., grandeurs utiles pour l'analyse du fonctionnement des composants de très petites dimensions.

## **II.3. Equation de transport de Boltzmann**

La complexité du transport électronique dans les dispositifs à semi-conducteurs se traduit, a priori, par la grande diversité des modèles physiques utilisés pour le décrire. Le point de départ de tous ces modèles est l'équation de transport de Boltzmann qui régit le phénomène de transport de charges dans un matériau semi-conducteur. Celle-ci a été décrite par L. Boltzmann en 1872 pour modéliser la cinétique des gaz. Sa principale

caractéristique est la présence d'un opérateur de collision non linéaire et non local, qui est responsable des grandes difficultés mathématiques dans le traitement analytique et numérique de cette équation.

L'équation de transport de Boltzmann qui établit l'évolution temporelle de la fonction de distribution, s'exprime d'une façon générale sous la forme :

$$\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t) / \partial t + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f(\vec{r}, \vec{k}, t) + \frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_k f(\vec{r}, \vec{k}, t) = \left( \frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} \right)_{coll} \quad (\text{II.1})$$

Où :

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

$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_k \varepsilon(\vec{k})$  : où  $\varepsilon(\vec{k})$  est la relation de dispersion de l'énergie et  $\hbar$  la constante de Planck réduite.

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

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

- **Intégrale de collision** : définie par :

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

Où

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

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

$[1 - f(\vec{r}, \vec{k}, t)]$  : est la probabilité de non occupation d'un état  $\vec{k}'$ . Ainsi pour un moment donné  $\vec{k}$ , la variation de  $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$  dûe aux interactions est la somme des probabilités sur chacun des types d'interaction  $i$  et sur chacun des moments  $\vec{k}'$ , qu'un porteur dans un état  $\vec{k}'$  subisse une interaction de type  $i$  vers l'état  $\vec{k}$  moins la somme des probabilités qu'un porteur dans l'état  $\vec{k}$  subisse une interaction  $i$  vers un état  $\vec{k}'$  [3].

- **Génération de vol libre**

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

Le taux de diffusion,  $\lambda[k(t)]$ , représente la somme des contributions de chaque mécanisme de diffusion individuelle, qui sont généralement calculés en utilisant la théorie des perturbations, comme décrit plus loin. La dépendance implicite  $\lambda[k(t)]$  dans le temps reflète le changement dû à l'accélération de champs internes et externes [4]. Pour les électrons soumis à des champs électriques et magnétiques indépendant du temps, l'évolution temporelle de  $k$  entre les collisions est

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

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

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

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

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

- **Domaine de validité**

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

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

### **II.3.1. Modèles de résolution de l'équation de Boltzmann**

Trouver la solution de l'équation (1) appliquée à l'étude du transport de charges dans les composants électroniques a été depuis toujours un domaine important dans les recherches portant sur la physique des semi-conducteurs. Comme nous pouvons le constater l'équation de transport de Boltzmann a une forme intégral-différentielle, qui sous sa forme complète tridimensionnelle, exige sept variables indépendantes que sont le temps, l'espace et le moment. Compte tenu de la complexité de l'équation, sa résolution analytique n'est possible que dans certains cas particuliers, et les hypothèses faites pour rendre le problème soluble restreignent considérablement le domaine de validité des solutions trouvées. Une étude plus complète nécessitant moins d'hypothèses restrictives peut être entreprise quand on dispose de moyens de calculs suffisants pour résoudre numériquement

l'équation de Boltzmann d'une manière directe. Les méthodes numériques directes sont essentiellement de deux types : les techniques itératives et les techniques stochastiques. Les méthodes stochastiques sont représentées par des modèles particuliers du type Monte-Carlo. Une autre catégorie de méthodes pour résoudre numériquement cette équation de transport sont les méthodes de moments, qui permettent de déduire à l'aide de quelques hypothèses simplificatrices des équations à dérivées partielles (comme le modèle hydrodynamique et ses deux variantes: modèle d'énergie-balance, et modèle de dérive-diffusion), qui sont couplées avec l'équation de Poisson pour auto-consistance dans les composants.

Dans ce qui suit, nous allons décrire brièvement le principe de base des deux approches de résolution pour la modélisation des phénomènes de transport électrique dans les dispositifs semi-conducteurs.

### ***II.3.1.1. Modèle hydrodynamique***

Ce modèle permet de résoudre une forme simplifiée de l'équation de Boltzmann, en supposant que la fonction de distribution ne dépend que de l'énergie moyenne des porteurs. Les collisions sont prises en compte par l'approximation des temps de relaxation. Les équations mises en jeu dans ce modèle sont les suivantes:

- équation de Poisson,
- équation de conservation du courant,
- équation de conservation du moment,
- équation de conservation de l'énergie.

Une des variantes du modèle hydrodynamique est le modèle de dérive-diffusion. Il se compose de l'équation de Poisson qui traduit les caractéristiques électromagnétiques du dispositif, et de l'équation de conservation de charge qui suppose que le courant est la somme d'un terme de dérive et un terme de diffusion. Le terme de dérive du courant est établi par la loi d'Ohm assurant la proportionnalité de la vitesse des porteurs de charge au champ électrique, alors que le terme de diffusion du courant est proportionnel au gradient de la concentration de porteurs.

### ***II.3.1.2. Modèle Monte-Carlo***

Pour résoudre directement l'équation de Boltzmann, il faut résoudre en fonction du temps et pour chaque particule une équation différentielle à six dimensions (trois

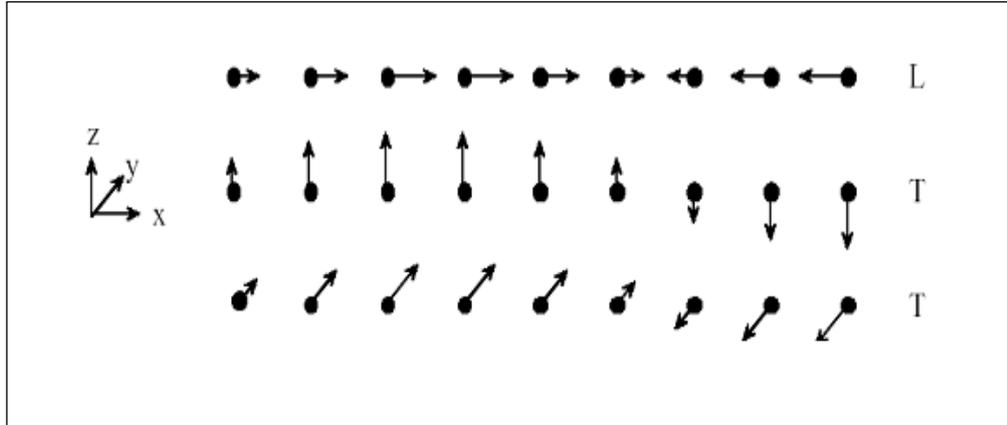
dimensions dans l'espace réel pour la position, et trois dimensions dans l'espace réciproque pour le vecteur d'onde). L'approche adoptée par le modèle Monte-Carlo est de suivre l'évolution des positions des porteurs en tenant compte du caractère stochastique du mouvement que les divers types d'interactions peuvent faire subir aux porteurs. Ce mouvement aléatoire est étudié simultanément dans l'espace réciproque des vecteurs d'onde  $K$  et dans l'espace réel. Les collisions sont aléatoires, et elles sont tirées au sort suivant des lois de probabilités spécifiques à chaque type d'interaction à l'aide de nombres pseudo aléatoires. D'un point de vue historique, la méthode de Monte-Carlo a été appliquée pour la simulation des phénomènes de transport dans les semi-conducteurs depuis les années soixante. Par construction, elle offre accès non seulement aux moments d'ordre un des variables de simulation (les valeurs moyennes), mais aussi aux moments d'ordre supérieur, notamment aux fluctuations dans un système physique.

### **II.4. Les différents types de collisions**

Les principaux mécanismes d'interaction peuvent être classés en quatre catégories :

#### **II.4.1. avec le réseau cristallin**

Les atomes d'un cristal s'organisent pour former des structures cristallines bien définies. Si on se place à 0 K, les atomes sont fixes dans leurs positions d'équilibre. Si on augmente la température, les atomes vont vibrer autour de leurs positions d'équilibre avec une pulsation  $\omega$ . Plus la température est élevée, plus les vibrations du réseau cristallin sont importantes et les chocs avec les phonons sont fréquents. L'énergie d'une vibration est quantifiée  $h\omega$  et le quantum d'énergie est appelé phonon (par analogie avec les photons). On rappelle qu'un phonon n'est pas une vraie particule, en effet il n'a pas d'existence propre. Il existe que parce que le réseau existe et que les atomes vibrent. Toutefois, il se comporte à l'intérieur du cristal comme une vraie particule et on le traite comme tel. Dans un cristal à 3D l'espace réciproque devient également 3D et aux modes longitudinaux (acoustiques et optiques) que l'on a en 1D s'ajoutent dans chaque cas 2 modes transverses polarisés à 90° l'un de l'autre, comme illustré sur la figure (II.1):



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

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

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

#### **II.4.2. avec les autres porteurs :**

Lorsque la densité de porteurs est élevée, leurs potentiels coulombiens sont sources d'interactions. Ce phénomène est complexe car il dépend de la fonction de distribution des porteurs. Ce processus est pris en considération, car l'ionisation par choc relève de cette catégorie, elle est prise en compte dans l'étude des dispositifs.

#### **II.4.3. avec les impuretés ionisées:**

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

#### **II.4.4. avec les alliages :**

La présence d'alliage dans le cristal cause un désordre important dans le réseau qui perd facilement sa périodicité pour créer un changement de potentiel à l'échelle atomique. Cette différence de potentiel influe sur le mouvement du porteur et

l'oblige à changer sa direction pendant son parcours [5] Le potentiel effectif qui contribue à cette diffusion dépend de la nature d'alliage qu'il soit ternaire ou quaternaire car à l'échelle microscopique dans ces matériaux la stœchiométrie du réseau n'est pas respectée donc le potentiel cristallin est perturbé, perturbation prise en compte par le potentiel d'alliage. Le modèle le plus utilisé est celui de JASON HARRISAND [6] qui stipule que quand un électron passe devant un atome de type B sur une place qui doit être normalement occupée par un atome de type A, il subit un potentiel  $E_{all}$  dont l'extension spatiale est  $r_0$  telle que :

$$E_{all} = \begin{cases} qU_{all} & \text{si } r \leq r_0 \\ 0 & \text{si } r > r_0 \end{cases} \quad (\text{II.6})$$

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

## II.5. Libre parcours moyen élastique et inélastique :

Le libre parcours moyen est défini comme étant la distance parcourue entre deux interactions successives. Durant cette distance les électrons circulent librement dans le semi-conducteur. Il peut être élastique, comme il peut être inélastique suivant le type d'interactions subies par les électrons. On définit pour ces types d'interactions deux temps caractéristiques  $\tau_e$  et  $\tau_i$  ainsi que leurs probabilités de collisions par unité de temps :

$\tau_e$  : Temps de collision élastique

$\tau_i$  : Temps de collision inélastique

On définit alors deux longueurs caractéristiques du transport :

- le libre parcours moyen élastique :  $l_e = v_f \tau_e$ . Pour les interactions élastiques, les propriétés ondulatoires de l'électron restent inchangées le long de cette distance  $l_e$  [7].

- le libre parcours moyen inélastique :  $l_i = v_f \tau_i$ . Pour les interactions inélastiques, il y a un changement d'énergie.

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

## II.6. Mécanismes d'interaction :

Lorsqu'un électron se déplace dans un cristal, il peut entrer en interaction avec les charges électriques présentes, atomes d'impureté ou autres porteurs ou par l'intermédiaire du champ électrique qu'il crée, échanger des quanta d'énergie ou phonons avec le réseau cristallin [8].

Au cours de ces interactions, son vecteur d'onde passe de  $\vec{K}$  à  $\vec{K}'$  et la probabilité d'interaction par unité de temps  $\lambda$  s'obtient en intégrant la densité de probabilité de transition  $S(\vec{K}, \vec{K}')$  entre les états  $\vec{K}$  et  $\vec{K}'$  sur toutes les valeurs de  $\vec{K}'$  [9]:

$$\lambda(\vec{k}) = \int_{k'} s(\vec{k}, \vec{k}') \times \partial^3 k' \quad (\text{II.7})$$

L'expression de  $S(\vec{k}, \vec{k}')$  ne fait, en général, intervenir que le module des vecteurs  $\vec{K}$  à  $\vec{K}'$  et l'angle  $\beta$  qui les sépare. Dans les semi-conducteurs III-V comme GaN, les vallées  $\Gamma$  sont isotropes et le module de  $\vec{K}$  est relié de façon biunivoque à l'énergie  $\varepsilon$  (mesurée par rapport au bas de la vallée dans laquelle se trouve l'électron) [9]:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon) \quad (\text{II.8})$$

On peut donc exprimer les densités de probabilité  $S$  en fonction des énergies  $\varepsilon$  et  $\varepsilon'$  de l'angle  $\beta$ .

### II.6.1. Interactions élastiques

Ces interactions n'influent pas de façon essentielle sur le comportement de l'électron. Elles sont néanmoins introduites pour obtenir une description aussi quantitative que possible, de la dynamique électronique [10].

#### II.6.1.1. interaction acoustique :

Les interactions acoustiques sont élastiques. Elles se manifestent donc à énergie constante. Lorsqu'un porteur subit une interaction acoustique, le module du vecteur d'onde dans cette vallée reste constant [11]. Elle est presque inexistante en vallée

centrale, possède une probabilité assez forte en vallée latérale ; de plus, la distribution de l'angle  $\beta$  de déviation est quasi-uniforme.

L'angle de déviation  $\beta$  après interaction est tiré avec une distribution uniforme entre  $[0, \pi]$ . Cette interaction est très faible en vallée  $\Gamma$  et ses effets sont souvent masqués par ceux de la multitude d'interactions inter vallées qui prédominent en vallées latérales.

La probabilité d'interaction acoustique par unité de temps est donnée par [11]:

$$\lambda_{ac}(\varepsilon) = \frac{K_B \cdot T \cdot E_{ac}^2 \cdot m^{*3/2}}{\rho \cdot S^2 \cdot \hbar^4 \cdot 3\pi \cdot \sqrt{2}} \cdot \delta^{1/2}(\varepsilon) \frac{3(1 + \alpha \cdot \varepsilon)^2 + (\alpha \cdot \varepsilon)^2}{(1 + 2 \cdot \alpha \cdot \varepsilon)} \quad (II. 9)$$

Avec :  $\delta(\varepsilon) = \varepsilon(1 + \alpha \cdot \varepsilon)$  et  $\delta(\varepsilon') = \varepsilon'(1 + \alpha \cdot \varepsilon')$

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

### II.6.1.2. Interaction piézo-électrique :

La présence du champ de polarisation par les vibrations thermiques à des longueurs d'ondes acoustiques se traduit par un effet piézoélectrique pour modifier le parcours du porteur et causer une diffusion [4].

L'interaction piézoélectrique devient importante dans les cristaux piézoélectriques à faible température mettant en jeu un phonon acoustique de faible longueur d'onde. Son effet sur le comportement de l'électron est très faible car c'est une interaction élastique qui ne provoque aucune déviation de la trajectoire de l'électron. La probabilité est inversement proportionnelle à la racine carrée de l'énergie. La probabilité d'interaction piézo-électrique par unité de temps est donnée par [12] :

$$\lambda_{pi} = \frac{e^2 \cdot K_B \cdot T \cdot P_{pi}^2 \cdot m^{*1/2}}{4\sqrt{2} \cdot \pi \cdot \hbar^2 \cdot \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_s \cdot \delta^{1/2}} \frac{I}{(1 + 2 \cdot \alpha \cdot \varepsilon)} \quad (II. 10)$$

Où  $I = (1 + 2 \cdot \alpha \cdot \varepsilon)^2 \cdot \ln \left| \frac{1}{1 - \cos \alpha} \right| - 2\alpha\varepsilon(1 + 2 \cdot \alpha \cdot \varepsilon) \cdot (1 + \cos \alpha) + \frac{(\alpha\varepsilon)^2}{2} \cdot (4 - (1 - \cos \alpha)^2)$

Avec :  $P_{pi}$  est le potentiel piézo-électrique et  $\alpha$  a un angle très faible  $< 0.01$  radians.

### II.6.1.3. Interactions avec les impuretés ionisées:

Les interactions avec les impuretés ionisées sont dues à la masse des électrons qui est plus petite que celle des impuretés ionisées par l'intermédiaire du potentiel Coulombien. Le changement de l'énergie de l'électron dans ces collisions est négligeable [13].

Les interactions avec les impuretés sont élastiques, et ont pour seule conséquence de dévier la trajectoire de l'électron, ceci d'autant moins que son énergie est élevée; elles auront généralement peu d'influence sur le transport, sauf pour des matériaux très dopés. C'est un modèle classique des interactions élastiques et la probabilité est indépendante de la concentration en impureté. Plusieurs théories ont été développées pour rendre compte de ce type d'interaction, mais dans notre simulation, on a adopté l'hypothèse développée par Brooks et Herring [14]. Pour ce type d'interaction, la probabilité d'interaction vaut [15]:

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2} \cdot \pi \cdot N_D \cdot e^4 \cdot \varepsilon^{-4/2}}{(4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_s)^2 \cdot m^{*1/2}} \cdot \frac{(1 + 2\alpha\varepsilon)}{(1 + \alpha\varepsilon)^{3/2}} \cdot I \quad (\text{II. 11})$$

$$\text{Avec : } I = \frac{[1 + 2 \cdot e_k^6 (\theta/2k)^2]^2}{4 \cdot (\theta/2k)^2 \cdot [1 + (\theta/2k)^2]} + e_k^2 \cdot [1 + 2 \cdot e_k^2 (\theta/2k)^2] \ln \left[ \frac{(\theta/2k)^2}{1 + (\theta/2k)^2} \right] + e_k^2$$

Où :  $e_k = \left( \frac{\alpha\varepsilon}{1 + 2\alpha\varepsilon} \right)^{1/2}$  et le paramètre d'écran  $\theta$  est lié à la concentration en impuretés  $N_D$  des électrons par :

$$\theta = \frac{N_D \cdot e^2}{\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_s \cdot K_B \cdot T} \quad (\text{II.12})$$

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

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{e^2 \cdot m^{*1/2} K_B \cdot T}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_s \hbar^2 \sqrt{2}} \cdot \frac{1 + 2\alpha\varepsilon}{\delta(\varepsilon)^{1/2}} \quad (\text{II. 13})$$

#### **II.6.1.4. Interactions avec les alliages**

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

L'hypothèse de ce type d'interaction a été étudiée par Shichijo [15], et la probabilité vaut:

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{3\pi(m^*)^{3/2}}{8\sqrt{2}\hbar^2 N_s} (\Delta E_s)^2 \cdot x(1-x) \frac{\delta\gamma(\varepsilon)}{\delta\varepsilon} \gamma(\varepsilon)^{1/2} \quad (\text{II.14})$$

Où  $\Delta E_s$  représente la différence des affinités des matériaux binaires,  $x$  est une fraction molaire et  $N_s$  est la densité des sites d'alliages donnée par  $N_s = \frac{x}{\Omega}$  où  $\Omega$  est le volume d'une cellule unitaire du réseau cristallin.

#### **II.6.2. Interactions inélastiques**

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

##### **II.6.2.1. Interaction intervallée équivalente et non équivalente**

C'est au cours de ces interactions inélastiques qu'ont lieu les transferts entre les vallées équivalentes ou non équivalentes. Comme le montre la structure de bande, ces interactions sont tout à fait inexistantes dans la vallée centrale à faible champ car l'électron n'a pas suffisamment d'énergie pour être transféré dans les vallées supérieures. Mais dès que les conditions sur l'énergie sont satisfaites, les interactions intervallées jouent de loin le rôle le plus important parmi toutes les interactions, autant par leur forte probabilité que par leurs conséquences sur le comportement de l'électron. Un transfert ne peut avoir lieu que si l'énergie après interaction est supérieure à l'énergie au fond de la vallée d'accueil. Ces énergies sont repérées par rapport au minimum de la bande de conduction [13].

La condition nécessaire pour qu'une interaction intervallée ait une chance d'intervenir est [10]:  $\varepsilon_i \pm \hbar W_{ij} + \Delta_i - \Delta_j \geq 0$

$\Delta_i$  est l'écart d'énergie entre le bas de la vallée de départ  $i$  et celui de la vallée  $\Gamma$  (000).

$\Delta_j$  est l'écart d'énergie entre le bas de la vallée d'arrivée  $j$  et celui de la vallée  $\Gamma$  (000).

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

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

Après un éventuel transfert de la vallée  $\Gamma$  (000) vers les vallées de symétrie L(111) et X(100), la vitesse moyenne des porteurs chute car d'une part, dans ces vallées les masses sont plus grandes que dans la vallée centrale et d'autre part, les directions des vitesses sont aléatoires après une telle interaction [10].

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

$$\lambda_{ij}(\varepsilon_i) = \frac{Z_{ij} \cdot m^{*3/2} \cdot E_{ij}^2}{\pi \sqrt{2} \cdot \rho \omega_{ij} \cdot \hbar^3} \cdot \left( N_{ij} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \cdot \delta(\varepsilon') \cdot \frac{(1 + \alpha_i \varepsilon_i)(1 + \alpha_i \varepsilon_j')}{(1 + 2\alpha_i \varepsilon_i)} \quad (\text{II.15})$$

Avec  $N_{ij}$  est la fonction de répartition des phonons est égale à :  $N_{ij} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_{ij}/K_B T) - 1}$

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

### II.6.2.2. Interactions optiques:

#### a) Interactions avec un phonon optique polaire:

L'énergie des phonons  $\eta\omega_i$  est comparable à celle des électrons à la température ambiante. L'équivalent en température pour la plupart des matériaux est de 200 à 600 K. On ne peut pas donc négliger la température des phonons devant celle des électrons. L'interaction optique polaire est très importante dans toutes les vallées. Elle est caractérisée par l'échange d'un phonon optique polaire et par une forte anisotropie sur les états finaux probables. L'énergie des électrons après interaction dans le cas de l'émission ou d'absorption est donnée par:

$$\varepsilon' = \varepsilon \pm \hbar\omega_0 \quad (\text{II.16})$$

La probabilité d'interaction des électrons avec les phonons optiques polaires est donnée par [11] :

$$\lambda_p(\varepsilon) = \frac{e^2 m^{*2} \omega_0}{\hbar \sqrt{2.4\pi \varepsilon_0}} \left( \frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right) \frac{1+2\alpha\varepsilon}{\sqrt{\delta(\varepsilon)}} F(\varepsilon, \varepsilon') \left( N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \quad (\text{II.17})$$

Où :

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

Avec :

$$A = \left\{ 2 \left( 1 + \alpha_i \varepsilon_i \right) \left( 1 + \alpha_i \varepsilon_i' \right) + \alpha_i \left( \gamma \left( \varepsilon_i \right) + \gamma \left( \varepsilon_i' \right) \right) \right\}^2$$

$$B = -2\alpha_i \left( \gamma^{1/2}(\varepsilon_i) + \gamma^{1/2}(\varepsilon_i') \right) \left\{ 4 \left( 1 + \alpha_i \varepsilon_i \right) \left( 1 + \alpha_i \varepsilon_i' \right) + \alpha_i \left[ \gamma(\varepsilon_i) + \gamma(\varepsilon_i') \right] \right\}$$

$$C = 4 \left( 1 + \alpha_i \varepsilon_i \right) \left( 1 + \alpha_i \varepsilon_i' \right) \left( 1 + 2\alpha_i \varepsilon_i \right) \left( 1 + 2\alpha_i \varepsilon_i' \right)$$

### b) Interactions avec un phonon optique non polaire

L'interaction des électrons avec les phonons optiques non polaires est due essentiellement aux variations du déplacement atomique qui déplace les atomes voisins dans un sens opposé. La diffusion est causée directement par ce déplacement qui est considéré comme le potentiel de déformation [9]. Ces interactions sont négligées dans la vallée centrale mais deviennent importantes dans la vallée L.

La probabilité d'interaction des électrons avec les phonons optiques non polaires est donnée par [16] :

$$\lambda_{np}(\varepsilon) = (Z_L - 1) \frac{\pi \hbar D_{no}^2}{\rho \omega_{no}} \left( N_{no} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) g_L(\varepsilon') \quad (\text{II.18})$$

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

## II.7. Interactions prépondérantes dans les semi-conducteurs [17] :

Les électrons subissent sur leurs trajectoires différents types d'interactions dont certaines ont une influence beaucoup plus importantes que les autres et avec une

grande probabilité d'interaction, mais cela suivant la nature du champ électrique et la position des électrons dans le diagramme de bande, nous allons faire un récapitulatif des interactions en précisant la position et le champ utilisé:

### II.7.1. Champ électrique faible

Quand un électron dérive dans un matériau sous l'effet d'un champ électrique, il gagne de l'énergie sous forme cinétique et la transmet progressivement au cristal par le biais des nombreux chocs qu'il effectue avec les phonons du réseau. Dans la vallée centrale et à faible champ électrique, les électrons ont une énergie très faible par rapport à l'énergie des phonons optiques polaires. Ils ont une énergie équivalente avec les phonons acoustiques. Les interactions prépondérantes sont les interactions acoustiques et les interactions optiques polaires d'absorptions. Les interactions acoustiques sont des interactions élastiques et isotropes, dans ce cas, on ne distingue pas les cas d'absorption et d'émission de phonons. Elles rendent la direction du vecteur-vitesse des électrons aléatoire. Alors que les interactions optiques polaires d'absorptions sont des interactions inélastiques.

### II.7.2. Champ électrique moyen

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

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

### II.7.3. Champ électrique fort

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

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

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

### II.7.4. Champ électrique très fort

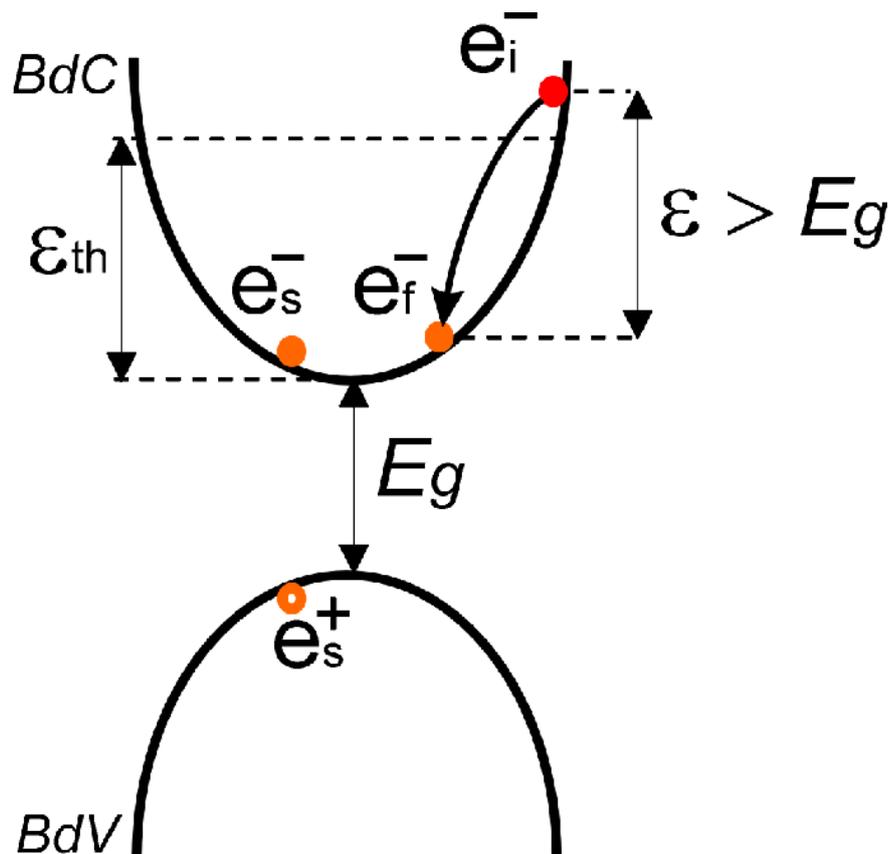
Lorsque le champ électrique devient très fort et dans les composants de petites dimensions, les électrons gagnent de l'énergie sous forme cinétique et la transmet au cristal par l'intermédiaire des chocs qu'ils effectuent avec les phonons.

Cependant, si un électron possède une énergie très grande, il transfère une partie de celle-ci à un autre électron de la bande de valence qui va lui-même être transféré dans la bande de conduction créant ainsi une paire électron-trou. Ce processus s'appelle ionisation par impact et est indésirable dans les transistors à effet de champs, car il génère des courants parasites qui s'amplifient très vite ce qui nous mène au claquage du composant.

## II.8. Le phénomène d'ionisation par impact :

L'ionisation par impact ou par choc apparaît dans un matériau pour des champs électriques intenses. En effet, un électron qui dérive dans un solide sous l'effet d'un champ électrique, gagne de l'énergie sous forme cinétique et la transmet progressivement au cristal par le biais des nombreux chocs qu'il effectue avec les phonons du réseau. Ce processus assure la dissipation thermique de l'énergie

potentielle perdue par les électrons. Cependant, si le champ électrique est suffisamment intense, certains électrons peuvent, au cours d'un vol libre, acquérir une énergie telle que leur impact sur un atome du réseau cristallin, aboutit à la rupture d'une liaison et à la création d'une paire électron-trou. Ce processus, illustré sur la figure II.2. [18], peut devenir cumulatif et conduire au phénomène d'avalanche. Cet effet étant d'autant plus important que le gap du matériau est petit (l'énergie de seuil de l'ionisation par choc est approximativement de  $3/2 E_g$ )



**Figure II.2 :** 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).

## II.9. Conclusion :

La compréhension des mécanismes de transport électronique et la connaissance de la dynamique des porteurs libres dans les matériaux semi-conducteurs, nous aide à mieux

expliquer le mécanisme de diffusion des porteurs, sous différentes conditions extérieures (champ électrique, champ magnétique) etc. ...

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

*Références*

- [1] O.Bonnaud, « physique des Solides, des Semi-conducteurs et Dispositifs », juin 2003.
- [2] A. C. Negoï: "Composant virtuel et ses processeurs de simulation", Thèse de Doctorat en Microélectronique, ENSERG-INPG, Octobre 1998.
- [3] S. Lepaul: "Contribution à la modélisation numérique des composants électroniques aux dimensions nanométriques", Thèse de Doctorat, Université Paris 6, Novembre 1996.
- [4] B. BOUAZZA, «Simulation Monte Carlo des Composants Microélectroniques à base de Matériaux III-V, II-VI ternaires. Intégration monolithique en électronique de puissance », Thèse de Doctorat, université de Tlemcen, 2007
- [5] D. A. ANDERSON, N.APSLEY, P.DAVIES, P.L.GILES, « Compensation in heavily doped n-type InP and GaAs », j.appl.phys vol.58, no.10, pp.3059-3067, October 1985.
- [6] JASON HARRISAND DRAGIGA VASILESKA, « Monte Carlo simulation of GaAs devices using high generality object-oriented code and encapsulated scattering tables », department of electrical engineering, Arizona state university, Tempe, AZ85257-5706, USA.
- [7] O.MANASREH « Semiconductor heterojunctions and nanostructure », McGraw-Hill Companies, 2005.
- [8] P. Hesto « Simulation Monte Carlo du transport non stationnaire dans dispositifs submicroniques : importance du phénomène balistique dans GaAs à 77K », these de docteur en science, université de paris sud, 1984.
- [9] : N. MASSOUM, «Simulation des phénomènes de transport dans les matériaux III-V

- ternaires par la méthode Monte Carlo : Application à GaInP», Thèse de Magister, université de Tlemcen, 2010.
- [9] C.SAYAH, « études des effets du champ électromagnétique sur les propriétés des composés III-V par la méthode de Monte Carlo et l'équation de Poisson couplées », thèse de doctorat, université de Tlemcen, 2010.
- [10] M. Fadel, « Contribution à l'étude du bruit et du transport en régime d'électrons chauds dans InP » these de doctorat, Université du Languedoc 1983.
- [11] M.ABOU KHALIL, «Modélisation du transport des porteurs de charge dans les dispositifs actifs à hétéro-structures et à puits quantiques par la méthode Monte carlo», Ph.D université de Montréal, 15 juillet 1996.
- [12] S.S.LI, « semiconductor physical electronics», Springer 2006.
- [13] A.KASZYNSKY, «Etude des phénomènes de transport dan les matériaux semi-conducteurs par la méthode Monte Carlo : Application a l'arséniure de gallium de type N», thèse de docteur ingénieur, université des sciences et techniques de Lille, juillet 1979.
- [14] E. Tea, Université Paris-Sud, 2011.
- [15] H.SHICHIJO, «Theoretical studies of high field transport in III-V semiconductors », thesis dissertation, electrical engineering department, university of Illinois at Urbana-champaign, 1980.
- [16] A.K. HAMDOUNE, B. BOUAZZA, A. GUEN-BOUAZZA, A.E. LALLAM, N.E. CHABANE-SARI, « Développement de la méthode de Monte Carlo pour le calcul des interactions et du transport électrique dans les semi conducteurs ternaires », Afrique science, 03-02-2007, 186-200.

- [17] A.A. EL OUCHDI, « Caractérisation du phénomène de transport électronique dans les matériaux composés ternaires : Application au matériau  $GaxIn_{1-x}Sb$  », Magister en Microélectronique, université de Tlemcen, 2011.
- [18] V. W. L. Chin, T. L. Tansley, and T. Osotchan, & J. Appl. Phys. 75, 7365 (1994).

---

## *Chapitre III*

# *Présentation de la simulation de Monte Carlo.*

---

## ***Chapitre III***

### ***Présentation de la simulation de Monte Carlo.***

*La modélisation et la simulation sont devenues aujourd'hui un outil de base pour le calcul des propriétés structurales et dynamiques des systèmes les plus complexes. Ils sont aussi un outil de choix pour la prédiction des propriétés de nouveaux matériaux. Bien souvent, les problèmes scientifiques conduisent à l'évaluation d'intégrales ou de sommes ainsi qu'à la résolution d'équations différentielles qui sont difficiles à résoudre analytiquement, comme dans le cas de la compréhension des phénomènes physiques qui décrivent le comportement des porteurs dans les matériaux semi-conducteurs. Celle-ci nécessite la connaissance de la fonction de distribution d'énergie qui est obtenue grâce à la résolution de l'équation de Boltzmann. A cause de sa complexité, cette équation aux dérivées partielles n'a pas de solution analytique sauf dans un nombre de cas limité. C'est pourquoi il est fait appel à d'autres procédés et en particulier aux méthodes de Monte Carlo pour traiter ce problème dans toute sa généralité.*

*Dans ce chapitre, nous décrivons en détail les étapes fondamentales de la simulation Monte Carlo (SMC). Dans une première section, nous expliquons les équations de mouvement, qui régissent le transport des porteurs de charge dans l'espace de phase et dans l'espace réel. Ensuite les étapes de calcul, où nous montrons les détails du programme de la méthode de Monte Carlo avec une description précise du logiciel utilisé pour la modélisation du transport électronique dans les matériaux semi-conducteurs III-N.*

#### **III.1. Simulation Monte Carlo**

On appelle méthodes de Monte Carlo l'ensemble de méthodes visant à calculer une valeur numérique, et utilisant des procédés aléatoires, c'est-à-dire des techniques probabilistes. Plusieurs travaux ont participé à l'amélioration et au développement de cette méthode comme ceux de Price [1] et Hockney [2], Jacoboni et du groupe Malvern [3] qui ont étudié le modèle à plusieurs bandes. Par la suite, Littlejohn et Ferry ont analysé le transport dans les alliages ternaires et quaternaires. La méthode de Monte Carlo est utilisée dans divers

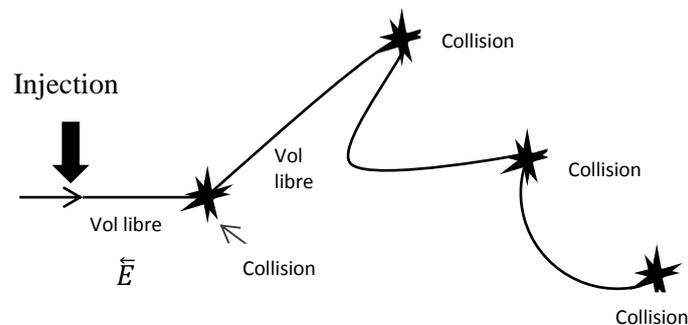
domaines. C'est une méthode statistique qui fait appel à des suites de nombres pseudo aléatoires, pour résoudre des problèmes variés. Elle est utilisée en physique nucléaire, en mathématique statistique, en sciences économiques, prévisions électorales, etc... .

La simulation par la méthode de Monte Carlo est aujourd'hui une des techniques les plus utilisées pour l'étude du fonctionnement physique des composants électroniques, et qui offre la possibilité de reproduire fidèlement les divers phénomènes microscopiques se produisant dans les matériaux semi-conducteurs [4]. Elle permet de résoudre de façon numérique des problèmes physiques qui n'ont pas de solutions analytique.

Le principe général de cette méthode est d'étudier au cours du temps, la dynamique des porteurs de charges durant leurs déplacements à l'intérieur du semi-conducteur. Sous l'effet d'un champ électrique externe, la trajectoire des électrons est constituée de deux séquences ;

- ✓ une séquence de vol libre sous l'effet du champ électrique dite libre parcours moyen,
- ✓ une autre séquence d'interactions des électrons dans le matériau qui sont des phénomènes aléatoires.

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



**Figure III.1** : l'évolution d'un ensemble de particule au cours du temps [5]

Il y a deux approches possibles pour simuler le comportement des électrons dans un semi-conducteur [6]:

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

### III.1.1. 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

$$\frac{\partial \vec{K}}{\partial t} = \frac{q\vec{E}}{\eta} \quad (\text{III.1})$$

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

$$\varepsilon(\vec{K}) = \frac{\eta^2 K^2}{2m^*} \quad (\text{III.2})$$

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

Connaissant la position d'un porteur de charge dans l'espace des vecteurs d'onde  $\vec{K}$  [6], 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:

$$\vec{v} = \frac{\partial \varepsilon_{\rho}}{\eta \partial \vec{K}} \quad (\text{III.3})$$

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 par l'observation d'un grand nombre de particules permettant de calculer les moyennes d'ensemble (cette définition est utile quand les conditions d'étude changent dans le temps), soit par observation d'un seul électron pendant une durée suffisamment grande. La trajectoire de chaque électron sera constituée par une suite de vols libres effectués sous l'influence de la force externe, puis des chocs sur les différents obstacles présentés par le milieu où évolue le porteur.

L'avantage des méthodes de Monte Carlo est de pouvoir obtenir à la fois la durée de vol libre, et les états du porteur après les chocs en utilisant un procédé basé d'une part sur le tirage de nombres aléatoires et d'autre part sur la connaissance des densités de probabilités correspondant aux interactions auxquelles est soumis le porteur. Un des principaux avantages de ces méthodes est leur souplesse d'utilisation. Une fois le processus élémentaire de simulation est mis au point, les conditions d'utilisation de celui-ci peuvent être variées à l'infini. L'application la plus simple que l'on puisse imaginer est l'étude de la dynamique électronique dans un matériau supposé infini et homogène soumis à des conditions stationnaires, en fonction du temps. La situation peut se compliquer singulièrement quand le matériau est inhomogène, ou lorsque le champ appliqué n'est plus constant dans le temps ni uniforme dans l'espace. Dans le cas où les concepts habituels de bande d'énergie et de collisions instantanées restent valides, la méthode de Monte Carlo montre sa supériorité lorsque les phénomènes se compliquent quelque peu. En effet ; elle permet de tenir compte facilement des non stationnarités spatiales ou temporelles que l'on veut étudier. Cette méthode est actuellement la seule susceptible d'étudier les manifestations des porteurs chauds quelque soient les régimes de champ appliqué. Elle tient compte de façon complète, des formes de bandes d'énergie même complexes ; et c'est le cas particulier de l'étude des alliages ternaires et de tous les détails de la dynamique microscopique avec des hypothèses simplificatrices réduites au minimum. En contrepartie, la méthode de Monte Carlo est accompagnée d'erreur statistique. Comme pour tout phénomène statistique, on peut améliorer la précision en augmentant la durée d'observation  $t$ . Malheureusement, 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 l'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 on s'intéresse à la vitesse de dérive. Une bonne estimation de la moyenne exigera une longue intégration, et par conséquent un allongement du temps de calcul.

### III.1.2. Temps de vol libre

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

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

On déduit alors, la probabilité  $p_f(t)$  pour qu'une interaction ne se produise pas au temps  $t$ , qui est donnée par :  $p_f(t) = \prod_i (1 - \lambda(k(t))\delta t_i)$

En prenant  $t = \sum_i \delta t_i$

$$\text{On a alors : } p_f(t) = \exp[-\sum_i \lambda(k(t))\delta t_i] \quad (\text{III.4})$$

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

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

$$p(\Delta t) = \int_0^{\Delta t} \lambda(k(t)) - \exp\left[-\int_0^t \lambda(k(t'))\delta t'\right] \delta t \quad (\text{III.6})$$

$$p(\Delta t) = 1 - \exp(-\int_0^{\Delta t} \lambda(k(t))\delta t) \quad (\text{III.7})$$

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

$$\int_0^{\Delta t} \lambda(k(t)) = -\ln r \quad (\text{III.8})$$

Dans le cas général, l'expression (7) est assez complexe, et l'équation (8) n'est pas intégrable analytiquement. Pour simplifier l'expression (7), Rees a suggéré d'ajouter à l'ensemble des mécanismes de collisions réelles, le processus du Self Scattering [2].

### III.1.3. Méthode du self scattering

Cette méthode consiste à introduire une interaction fictive supplémentaire dite « Self Scattering  $\lambda_{sc}$  » qui est sans effet sur le mouvement de l'électron. La probabilité  $\lambda_{sc}$  est choisie de manière à ce que la probabilité totale d'interaction  $\Gamma = \lambda_{sc} + \sum_i \lambda_i$  soit une constante (figure III.2). Ceci fournit une expression particulièrement simple pour  $p(\Delta t)$  :

$$p(\Delta t) = \Gamma e^{-\Gamma \Delta t} \quad (\text{III.9})$$

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

$$\Delta t = -\frac{1}{\Gamma} \ln r \quad (\text{III.10})$$

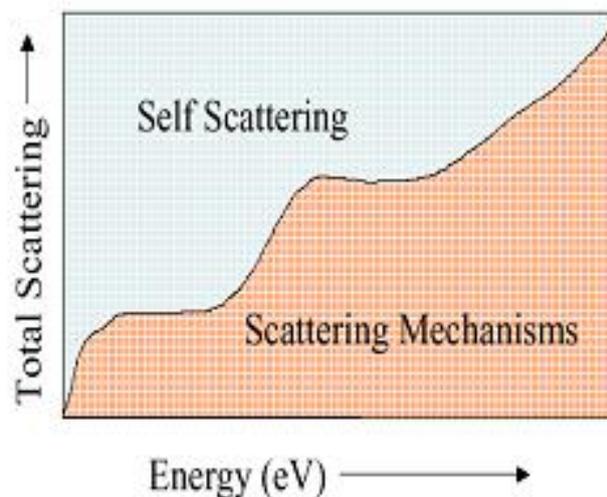
La succession des opérations est alors sans changement, mais le Self-Scattering doit maintenant figurer parmi les interactions susceptibles de se produire à la fin du vol libre. Il faut cependant que  $\Gamma$  soit au moins égale aux plus grandes sommes  $\sum_i \lambda_i$  susceptibles d'être atteintes, de telle manière à éviter des valeurs négatives de  $\lambda_{sc}$  . Pour utiliser la relation (9), il faut se fixer à l'avance la valeur de  $\Gamma$  ; il est nécessaire de connaître à priori la valeur maximum que prendra la quantité  $\sum_i \lambda_i$  dans la simulation envisagée. Une fois la durée de vol libre  $\Delta t$  déterminée, on calcule l'ensemble des probabilités des interactions susceptibles de se produire à l'instant considéré. Comme on a nécessairement par définition :

$$\sum_{i=0}^N \lambda_i(\vec{k}) = \Gamma \quad (\text{III.11})$$

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

$$r < \sum_{i=0}^m \lambda_i(\vec{k}) = \lambda_{sc} + \sum_{i=1}^m \lambda_i(\vec{k}) \quad (\text{III.12})$$

Pour toute valeur  $m$ , il y a un processus d'interaction choisi qui interviendra. Il apparaît dans ce test que la collision choisie peut être une collision fictive dont la probabilité est  $\lambda_{sc}$ . Si c'est le cas, elle laissera le vecteur d'onde inchangé et le mouvement se poursuivra directement pour le  $\Delta t$  suivant. Dans le cas contraire ; de nouveaux nombres aléatoires permettent de définir la position du vecteur d'onde, après le choc. L'avantage de cette procédure est le choix de la valeur de  $\Gamma$  de manière à minimiser le nombre de collisions fictives, puisque ces collisions ne jouent aucun rôle sur la trajectoire de l'électron. Il faut signaler que cette première méthode a été utilisée par de nombreux auteurs, pour étudier un grand nombre de matériaux [7].



*Figure III-2 : Probabilité totale d'interactions et Self Scattering [8].*

## III.2. Mouvement des électrons

### III.2.1. Les équations du mouvement

L'évolution des porteurs de charges à l'intérieur des semi-conducteurs est décrite par la structure de bande qui détermine leurs états énergétiques. Ces états sont déterminés en résolvant l'équation de Schrödinger et sont exprimés par la relation de dispersion  $\varepsilon(k)$  qui relie l'énergie  $\varepsilon$  et le vecteur d'onde du cristal  $k$  [9], cette relation est donnée par :

$$\gamma(\varepsilon) = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (\text{III.13})$$

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

Le coefficient de non parabolicité est donné par la relation :

$$\alpha = \frac{1}{E_g} \left(1 - \frac{m^*}{m_0}\right)^2 \quad (\text{III.14})$$

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

De plus, la vitesse de groupe  $v$  avec laquelle se déplace le porteur est donnée par :

$$V = \frac{dr}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\gamma(\varepsilon)}{dk} \quad (\text{III.15})$$

Elle est égale à :

$$\frac{dr}{dt} = \frac{\hbar}{m^*} k \quad (\text{III.16})$$

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

$$\frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar} eE \quad (\text{III.17})$$

Donc l'évolution de la position et du vecteur d'onde en fonction du temps qui est traitée semi-classiquement en absence du champ externe est donnée par les deux équations suivantes [10]:

$$\begin{cases} \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar} eE \\ \frac{dr}{dt} = \frac{\hbar}{m^*} k \end{cases} \quad (\text{III.18})$$

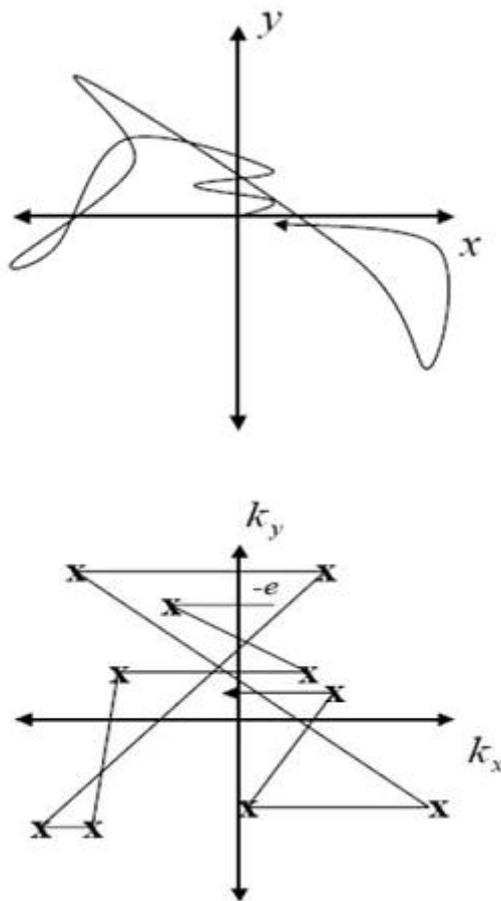
Si on applique un champ électrique externe pendant une durée  $\delta t$ , le porteur passe de son état initial  $(r_i, k_i)$  à l'instant  $t_i$ , à un autre état supposé final  $(r_f, k_f)$  à l'instant  $t_f$ .

Ceci permet de décrire que:

$$\begin{cases} k_f = k_i + \frac{\delta t}{\hbar} eE \\ r_f = r_i - \frac{\hbar}{m^*} \frac{(k_i + k_f)}{2} \delta t \end{cases} \quad (\text{III.19})$$

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

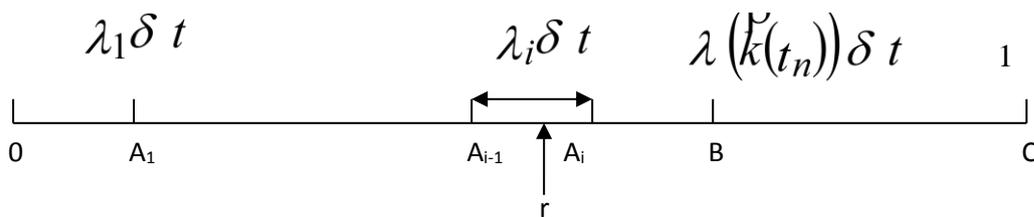
Durant le vol libre, l'électron se déplace dans l'espace réel et dans l'espace des vecteurs d'ondes en suivant la direction du champ électrique comme le montre la figure (III.3) :



**Figure III.3** : trajectoire d'un électron dans l'espace réel et dans l'espace des  $K$

### III.2.2. Procédure et choix d'interaction

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



**Figure III.4 :** Le schéma indique la procédure de choix de l'interaction. Quand  $r$  se situe entre les points  $A_{i-1}$  et  $A_i$  le  $i^{\text{ème}}$  type d'interaction a lieu [11].

Le segment BC représente la probabilité qu'il ne se passe rien après le pas  $\delta t$ . Dans le cas où une collision aurait effectivement lieu, la procédure de choix du vecteur d'onde après choc est en tout point identique à celle décrite précédemment. Le porteur continue ensuite pour le  $\delta t$  suivant.

La première constatation est que les libres parcours vécus par le porteur sont nécessairement constitués d'un nombre aléatoire de pas  $\delta t$ . Plus le  $\delta t$  est petit plus la valeur approchée de la durée de parcours sera bonne (figure III.5).

Il en résulte que  $\delta t$  doit être beaucoup plus petit que le plus court des libres parcours. Cette condition garantit également que la quantité  $\lambda[k(t_n)]\delta t$  ne peut jamais être plus grande que, De plus, le tirage de  $r$  se fait selon une distribution uniforme, le fait de tirer l' $i^{\text{ème}}$  interaction

ne dépend pas de l'ordre dans lequel on a effectué ces interactions ; le résultat de test ne dépend que de la largeur  $p_i(k) \delta t$  du segment correspondant, soit en pratique de l'énergie du porteur au moment considéré.

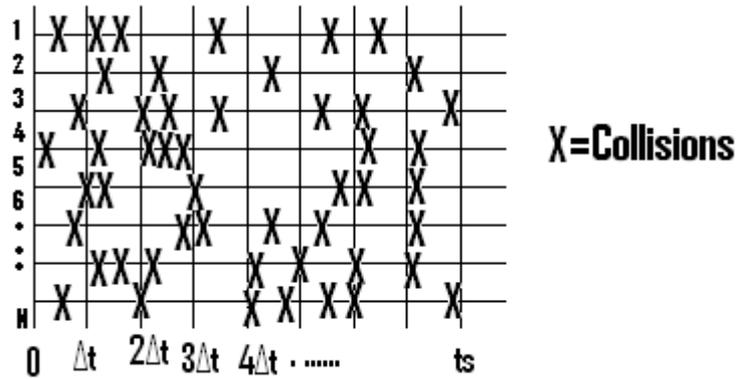


Figure III.5 : Echelle d'intervalle de temps de la simulation de Monte Carlo

### III.2.3. Choix des angles de déviation

Quand une interaction est choisie, elle est supposée instantanée ; et son effet provoque une discontinuité dans l'évolution de l'état de l'électron. Cet effet se manifeste à la fois par un éventuel échange d'énergie, et par un brusque changement d'orientation de la vitesse de l'électron. Il se traduit dans l'espace des moments, par une variation instantanée du vecteur d'onde, en module et en direction. Tout échange éventuel d'énergie au cours de l'interaction, se traduit donc au niveau du vecteur d'onde par une variation brutale de son module qui ne dépend que des énergies initiale  $\mathcal{E}$  et finale  $\mathcal{E}'$ .

C'est un changement d'orientation du vecteur d'onde (figure 5.4) qui décrit la déviation subie par l'électron. Le vecteur d'onde  $\vec{k}'$  est repéré par rapport au vecteur d'onde initial  $\vec{k}$ , par un angle de déviation  $\beta$ . L'angle de déviation du vecteur d'onde est déterminé par tirage au sort, suivant une loi de probabilité caractéristique de l'interaction [12]. Pour cela, on tire deux nombres aléatoires  $r_1$  et  $r_2$  suivant des distributions dépendant du type de l'interaction qui vient d'être choisie, en se plaçant dans un repère lié au vecteur d'onde  $k$ , avant la collision (figure 5.5). Ces deux nombres sont tels que :

$$\varphi = 2\pi \cdot r_1$$

Et

$$\cos \beta = 1 - 2r_2$$

Il arrive pour certaines interactions, que la détermination de l'angle  $\beta$  en fonction du réel  $r$ , ne soit pas immédiate

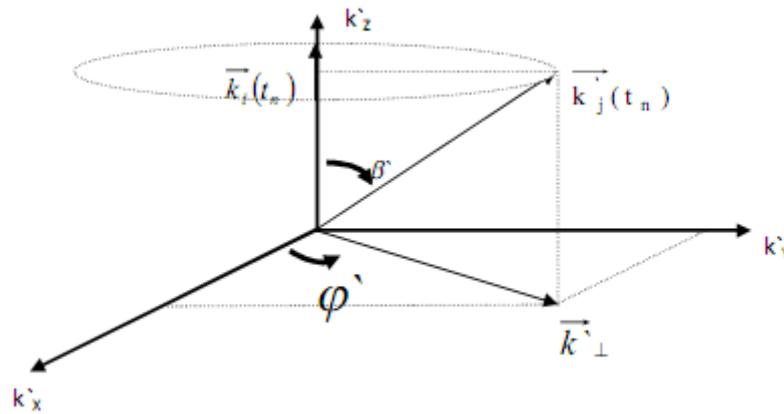


Figure III.6 : Angles de déviation [6]

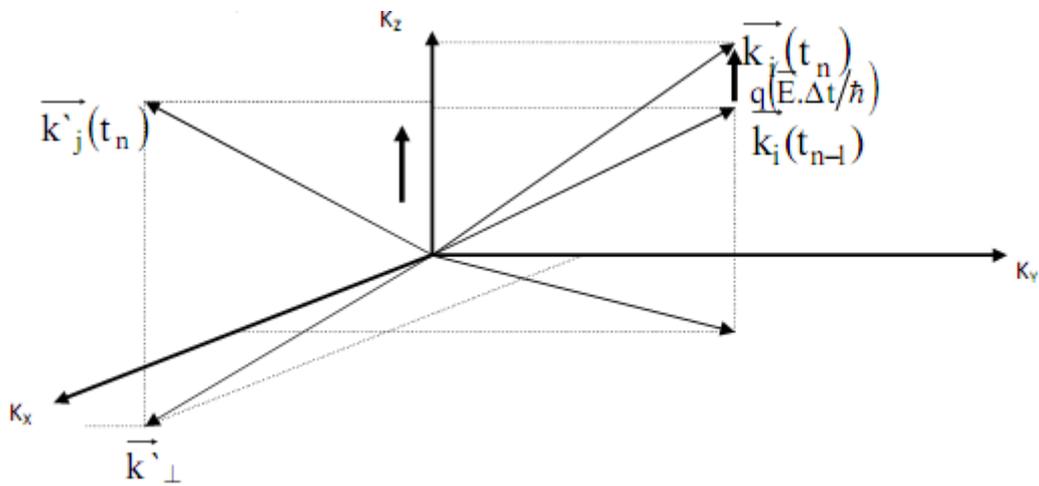


Figure III.7 : Orientation du vecteur d'onde [6].

### III.3. Etapes de calcul

Le détail de la mise en œuvre du programme de la méthode de Monte Carlo utilisé pour la modélisation du transport électronique dans les matériaux semi-conducteurs est

représenté par l'organigramme de la figure III.8. Le programme commence par introduire les données des paramètres du matériau utilisé, de calculer les taux d'interactions et de les stocker en mémoire. Le cœur de l'organigramme est constitué de deux boucles, la première itération sur le temps de l'échantillonnage  $\Delta t$  dans laquelle est imbriquée une deuxième boucle sur la population d'électrons. Pendant chaque intervalle de temps, les électrons sont animés grâce à la procédure Monte Carlo mono particulaire (accélération et collision) une ou plusieurs fois. Deux échelles du temps dépendants sont générés le premier est celui de l'échantillonnage de pas  $\Delta t$  réguliers (au bout des quels les valeurs moyennes sont actualisées), le deuxième est propre à chaque électron et qui représente l'addition successive des temps de vol libres propres. Donc chaque électron subit plusieurs interactions sous l'effet de champ électrique et pour déterminer la nature d'une interaction, une procédure de tirage au sort d'un nombre aléatoire entre 0 et 1 est utilisée. L'électron étant dévié de sa trajectoire, l'angle de déviation est alors déterminé, puis le vecteur d'onde est modifié et enfin l'énergie réactualisée en prenant en compte d'un éventuel échange de phonon. Une fois les boucles exécutées sur les particules et sur le temps, le programme calcule les moyennes des grandeurs physiques, et il les sauvegarde sur le disque dur.

On peut y avoir que 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  $\varepsilon$  qui est fonction de la position du vecteur d'onde [20] :

$$\varepsilon_p(t) = \varepsilon(\vec{k}_p(t)) \quad (\text{III.20})$$

On effectue un vol libre de durée  $\Delta t$ , et l'on a :

$$\begin{cases} \vec{k}_p(t + \Delta t) = \vec{k}_p(t) + \frac{e\vec{E}}{\hbar} \Delta t \\ \vec{r}_p(t + \Delta t) = \vec{r}_p(t) + \int_t^{t+\Delta t} \vec{v}_p(t') \delta t \\ \varepsilon_p(t + \Delta t) = \varepsilon(\vec{k}_p(t + \Delta t)) \end{cases} \quad (\text{III.21})$$

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  $\Delta t$  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  $k'_p$  après le choc, par tirage au sort. Son état est maintenant défini par :

$$\begin{cases} \vec{k}'_p(t + \Delta t) \\ \vec{r}'_p(t + \Delta t) = \vec{r}_p(t + \Delta t) \\ \varepsilon'_p(t + \Delta t) = \varepsilon(\vec{k}'_p(t + \Delta t)) \end{cases} \quad (\text{III.22})$$

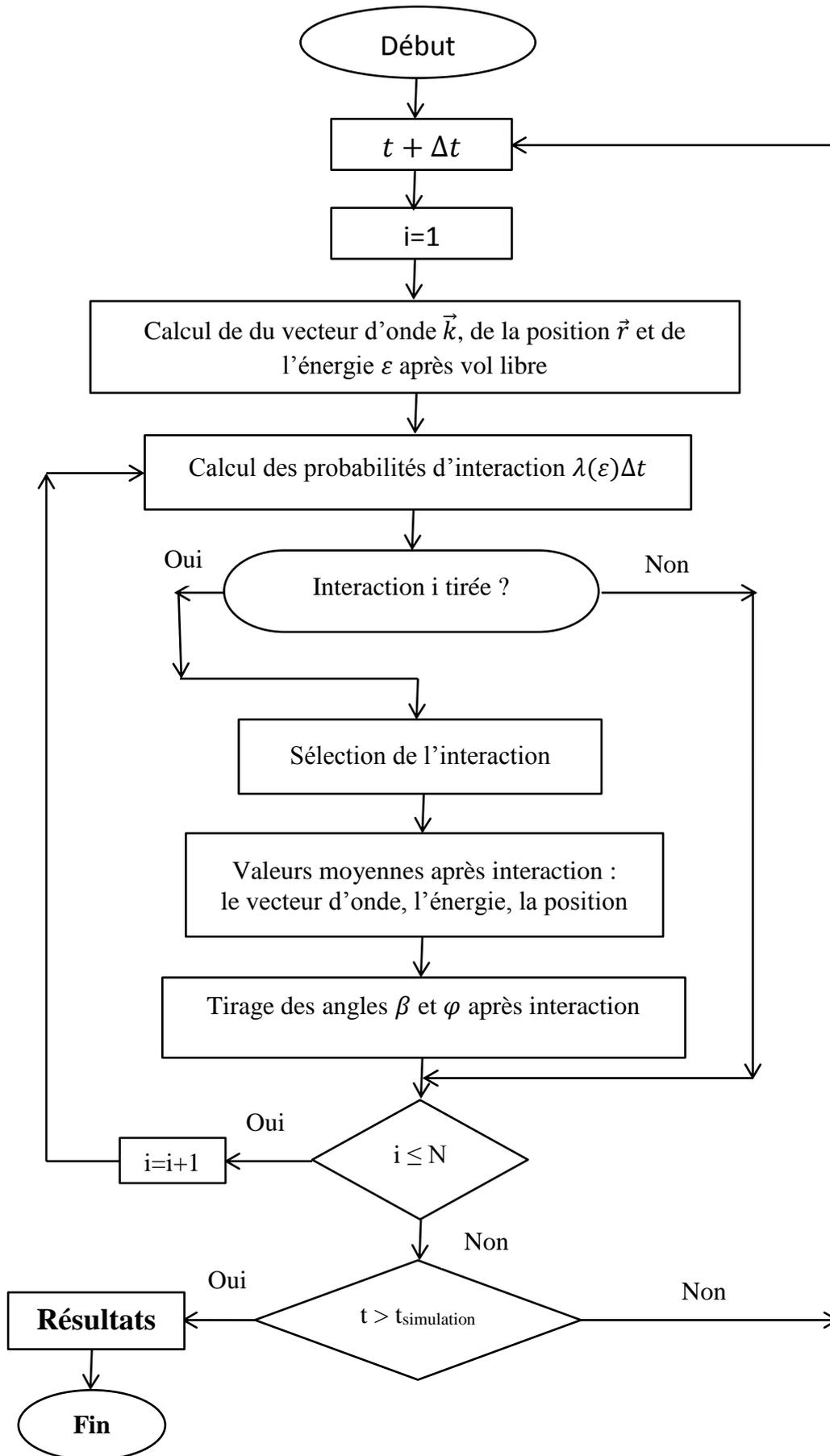


Figure III-8 : Organigramme de la méthode de Monte Carlo[6]

### III.4. Description du logiciel

La méthode de Monte Carlo que nous avons présentée dans ce chapitre, nous a permis d'établir un logiciel écrit en langage FORTRAN, le programme compte plusieurs sous-programmes. Chaque sous-programme correspond à un type d'interaction dont on calcule son taux en fonction de l'énergie. Le programme utilisé simule la trajectoire de Vingt mille quasi-particules. Les particules se déplacent dans le matériau sous l'influence des forces externes et d'événements aléatoires de diffusion.

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 ( $\Gamma$ , L, X), isotropes mais non paraboliques. Les interactions prises en compte sont : les interactions optiques polaires et non polaires, acoustiques, intervallées équivalentes et non équivalentes, piézoélectriques, intravallée due aux impuretés ionisées, ionisation par impact, coulombienne, d'alliage, électron-électron. La deuxième fonction est destinée à déterminer les grandeurs instantanées définies sur un ensemble d'électrons (l'énergie, la vitesse, la position) par la procédure Self Scattering pour laquelle les durées de vol libre sont distribuées pour chaque électron.

Les résultats obtenus sont fortement dépendants de nombreux paramètres qui caractérisent le matériau et qui, malheureusement, sont parfois très mal connus. Le développement au niveau software, a permis de rendre notre programme plus convivial et plus simple. La procédure générale d'exécution de ce logiciel est composée de trois étapes essentielles qui peuvent être résumées comme suit:

1. Lecture du fichier de données (un fichier.txt) 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.
2. Exécution du logiciel.
3. Obtention des résultats sous forme des fichiers de sorties : les différentes valeurs des probabilités d'interaction, les vitesses dans les différentes vallées, les énergies...

### III.5. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons introduit les principes de la simulation par la méthode de Monte Carlo et les différentes étapes de simulation employées dans la modélisation du

transport des particules dans les semi-conducteurs. L'avantage de cette méthode est de pouvoir obtenir à la fois la durée de vol libre et les états du porteur après les collisions en utilisant un procédé basé d'une part sur le tirage de nombres aléatoires et d'autre part sur la connaissance des densités de probabilité correspondant aux interactions auxquelles est soumis le porteur.

### Références

- [1] P.S.PRICE, Semi-conductors and Semi-metals, Vol 31, PP 1963, (1970)
- [2] R.W.HOCKNEY and EASTWOOD, Computer simulation using particles, Adam Higler, Bristol and New York, 1989
- [3] C. JACOBONI, and L. REGGIANI, « The Monte Carlo methode for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials », Reviews of modern physics, 55(3), pp.645-705 (Jul.1983)
- [4] A.Negol, A.Guyot, J.Zimmermann, « A dedicated circuit for charged particles simulation using the monte Carlo » procededing of IEEE International Conference on Application-Specific Systems, Architectures and Processors (AASAP 97), IEEE 1997.
- [5] C.SAYAH, « études des effets du champ électromagnétique sur les propriétés des composés III-V par la méthode de Monte Carlo et l'équation de Poisson couplées », thèse de doctorat, université de Tlemcen, 2010.
- [6] B. BOUAZZA, «Simulation Monte Carlo des Composants Microélectroniques à base de Matériaux III-V, II-VI ternaires. Intégration monolithique en électronique de puissance », Thèse de Doctorat, université de Tlemcen, 2007
- [7] 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.
- [8] Josan harris Dragica Vasileska, « Monte Carlo simulation of GaAs devices using high generality object-oriented code and encapsulated scattering tables » department of electrical enginnering , Arizona state university. Tempe, AZ85287-5706 USA
- [9] : R.W.HOCKNEY and EASTWOOD, « Computer simulation using particles », Adam Higler, Bristol and New York, 1989.

- [10] : A.FARIBAULT, « Simulation Monte Carlo du transport et de la relaxation des porteurs dans les structures à boîtes quantiques auto-assemblées », Mémoire de maitre des sciences, Université de Sherbrooke, Québec, Canada, mai 2002.
- [11] Fatima Zohra OTMANI « Etude du transport électronique par la méthode de Monte Carlo. Application : Silicium, Germanium et le composé  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ . » Chapitre 3 : Procédure de choix d'interaction. (2003). Thèse de Magister (2003).
- [12] A. W. Smith and K. F. Brennan, “Hydrodynamic simulation of semiconductor devices,” Progress in Quantum Electronics, vol. 21, no. 4, pp. 293–360, 1997.

---

## *Chapitre IV*

### *Discussions sur les résultats de la simulation*

---

## ***Chapitre IV***

### ***Discussions sur les résultats de la simulation***

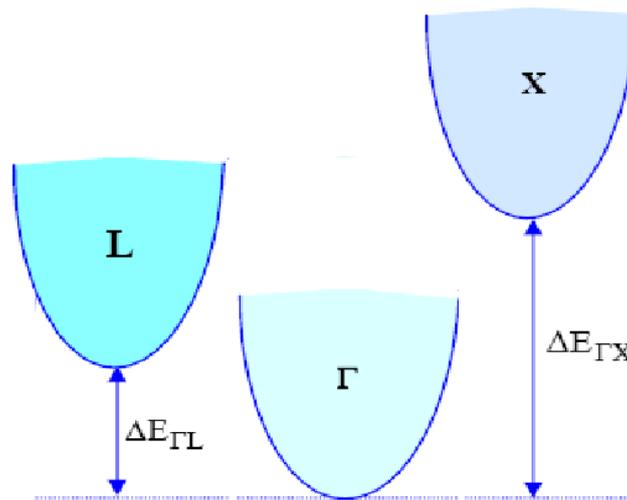
*Dans les sections précédentes, nous avons fait une étude générale sur les semi-conducteurs III-V, ainsi qu'une étude sur les différents types d'interactions que subissent les électrons durant leurs mouvements et leurs influences sur leur comportement et sur le transport à l'intérieur du semi-conducteur. Nous avons aussi présenté le principe général de la méthode Monte Carlo ainsi que les différentes étapes de simulation utilisées dans la modélisation du transport de particule dans les semi-conducteurs.*

*L'analyse des résultats de la simulation de Monte Carlo obtenus sur les matériaux III-V à large bande interdite, spécifiquement le nitrure de bore (BN), le nitrure de gallium (GaN), le nitrure d'aluminium (AlN) et leurs alliages ternaires BGaN et BAlN est développée dans cette partie. Dont nous allons examiner les deux régimes, permanent et transitoire :*

*Dans le régime stationnaire, nous calculons les différentes interactions, l'énergie en fonction du champ électrique appliqué ainsi que la vitesse en fonction du champ électrique pour plusieurs températures et pour plusieurs concentrations d'électrons. Et dans le régime transitoire, nous étudions l'évolution de l'énergie et la vitesse en fonction du temps pour plusieurs valeurs du champs électriques.*

#### **IV.1. Modèle de simulation**

Pour faciliter les calculs et de diminuer les temps des simulations, certaines approximations ont été introduites dans le programme ; par exemple pour la structure de bande, le modèle utilisé est celui de Littlejohn [1] qui considère le modèle à trois vallées ( $\Gamma$ , L, X) isotropes et non paraboliques. Les vallées à symétrie L présentent des minimas relatifs inférieurs à ceux des vallées X, ont été mises en évidence expérimentalement dans les directions (1 1 1) (Figure IV.1).



*Figure IV.1 : Modèle à trois vallées [1]*

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

## IV.2. Simulation numérique :

Dans cette simulation numérique nous nous sommes rapprochés le plus possible du cas réel, on voulait voir l'effet du nombre de particules sur les résultats de la simulation, alors toute l'étude faite pour vingt mille particules a été refaite pour cinquante mille particules, on a comparé tous les résultats et on n'a pas trouvé d'intérêt d'augmenter le nombre d'électron du moment qu'ils étaient presque identiques, bien au contraire, on a trouvé un inconvénient vu que le temps de calcul s'est multiplié par trois à peu près. Donc un paquet de vingt mille électrons nous semble assez bon pour représenter le cas réel.

La simulation qui vient d'être décrite nécessite une bonne connaissance des caractéristiques du matériau étudié, en l'occurrence le  $B_xGa_{(1-x)}N$  et le  $B_xAl_{(1-x)}N$ . En particulier, les caractéristiques de la bande de conduction jouent un rôle prépondérant dans l'étude des phénomènes de transport. Les niveaux des minima de vallées indiquent l'énergie à partir de laquelle un électron peut transférer, modifiant ainsi éventuellement ses conditions de transport.

Nous avons travaillé sous différentes conditions de champs et de température de réseau. Premièrement nous avons fixé la température et tourné la simulation pour différentes valeurs de champ électrique en mode stationnaire et transitoire et ceci pour rendre compte de l'effet du champ électrique sur les grandeurs relatifs au transport électronique à savoir ; la vitesse, l'énergie et la diffusion des porteurs. Les valeurs du champ électrique sont comprises entre 100 et 700 kV/cm. En deuxième lieu, nous nous sommes intéressés aux effets de la température sur ces grandeurs. Alors, nous avons varié les températures durant l'application d'un champ électrique statique. Nous avons varié les températures de 77K à 1000 K car d'après A.Y. Polyakov et all [2-4], les températures de croissance pour B<sub>x</sub>Ga<sub>(1-x)</sub>N et B<sub>x</sub>Al<sub>(1-x)</sub>N sont 1300 K et 1000 K, respectivement. Par ailleurs, il est intéressant avant de décrire les résultats obtenus et les interpréter, d'établir en fonction du champ électrique et de la vallée occupée, une hiérarchie entre les différentes interactions subies par le porteur. C'est pourquoi seront passés en revue les différents types de perturbations que l'électron peut subir de la part du réseau cristallin dans les deux matériaux ternaires B<sub>x</sub>Ga<sub>(1-x)</sub>N et le B<sub>x</sub>Al<sub>(1-x)</sub>N.

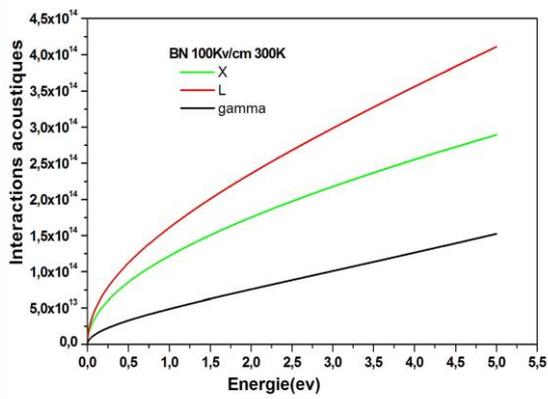
### **IV.3 Evolution des probabilités d'interactions**

Nous allons présenter dans l'ordre les résultats obtenus pour les trois matériaux le nitrure de bore (BN), le nitrure de gallium (GaN), le nitrure d'aluminium (AlN) et leurs alliages ternaires B<sub>x</sub>Ga<sub>(1-x)</sub>N et le B<sub>x</sub>Al<sub>(1-x)</sub>N, les probabilités des interactions élastiques et inélastiques pour plusieurs températures et pour plusieurs valeurs du champ électrique.

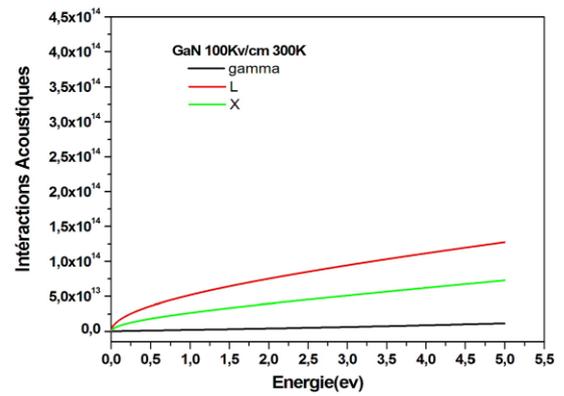
#### **IV.3.1 Les interactions élastiques**

##### *IV.3.1.1. les interactions acoustiques*

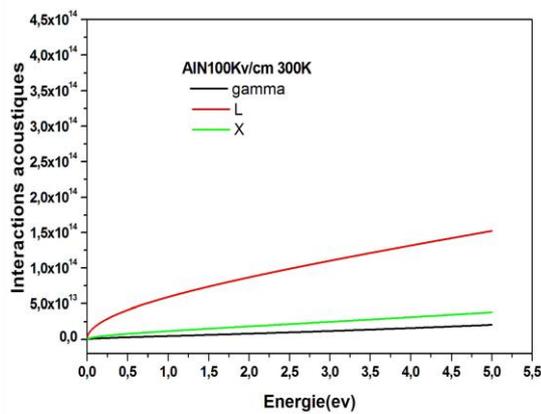
Le transfert d'énergie maximum pour une interaction électronique avec émission de phonons acoustiques est, en général, beaucoup plus petite que l'énergie des électrons, et donc la diffusion acoustique est très souvent considérée comme un processus élastique, comme dans notre cas. L'évolution de ces types d'interactions dans les trois vallées ( $\Gamma$ , L, X) en fonction de l'énergie pour les trois matériaux nitrure (BN, GaN et AlN) et leurs alliages ternaires B<sub>0.5</sub>Ga<sub>0.5</sub>N et B<sub>0.5</sub>Al<sub>0.5</sub>N sont illustrés respectivement de (a) à (e) dans la figure IV-2. Ces résultats ont été relevés pour : un champ électrique allant de 100KV/cm, une température de réseau de 300°K et une concentration d'électron de 10<sup>17</sup>cm<sup>-3</sup>.



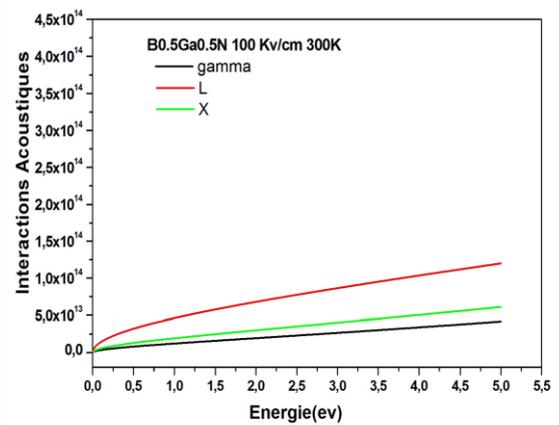
(a)



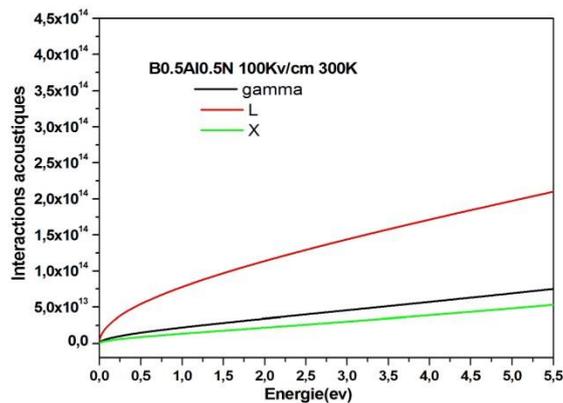
(b)



(c)



(d)



(e)

**Figure IV-2** : Probabilité d'interactions acoustique en fonction de l'énergie pour les trois vallées ( $\Gamma$ , L, X).

a) BN, b) GaN, c) AlN, d)  $B_{0.5}Ga_{0.5}N$  et e)  $B_{0.5}Al_{0.5}N$ .

Ces interactions sont provoquées essentiellement par les effets du dopage en électrons. Elles sont les plus dominantes parmi les interactions élastiques, et se produisent lorsque les ions traversent le cristal, vibrent dans la même direction que les atomes voisins. Elle est presque inexistante en vallée centrale, et très importantes dans les vallées latérales. Leurs effets sont souvent masqués par les interactions inter-vallées qui prédominent en vallées latérales. Ce qui est remarqué sur la figure IV-2, dans la vallée  $\Gamma$ , ce type d'interaction est très faible, par contre dans la vallée X la probabilité augmente peu, et elle augmente considérablement avec l'énergie dans la vallée L.

- **Effet de la teneur en bore, de la température et du champ électrique sur les interactions acoustiques :**

L'évolution de ce type d'interaction en fonction de l'énergie dans les deux matériaux ternaires  $B_xGa_{(1-x)}N$  et le  $B_xAl_{(1-x)}N$ , pour différentes compositions du bore à  $T= 300K$ , et à un champ électrique constant  $E= 100KV/cm$  est représenté sur la figure IV-3. Ces interactions qui sont proportionnelles au carré de l'énergie augmentent avec la composition du bore, puisque les énergies du gap et des autres vallées augmentent aussi. Par ailleurs, l'écart entre les probabilités des interactions dans les vallées latérales L et X augmente avec l'augmentation de la composition du bore, parce que l'énergie  $E_{LX}$  augmente en ajoutant le bore, par contre l'énergie  $E_{\Gamma X}$  se diminue ce qui explique une diminution de l'écart entre les probabilités des interactions dans ces vallées.

La probabilité de ces interactions change avec la température et le champ électrique. Nous présentons respectivement sur les figures IV-4 et IV-5 les interactions acoustiques en fonction de la composition du bore pour différentes valeurs de températures et du champ électrique pour le  $B_xGa_{(1-x)}N$  et le  $B_xAl_{(1-x)}N$ , où on remarque qu'il y a une importante augmentation de la probabilité de ces interactions en augmentant la température et le champ électrique. Pour des températures ou des champs électriques très élevés ; l'interaction acoustique devient prédominante, l'énergie de l'électron est plus importante que celle d'un phonon optique. L'électron a ainsi tendance à transmettre au réseau une partie de l'énergie que lui a fournie le champ électrique.

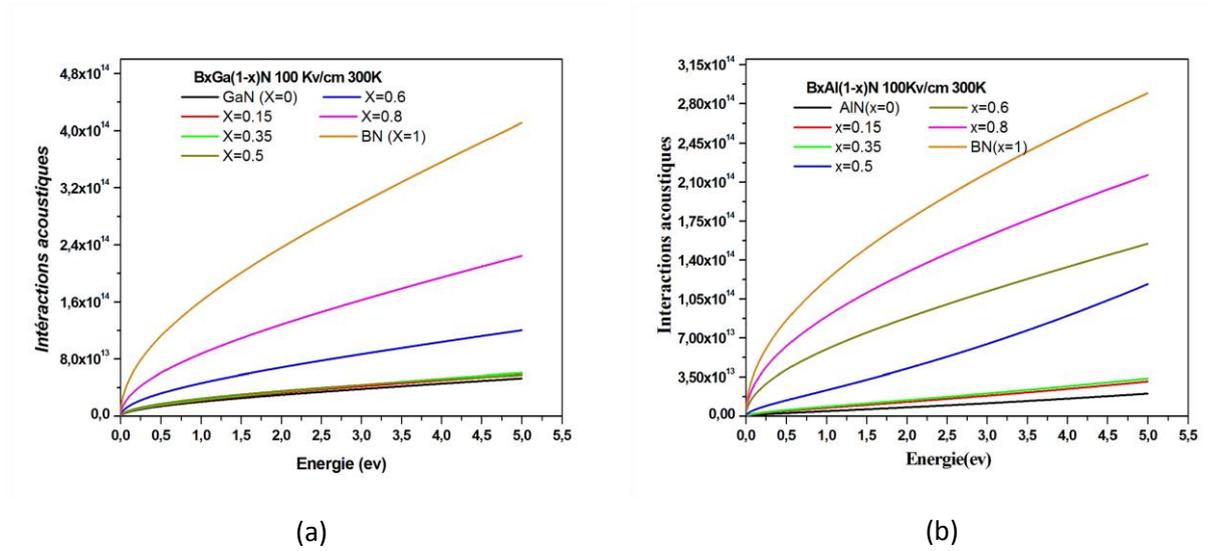


Figure IV-3 : Probabilité d'interactions acoustique en fonction de l'énergie pour différentes composition du bore dans (a)  $B_xGa_{(1-x)}N$  et (b)  $B_xAl_{(1-x)}N$

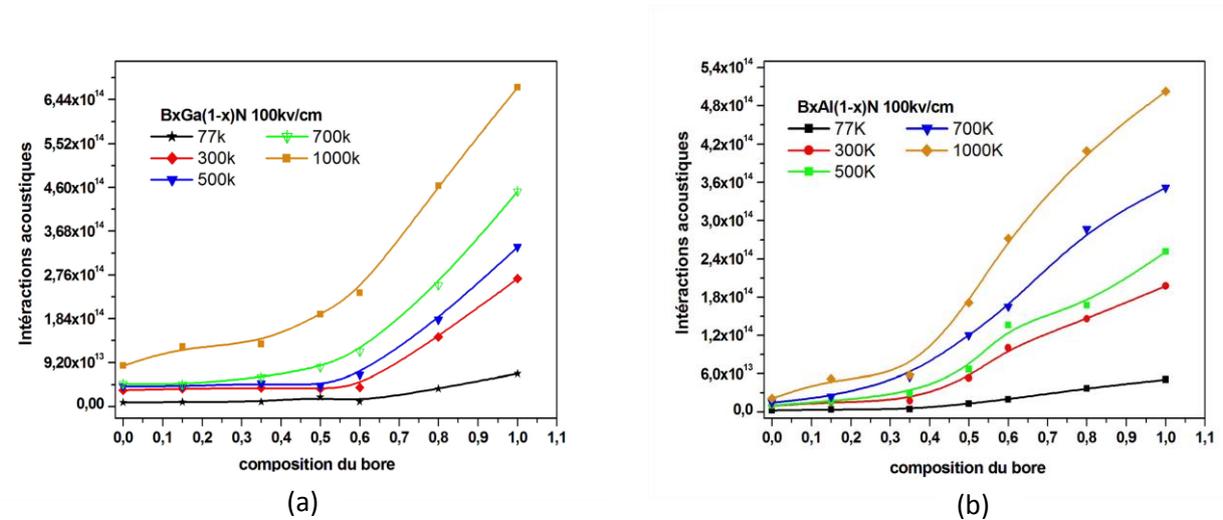
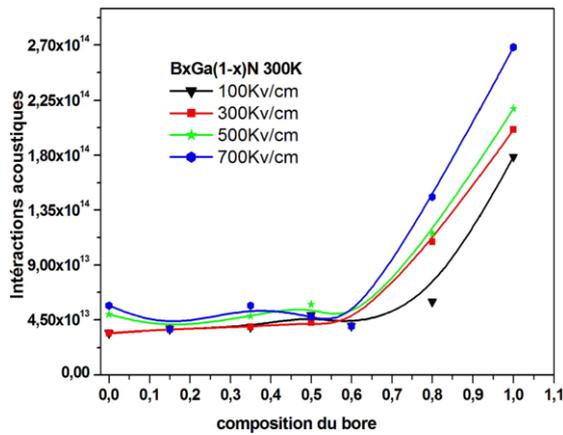
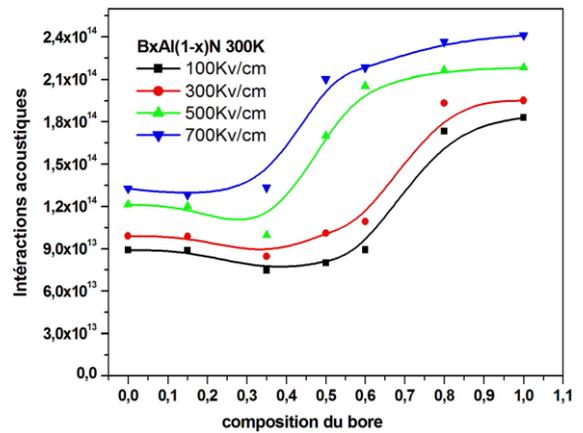


Figure IV-4 : Probabilité d'interactions acoustique en fonction de la composition du bore pour différentes températures dans (a)  $B_xGa_{(1-x)}N$  et (b)  $B_xAl_{(1-x)}N$



(a)

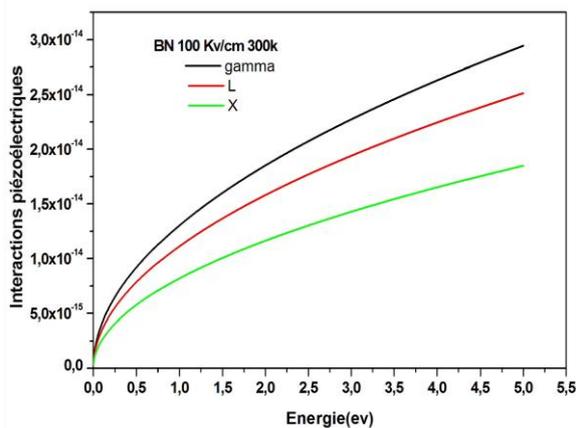


(b)

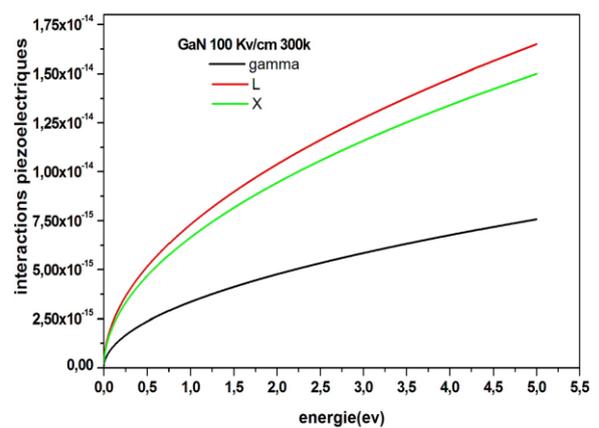
**Figure IV-5 :** Probabilité d'interactions acoustique en fonction de la composition du bore pour différentes valeurs du champ électrique dans (a)  $B_xGa_{(1-x)}N$  et (b)  $B_xAl_{(1-x)}N$

### IV.3.1.2. les interactions piézoélectriques

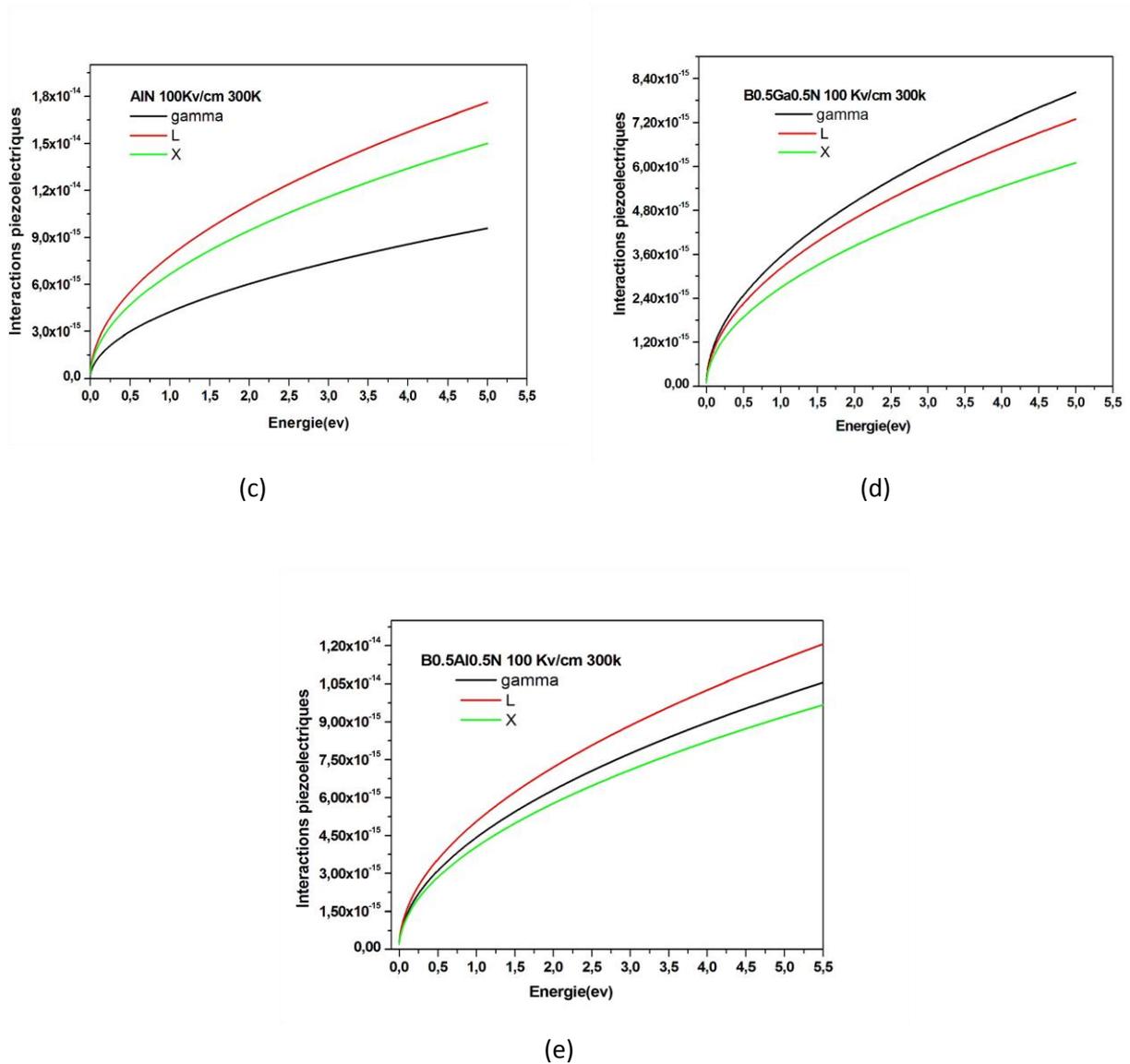
La probabilité de ces interactions dans les trois vallées ( $\Gamma$ , L, X) en fonction de l'énergie pour les trois matériaux nitrure (BN, GaN et AlN) et leurs alliages ternaires  $B_{0.5}Ga_{0.5}N$  et  $B_{0.5}Al_{0.5}N$  est représentée respectivement de (a) à (e) dans la figure IV-6.



(a)



(b)

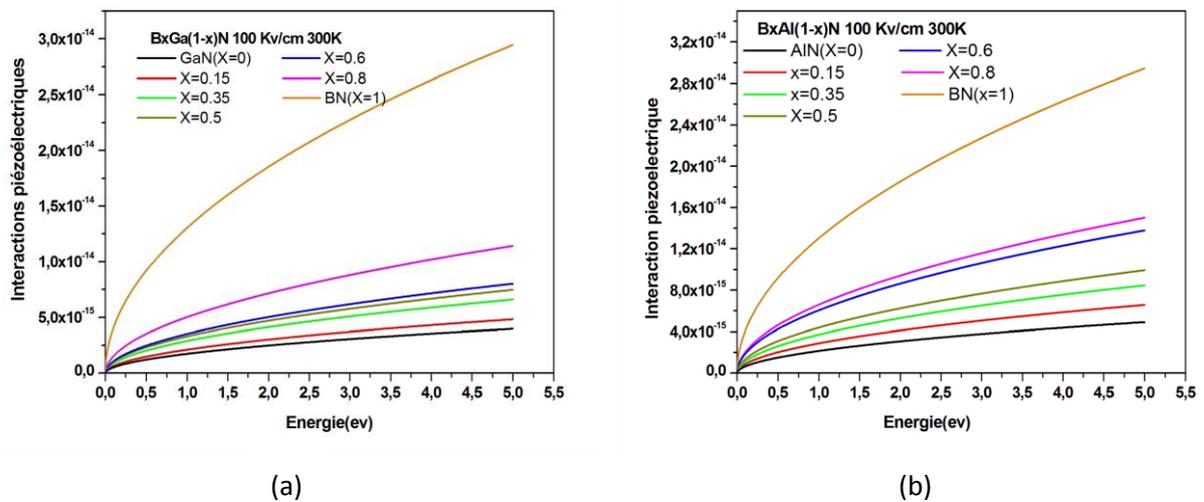


**Figure IV-6 :** Probabilité d'interactions piézoélectriques en fonction de l'énergie pour les trois vallées ( $\Gamma$ , L, X). a) BN, b) GaN, c) AlN, d)  $B_{0.5}Ga_{0.5}N$ , e)  $B_{0.5}Al_{0.5}N$ .

Pour les deux matériaux GaN, AlN et l'alliage  $B_{0.5}Al_{0.5}N$ , le taux d'interaction est faible dans la vallée  $\Gamma$ , et il augmente peu dans la vallée X, et dans la vallée L, cette probabilité augmente avec l'augmentation de l'énergie. Mais pour le matériau BN et le ternaire  $B_{0.5}Ga_{0.5}N$  ce type d'interaction est faible dans la vallée X par rapport à la vallée L et le taux d'interaction dans la vallée  $\Gamma$  augmente avec l'énergie à cause de l'augmentation de la masse effective (voir tableau 1.3 du premier chapitre).

- **Effet de la teneur en bore, de la température et du champ électrique sur les interactions piézoélectriques :**

Ces interactions en fonction de l'énergie de l'électron, pour différentes compositions du bore (x) des matériaux ternaires  $B_xGa_{(1-x)}N$  et  $B_xAl_{(1-x)}N$  à température égale à 300K et à un champ électrique constant  $E= 100KV/cm$ , sont illustrées respectivement par la figure IV-7 (a) et (b). On remarque que ces interactions augmentent avec l'augmentation de la composition du Bore. En effet ; elles dépendent peu d'énergie, bien qu'ils dépendent beaucoup du coefficient piézoélectrique, qu'il est plus important dans le BN que le GaN et le AlN (voir tableau 1.6 du premier chapitre), ce qui explique l'augmentation des probabilités de ces interactions en ajoutant le Bore. Et en augmentant la température (figure IV-8) et le champ électrique (figure IV-9) pour les deux matériaux ternaires, la probabilité des interactions piézoélectriques devient de plus en plus grande.



**Figure IV-7 :** Probabilité d'interactions piézoélectriques en fonction de l'énergie pour différentes compositions du bore dans (a)  $B_xGa_{(1-x)}N$  et (b)  $B_xAl_{(1-x)}N$

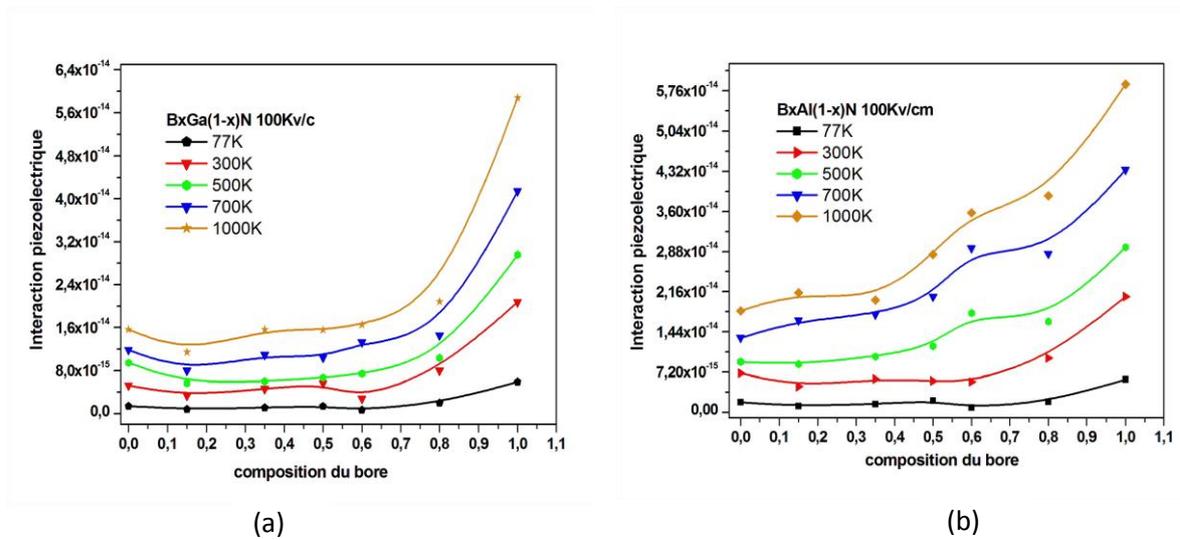


Figure IV-8 : Probabilité d'interactions piézoélectriques en fonction de la composition du bore pour différentes Températures dans (a)  $B_xGa_{(1-x)}N$  et (b)  $B_xAl_{(1-x)}N$

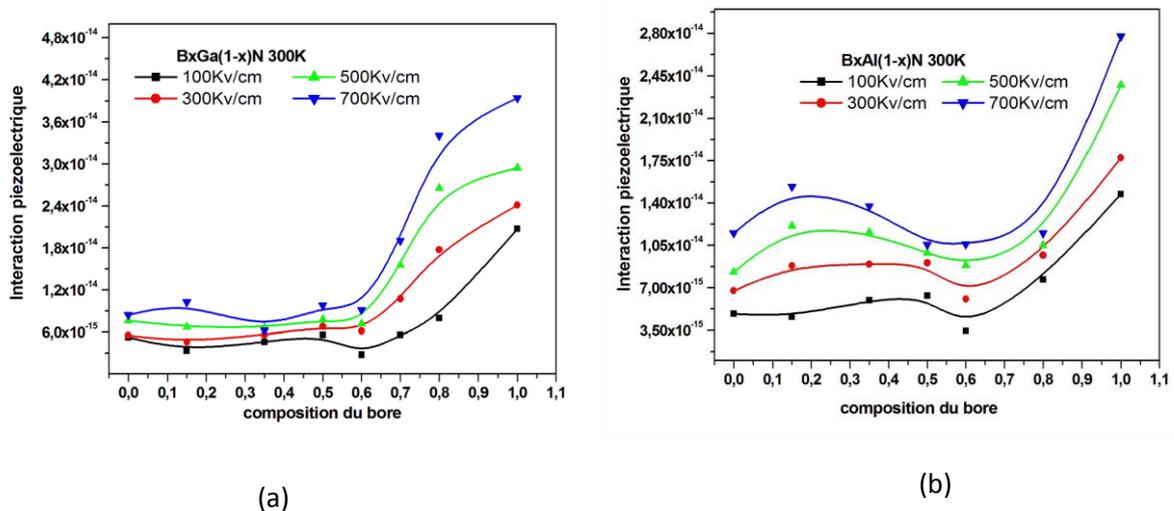


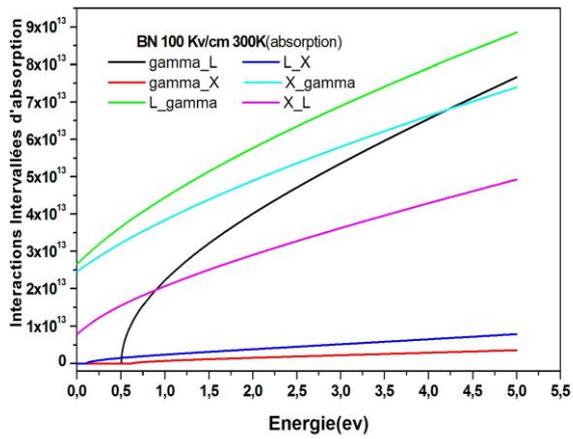
Figure IV-9 : Probabilité d'interactions piézoélectriques en fonction de la composition du bore pour différentes valeurs du champ électrique dans (a)  $B_xGa_{(1-x)}N$  et (b)  $B_xAl_{(1-x)}N$

## IV.3.2 Les interactions inélastiques

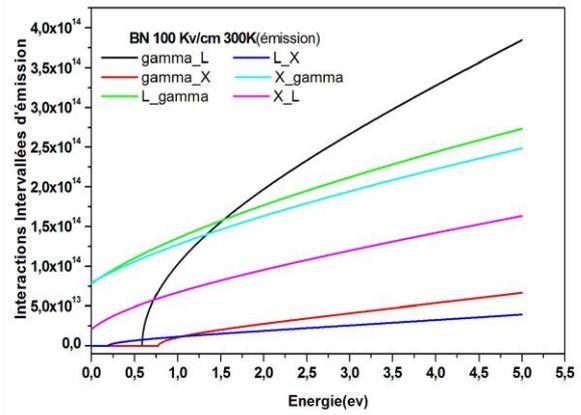
### IV.3.2.1 Les interactions intervalles d'absorption et d'émission

Ce type d'interaction est dû généralement aux transitions intervalles qui permettent le transfert des porteurs, d'une vallée à une autre vallée équivalente ou non équivalente. Elles

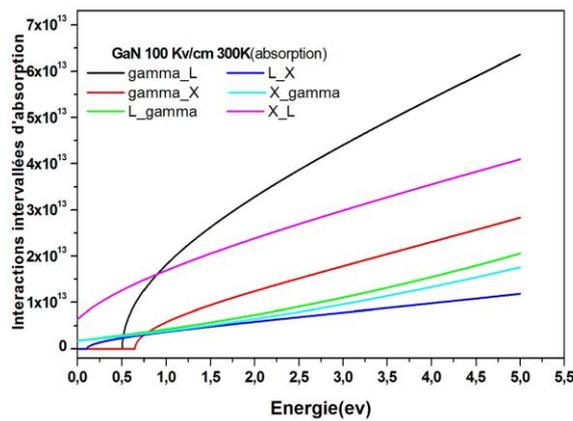
sont accompagnées d'absorption ou d'émission d'un phonon dont la valeur dépend de l'écart d'énergie entre la vallée de départ et la vallée d'arrivée.



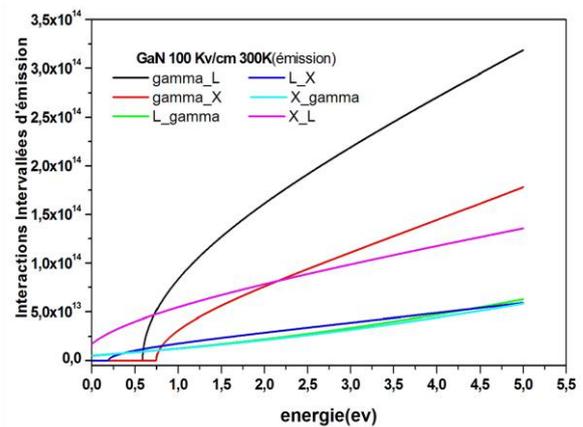
(a)



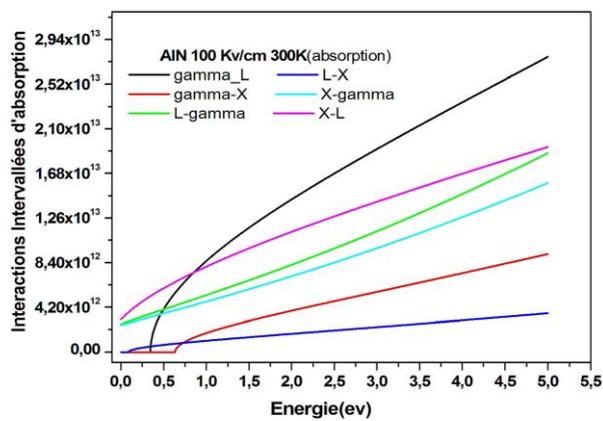
(b)



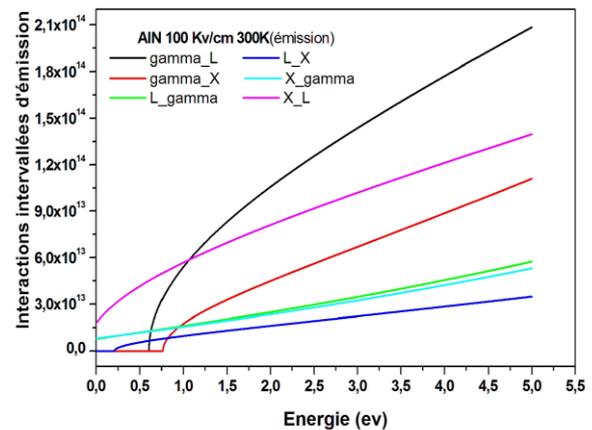
(c)



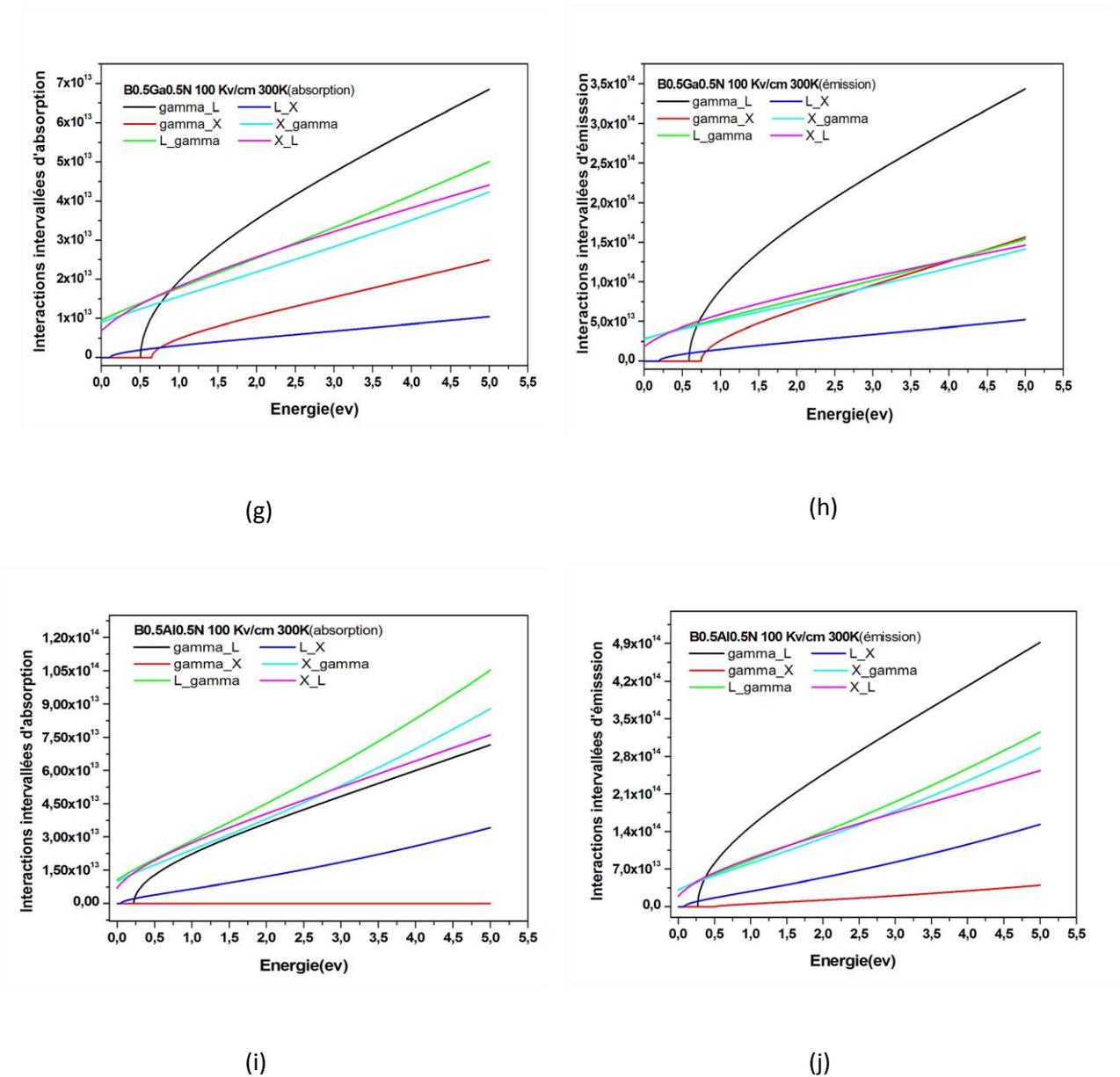
(d)



(e)



(f)



**Figure IV-10** : Probabilité d'interactions intervalées en absorption et en émission en fonction de l'énergie. (a) et (b) BN (absorption et émission), (c) et (d) GaN (absorption et émission), (e) et (f) AlN (absorption et émission), (g) et (h) B0.5Ga0.5N (absorption et émission), (i) et (j) B0.5Al0.5N (absorption et émission).

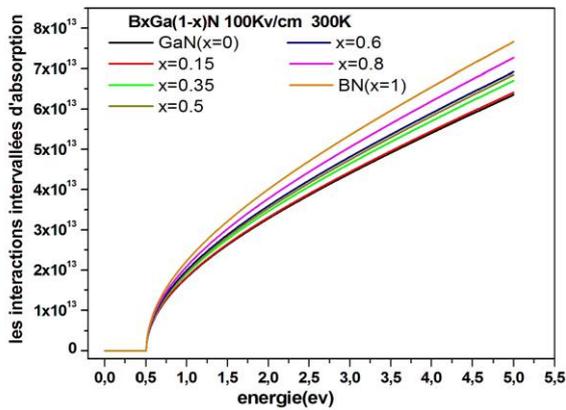
Une interaction intervalée ne peut avoir lieu que si l'énergie après absorption ou émission du phonon, est supérieure à l'énergie du fond de la vallée d'accueil (les énergies étant repérées par rapport au bas de  $\Gamma$ ). Ces interactions ne peuvent se produire que lorsque l'énergie des porteurs est suffisamment grande. Elles sont donc très peu probables à faible champ. Quand un électron est transféré vers une autre vallée, aux effets directs de l'interaction elle-même, viennent s'ajouter toutes les discontinuités dues à la non équivalence

éventuelle des vallées d'origine et d'arrivée. Comme l'énergie cinétique de l'électron se mesure à partir du minimum de la vallée qu'il occupe, un transfert vers une vallée non équivalente provoque une importante variation d'énergie cinétique correspondant à la différence de niveaux entre les deux vallées. Parmi toutes les vallées ( $\Gamma$ -L,  $\Gamma$ -X, L-X, L- $\Gamma$ , X-L et X- $\Gamma$ ) en absorption et en émission, les probabilités d'interactions intervallées d'émissions sont plus grande que celles d'absorption, et que les interactions  $\Gamma$ -L sont les plus importantes en absorption comme en émissions est ceci pour le matériau GaN, AlN et le ternaire  $B_{0.5}Ga_{0.5}N$ , quand l'énergie augmente ( $E > 0.5eV$ ) cette interactions commence à augmenter rapidement parce que les électrons ont acquis une énergie suffisante pour aller dans les vallées supérieurs. Les électrons vont ainsi pouvoir émigrer dans ces derniers, et surtout dans la vallée L, qui est la vallée la plus haute. Sauf que le nitrure de bore BN et  $B_{0.5}Al_{0.5}N$  les interactions L- $\Gamma$  et X- $\Gamma$  prennent le dessus. En effet, dans ce cas les électrons peuvent aller dans les vallées supérieurs pour les occuper, qui ont une capacité à revenir alors à la vallée  $\Gamma$  pour devenir plus stable.

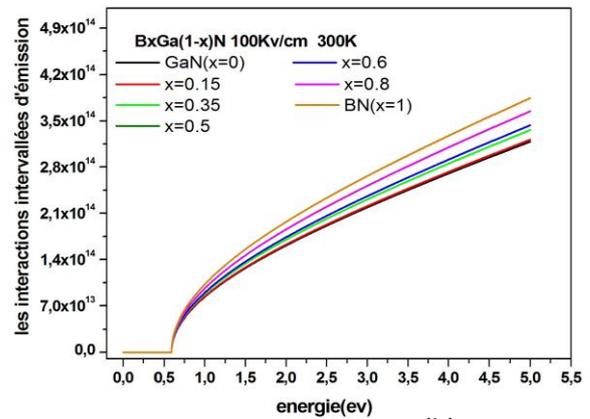
Donc on peut conclure que les probabilités d'émissions sont plus grandes que celles d'absorptions car les électrons ont tendance à émettre de l'énergie pour être plus stable.

- **Effet de la teneur en bore sur les interactions intervallées d'absorption et d'émission :**

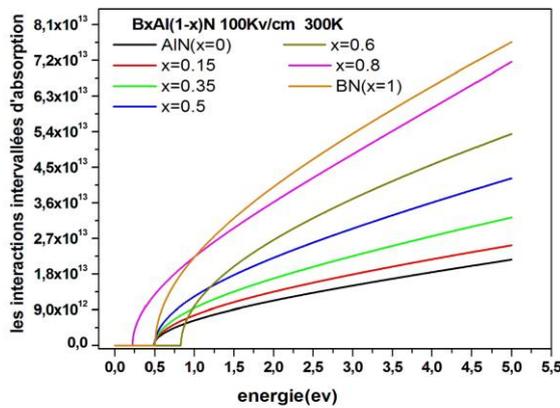
Nous présentons sur la figure IV.11 les interactions intervallées d'absorption et d'émission en fonction de l'énergie pour les deux matériaux ternaire  $B_xGa_{(1-x)}N$  et  $B_xAl_{(1-x)}N$  pour différentes compositions du bore à un champ électrique constant  $E = 100KV/cm$  et à température égale à 300K. La probabilité de ces interactions augmente en augmentant la composition du bore pour les deux ternaires, et ceci dû à l'augmentation du gap, en effet, ces interactions dépendent surtout de l'énergie de la vallée d'accueil et dans ces alliages, l'énergie séparant les vallées latérales devient de plus en plus grande en ajoutant le bore. Et toujours on remarque que les interactions intervallées sont plus importantes en émission qu'en absorption et qu'elles sont plus importante pour le  $B_xAl_{(1-x)}N$  que le  $B_xGa_{(1-x)}N$  car l'énergie de gap ainsi que l'énergie des autres vallées sont plus grandes (voir tableau 1.2 du chapitre I) .



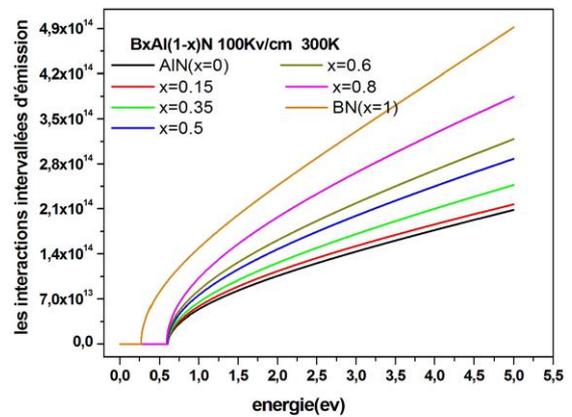
(a)



(b)



(c)



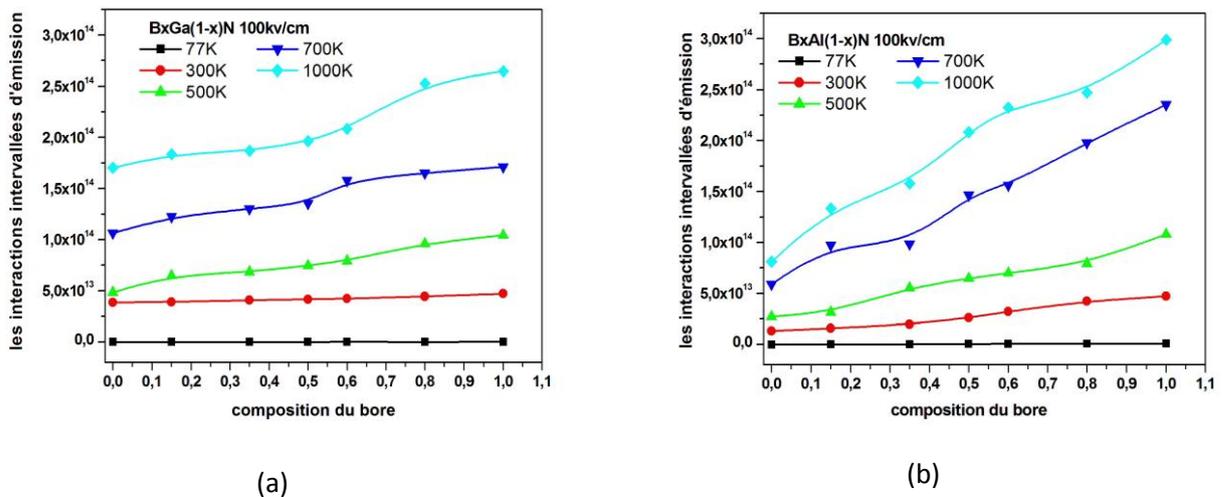
(d)

**Figure IV-11** : Probabilité d'interactions intervalles d'absorption et d'émission en fonction de l'énergie pour différentes compositions du bore dans  
 (a) et (b)  $B_xGa_{(1-x)}N$  (absorption et émission)  
 (c) et (d)  $B_xAl_{(1-x)}N$  (absorption et émission)

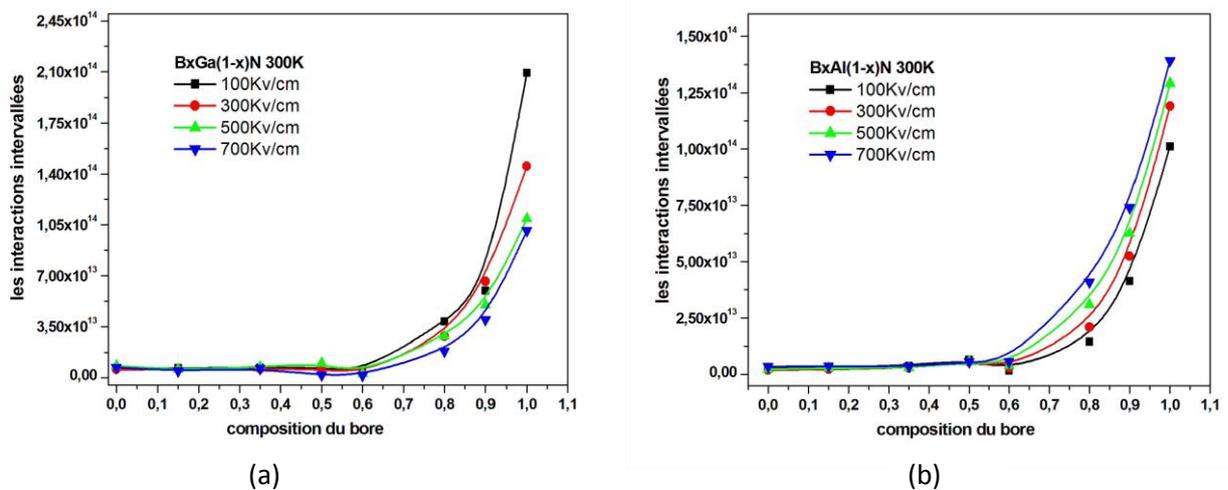
- **Effet de la température et du champ électrique sur les interactions intervalles d'émission :**

La figure IV-12 et IV-13 donnent respectivement l'évolution des interactions intervalles d'émission en fonction de la composition du bore dans les deux ternaires  $B_xGa_{(1-x)}N$  et  $B_xAl_{(1-x)}N$  pour différentes températures et différentes valeurs du champ électrique. Nous pouvons déjà remarquer que ces interactions augmentent avec l'augmentation de la composition du bore même qu'il y a une importante augmentation de ces interactions en

augmentant la température (figure IV-12) car le gap devient plus petit et les électrons peuvent allées occuper les vallées supérieures. On peut clairement voir dans la figure IV-13 que lorsque la composition du bore dépasse 0.6 ( $x > 0.6$ ), l'interaction qui était nulle commence à augmenter rapidement quand le champ devient assez élevé, l'électron peut transférer et peupler les vallées hautes, alors on peut dire qu'il y a une augmentation de probabilité de ces interactions pour les deux ternaires.



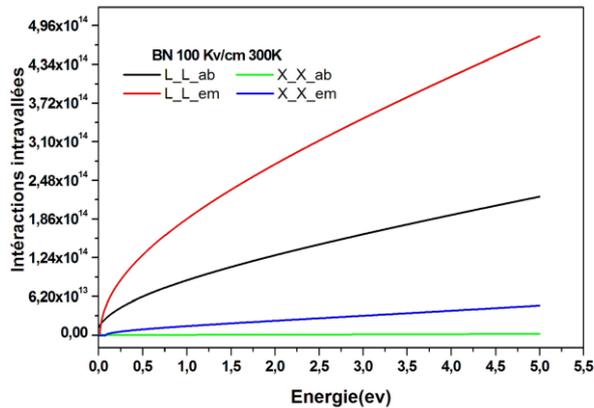
*Figure IV-12 : Probabilité d'interactions intervalles d'émission en fonction de la composition du bore pour différente températures dans (a)  $B_xGa_{(1-x)}N$  et (b)  $B_xAl_{(1-x)}N$*



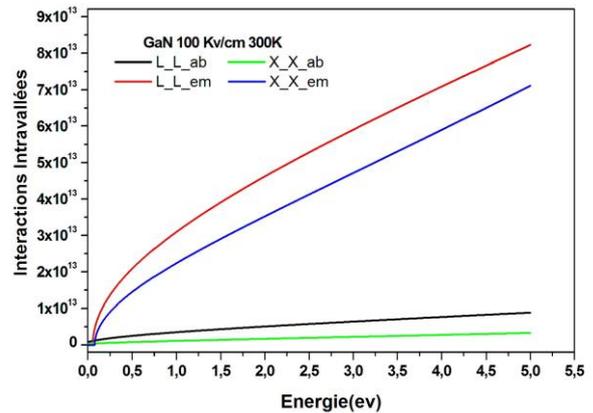
*Figure IV-13 : Probabilité d'interactions intervalles démission en fonction de la composition du bore pour différentes valeurs du champ électrique dans (a)  $B_xGa_{(1-x)}N$  et (b)  $B_xAl_{(1-x)}N$*

**IV.3.2.2 Les interactions intravalles d'absorption et d'émission**

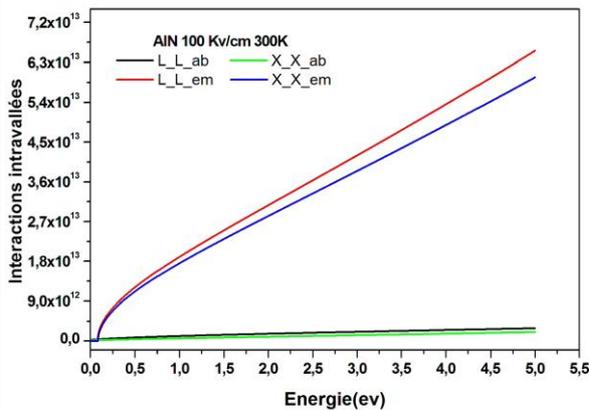
Dans la Figure IV-14, nous représentons les interactions intravallées en fonction de l'énergie des électrons pour les trois matériaux nitrure (BN, GaN et AlN) et leurs alliages ternaires  $B_{0.5}Ga_{0.5}N$  et  $B_{0.5}Al_{0.5}N$  à un champ électrique constant  $E= 100KV/cm$  et à température égale à 300K.



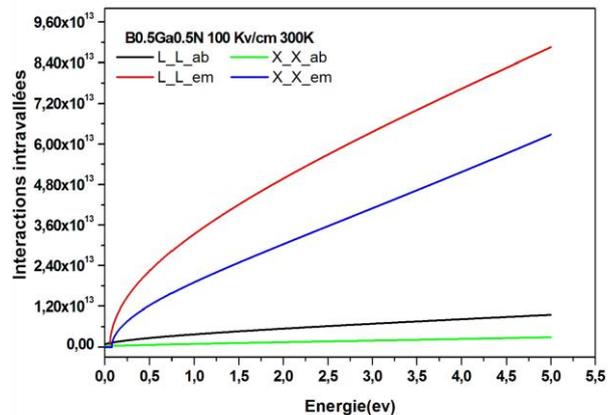
(a)



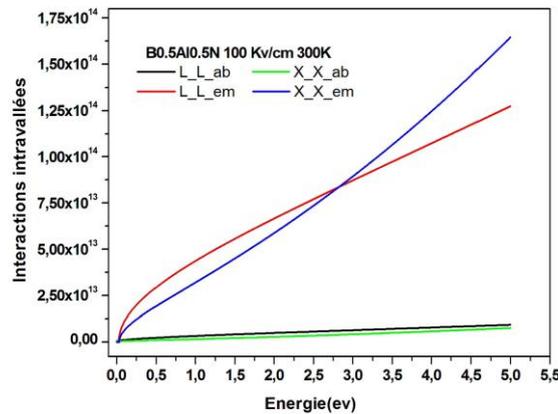
(b)



(c)



(d)



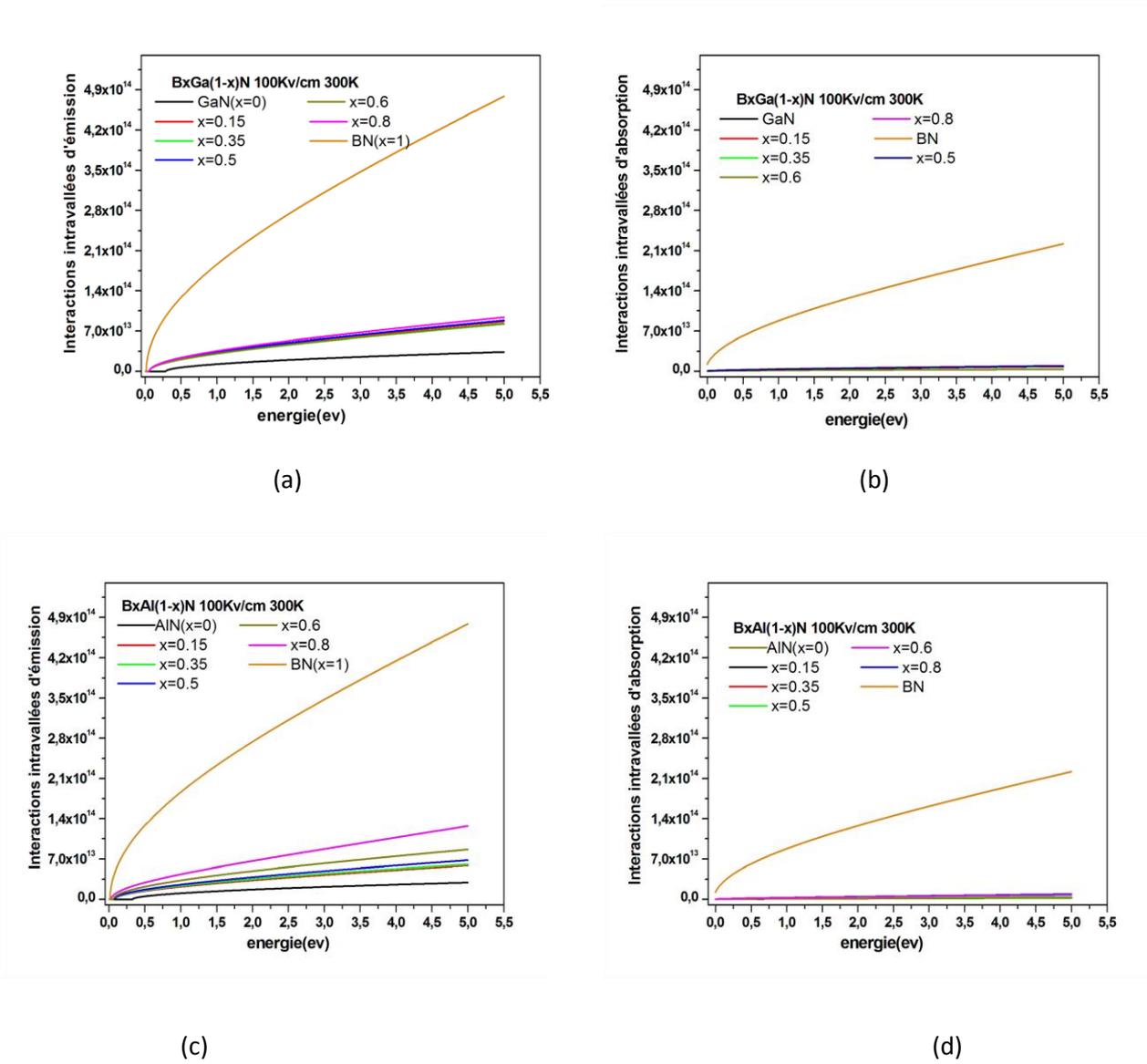
(e)

**Figure IV-14 :** Probabilité d'interactions intravallées en absorption et en émission en fonction de l'énergie. BN, (b) GaN, (c) AlN, d)  $B_{0.5}Ga_{0.5}N$ , e)  $B_{0.5}Al_{0.5}N$ .

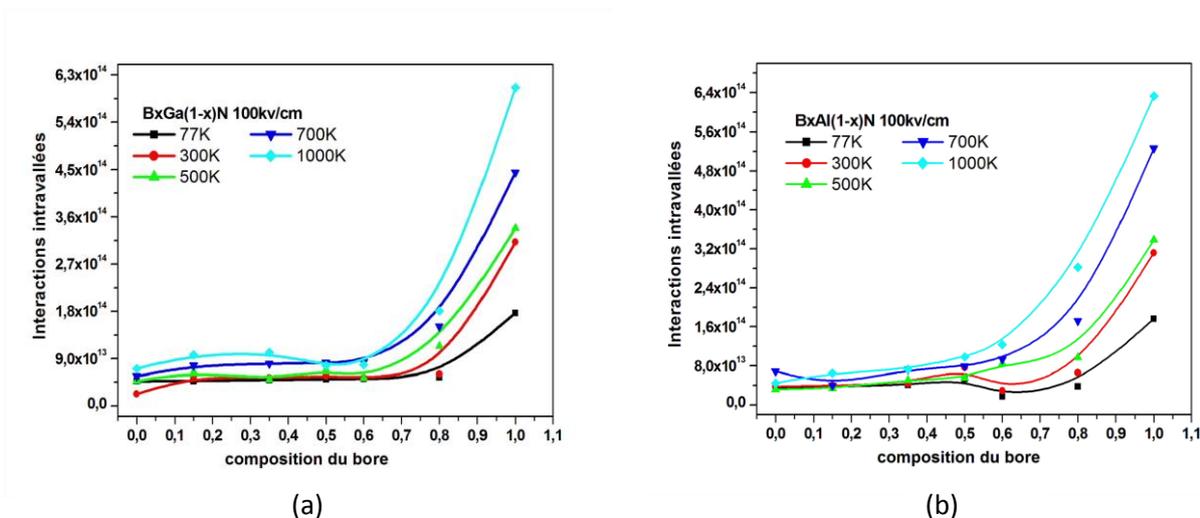
Ce type d'interactions, comme pour le cas des interactions précédentes, elles augmentent proportionnellement avec l'énergie des porteurs et deviennent plus importantes dans les vallées supérieures où la masse effective des électrons est plus grande. On remarque aussi que les probabilités d'émissions sont plus grandes que celles d'absorptions.

- **Effet de la teneur en bore, de la température et du champ électrique sur les interactions intravallées d'absorption et d'émission :**

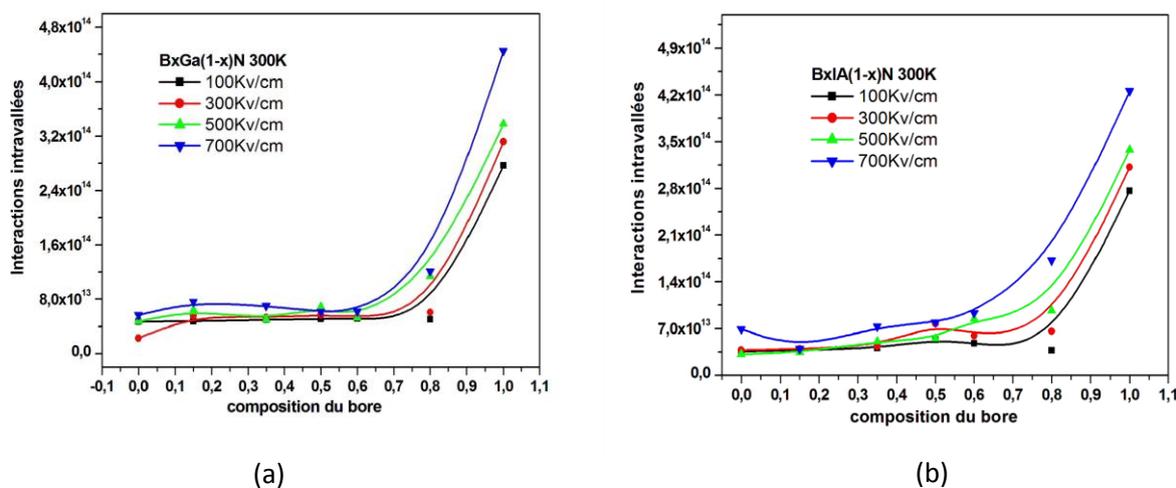
pour les deux matériaux ternaires  $B_xGa_{(1-x)}N$  et  $B_xAl_{(1-x)}N$  (figure IV-15) on remarque qu'il y a une faible augmentation pour le taux d'interactions intravallées en absorption comme en émission en ajoutant le bore, mais cette interaction qui était presque la même pour  $x=0$  à  $x=0.6$  en émission et en absorption commence à augmenter rapidement quand  $x \geq 0.8$  car les nitrures d'éléments III possèdent en général un gap direct, et que les valeurs des largeurs de la bande interdite pour les binaires (B,Al,Ga)N Zinc blende à 300K, et qui sont reportées dans le tableau I.2 du premier chapitre, montrent bien que l'énergie de gap de nitrure de bore est plus grande par rapport aux GaN et AlN. Et ce type d'interaction en fonction de la composition du bore dépend peu de la température (figure IV-16) et du champ électrique (figure IV-17) par ce qu'elles se passent dans la même vallée.



**Figure IV-15 :** Probabilité d'interactions intravallées en émission et en absorption en fonction de l'énergie pour différentes compositions du bore dans :  
 (a) et (b)  $B_xGa_{(1-x)}N$  (absorption et émission)  
 (c) et (d)  $B_xAl_{(1-x)}N$  (absorption et émission)



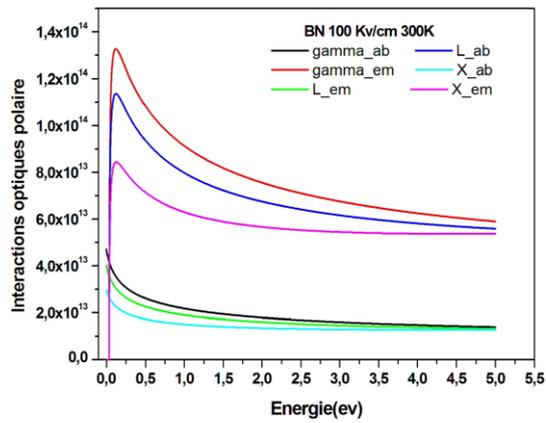
**Figure IV-16 :** Probabilité d'interactions intravallées en émission en fonction de la composition du bore pour différentes températures  
(a)  $B_xGa_{(1-x)}N$  et (b)  $B_xAl_{(1-x)}N$



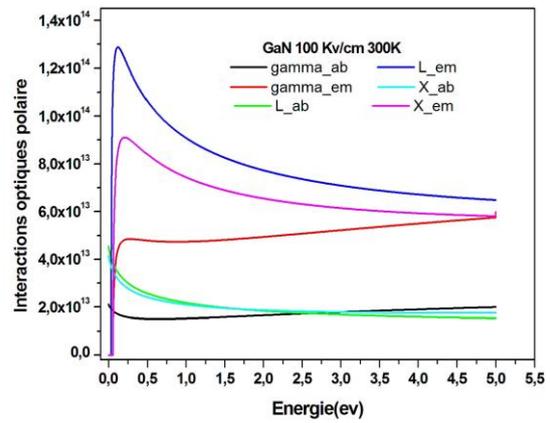
**Figure IV-17 :** Probabilité d'interactions intravallées en émission en fonction de la composition du bore pour différentes valeurs du champ électrique dans  
(a)  $B_xGa_{(1-x)}N$  et (b)  $B_xAl_{(1-x)}N$

### IV.3.2.3 les interactions optiques polaires

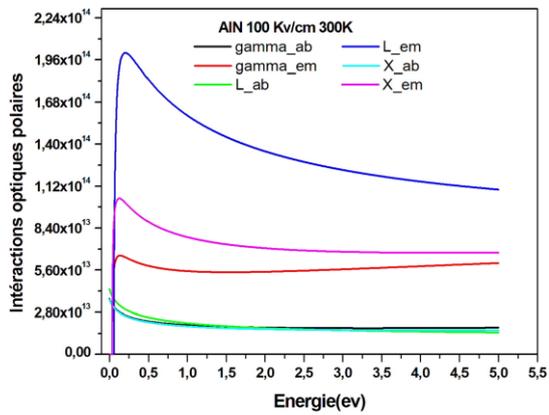
L'évolution des interactions optiques polaires (émissions et absorptions) dans les trois vallées pour le BN, GaN, AlN,  $B_{0,5}Ga_{0,5}N$  et le  $B_{0,5}Al_{0,5}N$  sont représentées respectivement de (a) à (e) par la figure (IV-18).



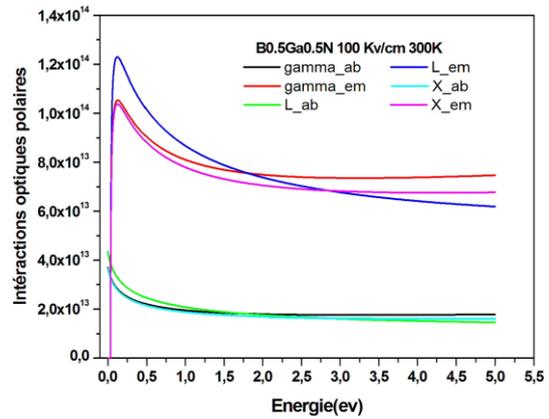
(a)



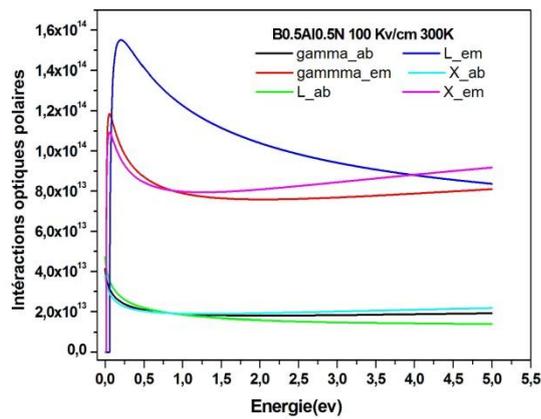
(b)



(c)



(d)



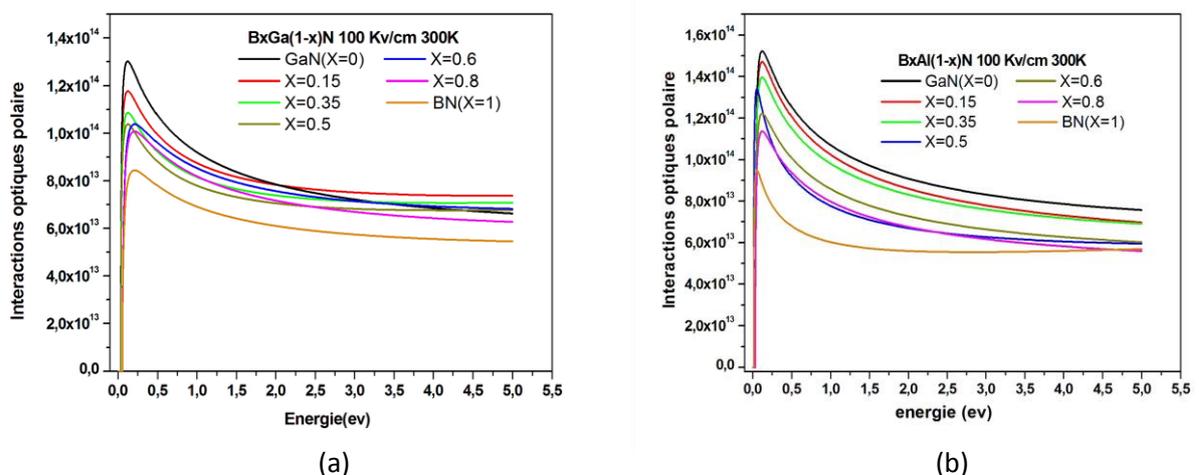
(e)

**Figure IV-18** : Probabilité d'interactions optiques polaires en absorption et en émission en fonction de l'énergie.

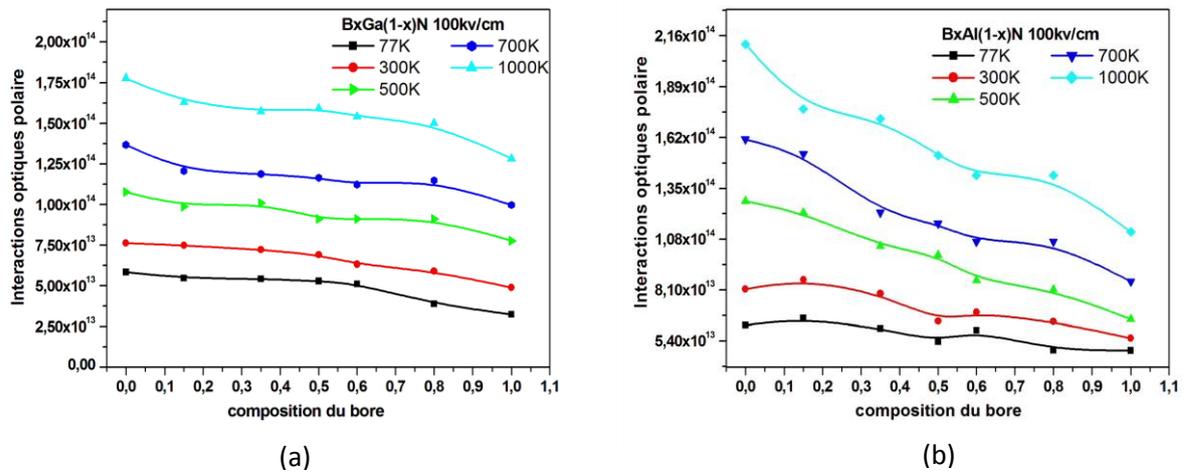
(a) BN, (b) GaN, (c) AlN d)  $B_{0.5}Ga_{0.5}N$ , e)  $B_{0.5}Al_{0.5}N$ .

D'après la figure IV-18, les interactions optiques polaires sont importantes dans toutes les vallées et sont caractérisées par une absorption ou émission d'un phonon optique, comme pour les autres types de diffusion, les probabilités d'interactions d'émission sont plus importantes que celles d'absorption, et leur valeur augmente considérablement quand l'énergie des électrons augmente. On remarque que ce type d'interaction est très faible dans la vallée gamma que les deux autres vallées (L et X) est-ceci est dû que dans la vallée gamma si l'énergie de l'électron est plus faible que l'énergie d'émission  $\hbar \omega_0$  du phonon optique polaire, les interactions acoustiques ou piézoélectriques prédomineront (influent sur le comportement des porteurs), ce sont des collisions élastiques et isotropes. Elles sont d'une grande influence sur le transport de charges, sous l'action d'un champ électrique, et lorsque l'énergie de l'électron est supérieure à  $\hbar \omega_0$ , l'émission d'un phonon optique polaire est possible, et elle devient le processus dominant quand l'énergie cinétique de l'électron dépasse  $\hbar \omega_0$ , l'électron est de moins en moins dévié de sa trajectoire. Mais dès que l'électrons a acquis une énergie supérieur à l'énergie de séparation  $\Delta E_{LX}$  et  $\Delta E_{\Gamma L}$ , il peut être transféré vers les vallées supérieures de la bande de conduction (L ou X), car la masse des électrons transférés dans L ou dans X, est plus grande que celle de la vallée gamma. De ce fait, les interactions d'absorptions sont négligeables devant celles d'émissions.

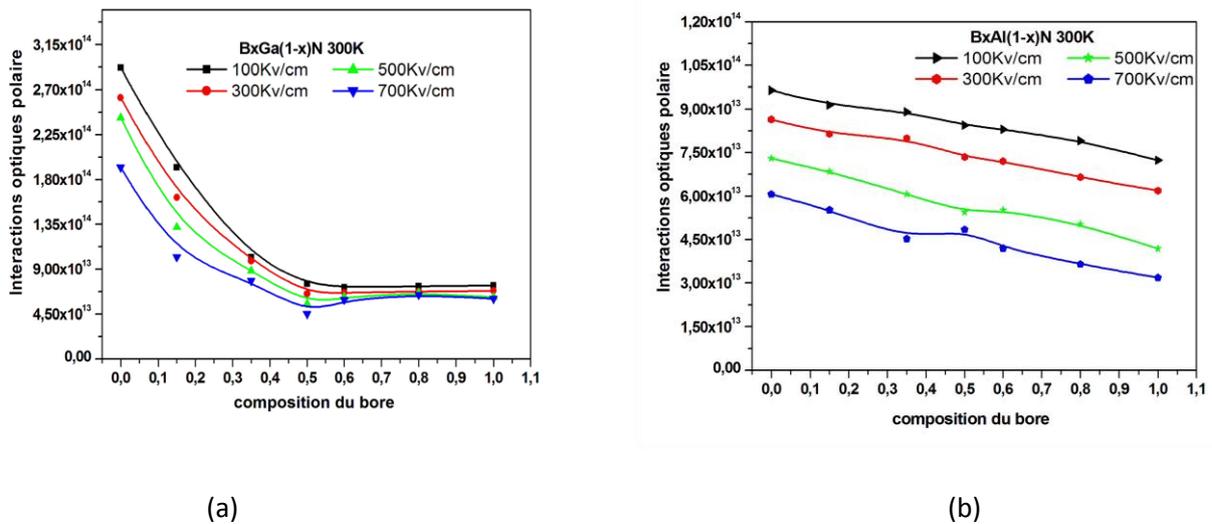
- Effet de la teneur en bore, de la température et du champ électrique sur les interactions optiques polaires d'émission :



**Figure IV-19** : Probabilité d'interactions optiques polaires d'émission en fonction de l'énergie pour différentes compositions du bore dans (a)  $B_xGa_{(1-x)}N$  et (b)  $B_xAl_{(1-x)}N$



**Figure IV-20:** Probabilité d'interactions optiques polaires d'émission en fonction de la composition du bore pour différentes températures dans (a) B<sub>x</sub>Ga<sub>(1-x)</sub>N et le (b) B<sub>x</sub>Al<sub>(1-x)</sub>N



**Figure IV-21 :** Probabilité d'interactions optiques polaires d'émission en fonction de la composition du bore pour différentes valeurs du champ électrique dans (a) B<sub>x</sub>Ga<sub>(1-x)</sub>N et le (b) B<sub>x</sub>Al<sub>(1-x)</sub>N

La figure IV-19 présente la Variation du taux d'interactions à phonons optiques polaires d'émission avec l'énergie des électrons dans le B<sub>x</sub>Ga<sub>(1-x)</sub>N et le B<sub>x</sub>Al<sub>(1-x)</sub>N et ceci pour différentes compositions du bore. On remarque que le seuil correspondant à l'énergie du phonon optique polaire est de l'ordre de 0.15 eV pour le B<sub>x</sub>Ga<sub>(1-x)</sub>N et de 0.12eV pour le B<sub>x</sub>Al<sub>(1-x)</sub>N, et les probabilités des interactions diminuent considérablement quand la

composition du bore augmente pour les deux alliages. De ce fait, les électrons auront une plus grande mobilité et aussi une plus grande durée de vie, des performances recherchées pour des applications en optoélectronique. La probabilité de ces interactions change avec la température et le champ électrique alors nous illustrons les variations de ces interactions déjà évoqué pour  $t=77\text{K}$ ,  $300\text{K}$ ,  $500\text{K}$ ,  $700\text{K}$  et  $1000\text{K}$  (figure IV-20) et pour des valeurs de champ électrique de  $100\text{KV/cm}$  à  $700\text{KV/cm}$  avec un pas de  $200\text{KV/cm}$  (figure IV-21).

Dans les deux cas on remarque que, la probabilité d'interactions augmente avec la température à cause des vibrations des phonons qui deviennent importantes, et diminue avec l'augmentation du champ électrique. L'électron, entraîné dans la direction du champ pendant la phase de vol libre, ne sera donc que détourné de cette direction sous l'effet de cette interaction. Cette particularité de l'interaction optique polaire est une des raisons qui expliquent les valeurs élevées de la mobilité électronique dans ces semi-conducteurs.

#### ***IV.4 Propriétés de transport dans les différents régimes***

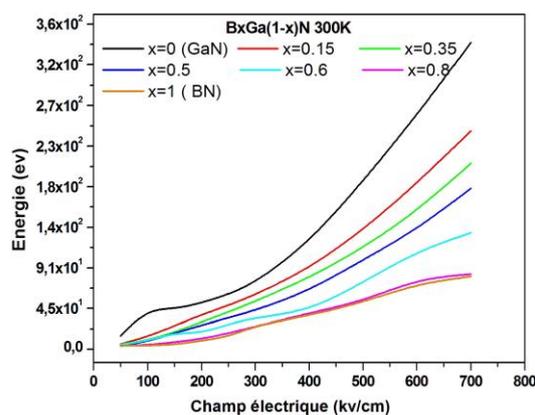
##### **IV.4.1 Caractéristiques du transport en régime stationnaire**

Le régime stationnaire est atteint lorsque les électrons ont subi plusieurs interactions, c'est à dire lorsque la distance qu'ils ont parcourue est plus grande que le libre parcours moyen pour que l'énergie qu'ils gagnent dans le champ électrique compense l'énergie qu'ils cèdent aux différentes interactions. Alors ce régime 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. Par la suite et après avoir présenté l'évolution des différentes interactions que subissent les porteurs durant leur parcours dans le semi-conducteur, nous présentons les caractéristiques du transport en régime stationnaire pour les composés ternaires  $\text{B}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$  et  $\text{B}_x\text{Al}_{(1-x)}\text{N}$ . Les principales grandeurs moyennes accessibles par cette simulation sont l'énergie et la vitesse de dérive, en fonction du champ électrique.

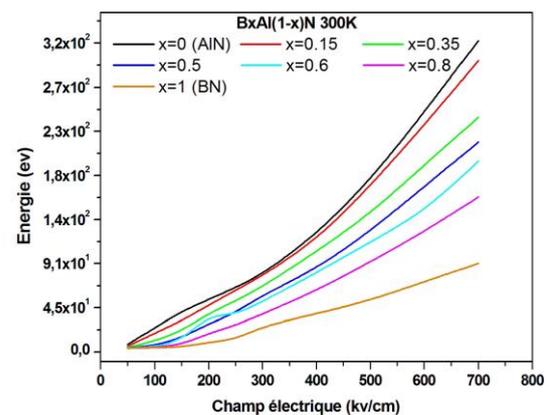
#### IV.4.1.1 Energie en fonction du champ électrique

Sur la figure IV-22 nous présentons les énergies en fonction du champ électrique dans les deux matériaux ternaires  $B_xGa_{(1-x)}N$  et  $B_xAl_{(1-x)}N$ , pour différentes compositions du bore, qui montre bien qu'il y a une augmentation soudaine, à environ 100 kV/cm dans le cas de GaN et de AlN. 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 dû aux interactions des phonons optiques polaires. 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 100 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  $\Gamma$  et X.

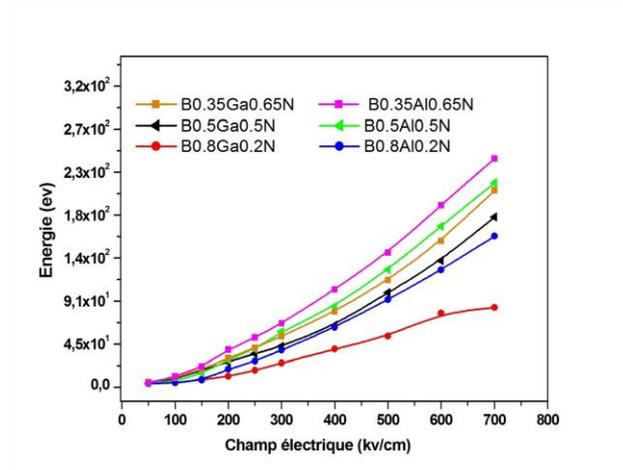
En ajoutant la composition du bore (x) pour les deux matériaux ternaires  $B_xGa_{(1-x)}N$  et  $B_xAl_{(1-x)}N$  l'énergie de gap augmente, alors qu'il faut appliquer un champ électrique plus fort, par conséquent le champ électrique critique pour lequel l'énergie commence à augmenter devient plus grand pour les deux matériaux, il est de 200 KV/cm pour  $x=1$  dans le cas de  $B_xGa_{(1-x)}N$  et autour de 250 kV/cm pour  $x=1$  dans le  $B_xAl_{(1-x)}N$ . Par ailleurs, l'énergie intervallée diminue en augmentant la composition du bore, ce qui fait que l'énergie moyenne diminue, elle ne dépasse pas 83 eV pour  $x=1$  dans le cas de  $B_xGa_{(1-x)}N$  et elle est autour de 91 eV pour  $x=1$  dans le cas de  $B_xAl_{(1-x)}N$ . Les courbes exposées dans la figure IV-22(c) montre une croissance d'énergie remarquable dans le BAlN (elle est à 180 eV, et à 280 eV pour  $B_{0.5}Ga_{0.5}N$  et  $B_{0.35}Ga_{0.65}N$  et à 216 eV, 242 eV pour  $B_{0.5}Al_{0.5}N$  et  $B_{0.35}Al_{0.65}N$  respectivement) dont l'énergie des électrons devient plus importante pour des champs électriques relativement fort par rapport à l'alliage B GaN.



(a)



(b)



(c)

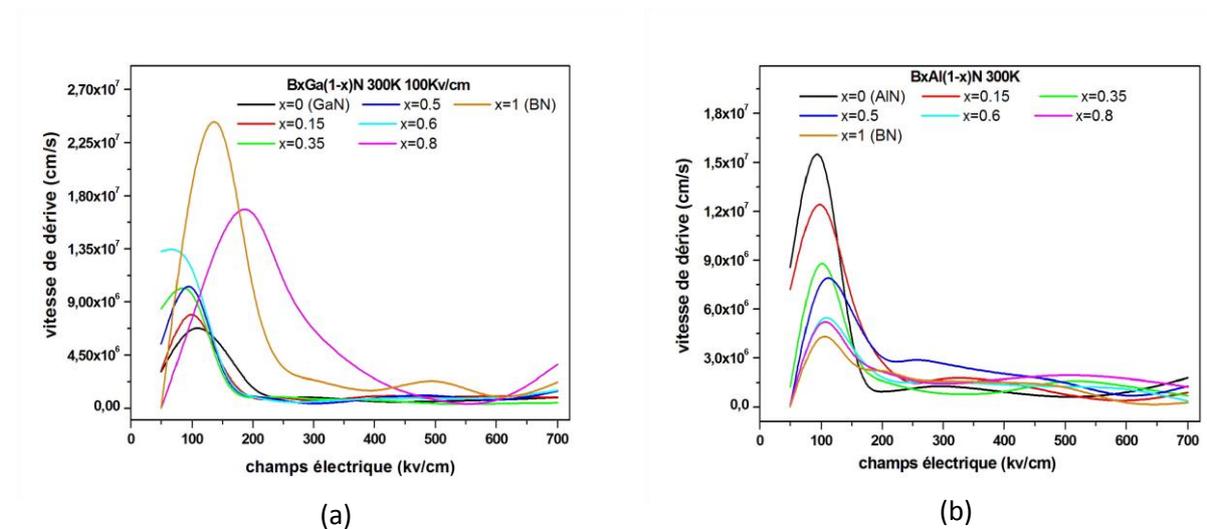
**Figure IV-22** : Evolution de l'énergie en fonction du champ électrique pour différentes composition du bore dans :

- (a)  $B_xGa_{(1-x)}N$
- (b)  $B_xAl_{(1-x)}N$
- (c) comparaison entre les deux alliages.

#### IV.4.1.2 La vitesse en fonction du champ électrique :

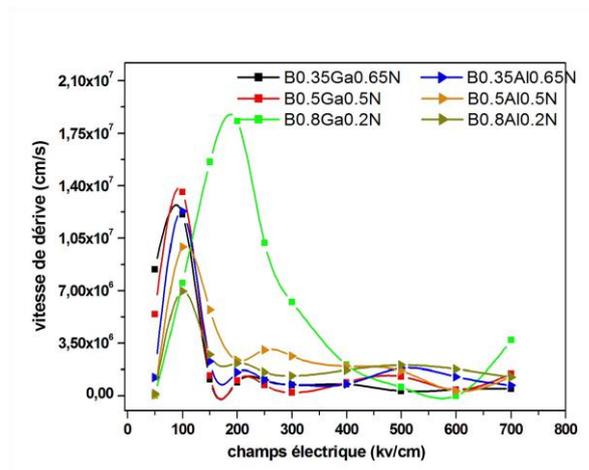
##### IV.4.1.2.1 Effet de la teneur en bore sur la vitesse de dérive :

Nous présentons sur la figure IV-23 la variation de la vitesse de dérive en fonction du champ électrique à  $T= 300\text{ K}$  et une concentration d'électrons à  $10^{17}\text{ cm}^{-3}$ , pour différentes valeurs de composition du bore.



(a)

(b)



(c)

**Figure IV-23** : Evolution de la vitesse de dérive en fonction du champ électrique pour différentes composition du bore.dans (a)  $B_xGa_{(1-x)}N$ , (b)  $B_xAl_{(1-x)}N$  et (c) comparaison entre les deux alliages.

Les courbes de la figure IV-23 ( a ) et ( b ) montrent l'existence de trois phases: une augmentation rapide et linéaire de la vitesse de dérive suivie d'un pic d'environ  $2.47 \cdot 10^7 \text{ cm/s}$  à  $137.8 \text{ Kv/cm}$  pour le  $B_xGa_{(1-x)}N$  à  $x=1$  (BN) et  $1.55 \cdot 10^7 \text{ cm/s}$  à  $92.5 \text{ Kv/cm}$  pour le  $B_xAl_{(1-x)}N$  à  $x=0$  (AlN) (et pour  $x=0.5$  et  $0.8$  voir tableau « 1 » et « 2 ») , puis la diminution de la vitesse, jusqu'à saturation. Ce si est du lorsque les électrons se trouvent dans la vallée centrale qui est définie par sa très faible masse effective, donc forte mobilité, les électrons ont une énergie inférieure à  $\hbar\omega_0$  alors, les intxeractions se font avec les phonons acoustiques qui n'influent pas sur la vitesse des électrons, donc la vitesse augmente rapidement jusqu'à atteindre son maximum (pic) cependant l'énergie des électrons est supérieure à  $\hbar\omega_0$  donc, les interactions se font avec les phonons optiques. Puis les électrons ont gagné une énergie qui devient supérieure à  $\Delta E_{\Gamma L}$  et commencent à diffuser vers la vallée L de la bande de conduction, or, dans cette vallée, la masse effective est élevée de ce fait, la vitesse diminue considérablement dans cette partie, puis la vallée X commence à se remplir petit à petit et la vitesse se stagne et reste constante. En comparant nos résultats à ceux du simulateur F. Nofeli [5] et Rezaee Rokn-Abadi [6], ou les auteurs ont utilisé le matériau AlGaN, qui a pratiquement la même allure que les deux matériaux ternaires B GaN et BAlN , nous pouvons dire que les résultats sont en accord satisfaisant.

$B_xGa_{(1-x)}N$	Valeurs de pic	Champ électrique	$B_xAl_{(1-x)}N$	Valeurs de pic	Champ électrique
X=0 (GaN)	$66.8 \cdot 10^7 \text{cm/s}$	106.9Kv/cm	X=0 (AlN)	$1.55 \cdot 10^7 \text{cm/s}$	92.5 Kv/cm
X=0.5	$103.2 \cdot 10^7 \text{cm/s}$	94.2Kv/cm	X=0.5	$7.85 \cdot 10^7 \text{cm/s}$	111.8Kv/cm
X=0.8	$167.6 \cdot 10^7 \text{cm/s}$	188.7Kv/cm	X=0.8	$5.14 \cdot 10^7 \text{cm/s}$	107.7Kv/cm
X=1 (BN)	$2.47 \cdot 10^7 \text{cm/s}$	137.8Kv/cm	X= (BN)	$4.36 \cdot 10^7 \text{cm/s}$	106.8Kv/cm

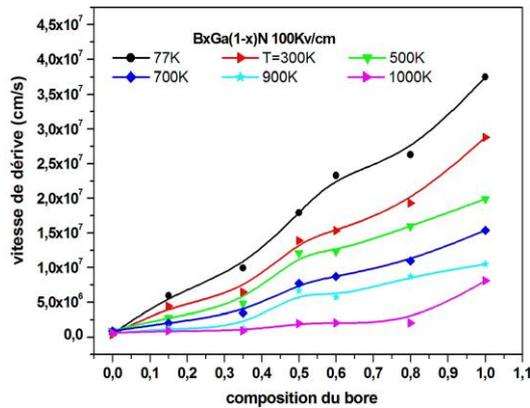
« 1 »

« 2 »

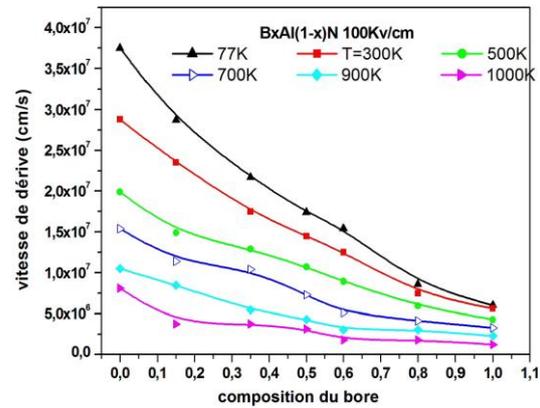
En augmentant la fraction molaire dans le  $B_xGa_{(1-x)}N$  ; l'énergie séparant les vallées  $\Gamma$  et L, et la masse effective des électrons dans la vallée centrale diminuent, tandis que la masse effective des électrons dans les vallées supérieures augmente. La diminution de la masse effective des électrons dans la vallée centrale, entraîne une augmentation de la vitesse de ces électrons. Cependant, en raison de la diminution de l'énergie séparant les vallées  $\Gamma$  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. Et l'augmentation de la composition du bore dans le  $B_xAl_{(1-x)}N$  donne une croissance de l'énergie du gap, de l'énergie qui sépare les vallées  $\Gamma$  et L, et de la masse effective. La croissance de la masse de l'électron dans la vallée centrale, entraîne une décroissance de la mobilité et une diminution de la vitesse de dérive des électrons. Quand la composition du bore augmente, l'énergie qui sépare les vallées  $\Gamma$  et L augmente, il y a alors une augmentation du champ électrique critique pour lequel la vitesse atteint son pic. L'augmentation de cette énergie entraîne aussi une réduction du taux de dispersion des électrons, et donc une décroissance de la population dans les vallées supérieures et des grandes vitesses pour les grands champs électriques.

Donc après une comparaison de la vitesse de dérive entre les deux matériaux ternaire et comme il est bien illustré sur la Figures VI-23(c) on peut conclure que le BGN présente une vitesse qui est supérieur à celles du BAlN et ceci on peut les observer facilement que la vitesse de dérive des électrons augmente avec la composition du bore "x" dans l'alliage  $B_xGa_{(1-x)}N$  et diminue dans le  $B_xAl_{(1-x)}N$ .

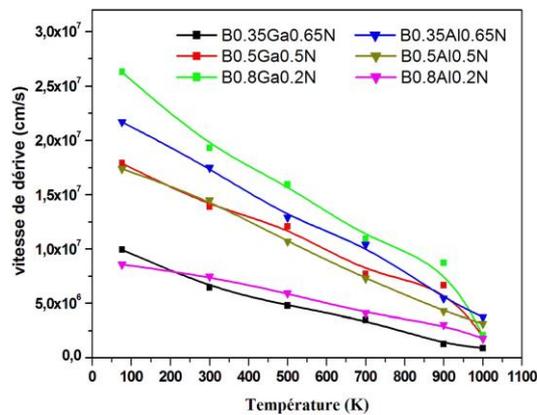
### IV.4.1.2.2 Effet de la température sur la vitesse de dérive



(a)



(b)



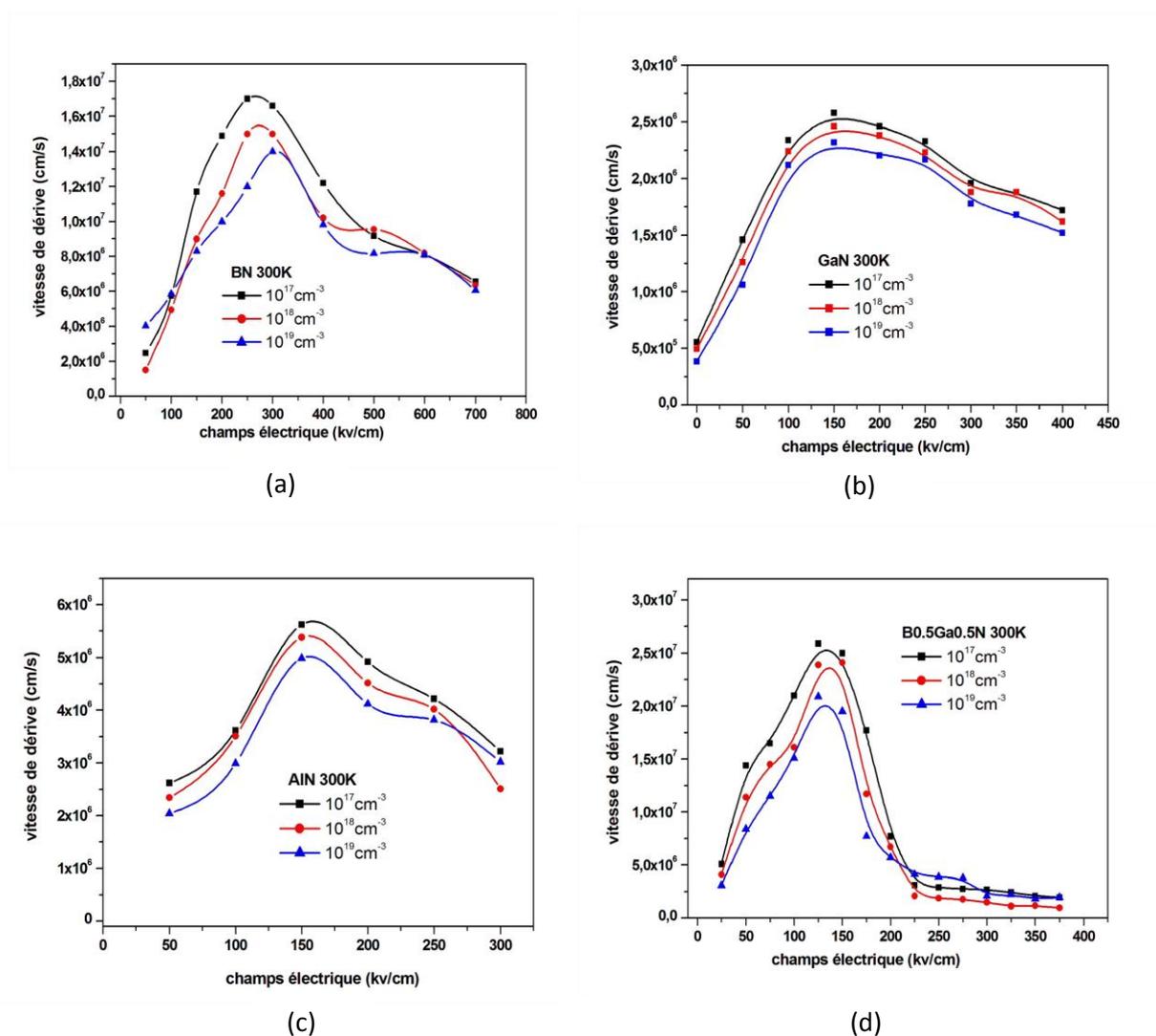
(c)

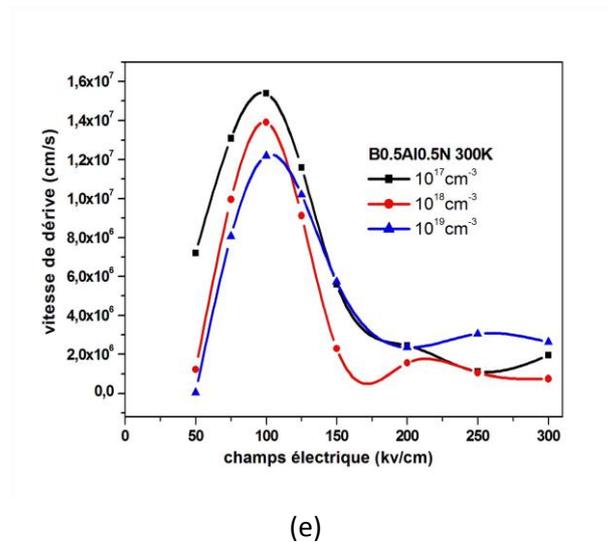
**Figure IV-24 :** Evolution de la vitesse de dérive en fonction de la composition du bore pour différentes températures dans  
 (a)  $B_xGa_{(1-x)}N$   
 (b)  $B_xAl_{(1-x)}N$   
 (c) comparaison entre les deux alliages en fonction de la température.

La figure VI-24 (a) et (b) montre respectivement l'évolution de la vitesse de dérive en fonction de la composition du bore pour différentes températures pour les deux matériaux ternaires  $B_xGa_{(1-x)}N$  et  $B_xAl_{(1-x)}N$ . Nous pouvons déjà remarquer que la vitesse augmente dans le matériau  $B_xGa_{(1-x)}N$ , et diminue dans le  $B_xAl_{(1-x)}N$  avec l'augmentation de la composition du bore même qu'il y a une diminution de cette vitesse dans les deux ternaires en augmentant la température et ce si s'explique par le fait que l'augmentation de la température permet un gain en énergie cinétique pour les électrons ; ils se déplacent alors plus et entrent en

collisions avec d'autres atomes en leur transférant leurs énergies. De plus en plus que la température augmente, les courbes enregistrées (figure IV-24(c)) montrent une décroissance remarquable de vitesse. Alors cette augmentation fait croître l'effet de l'agitation thermique subi par les atomes et augmente les possibilités de chocs entre eux. Cela va entraîner une diminution de la vitesse des électrons libres. On peut conclure qu'à de plus basses températures, les électrons et les trous se déplacent plus rapidement, parce qu'ils interagissent moins fréquemment. La vitesse des électrons dans l'alliage  $B_xGa_{(1-x)}N$  augmente en ajoutant le bore par rapport au  $B_xAl_{(1-x)}N$ . Cette vitesse est plus importante pour les faibles températures. Donc pour les faibles températures l'alliage  $B_xGa_{(1-x)}N$  est plus efficace et devient plus intéressant.

#### IV.4.1.2.3 Influence de la concentration d'électron sur la vitesse de dérive





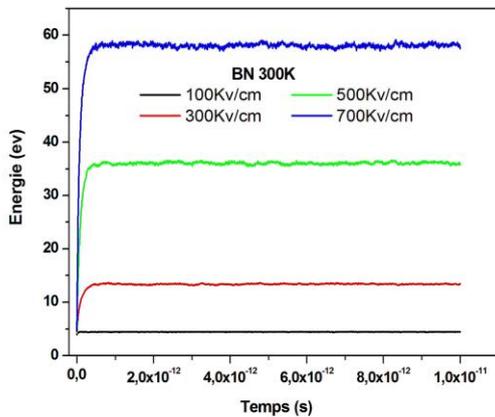
**Figure IV-25** : Influence de la concentration des électrons sur la vitesse de dérive en fonction du champ électrique dans (a) BN, (b) GaN, (c) AlN d)  $B_{0.5}Ga_{0.5}N$ , e)  $B_{0.5}Al_{0.5}N$ .

Les courbes de la figure VI-25 de (a) à (e) représentent respectivement l'évolution de la caractéristique de vitesse en fonction du champ électrique dans BN, GaN, AlN,  $B_{0.5}Ga_{0.5}N$  et  $B_{0.5}Al_{0.5}N$  à température ambiante pour différentes concentrations d'électron à  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ,  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  et  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . On remarque qu'il y a un affaiblissement de la vitesse lié à la présence d'une concentration en impuretés (la vitesse diminue, quand la concentration augmente) se manifeste en champ faible et autour du champ de seuil, ce phénomène peut être expliqué par le fait que l'augmentation du dopage va augmenter les possibilités de collisions entre les électrons ce qui va diminuer leurs vitesses. Et comme le montre la figure VI-24 la déformation de la caractéristique de la vitesse pour les matériaux BN, GaN, AlN et leur alliages, liée à la présence d'impuretés de concentration et caractérisée par une diminution de la mobilité en champ faible par un affaiblissement de la vitesse pic. Quand le champ est supérieur à 160Kv/cm et 125Kv/cm pour le  $B_{0.5}Ga_{0.5}N$  et  $B_{0.5}Al_{0.5}N$  respectivement l'effet des impuretés est négligeable. Donc l'effet du dopage se fait ressentir à faibles champs, et dès que nous commencerons à appliquer un champ fort, l'effet enduisant peut être négligé parce que les courbes convergent. En effet, quand le champ électrique atteint des valeurs très grandes, les porteurs s'échauffent et subissent de moins en moins l'influence des centres ionisés. La vitesse de saturation montre seulement une faible dépendance sur le dopage, reflétant la faible dépendance des mécanismes de collisions pour les grands champs sur le dopage.

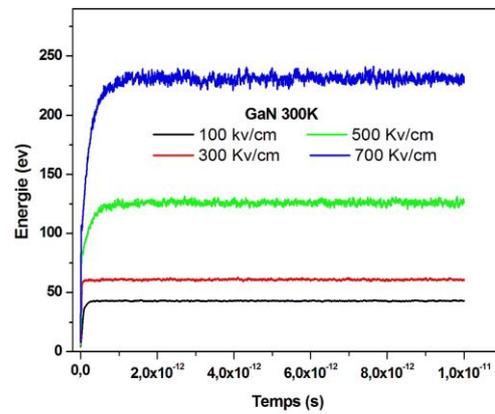
## IV.4.2 Caractéristiques du transport en régime transitoire

Dans cette partie on va étudier le régime transitoire pour distinguer le comportement des électrons quand ils sont brusquement soumis à l'effet d'un champ électrique constant, par rapport au temps :

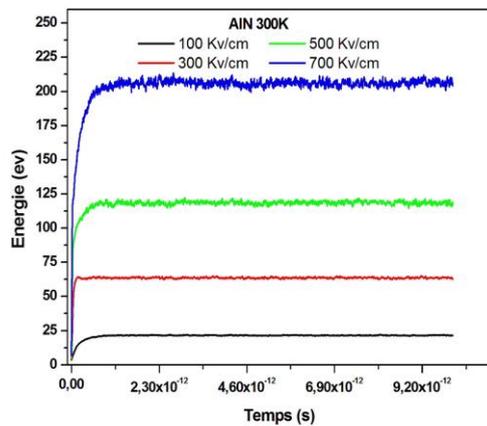
### IV.4.2.1 Energie en fonction du temps pour différentes champ



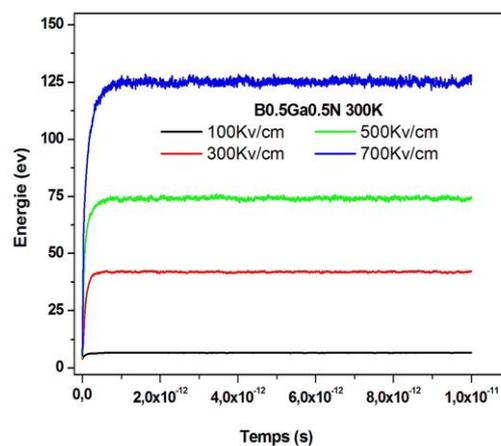
(a)



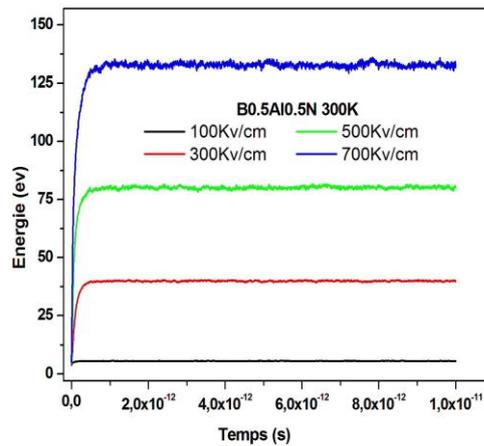
(b)



(c)



(d)



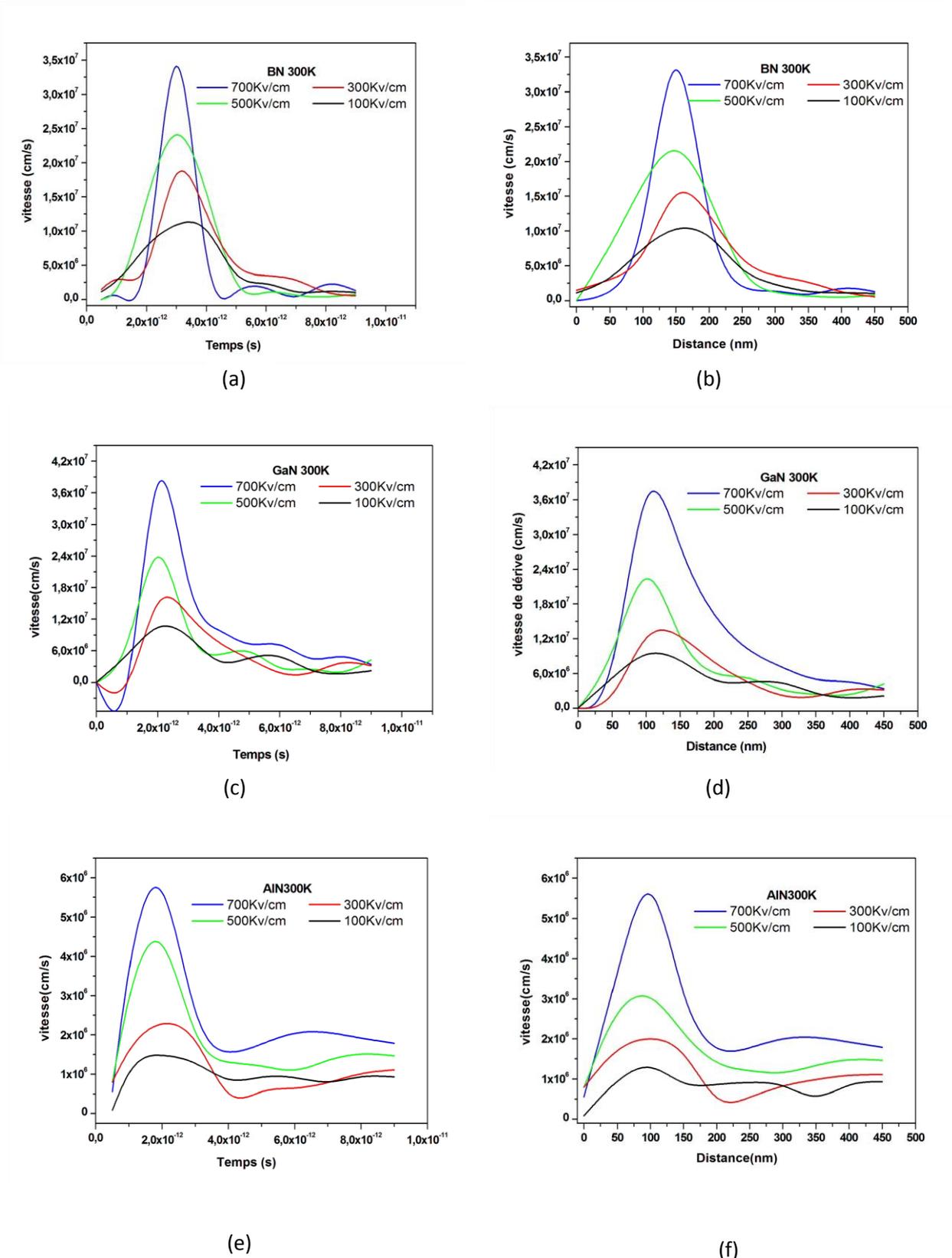
(e)

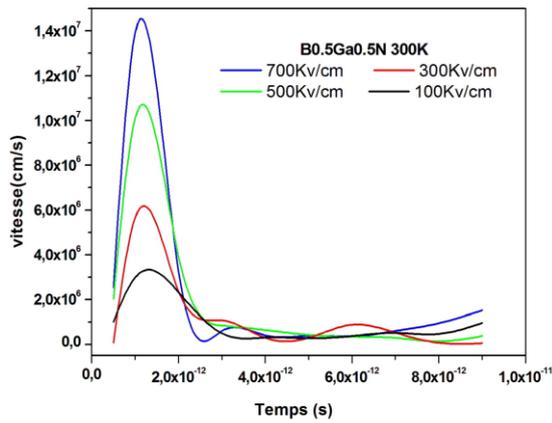
**Figure IV-26** : Evolution de l'énergie moyenne en fonction du temps pour différentes valeurs du champ électrique dans  
(a) BN, (b) GaN, (c) AlN d)  $B_{0.5}Ga_{0.5}N$ , e)  $B_{0.5}Al_{0.5}N$ .

Nous avons représenté, sur la figure IV-26 l'énergie moyenne en fonction du temps pour différentes valeurs du champ électrique à  $T=300K$  dans BN, GaN, AlN et leurs alliages à  $x=0.5$  respectivement. Pratiquement, on remarque que toutes les courbes ont la même allure, et qu'il y a une augmentation brusque de l'énergie pour atteindre une valeur maximale puis l'énergie devient constante, et on peut remarquer aussi que plus le champ est élevé, plus l'énergie est grande. Notons également que deux phases existent. Dans la première phase, les porteurs sont rapidement accélérés et l'énergie est quasi-linéaire. En ce moment les collisions sont de plus en plus nombreuses, conduisant à une propagation de la distribution d'énergie. Par la suite, dans la seconde phase, les porteurs se stabilisent, car les électrons perdent leur énergie lors des collisions. Ceci est due, que pour de forts champs électriques les porteurs acquièrent des énergies plus élevées pour les mêmes conditions de température. L'énergie croît très rapidement atteint la valeur de 56eV à 0.46 ps pour le BN, 214eV à 0.5ps pour le GaN, 195.7eV à 5.3ps pour le AlN, 119eV à 0.44ps pour le  $B_{0.5}Ga_{0.5}N$  et 127eV à 0.4ps pour  $B_{0.5}Al_{0.5}N$  et se stabilise à 0.6ps, 1.2ps, 1.2ps, 1ps et 1.1ps pour la valeur de 58eV, 233eV, 206eV, 125eV et 134eV pour le BN, GaN, AlN,  $B_{0.5}Ga_{0.5}N$  et  $B_{0.5}Al_{0.5}N$  respectivement. Selon la figure IV-26 (d) et (e), les électrons dans  $B_{0.5}Al_{0.5}N$  sont légèrement accélérés et leur énergie atteint rapidement le

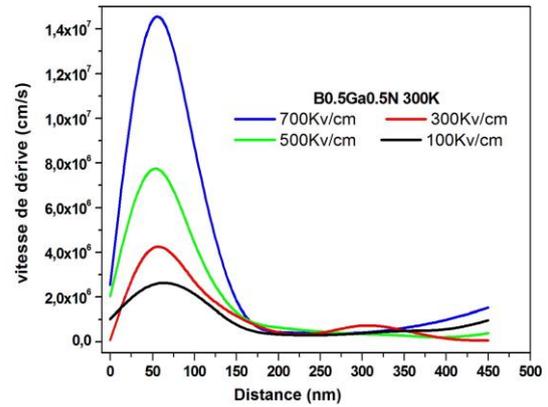
régime stationnaire par rapport au  $B_{0.5}Ga_{0.5}N$ . Ce régime se produira suite à l'égalité des forces dues aux interactions et celle engendrée par le champ électrique.

**IV.4.2.2 La vitesse en fonction du temps et en fonction de la distance pour différentes valeurs du champ électrique**

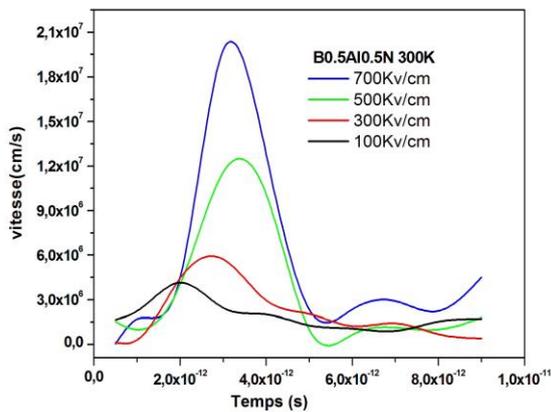




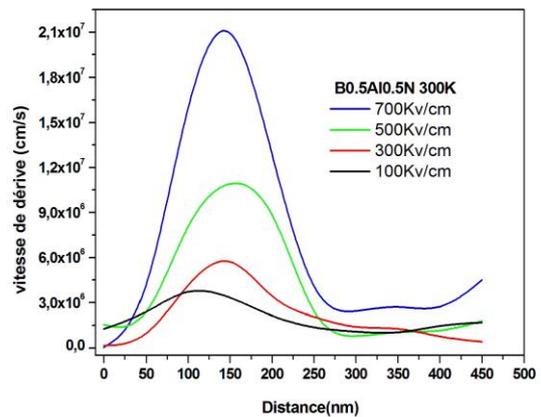
(g)



(h)



(i)



(j)

**Figure IV-27** : Evolution de la vitesse moyenne en fonction du temps et de la distance pour différentes valeurs du champ électrique dans :  
(a) et (b) BN, (c) et (d) GaN, (e) et (f) AlN, (g) et (h)  $B_{0.5}Ga_{0.5}N$ , (i) et (j)  $B_{0.5}Al_{0.5}N$ .

L'étude qui a été menée jusqu'à présent sur l'évolution de la vitesse ne concerne que les caractéristiques de transport en régime stationnaire des semiconducteurs BN, GaN, AlN et leurs alliages. Il est donc intéressant de connaître leur comportement en régime non-stationnaire et de voir l'influence de ce dernier sur la vitesse de dérivation et ces conséquences jusqu'à l'existence de la survitesse. Le phénomène de survitesse apparaissant dans les semiconducteurs lorsque les porteurs sont soumis à des champs largement variables dans le temps, il a été très étudié par des simulations numériques particulières de type

Monte-Carlo, dans lesquelles le mouvement des particules est calculé en fonction du champ appliqué.

Les courbes relatives aux vitesses de dérive à différents champs électriques en fonction du temps et de la distance sont illustrées dans la figure IV-27 qui montre que chaque courbe comporte quatre parties, par exemple on prend le cas de  $B_{0.5}Ga_{0.5}N$  (i) et  $B_{0.5}Al_{0.5}N$  (j) de la figure IV-27 à  $E=700Kv/cm$ :

- Dans le premier intervalle,  $t < t_0$  ( $t_0=1ps$  pour (i), et  $t_0=3 ps$  pour (j)), la vitesse augmente très rapidement et varie proportionnellement avec le temps. La distance parcourue est de l'ordre de  $0.058\mu m$  et  $0.14\mu m$  pour (i) et (j) respectivement.
- Dans le deuxième intervalle  $t_0 < t < t_1$  ( $t_1=1.13ps$  et  $3.2ps$  pour (i) et (j), respectivement), la vitesse et la distance continuent de croître mais moins rapidement par rapport au premier domaine jusqu'à atteindre son maximum ( $V = 1.44 \cdot 10^7 cm/s$ ). Cette valeur est largement supérieure à la valeur stationnaire correspondant au champ  $E_0$  : c'est le phénomène de survitesse qui apparaît.
- Dans le troisième intervalle  $t_1 < t < t_2$  ( $t_2 = 2.62ps$  pour (i) et  $5.43ps$  pour (j) ), la vitesse décroît brusquement alors que la distance continue à croître lentement. pour atteindre la valeur qui correspond au régime stationnaire.
- Dans le quatrième et dernier intervalle ( $t > t_2$  ), la vitesse reste constante est égale à la vitesse correspondant au régime stationnaire. Sur une distance de  $0.25\mu m$  pour (i) et  $0.35\mu m$  pour (j).

Donc, cette ensemble de courbes permet de constater que les pics de survitesse deviennent de plus en plus importants lorsque le champ électrique augmente, et qu'ils se déplacent en même temps vers les temps et les distances quand le champ augmente et que le régime stationnaire est atteint plus vite à fort champ.

Ce phénomène de survitesse se présente mieux dans le cas de  $B_{0.5}Al_{0.5}N$  par rapport au  $B_{0.5}Ga_{0.5}N$ . Cela est dû à la faible masse des porteurs dans la vallée centrale et par conséquent la mobilité élevée. Pour le BN  $m_L^*=0.752 m_0$  et pour le AlN  $m_L^*=0.21 m_0$  alors que pour le GaN  $m_L^*=0.15 m_0$ . Cela est dû aussi aux distances énergétiques qui séparent les vallées latérales de la vallée centrale, est qui donnent l'espace nécessaire pour que les porteurs puissent atteindre une vitesse de dérive importante, qui dépend fortement de l'énergie gagnée par le porteur ainsi que le champ appliqué sur ce dernier.

## IV.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les résultats obtenus par la méthode de Monte Carlo concernant les semiconducteurs : BN, GaN, AlN et leurs alliages ternaires  $B_xGa_{(1-x)}N$  et  $B_xAl_{(1-x)}N$ . Dans lequel nous avons examiné les interactions élastiques et inélastiques ainsi que le transport électrique de ces composés. Cette méthode est destinée à la détermination des interactions acoustiques, piézoélectriques et Les interactions inélastiques (intervallées, intravallées et optiques polaires) en fonction de l'énergie, qui n'influe pas de façon essentielle sur le comportement de l'électron. La probabilité des interactions piézoélectriques et acoustiques augmente avec la composition du Bore dans les deux ternaires, et elle devient de plus en plus grande en augmentant la température et le champ électrique. Les interactions inélastiques d'émissions (intervallées, intravallées et optiques polaires) sont plus importantes que celles d'absorptions.

Aussi nous avons vu que cette simulation présente l'avantage de pouvoir réaliser facilement l'étude des deux régimes stationnaire et transitoire. L'amplitude du phénomène de survitesse détermine les performances en fréquence et en puissance de composant réalisé à partir du matériau étudié ; il est donc intéressant de déterminer les paramètres physiques du matériau qui favorisent cette survitesse et de comparer les possibilités offertes par le nitrure de bore (BN) avec d'autres composés binaires III-V tels que le nitrure de gallium (GaN) et nitrure d'aluminium (AlN) et entre les deux matériaux ternaires B<sub>x</sub>GaN et B<sub>x</sub>AlN. Nous poursuivons donc cette étude, en examinons l'influence de quelques paramètres tels que le dopage, la température, et le champ électrique, en vue de définir la structure optimale qui donnera les performances maximales pour la réalisation des dispositifs électroniques performants.

**Références**

- [1] A. Kaszynski, "étude des phénomènes de transport dans les matériaux semiconducteurs par les méthodes de Monte Carlo : application a l'Aeséniure de Gallium de type N" thèse de docteur ingénieur, Université des sciences et techniques de Lille, 1979.
  
- [2] A.Y. Polyakov, M. Shin, W. Qian, M. Skowronski, D.W. Greve, R.G. Wilson, J. Appl. Phys. 81 (1997) 1715.
  
- [3] M. Shibata, M. Kurimoto, J. Yamamoto, T. Honda, H. Kawanishi, J. Crystal Growth 189=190 (1998) 445.
  
- [4] M. Kurimoto, T. Takano, J. Yamamoto, Y. Ishihara, M. Horie, M. Tsubamoto, H. Kawanishi, J. Crystal Growth 221 (2000) 378.
  
- [5] K. Kim, LAMBRECHT, W.R.L., and SEGALL, B. Rev. B, 53, 16310 – 16326 (1996).  
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.53.16310>
  
- [6] F. Nofeli, International Journal of Engineering Research and Applications, 3, 2679-2682 (2013)

---

# *Conclusion générale*

---

## *Conclusion générale*

Le travail mené au cours de cette thèse porte sur l'étude de phénomènes de transport dans les semi-conducteurs III-N et en particulier le nitrure de bore (BN), le nitrure de gallium (GaN), le nitrure d'aluminium (AlN) et leurs alliages ternaires B<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N et B<sub>x</sub>Al<sub>1-x</sub>N sous la structure cubique, ces composés ont une grande importance surtout en optoélectronique où ils trouvent un champ d'application très vaste. Ils sont très intéressants du fait que leurs alliages ternaires et quaternaires offrent une grande variété de compositions permettant de fixer leurs propriétés électroniques en fonction des proportions.

Le phénomène de transport dans ces semi-conducteurs ternaires à base de nitrures, résulte du comportement des électrons de la bande de conduction et de 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. Dans le but d'étudier ce phénomène nous avons adopté un modèle numérique basé sur la méthode de Monte Carlo, que nous avons décrit en détail dans le troisième chapitre. C'est une méthode probabiliste parfaitement adaptée à l'étude du transport électronique, et que cette méthode est un outil non seulement facile d'emploi mais aussi peut être utilisé dans différentes conditions initiales de champ électrique et de température. Elle consiste à simuler le comportement des électrons dans les semi-conducteurs qui se fait en deux étapes successives ; le libre parcours moyen et les collisions avec le réseau, et de tirer par la suite les fonctions de distribution des électrons ils sont similaires à ceux trouvés par la résolution de l'équation de Boltzmann.

Nous avons montré qu'en champ faible, l'électron est en vallée centrale. Et quand le champ devient assez élevé, l'électron peut transférer et peupler les vallées latérales. En effet, les électrons sont littéralement propulsés en masse vers les énergies élevées où ils acquièrent de fortes vitesses. Il leur devient alors possible de transférer vers les vallées latérales. Mais à cause de la valeur de la probabilité de transfert qui limite à chaque pas le nombre des électrons transférant effectivement, ils restent en vallée centrale une

fraction importante d'électrons légers rapidement portés à des vitesses de plus en plus élevées. Ce processus est responsable du phénomène de "survitesse" qui apparaît de façon transitoire et pendant lequel la vitesse moyenne de l'ensemble des électrons peut prendre des valeurs largement supérieures à la vitesse en régime stationnaire.

Quand le champ est fort, l'électron reste en vallées hautes la plupart du temps ; 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 et sa vitesse en fonction du champ diminue lentement vers une vitesse de saturation qui ne dépend que de l'énergie du phonon intervallée équivalente échangé dans la vallée les plus hautes où l'électron séjourne constamment.

L'amplitude de ce phénomène de survitesse détermine les performances en , fréquence et en puissance de composants réalisés à partir de ce matériau étudié, et conditionnée par le temps de transfert des électrons sur une distance donnée. Nous avons étudié l'effet de la température, le champ électrique ainsi que le dopage sur les paramètres de transport. Et de montrer que le comportement des porteurs est assez différent selon la température du réseau. Et de définir la structure optimale qui donnera les performances maximales pour la réalisation des dispositifs électroniques performants.

## Résumé

Dans ce travail l'objectif principal est l'étude du transport des porteurs de charge dans les matériaux semi-conducteurs spécifiquement le nitrure de bore (BN), le nitrure de gallium (GaN), le nitrure d'aluminium (AlN) et leurs alliages ternaires B<sub>x</sub>Ga<sub>(1-x)</sub>N et B<sub>x</sub>Al<sub>(1-x)</sub>N par la méthode de Monté Carlo qui permet de reproduire les phénomènes microscopiques dans les matériaux semi-conducteurs. Le phénomène de transport dans ces semi-conducteurs résulte du comportement des électrons de 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. A cause de sa complexité, cette équation aux dérivées partielles pas de solution analytique sauf dans un nombre de cas limité. C'est pourquoi il a été fait appel à d'autres procédés et en particulier aux méthodes de Monte Carlo pour traiter ce problème dans toute sa généralité. Pour cela nous avons développé un programme écrit en langage Fortran basé sur le principe de cette méthode. Ce logiciel permet de calculer les probabilités à partir des expressions usuelles, en considérant dans notre cas, un modèle à trois vallées (Γ, L, X), isotropes mais non paraboliques, et pour déterminer l'évolution des différentes interactions ainsi que la vitesse de dérive et l'énergie des porteurs dans les deux matériaux ternaire B<sub>x</sub>Ga<sub>(1-x)</sub>N et B<sub>x</sub>Al<sub>(1-x)</sub>N qui n'influent pas de façon essentielle sur le comportement de l'électron. Elles sont néanmoins introduites pour obtenir une description aussi quantitative que possible de la dynamique électronique.

**Mots-clés:** B<sub>x</sub>Ga<sub>(1-x)</sub>N et B<sub>x</sub>Al<sub>(1-x)</sub>N, simulation de Monte Carlo, phénomène de transport, température, champ électrique, énergie électronique, vitesse de dérive.

## Abstract

The main objective in this work is to study the transport of charge carriers in semiconductor materials specifically boron nitride (BN), gallium nitride (GaN), aluminum nitride (AlN) and their ternary alloys B<sub>x</sub>GaN and B<sub>x</sub>AlN by the Monté Carlo method which it possible to reproduce the microscopic phenomena in semiconductor materials. The phenomenon of transport in these semiconductors results from the behavior of the electrons of the conduction band and the band gap. An analytical study of the problem requires knowledge of the electron energy distribution function, a function obtained by solving the Boltzmann equation. Because of its complexity, this partial differential equation has no analytical solution except in a limited number of cases. That is why other processes, in particular the Monte Carlo methods, have been used to address this whole problem. For this we have developed a program written in Fortran language based on the principle of this method. This program makes it possible to calculate the probabilities from the usual expressions, considering in our case a model with three valleys (Γ, L, X), isotropic but not parabolic, and to determine the evolution of the various interactions as well as the speed and the energy of the carriers in the two ternary materials B<sub>x</sub>GaN and B<sub>x</sub>AlN which do not essentially influence the behavior of the electron. They are nevertheless introduced to obtain a description as quantitative as possible of the electronic dynamics.

**Keywords:** B<sub>x</sub>Ga<sub>(1-x)</sub>N et B<sub>x</sub>Al<sub>(1-x)</sub>N, Monte Carlo simulation, transport phenomenon, temperature, electric field, electron energy, drift velocity.

## ملخص

الهدف الرئيسي في هذا العمل هو دراسة نقل ناقلات الشحنة في مواد النسيب الناقلة على وجه التحديد نيتريد برون (BN)، نيتريد الغاليوم (GaN)، نيتريد الألومنيوم (AlN) والمواد الثلاثية B<sub>x</sub>GaN، BAIN. بطريقة مونت كارلو لإعادة إنتاج الظواهر المجهرية في المواد النسيب الناقلة. ظاهرة النقل في هذه المواد تنتج سلوك للإلكترونات في نطاق شريط التوصيل وقائصر. دراسة تحليلية للمشكلة تتطلب معرفة معادلة توزيع طاقة الإلكترون، يتم الحصول عليها من خلال حل معادلة بولتزمان. بسبب تعقدها، هذه المعادلة التقاضلية الجزئية ليس لها حل تحليلي إلا في عدد محدود من الحالات. ولهذا السبب استخدمت عمليات أخرى، ولا سيما أساليب مونت كارلو، لمعالجة هذه المشكلة برمتها. لهذا قمنا بتطوير برنامج مكتوب باللغة فورتران على أساس مبدأ هذه الطريقة. هذا البرنامج يسمح بحساب الاحتمالات عن طريق التحيزرات المعتادة لقد استخدمنا في هذه الحالة نموذج ثلاثي الأبعاد غير مكافئ وتحديد تطور مختلف التفاعلات وكذلك السرعة وطاقة الحوامل في العادتين الثلاثية النسيب الناقلة بغان و بلن التي لا تؤثر أساسا على سلوك الإلكترون. ومع ذلك، فإنها تمسحت للحصول على وصف قدر الإمكان للديناميات الإلكترونية.

**كلمات المفتاح:** نسيب النواقل، أساليب مونت كارلو، درجة الحرارة، المجال الكهربائي، طاقة الإلكترون، السرعة.