

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

**MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

UNIVERSITE ABOU-BAKR BELKAÏD

FACULTE DES SCIENCES

Département de Physique

Laboratoire des Matériaux et des Energies Renouvelables

THESE DE MAGISTER

En

Physique Energétique et Matériaux

Etude des Phénomènes de Transport dans les Matériaux

III-V par la Méthode de Monte Carlo :

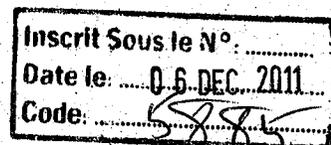
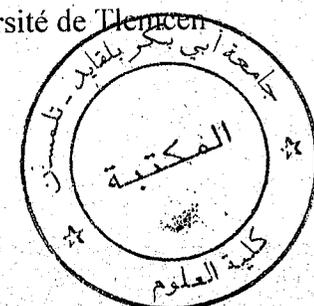
« Application à l'InAs »

Présentée par : AMER Lakhdar

Soutenue en juin 2003 devant la commission d'examen

Président : Mr. B. BENYOUCEF
Directeur de thèse : Mr. N-E. CHABANE-SARI
Codirecteur de thèse : Mr. B. BOUAZZA
Examineurs : Mr. G. MERAD
Mr. K. GHAFfour
Mr. A. HAMDOUNE

Professeur à l'Université de Tlemcen
Professeur à l'Université de Tlemcen
C. C. à l'Université de Tlemcen
Professeur à l'Université de Tlemcen
M. C. à l'Université de Tlemcen
C. C. à l'Université de Tlemcen



DEDICACE

Dédicace

C'est avec une très grande joie que je dédie ce travail à

La grâce de dieu qui ma guidé

A mes très chers parents,

Ma mère ainsi que la mémoire de mon père

Et à toute ma famille.

A tous ceux qui m'ont aidé et encouragé durant mes
années d'étude.

A tous ceux qui me sont chers.

En témoignage de reconnaissance
Pour l'affection dont ils m'entourent

REMERCIEMENT

REMERCIEMENTS

Le présent travail a été effectué dans le Laboratoire de Matériaux et Energies Renouvelables du Département de Physique de la Faculté des Sciences de l'Université Abou Bakr BELKAÏD – Tlemcen. Ce travail est également le fruit d'une collaboration scientifique avec le Laboratoire de Physique de la Matière de l'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon. Nous remercions le professeur CHRISTIAN GONTRAND pour l'aide précieuse et les conseils qu'il n'a cessé de nous apporter.

J'exprime toute ma gratitude à Monsieur N.E. CHABANE SARI, Professeur de l'Université Abou Bakr BELKAÏD, de m'avoir dirigé au cours de ce travail. Ses critiques constructives, remarques et précieux conseils ont contribué à faire progresser mes recherches.

J'exprime toute ma reconnaissance et mes remerciements à Monsieur B. BOUAZZA, chargé de cours à l'Université Abou Bakr BELKAÏD, qui m'a également bien assuré la bonne démarche tout au long de ce travail.

Je remercie Monsieur B. BENYOUCEF, Professeur de l'Université Abou Bakr BELKAÏD, pour l'intérêt qu'il a bien voulu porter à ce travail en acceptant de présider le jury de cette thèse.

Je remercie Monsieur G. MERAD, Professeur de l'Université Abou Bakr BELKAÏD, qui m'a fait l'honneur d'examiner cette thèse.

Je remercie Monsieur K. GHAF FOUR, Maître de conférence à l'Université Abou Bakr BELKAÏD, qui m'a fait l'honneur de faire partie du jury.

Je remercie Monsieur A. HAMDOUN, chargé de cours à l'université Abou bakr BELKAÏD, d'avoir accepté de participer à ce jury de thèse.

Je tiens également à remercier Mme A. BOUAZZA et Melle C. SAYAH pour les diverses discussions scientifiques qui ont beaucoup enrichi mes connaissances.

Enfin, j'adresse mes remerciements à toutes les personnes qui de près ou de loin m'ont aidé et soutenu pendant cette période.

Etudiant
L. AMER



Directeur de thèse
Professeur N.E.CHABANE SARI

SOMMAIRE

SOMMAIRE

INTRODUCTION GENERALE	1
CHAPITRE I	4
Introduction	5
Généralités sur les matériaux III-V	6
Propriétés des principaux composés binaires III-V à 300 K	9
Performances des composés III-V	11
Structures des matériaux semiconducteurs III-V	13
Structure générale des composés III-V	13
Structure de l'arséniure d'indium	15
Méthodes d'approximation	17
Approximation de Born Oppenheimer	17
Approximation de Hartree ou de l'électron seule	18
Méthodes de calcul des structures de Bandes	19
Méthode des ondes planes orthogonalisées	20
Les pseudopotentiels	20
Théorie des K.p	21
CHAPITRE II	25
Introduction	26
Equation de Boltzmann	26
Equations de transport dans un semiconducteurs	29

Propriétés électroniques des semiconducteurs III-V.....	32
Effet Hall	32
Effet d'Avalanche.....	34
Propriétés optiques	36
Élément dipolaire dans les semi conducteurs à gap direct	36
Transitions optiques verticales	39
Susceptibilité optique	39
Temps de vie radiative	41
Coefficient d'absorption	43
Taux d'émission spontanée	45
Indice optique	46
Moyenne et loin infrarouge	46
CHAPITRE III	48
Méthode de Monte Carlo	49
Présentation de la simulation	50
Procédure du choix de l'interaction	51
Procédure du Self Scattering	54
Mouvement des électrons	55
Mécanisme d'interaction	58
Types d'interactions	59
Interactions acoustiques	59
Interaction piézoélectrique	60
Interaction avec les impuretés	61
Interaction optique polaire	62
Interactions intervallées équivalentes et non équivalentes	63

Etat de l'électron après interaction	65
Temps de vol libre	70
CHAPITRE IV	72
Interactions prédominantes dans l'InAs.....	73
Interaction acoustique	73
Interaction piézoélectrique	74
Interaction optique polaire	74
Interaction avec les impuretés	74
Résultats et Interprétations	75
Régime stationnaire	75
Vitesse en fonction du champ	75
Energie en fonction du champ	77
Régime non stationnaire	78
Profil de la vitesse et l'énergie en fonction du temps	78
Influence du dopage	80
Influence de la température	81
Influence de la longueur	83
Variation de la vitesse en fonction de la distance.....	85
Comparaison des résultats.....	86
Conclusion	90
CONCLUSION GENERALE	91
ANNEXE A	94
ANNEXE B	101
ANNEXE C	115

INTRODUCTION GENERALE

INTRODUCTION GENERALE

Les phénomènes de transport dans les matériaux semi-conducteurs présentent une conséquence du comportement des électrons dans la bande de conduction. Une approche analytique du problème exige en générale la connaissance de la fonction de distribution de l'énergie des électrons obtenus en résolvant l'équation de Boltzmann. Vu ça complexité, cette équation aux dérivés partiels admet des solutions seulement dans des cas particuliers, c'est la raison pour laquelle on a fait appel à des techniques numériques et en particulier la méthode de Monte Carlo.

Cette dernière méthode permet par la simple observation d'un paquet d'électrons au cours du temps, de mettre en évidence les caractéristiques les plus importantes du matériau traité soit en régime stationnaire ou en régime transitoire, ça souplesse en fait un outil adaptable à une grande diversité d'applications.

Ainsi le traitement des phénomènes de transport dans les matériaux peut être géré par la substitution de la simulation du comportement des électrons de la bande de conduction à la résolution de l'équation de Boltzmann, cette formulation du problème est d'une grande souplesse car elle peut être mise en œuvre quelles que soient les conditions imposées et peut particulièrement rendre compte des phénomènes stationnaires et non stationnaires et elle permet d'avoir accès directement à des grandeurs importantes en dynamique électronique tel que la vitesse et l'énergie.

Les matériaux III-V ont prouvé leur importance dans la base de tous les domaines technologiques, ce qui laisse la porte ouverte vers des recherches approfondis concernant cette filière. Parmi ces matériaux on trouve l'InAs, un matériau qui possède un gap étroit et une mobilité assez élevée.

Il est donc intéressant d'effectuer une étude complète des possibilités présentées par ce matériau et de déterminer l'influence du milieu extérieur sur les effets qu'il produit pour comprendre son fonctionnement, on aura plus la possibilité de considérer le déplacement des électrons dans leurs ensembles, mais il devient nécessaire de calculer pour chaque particule

La trajectoire qui fait appel aux lois de probabilité d'interaction entre les électrons et les imperfections cristallines.

Nous avons structuré notre manuscrit de la manière suivante :

Dans la première partie on étudie la structure des composés semi-conducteurs III -V dont le réseau cristallin est de type zinc blende, on présente aussi la forme générale de leur structure de bandes d'énergie, et plus précisément la structure de bande d'énergie de l'InAs.

Dans la seconde partie on présente les différentes propriétés électroniques et optiques des matériaux semiconducteurs III-V, qui leur offrent un domaine très vaste d'application dans la technologie des hyperfréquences.

La troisième partie fera l'objet des techniques de simulation par la méthode de Monte Carlo en intégralité avec ses étapes, qui seront suivie par la définition et le calcul des différentes probabilités d'interactions des électrons dans la bande de conduction avec les impuretés d'une part et les vibrations du réseau d'une autre part.

Dans le quatrième chapitre, nous donnons les résultats obtenus par la simulation de Monte Carlo, la vitesse de dérive des porteurs en régime stationnaire et transitoire, ainsi que l'énergie dans les deux types de régimes, et l'effet de la température, le dopage, la longueur du matériau sur le comportement des porteurs libres, et enfin on fait une comparaison de nos résultats avec d'autres résultats obtenu par la même méthode de Monte Carlo sur un autre matériau de la même filière III-V (le GaAs).

CHAPITRE I

Structuration des matériaux III-V

Introduction

Le domaine technologique et surtout l'optoélectronique et l'électronique a connu un grand développement, il est dû à une grande partie aux matériaux utilisés dans la fabrication des semiconducteurs.

Parmi les réussites des recherches, l'application d'une nouvelle catégorie de matériaux semiconducteurs telle que la famille des composés III-V, qui représente l'union d'éléments de la troisième et de la cinquième colonne de la classification périodique du tableau du Mendeleïev.

Ces matériaux ont prouvé par leurs qualités très spéciales (grande mobilité des porteurs, la facilité de balayer une large bande de longueur d'onde, etc...), leur importance dans la base de presque tous les domaines de l'optoélectronique. Ils trouvent un champ d'application très vaste, et permettent un certain choix de largeur de bande interdite, ainsi que la longueur d'onde pour les rayonnements émis ou détectés par le matériau concerné[9].

En particulier les composés III-V à bande interdite étroite tel que l'InSb ou l'InAs par exemple sont utilisés pour réaliser des photodétecteurs dans l'infrarouge ou des émetteurs.

Les composés III-V à bande interdite indirecte tel que l'AsSb et le GaP permettent de faire de bons émetteurs en utilisant des transitions par niveau d'impureté.

D'autre part le développement des super-réseaux s'est avéré important pour l'obtention des matériaux à structure de bande de type direct à fort rendement optique à partir des matériaux constitutifs à bande interdite indirecte au rendement optique plus faible.

Ceci est d'une importance considérable parce qu'il peut conduire à de nouveaux dispositifs optoélectroniques.

I- Généralités sur les matériaux III-V

Les matériaux III-V sont constitués des éléments des colonnes III et V de la classification périodique des éléments. Le tableau (I-1) regroupe un extrait de cette classification (les chiffres en haut et en bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique). Ainsi, de nombreux composés binaires peuvent être réalisés.

III	IV	V
5 B 10,81	6 C 12,01	7 N 14,01
13 Al 26,98	14 Si 28,09	15 P 30,97
31 Ga 69,74	32 Ge 72,59	33 As 74,92
49 In 114,82	50 Sn 118,69	51 Sb 121,75

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

L'étude de leur structure de bandes montre toutefois, que les éléments les plus légers donnent des composés dont la bande interdite est large et indirecte, et dans laquelle la masse effective des électrons est élevée. Des matériaux, comme les composés contenant du bore, ou de l'aluminium, sont ainsi moins intéressants pour l'électronique rapide. Le tableau (I-2) résume cette situation en donnant l'énergie E_g de la bande interdite, la masse effective m^*/m_0 (où m^* et m_0 sont respectivement la masse effective et la masse de l'électron dans le vide) des électrons du bas de la bande de conduction, la mobilité électronique à champ faible μ et le paramètre cristallin a .

Des semi-conducteurs binaires comme l'arséniure de gallium (GaAs), l'antimoniure de gallium (GaSb), le phosphore d'indium (InP), l'arséniure d'indium (InAs), l'arséniure d'aluminium (AlAs), mais également les alliages ternaires et quaternaires qui en découlent, présentent des propriétés très intéressantes pour les applications hyperfréquences. Ces alliages ternaires et quaternaires sont réalisés par substitution partielle de l'un des éléments par un élément de la même colonne. On sait, par exemple, obtenir des alliages du type $Ga_xAl_{1-x}As$ ou du type $Ga_xIn_{1-x}As$ [11].

Composé III-V	E_g (eV)	m^*/m_0	μ (cm ² /V.s)	a (Å)
B N	7,5			3,6150
Al P	2,45			5,4510
Al As	2,16			5,6605
Al Sb	1,58	0,12	200	6,1355
B P	2,0			4,5380
Ga N	3,36	0,19	380	a=3,189 c=5,185
Ga P	2,26	0,82	110	5,4512
Ga As	1,42	0,067	8500	5,6533
Ga Sb	0,72	0,042	5000	6,0959
In P	1,35	0,077	4600	5,8686
In As	0,36	0,023	33000	6,0584
In Sb	0,17	0,0145	80000	6,4794

Tableau (I-2) : différents paramètres de quelque composés III-V.

I-2 propriétés des principaux composés binaires III-V à 300 K

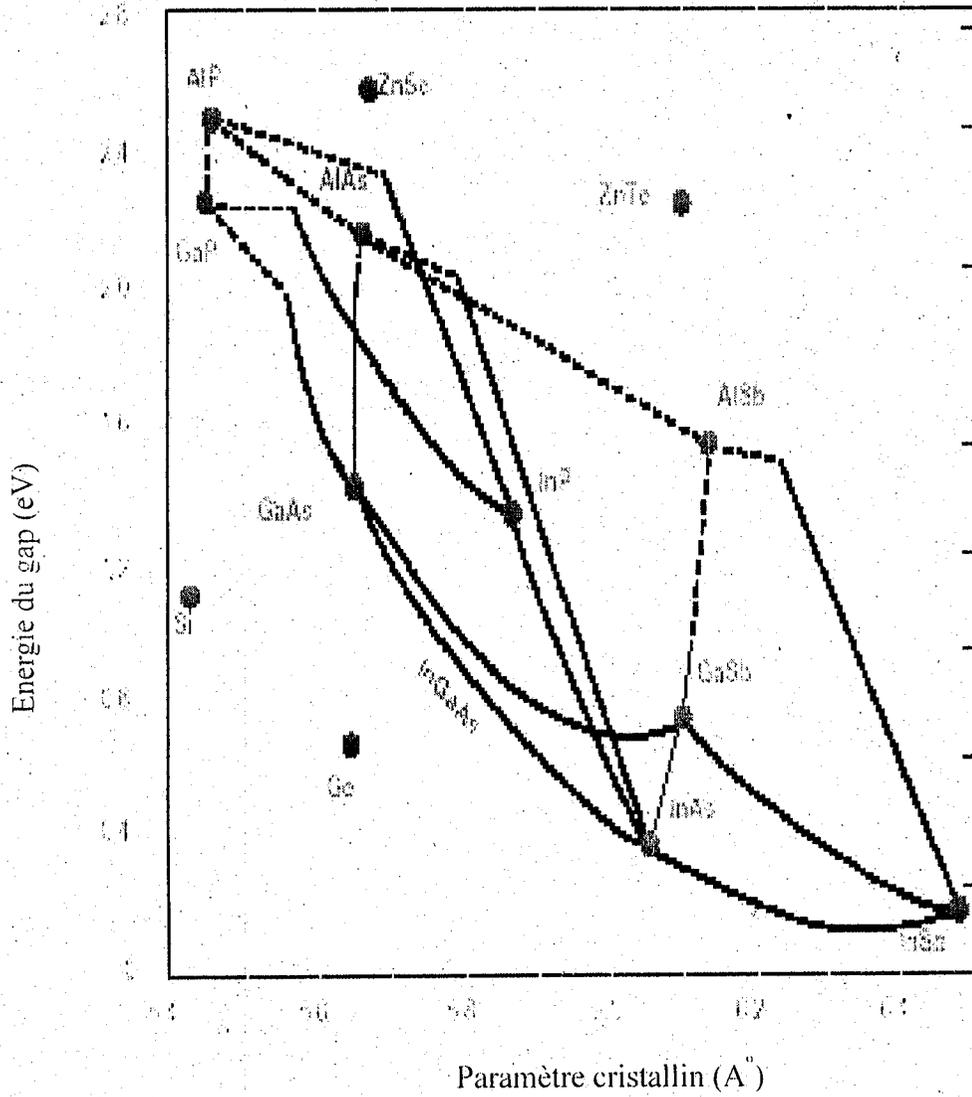


Figure (I-1) : évolutions de l'énergie de bande interdite et du paramètre cristallin des alliages de composés III-V.

La Figure (I-1) présente les variations de l'énergie de la bande interdite en fonction du paramètre cristallin "a" qui varie lui-même avec la composition. Dans ce diagramme les points présentent la position des composés binaires stœchiométriques, et les lignes représentent l'évolution du gap "Eg" et du paramètre cristallin "a", en fonction de la composition des alliages ternaires. Certaines lignes présentent un point anguleux qui dénote une transition entre un gap direct et un gap indirect.

Ce diagramme est donc très important parce qu'il permet de connaître la composition de tout alliage ternaire susceptible d'être déposé en couche mince, par épitaxie, sur un substrat binaire.

Les matériaux III-V offrent donc une grande variété de compositions permettant de modifier leurs propriétés électroniques.

I- 3 Performances des composés III-V

La génération d'ondes de plus en plus courtes ne put être satisfaite qu'avec l'apparition de composants semi-conducteurs, au dépend du magnétron. Toutefois, la réduction de la longueur d'onde du centimétrique vers le millimétrique exige le développement de composants de plus en plus rapides. Cela repose sur la diminution des dimensions des composants, sur l'utilisation de matériaux semi-conducteurs possédant de meilleures propriétés de transport et sur l'utilisation de structures nouvelles. En ce qui concerne l'amplification nécessaire pour l'émission et la réception des signaux, le transistor est le composant clef. Toutefois, bien que les transistors bipolaires et MOS (Metal Oxide Semiconductor) réalisés en silicium bénéficient d'un marché énorme, reposant sur la simplicité de mise en œuvre et sur la grande maturité de cette technologie, cette filière est limitée à des fréquences de quelques GHz, limitation intrinsèque au matériau.

Afin d'améliorer les performances des dispositifs électroniques, les recherches se sont orientées vers les matériaux III-V, c'est-à-dire l'association d'éléments de la colonne III et d'éléments de la colonne V du tableau de la classification périodique des éléments.

L'arséniure de gallium (GaAs) s'est alors imposé avec le développement de structures MESFET (Metal Semiconductor Field Effect Transistor). Ces transistors permettent de répondre à des applications jusqu'à des fréquences d'environ 30GHz[11]. Cependant, malgré la réduction des dimensions de la zone active, ce type de composant est limité en fréquence par le transport électronique s'effectuant dans un matériau dopé. Les transistors à hétérojonction(s) sont alors apparus, permettant d'obtenir une importante densité de porteurs dans le matériau intrinsèque, où la mobilité et les vitesses électroniques sont plus élevées[12].

D'autres filières de matériaux III-V, comme la filière de l'arséniure d'indium (InAs) et la filière du phosphore d'indium (InP), sont étudiées afin de pouvoir répondre à la montée en fréquence des applications[15].

Les principaux avantages des matériaux III-V sont les suivants :

- leur propriété semi-isolante (substrat SI) permet la fabrication des circuits intégrés hyperfréquences,
- leur résistance aux radiations,
- leur capacité de travailler à des températures plus importantes que celle du silicium standard, ce qui est important pour les applications militaires.
- leurs performances vitesse/consommation nettement supérieure à celles des calculateurs utilisant des circuits en silicium (applications numériques).
- leur très vaste domaine de fréquences couvert puisqu'il s'étend de 1 GHz à plus de 100 GHz.

Ce dernier aspect est fondamental, parce que les composants à base de silicium sont actuellement limités à une fréquence inférieure à quelques Giga Hertz[3].

La filière des composés III-V est la seule filière hyperfréquence dont la technologie soit actuellement mature pour des réalisations au niveau industriel. Cette maturité et son développement ont donc permis d'aboutir à des coûts de production abordables, qui restent cependant largement supérieurs à ceux de la filière silicium[6]. Les composés III-V sont donc parfaitement appropriés à la réalisation de circuits hyperfréquences. On peut classer ces circuits par type :

1- les circuits bas niveau :

- amplification faible bruit,
- fonction de contrôle,
- commutation, etc.

2- les circuits de puissance : parmi les applications évoquer par la nouvelle technologie, le domaine des télécommunications pour les composants discrets, et le balayage électronique radar pour les circuits intégrés micro-ondes.

3- les circuits numériques : pour toutes les applications qui étaient couvertes jusqu'à présent par des circuits intégrés bipolaires silicium.

I- 4 Structure des matériaux semi-conducteurs III-V

I-4-1 Structure des composés III-V

Les composés III -V cristallisent en majorité dans la structure zinc-blende où les liaisons atomiques ne sont pas simplement covalentes mais elles sont beaucoup plus forte. Elles reposent sur le transfert des électrons des atomes du groupe V sur ceux du groupe III, la structure zinc blende peut être considérée comme la juxtaposition de deux sous structure cubique à face centrée décalée l'un par rapport à l'autre d'un quart à la diagonale[1].

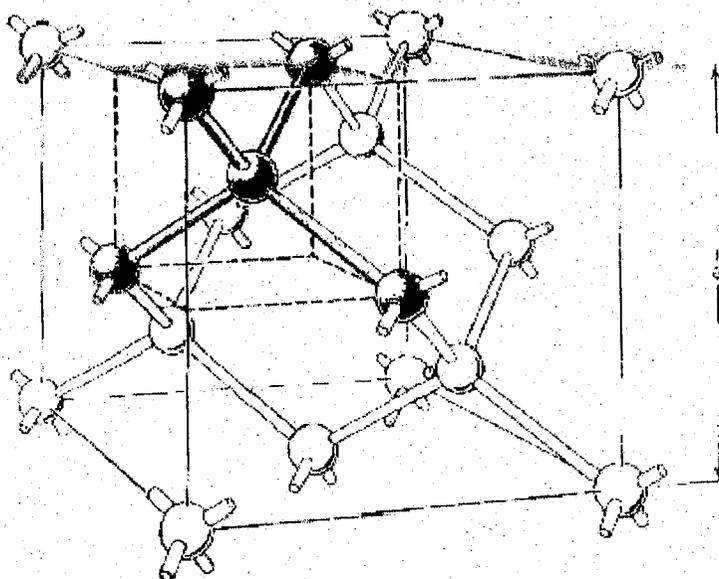
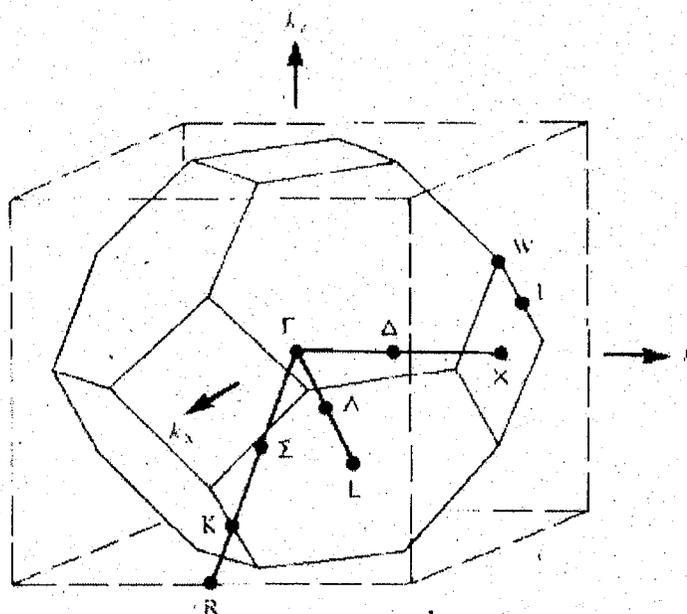
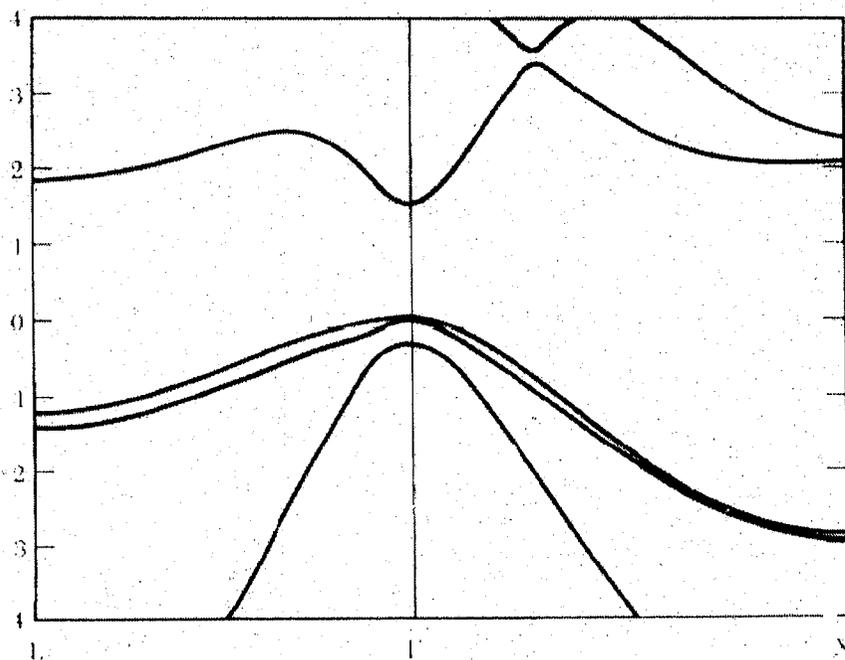


Figure (I-2) : Maille élémentaire de la structure Zinc-blende



Figure(1-3) : Première zone de Brillouin de la structure zinc-blende

Si on se limite à la première zone de Brillouin la structure des bandes des composés III -V aura l'allure suivante:



Figure(1-4) : Structure générale de bande d'énergie des composés III-V

I-4-2 Structure de l'arséniure d'indium

Le matériau semiconducteur «InAs» est constitué de l'arsenic pentavalent et d'indium trivalent qui forme une liaison covalente assez forte, c'est à dire que la liaison entre les atomes est semblable à celle qui relie les atomes dans des molécules comme $\text{SiO}_2, \text{N}_2, \text{HCl}$.

Ce sont des liaisons très directionnelles produites par la mise en commun d'électrons appartenant à plusieurs atomes. Ces forces sont légèrement plus faibles que les forces électriques rencontrées dans les cristaux ioniques. Ces cristaux sont tous très durs du point de vue mécanique[4].

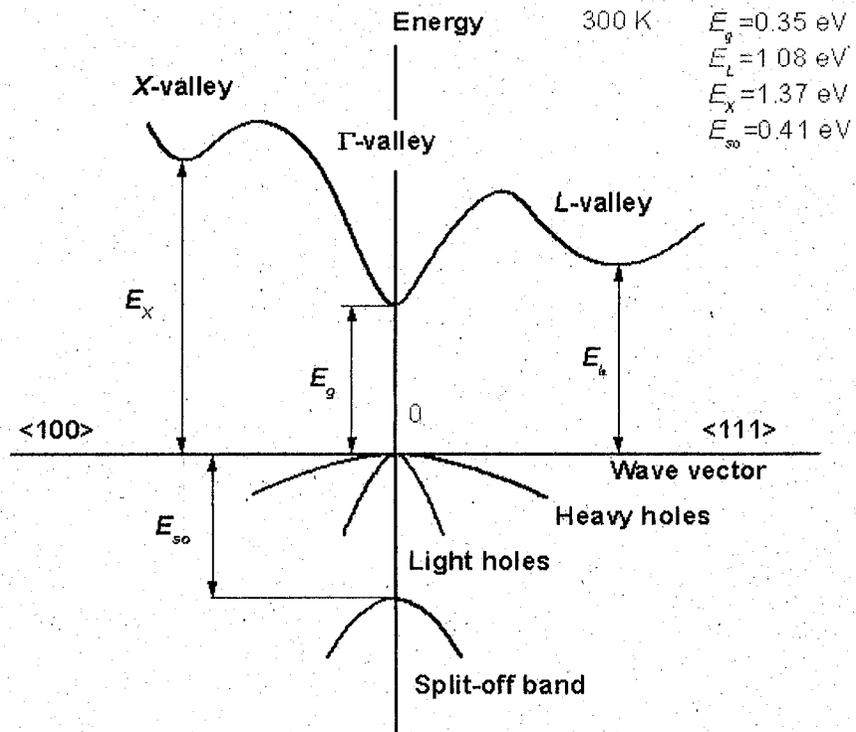


Figure (I-5) : allure de bandes d'énergie dans l'InAs

Il possède un gap direct c'est à dire que l'énergie minimale Γ_6 de la bande de conduction et les énergies maximales Γ_7 et Γ_8 de la bande de valence font face au centre de la zone de brillouin[14].

On note également la présence de deux vallées latérales sur la bande de conduction, une vallée L<111> et X<100>.

Dans l'espace réel il existe quatre vallées équivalentes de type L et trois de type X, la différence entre ses vallées latérales et la vallée centrale est que dans cette dernière la masse effective est plus faible, inversement la mobilité est plus élevée, par contre dans les vallées latérales, la masse effective est plus élevée ce qui rend la mobilité faible[9].

Le tableau (I-3) présente quelques paramètres qui caractérisent la structure des bandes d'énergie de l'InAs, le GaAs et l'InP.

Matériau	distance énergétique			masses effectives m^*/m_0			Coefficient de non parabolicité α		
	Gap ϵ_g	$\Delta\epsilon_{\Gamma L}$	$\Delta\epsilon_{\Gamma X}$	m_{Γ}^*/m_0	m_L^*/m_0	m_X^*/m_0	α_{Γ}	α_L	α_X
GaAs	1.43	0.33	0.52	0.063	0.22	0.58	0.610	0.461	0.204
InP	1.35	0.608	0.755	0.08	0.22	0.38	0.635	0.300	0.1
InAs	0.35	0.73	1.02	0.023	0.29	0.64	1.25	0.44	0.2

Tableau (I-3) : Principaux paramètres de structure de bandes d'énergie à 300K pour quelques matériaux III-V.

I- 5 METHODES D'APPROXIMATION

Le phénomène de transport dans les matériaux semi-conducteurs présente une conséquence du comportement des porteurs dans la bande de conduction, donc pour comprendre ce phénomène de transport dans ces matériaux semi-conducteurs, on a essayé de décrire le comportement des porteurs dans la bande de conduction, mais pour effectuer cette description il est nécessaire d'établir une approximation car nous avons 10^{23} particules/cm³.

Beaucoup de méthodes ont été élaborées et exploitées pour le calcul des structures de bandes, toutes ces méthodes essayent de calculer la relation de dispersion entre l'énergie, le vecteur d'onde $E_n(k)$ et les fonctions d'ondes propres $\Psi_n(k)$ [18].

I-5-1 L'approximation de Born Oppenheimer

L'approximation de Born-Oppenheimer dite aussi approximation Adiabatique est basée sur la description du mouvement ou du comportement des électrons et des noyaux qui sont très différents. Le noyau ne pourra plus réagir au comportement de chaque électron et se déplace dans le champ résultant produit par tous les électrons.

Supposons que les noyaux atomiques sont immobiles, en adoptant cette supposition, on va simplifier notamment l'équation de Schrödinger :

$$H_c = T_c + U_{ee} + U_{ez} \quad \dots(I-1)$$

avec :

$$(U_z = 0, T_z = 0)$$

Mais cette approximation est assez écrue, il serait beaucoup plus naturel de tenir compte du comportement des noyaux. En faisant introduire une nouvelle fonction d'onde qui caractérise les noyaux Ψ_z . Nous pouvons maintenant représenter l'Hamiltonien du cristal à l'aide de deux opérateurs H_c et H_z :

$$H = H_c + H_z \quad \dots(I-2)$$

La fonction d'onde Ψ du cristal sera maintenant un produit de la fonction d'onde des électrons Ψ_e et de la fonction d'onde des noyaux Ψ_z :

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

Avec:

$$H_e \cdot \Psi_e = E_e \cdot \Psi_e$$

et

$$H_z \cdot \Psi_z = E_z \cdot \Psi_z$$

Cette approximation présente une certaine difficulté au niveau de la sommation des termes concernant les opérateurs H_e et H_z .

I-5-2 Approximation de Hartree ou de l'électron seul

L'approximation de Born-Oppenheimer montre que la fonction d'onde des électrons doit satisfaire à l'équation :

$$(T_e + U_{ee} + U_{ez}) \cdot \Psi_e = E_e \cdot \Psi_e \quad \dots (I-3)$$

Cette équation reste très difficile à résoudre, c'est pourquoi on a essayé de la réduire à une équation caractérisant un seul électron. Si on admet que les électrons n'interagissent pas entre eux ($U_{ij}=0$), le problème de P électrons se ramènera à un modèle à un seul électron. Ce résultat est acquis grâce à l'introduction de la notion de champ "Self-Consistent" qui tient compte des interactions coulombiennes des électrons, et cela en remplaçant le système d'électrons en interaction par un système d'électrons indépendants. De cette façon, l'Hamiltonien du système peut s'écrire alors sous la forme d'une somme d'Hamiltoniens de chaque électron :

$$H_e = \sum_i H_i \quad \dots (I-4)$$

L'hamiltonien correspondant à l'électron i sera donc :

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \Omega_i(r_i) + U_i(r_i) \quad \dots (I-5)$$

avec:

$\Omega_i(r_i)$: Présente l'énergie potentielle de l'électron "i" soumis au champ produit par tous les autres électrons.

$U_i(r_i)$: l'énergie potentielle du même électron dans le champ produit par tous les noyaux du cristal.

La fonction d'onde du système sera égale à un produit de fonctions d'onde de tout les électrons, et l'énergie du système sera égale à la somme des énergies de tous les électrons :

$$\Psi_c(r_1, r_2, \dots) = \prod_i \Psi_i(r_i) \quad \dots(1-6)$$

$$E_c = \sum_i E_i \quad \dots(1-7)$$

avec:

$$H_i \Psi_i = E_i \Psi_i$$

Ce modèle de l'électron seul a résolu beaucoup de problème de l'état solide.

I- 6 Méthodes de calcul de structures de bandes

L'étude théorique quantitative des solides, comme la détermination des structures de bandes, l'énergie de cohésion, la largeur des bandes interdites des semiconducteurs...etc, est l'un des problèmes les plus ardues.

Cependant plusieurs efforts ont été concentrés dans ce domaine pour une détermination précise de ces propriétés, la connaissance de la dépendance en \bar{k} (vecteur de réseau réciproque de la zone de Brillouin) de la relation de dispersion $E_n(k)$ de toutes les bandes de valence et de conduction.

Ainsi que les fonctions d'ondes associées aux transitions inter- bande ne peuvent se réaliser que par une analyse des éléments de symétrie de la structure cristalline et par un choix judicieux du vrai potentiel cristallin.

Au cours de ces dernières années beaucoup de méthodes ont été développées dans le but de calculer les structures de bandes, parmi elles on peut citer :

- Méthode de Tight-Binding : liaisons fortes.
- Méthode cellulaire (wigner-seitz).
- Méthode des ondes planes augmentés (APW).
- Méthode des fonctions de green ou K.K.R : c'est une dérive de la (APW)
- Méthode des ondes planes orthogonalisés (OPW).
- Méthode de pseudopotentiel, qui dérive de l'OPW qui peut être utilisé avec des informations empiriques.

Dans ce chapitre on va présenter le principe de trois méthodes : l'OPW, la pseudo potentiel et la méthode k.p.

I-6-1 méthode des Ondes Planes Orthogonalisées

La méthode des Ondes Planes Orthogonalisées est basée sur la condition d'orthogonalité entre la fonction d'onde de l'électron de valence et les orbitales du cœur.

Cette méthode a été introduite par Herring en 1940 [28]. Il a découvert que, dans un solide, la fonction d'onde d'un électron de valence était presque une onde plane dans la région située entre les cœurs ioniques ainsi qu'à l'environnement proche des noyaux, la fonction d'onde aura des oscillations qui pouvaient être présentées par la même onde plane en soustrayant de celle-ci les orbitales du cœur saturé. Cette soustraction permet l'orthogonalisation de la fonction d'onde en question aux états du cœur.

I-6-2 Les pseudo potentiels : théorème d'annulation de Phillips :

Les chercheurs ont amélioré la méthode des Ondes Planes Orthogonalisées cette amélioration les a conduit à une autre méthode dite Pseudo potentiel. Le principe de cette dernière a été introduit par Phillips et Kleinman en 1959. Ce principe est basé sur un concept qui dit que les états cristallins des bandes de conduction et de valence doivent être orthogonaux aux états du cœur [28].

Cette théorie a réalisé des succès inattendus, elle a pu résoudre beaucoup de problèmes, ainsi elle a permis une prédiction des caractéristiques essentielles de la structure électronique des solides avant qu'elles soient déterminées expérimentalement[13].

Le théorème d'annulation de Philips est basé sur le principe de la méthode des ondes planes Orthogonalisées (OPW), elle permet une description de la fonction d'onde (superposition d'une fonction d'onde plane et d'une fonction de cœur), orthogonal aux états du cœur qui peuvent être à l'origine d'un potentiel orthogonal.

Le rôle de ce potentiel est de garder les électrons de valences en dehors du cœur, donc il représente un potentiel répulsif, si on fait une sommation du potentiel répulsif et du potentiel attractif du cœur leur somme sera presque nul, donc le potentiel résultant est très faible, ce potentiel est dit pseudopotentiel[12].

I-6-3 Théorie des k.p

En réalité les théories de l'électron quasi libre et des liaisons fortes sont très didactique, mais souffrent d'un grave handicap, il est extrêmement difficile pratiquement, à partir de données expérimentales comme la structure atomique des atomes, la forme du cristal ..., d'obtenir une quelconque prédiction physique comme la largeur de la bande interdite de n'importe quel matériaux : InAs, InP ... ect.

Ceci provient du caractère fortement réducteur des approximations qui ont été faite pour obtenir des résultats simples. La moindre sophistication des modèles conduit rapidement à des calculs inextricables. L'approche k.p est une méthode semi empirique due à Kane qui introduit dans les calculs de structure de bande des données accessible à l'expérience (optique,...).

Nous rappelons que l'équation de schrodinger à résoudre est :

$$H\psi_{n,k}(r) = \left(\frac{p^2}{2m} + V(r)\right)\psi_{n,k}(r) = E_{n,k}\psi_{n,k}(r) \dots (I-8)$$

Où les fonctions $\psi_{n,k}$ représentent les fonctions de Bloch c'est à dire que :

$$\psi_{n,k}(r) = U_{n,k}(r)e^{-ikr} \dots (I-9)$$

Or, on voit aisément que l'opérateur $P = -i\hbar\nabla$ agit sur les ondes de Bloch-Floquet de la façon suivante:

$$P^2(U_{n,k}(r)e^{-ikr}) = [(P + \hbar k)^2 U_{n,k}(r)]e^{-ikr} \dots (I-12)$$

En conséquence, la partie périodique de la fonction de Bloch $U_{n,k}$ est solution de l'équation de type schrodinger :

$$\left(\frac{P^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} k \cdot P + V(r) \right) U_{n,k}(r) = E_{n,k} U_{n,k}(r) \dots (I-11)$$

Pour $k=0$.

On constate que l'équation est totalement identique à celle de schrodinger qui s'exercerait sur la partie périodique des fonctions de Bloch_Floquet $U_{n,0}$:

$$\left(\frac{P^2}{2m} + V(r) \right) U_{n,0}(r) = E_{n,0} U_{n,0}(r) \dots (I-12)$$

La théorie k.p utilise maintenant $U_{n,0}$ comme base complète pour $U_{n,k}$:

$$U_{n,k}(r) = \sum C_m^k(k) U_{m,0}(r) \dots (I-13)$$

Et l'équation de schrodinger se transforme-en :

$$\sum \left(\frac{P^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} k \cdot p + V(r) \right) C_m^k(k) U_{m,0}(r) = \sum E_n(k) C_m^k(k) U_{m,0}(r) \dots (I-14)$$

Ou en prenant la projection sur $U_{M,0}$:

$$\left(E_{M,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) C_M^k(k) + \sum_m \frac{\hbar}{m_0} k \langle U_{M,0} | p | U_{m,0} \rangle C_m^k(k) = E_n(k) C_M^k(k) \dots (I-15)$$

Cette équation présente un problème habituel de diagonalisation de la matrice d'un hamiltonien effectif. Si nous connaissions tous les éléments de matrice $\langle U_{M,0} | p | U_{m,0} \rangle$, nous pourrions procéder à la diagonalisation. Or en premier lieu cela n'est pas le cas, et de plus seules les bandes avoisinant le gap présentent un réel intérêt. Pour k proche de 0 les termes dûs à l'opérateur k.p deviennent des perturbations, si nous définissons :

$$H_{Mm}^{kp} = \frac{\hbar}{m_0} k \langle U_{M,0} | p | U_{m,0} \rangle$$

L'équation (I-15) s'écrit :

$$\left(E_{M,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - E_n(k) \right) C_M^k(k) + \sum_m H_{Mm}^{kp} C_m^k(k) = 0 \dots (I-16)$$

Dans cette dernière équation, nous utilisons l'indice supérieur «n» pour désigner une des solutions pour laquelle $E^n(k)$ tend vers E_{n0} quand k tend vers 0. la simplification du problème vient maintenant de la séparation des bandes en un ensemble M_1 de bandes qui nous intéressent car se couplent fortement à la bande n et un ensemble M_2 d'autres bandes. Nous avons donc :

$$(E_{M,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - E_n(k))C_n^n(k) + \sum_{m \in M_1} H_{mn}^{kp} C_m^n(k) + \sum_{m \in M_2} H_{mn}^{kp} C_m^n(k) = 0 \quad \dots (I-17)$$

Pour $n \in M_1$ et $M \in M_2$ la dernière somme est beaucoup plus petites que la première. Ceci donne :

$$C_m^n(k) \cong \sum_{m' \in M_1} \frac{H_{Mm'}^{kp} C_{m'}^n(k)}{E_n(0) - E_{M0}} \quad \dots (I-18)$$

Pour $n \in M_1$ et $M \in M_1$ nous insérons le résultat ainsi obtenu, et nous trouvons :

$$(E_{M,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - E_n(k))C_m^n(k) + \sum_{m' \in M_1} H_{mn}^{kp} C_{m'}^n(k) + \sum_{m' \in M_1} \sum_{m'' \in M_2} \frac{H_{Mm'}^{kp} H_{m''m}^{kp} C_{m''}^n(k)}{E_n(0) - E_{m''0}} = 0 \quad \dots (I-19)$$

Après la renumérotation $m' \rightarrow m, m \rightarrow m'$ dans la double somme, l'équation est maintenant un problème de diagonalisation uniquement dans la base des fonctions appartenant aux bandes pertinentes $M \in M_1$:

$$(E_{M,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - E_n(k))C_m^n(k) + \sum_{m' \in M_1} (H_{mn}^{kp} + H_{nm'}^{kp}) C_{m'}^n(k) = 0 \quad \dots (I-20)$$

Avec :

$$H_{nm'}^{kp} = \sum_{m'' \in M_2} \frac{H_{Mm''}^{kp} H_{m''m'}^{kp}}{E_n(0) - E_{m''0}} \quad \dots (I-21)$$

Où nous avons supprimé l'argument k dans les coefficients C_m , de manière perturbative, nous avons donc ramené l'influence des bandes intéressantes à un hamiltonien effectif agissant sur les bandes intéressantes. Par cette méthode dite de lowdin, nous avons réduit la taille du problème en réduisant la zone de validité autour de $k=0$, si l'on restreint l'intérêt aux bandes toutes proches d'une énergie E_{M0} , la méthode est équivalente à la méthode des perturbations stationnaires, perturbation d'un niveau dégénéré si E_{M0} est dégénéré, perturbation simple si E_{M0} est non dégénéré.

Dans les semiconducteurs III-V de structure cristalline zinc blende, la bande de conduction est non dégénéré (doublement dégénéré avec le spin) avec son minimum au centre de la zone de Brillouin. Proche de $k=0$ la dispersion de cette bande est donc donnée par l'équation (I-21) dans la version la plus simple où l'ensemble M_1 ne contient que la bande de conduction :

$$(E_{c0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - E_c(k)) + \frac{\hbar^2}{m_0} \sum_{m \neq c} \frac{|\langle U_{c,q} | k.p | U_{m,0} \rangle|^2}{E_{c0} - E_{m0}} - C^c = 0 \dots (I-22)$$

d'où :

$$E_c(k) = E_{c0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 k^2}{m_0} \sum_{m \neq c} \frac{|\langle U_{c,q} | k.p | U_{m,0} \rangle|^2}{E_{c0} - E_{m0}} \dots (I-23)$$

La partie la plus importante vient évidemment des états les plus proches en énergie, les états de la bande de valence, et si on néglige les autres termes dans la somme, on a :

$$E_c(k) = E_{c0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \frac{P_2}{E_g} \dots (I-24)$$

où :

$$P^2 = \frac{2|\langle U_{c,q} | k.p | U_{m,0} \rangle|^2}{m_0} \dots (I-25) \text{ est l'élément de la matrice de Kane, et } E_g \text{ est le gap.}$$

De la dispersion $E^c(k)$, nous déduisons la masse effective :

$$\frac{m_c}{m_0} = \left(1 + \frac{P_2}{E_g}\right) \dots (I-26)$$

Il s'avère que P^2 est mesurable par les propriétés optiques et qu'il varie peu (20 :25 eV) d'un semiconducteur III-V à l'autre. La formule très simple prédit donc que, plus un semiconducteur présente un gap petit, plus la masse effective dans la bande de conduction est petite.

Cette prédiction est très bien observée expérimentalement, et le fait que $m_c/m_0 \ll 1$ soit donc du au fort couplage $P^2/E_g \gg 1$ entre les bandes de conduction et de valence.

CHAPITRE II

Propriétés électroniques et
optiques des matériaux
III-V

II-1 Introduction

A l'équilibre thermodynamique les électrons dans les matériaux se répartissent sur des bandes d'énergies permises (de conduction comme de valence). La position relative du niveau de Fermi et des extremums des bandes d'énergie permet de prévoir le caractère isolant, semiconducteur ou métallique d'un matériau, or d'après la théorie quantique des solides, l'effet d'un champ électrique est de faire circuler périodiquement les électrons dans la zone de Brillouin, ce qui n'est pas observé expérimentalement.

Dans ce chapitre nous présenterons quelques éléments de théorie qui permettent de faire le lien entre les aspects quantiques et les aspects classiques du comportement des électrons dans la matière [5]. Nous allons ainsi montrer comment les mécanismes de diffusion entre les différents états de la structure de bande permettent de rendre compte des propriétés électroniques, macroscopiques des semiconducteurs comme la loi d'Ohm ou de Fick, l'avalanche, ... à la fin de ce chapitre, nous pourrons alors présenter l'ensemble des équations qui permettent d'appréhender tous les mécanismes de transport dans les semiconducteurs.

II-2 Equation de Boltzmann

Le mouvement d'un électron dans une bande d'un semiconducteur sous l'influence d'un champ électrique E s'écrit :

$$|a(k, t)|^2 = \left| a\left(k - \frac{qEt}{\hbar}, 0\right) \right|^2 \quad \dots \text{(II-2-1)}$$

Si l'électron est dans un état \vec{k} dans la bande au temps $t=0$, il sera dans l'état $\frac{\vec{k} + q\vec{E}t}{\hbar}$ au

temps t . Autrement dit, l'effet du champ est décrit par la formule : $\hbar \frac{dk}{dt} = qE \quad \dots \text{(II-2-2)}$

Si on appelle $\hbar k$ la pseudo-impulsion, cette formule est analogue à la loi de Newton la vitesse d'un électron à l'état k dans l'espace réel est identique à la vitesse du groupe :

$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(k)$$

Et donc :

$$\frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = \frac{dv}{dt} = \frac{dv}{dk} \frac{dk}{dt} = \frac{qE}{\hbar^2} \nabla_k \nabla_k E(k) = M^{-1} qE \dots \text{(II-2-3)}$$

Où nous supposons que la matrice M^{-1} de masse effective inverse ne dépend pas de \vec{k} pour un porteur qui se trouve à un état proche d'un extremum d'énergie dans l'espace réciproque. Cette description est valable dans un semiconducteur ou dans un autre solide cristallin idéal à condition que le champ soit suffisamment faible pour ne pas induire de transition d'une bande à une autre et plus important qu'aucune imperfection (phonon impureté) ne provoque de transition d'un état k à un autre état k' , autant dire qu'elle n'est d'aucune utilité pratique [16].

En revanche, cette description forme la base de l'approximation semi-classique du transport électronique. Dans cette dernière, on suppose qu'un porteur au temps t se trouve à une position \vec{r} dans le semiconducteur et à l'état \vec{k} dans la bande n , et que son évolution est déterminée par le champ locale $E(\vec{r})$ selon les équations (II-2-1) et (II-2-3).

Il s'agit d'une approximation car la spécification simultanée de la position et de la vitesse d'un porteur n'est pas possible en mécanique quantique. Alors que, l'approximation s'avère très correcte si la taille des domaines de l'espace où les paramètres (champ électrique...) ne varient pas, reste suffisamment large par rapport à la distance parcourue par le porteur entre deux chocs de diffusion.

La particularité de l'approximation semi-classique est que les aspects ondulatoires du porteur entrent en jeu indirectement par la structure de bande $E(k)$ et via les processus de diffusion qui sont recalculés comme des probabilités par unité de temps de transition par la règle d'or de Fermi entre les fonctions d'onde correspondant à l'état initial \vec{k} et à l'état final \vec{k}' .

L'ensemble des porteurs dans une bande peut maintenant être décrit par une fonction de distribution $f(r, k, t)$, qui désigne soit la probabilité de trouver un porteur à l'endroit r dans l'état k , soit le nombre de porteurs dans un volume de phase $d^3r d^3k$. Les deux interprétations sont liées par la densité d'état $g_s d^3r / (2\pi)^3$

Où $g_s=2$ représente la dégénérescence de spin.

En observant un volume dans l'espace de phase au temps $t+dt$, l'évolution de $f(r, k, t)$ entre t et $t+dt$ s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} &= \frac{f(r, k, t+dt) - f(r, k, t)}{dt} \\ &= \frac{f(r - v dt, k - \frac{dk}{dt} dt, t) - f(r, k, t)}{dt} \\ &= -v(k) \nabla_r f(r, k, t) - \frac{dk}{dt} \nabla_k f(r, k, t) \dots \quad (\text{II-2-4}) \end{aligned}$$

On ajoute aux particules qui on ainsi dérivé vers (r, k) le nombre net de particules impurétés par collisions d'autres états k'

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \sum_{k'} S(k' \rightarrow k) f(r, k', t) - S(k \rightarrow k') f(r, k, t) \dots \quad (\text{II-2-5})$$

Où $S(k' \rightarrow k)$ est la probabilité par unité de temps de transiter par collision de l'état k' à l'état k . L'équation qui décrit l'évolution de f sans l'emprise de champ électrique et des collisions est donc :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v(k) \cdot \nabla_r f + \frac{qE(r)}{\hbar} \nabla_k f = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} \dots \quad (\text{II-2-6})$$

Cette dernière équation fait le lien entre les aspects quantiques et les aspects classiques des électrons dans les solides c'est l'équation de Boltzmann.

Une fois la solution $f(r, k, t)$ de cette équation est connue, on peut calculer les valeurs moyennes macroscopiques telles que la densité des porteurs :

$$n(r, t) = \int \frac{g_s d^3 k}{(2\pi)^3} f(r, k; t) \dots \text{(II-2-7)}$$

Et la densité de courant particulière :

$$j(r, t) = q \int \frac{g_s d^3 k}{(2\pi)^3} v(k) f(r, k; t) \dots \text{(II-2-8)}$$

Ainsi que l'énergie moyenne des particules :

$$\langle E(r, t) \rangle = \frac{1}{n(r, t)} \int \frac{g_s d^3 k}{(2\pi)^3} E(k) f(r, k, t) \dots \text{(II-2-9)}$$

Et la variance de la vitesse :

$$\sigma_v^2(r, t) = \frac{1}{n(r, t)} \int \frac{g_s d^3 k}{(2\pi)^3} (v^2(k) - \langle v \rangle^2) f(r, k, t) \dots \text{(II-2-10)}$$

II-3 Equations de transport dans un semiconducteur

En principe la description semi-classique des propriétés de transport dans un dispositif semiconducteur est l'équation de Boltzmann, pour les électrons dans la bande de valence et de conduction. Dans l'intégrale de collision il faudrait spécifier toutes les interactions pertinentes, y compris les interactions qui diffusent un électron entre deux bandes correspondant à des processus de génération et de recombinaison [19].

A cette équation s'ajoutaient les équations de Maxwell pour la détermination des champs qui exercent des forces sur des électrons.

Les premières équations sont des équations de continuité, que l'on peut dériver de l'équation de Boltzmann en intégrant la fonction de distribution sur tous les états \bar{k} et en séparant les trous et les électrons.

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \frac{1}{e} \nabla j_n = G_n - R_n \quad (\text{II-3-1})$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{e} \nabla j_p = G_p - R_p$$

Ce système d'équation représente les équations de continuité où G et R sont les taux de génération et de recombinaison et :

$$j_n = -nev_n$$

$$j_p = pev_p$$

Représente les densités de courant des électrons et des trous [20].

En utilisant la loi d'Ohm et la loi de Fick, on détermine le système donnant les densités de courants :

$$j_n = \mu_n n E + e D_n \nabla n$$

$$j_p = \mu_p p E - e D_p \nabla p \quad \dots (\text{II-3-2})$$

$$j_{\text{total}} = j_n + j_p$$

Les équations (II-3-2) sont inspirées des résultats obtenus pour des champs et gradients faibles. Mais les valeurs de mobilités et les coefficients de diffusion sont obtenus soit par des mesures expérimentales soit par des solutions numérique de l'équation de Boltzmann [21].

Pour les équations décrivant la réaction des particules au champ s'ajoutent les équations de Maxwell qui déterminent les champs en fonctions des propriétés des matériaux [19]:

$$\nabla D = \rho$$

$$\nabla B = 0 \quad \dots (\text{II-3-3})$$

$$\nabla \times H = j_{\text{total}} + \frac{\partial D}{\partial t}$$

$$\nabla E = -\frac{\partial B}{\partial t}$$

Où pour des semiconducteurs non magnétiques, $B = \mu_0 H$ et $D = \epsilon E$.

Avec :

ϵ : La permittivité associée à la polarisation des charges localisées.

Dans la plus part des problèmes de transport électronique des semiconducteurs, les longueurs d'onde correspondant aux fréquences pertinentes sont beaucoup plus grandes que la taille des dispositifs et les champs magnétiques ne jouent aucun rôle. Dans ce cas, les équations importantes sont la loi de poisson, $\nabla E = \frac{\rho}{\epsilon}$ et le fait que le courant total

$j = j_{cont} + \frac{\partial D}{\partial t}$ est conservé.

La charge $\rho = e(p - n + N_D + N_A) \dots$ (II-3-4)

Où :

N_D : est la densité de donneurs ionisés.

N_A : est la densité d'accepteurs ionisés.

Les équations énoncées forment la base de la description des dispositifs semiconducteurs classiques.

II-4 Propriétés électroniques des semiconducteurs

II-4-1 Effet Hall

Dans le cadre de la description semi-classique, on peut montrer que l'effet d'un champ magnétique B sur un électron dans un semiconducteur est simplement d'ajouter la force de Lorenz à l'équation (II-2-2) [7] :

$$\hbar \frac{dk}{dt} = q(E + v(k) \times B) \dots (II-4 -1)$$

Si par mesure de simplicité nous nous restreignons à des électrons dans des parties de la structure de bande où la masse effective est isotrope, $v = \frac{\hbar k}{m^*}$ le mouvement de l'électron est classique presque comme dans le vide :

$$m^* \frac{dv}{dt} = q(E + v(k) \times B) \dots (II-4 -2)$$

Continuons les simplifications et admettons que E est parallèle à l'axe ox et B est parallèle à l'axe oz .

Modélisons ensuite les collisions par une friction $\frac{-m^*v}{\tau}$ avec un temps de relaxation constant. La dynamique de l'électron s'écrit alors :

$$\begin{aligned} m^* \frac{dv_x}{dt} &= q(E + v_y(k) \times B) - \frac{m^* v_x}{\tau} \\ m^* \frac{dv_y}{dt} &= -q v_x B - \frac{m^* v_y}{\tau} \\ m^* \frac{dv_z}{dt} &= -\frac{m^* v_z}{\tau} \end{aligned} \dots (II-4 -3)$$

Et la solution stationnaire est :

$$\begin{aligned} \frac{v_x}{E} &= \frac{q\tau}{m^*} \frac{1}{1 + (\omega_c \tau)^2} = \frac{\mu}{1 + (\omega_c \tau)^2} \\ \frac{v_y}{E} &= \frac{q\tau}{m^*} \frac{\omega_c \tau}{1 + (\omega_c \tau)^2} = \frac{\mu^2 B}{1 + (\omega_c \tau)^2} \\ v_z &= 0 \end{aligned} \dots (II-4 -4)$$

Avec la mobilité $\mu = \frac{q\tau}{m^*}$ et la fréquence de cyclotron $\omega_c = \frac{qB}{m^*}$. On voit que le champ magnétique détourne la direction du courant de la direction du champ électrique c'est l'effet Hall.

Si l'on mesure le courant $j = n \cdot q \cdot v$ on peut donc déduire la mobilité par $\mu = -\frac{j_y}{j_x B}$ et la densité de porteurs $n = \frac{j}{\mu q E}$ séparément. Il faut donc noter que la mobilité est négative pour un gaz d'électrons et positive pour un gaz de trous. En mesurant la conductivité et l'angle de Hall entre le courant et le champ électrique, on détermine donc le type et la densité des porteurs ainsi que leur mobilité.

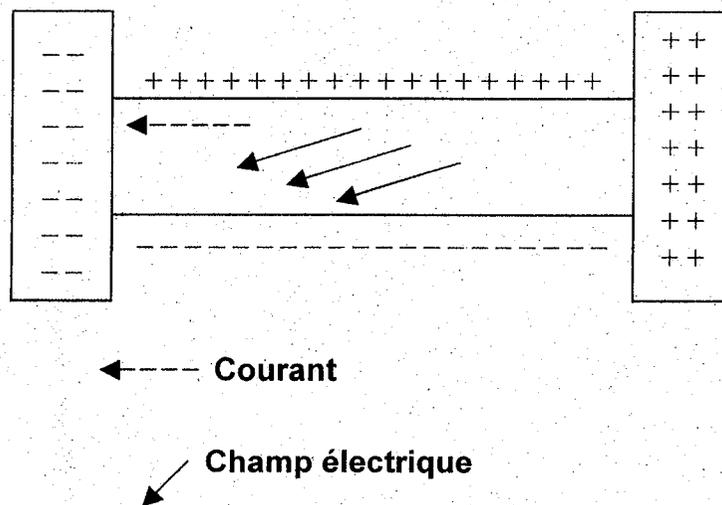


Figure (II- 1) : présentation de la direction du courant par rapport au champ électrique appliqué pour un semiconducteur soumis à un champ magnétique B.

Sous l'effet d'un champ magnétique B, les porteurs sont déviés de leur chemin d'un contact à l'autre. Des charges s'accumulent aux côtés de l'échantillon créant une composante du champ électrique perpendiculaire au courant. Le champ résultant est oblique par rapport à la direction du courant qui finalement doit passer d'un contact à l'autre.

II-4-2 Effet d'Avalanche

Si le champ électrique régnant dans un semiconducteur dépasse largement le champ de saturation de la vitesse, certains électrons vont pouvoir gagner un excédent d'énergie cinétique au dessus du bas de la bande de conduction plus grand que l'énergie du gap. Le processus d'ionisation par impact devient alors possible. L'électron interagit avec tous les électrons au travers de la bande interdite, ce qui correspond à une création de pair électron-trou, donc à un processus de génération [17].

Dans ce processus, l'énergie et la pseudo impulsion sont conservées. Nous avons avant la collision un électron dans l'état k_i avec l'énergie $E_c(k_i)$, et un électron dans l'état $-k_h$ avec une énergie $E_v(k_h)$, après la collision, il y a deux électrons dans les états k_1 et k_2 dans la bande de conduction et les lois de conservation seront :

$$K_i - k_h = k_1 + k_2$$

$$E_c(k_i) + E_v(k_h) = E_c(k_1) + E_c(k_2)$$

Pour avoir une idée de l'énergie de seuil pour ce processus, utilisons l'approximation parabolique des bandes $E_c(k_i) = E_g + \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m_e}$ et $E_v(k_i) = -\frac{\hbar^2 k_i^2}{2m_h}$ avec les masses effectives des électrons m_e et des trous m_h :

$$K_i = k_1 + k_2 + k_h$$

$$\frac{\hbar^2 k_i^2}{2m_e} = E_g + \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k_h^2}{2m_h} \dots \text{(II-4 -5)}$$

On peut se convaincre que le minimum d'énergie initiale est obtenu quand les impulsions sont toutes orientées dans la même direction. Le minimum se trouve alors de manière plus élégante (méthode de Lagrange) en minimisant la fonction :

$$F = E_g + \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k_h^2}{2m_h} + \lambda(k_1 + k_2 + k_h) \dots \text{(II-4 -6)}$$

Où λ est le multiplicateur de Lagrange. Dérivant E selon k_1 , k_2 et k_h on trouve :

$$-\lambda = \frac{k_1}{m_e} = \frac{k_2}{m_c} = \frac{k_h}{m_h} \dots (\text{II-4 -7})$$

Par conséquent l'énergie cinétique initiale minimale :

$$\min\left(\frac{\hbar^2 k_i^2}{2m_e}\right) = \frac{1+2\frac{m_c}{m_h}}{1+\frac{m_c}{m_h}} E_g \dots (\text{II-4 -8})$$

Ceci conduit à des seuils d'énergie d'émission par impact un peu au-dessus de E_g s'il s'agit de trous lourds, mais de l'ordre de $(3/2)E_g$ si les deux masses m_c et m_h sont proches. Le seuil est donc plus bas pour la génération de trous lourds.

Par symétrie le processus analogue où la particule initiale est un trou, donne le résultat qu'on obtient en inversant m_c et m_h , le seuil est généralement plus élevé dans ce cas. Mais il faut bien se rendre compte que pour ces énergies l'approximation par les bandes paraboliques est très mauvaise.

Un électron primaire qui génère une paire électron trous secondaire sera à nouveau accéléré par le champ électrique et peut générer davantage des particules secondaires. La même possibilité existe pour les particules secondaires de générer encore davantage d'autres particules secondaires créant ainsi une avalanche [23].

Ceci conduit à une augmentation de la conductivité par l'intermédiaire de l'augmentation de la densité de porteurs libres.

II-5 Propriétés optiques

Nous avons vu dans le chapitre I que les états de l'électron dans un solide, un cristal en général et un semiconducteur en particulier, sont repartis en bande d'énergie où il sont repérés notamment par un indice variant continûment, le vecteur \vec{k} . Dans cette partie on va présenter les techniques mathématiques qui permettent de prendre en compte les interactions entre la lumière et ces états distribués continûment en énergie. Nous pourrons ainsi décrire comment s'opèrent les interactions entre la lumière et un semiconducteur massif.

II-5-1 Élément dipolaire dans les semiconducteur à gap direct

Considérons un cristal semiconducteur de volume V dont les fonctions d'onde des états propres $|\psi_{n,k}\rangle$ d'énergie $E_{n,k}$ sont les fonctions de Bloch-floquet :

$$\psi_{n,k}(\mathbf{r}) = \frac{U_{n,k}(\mathbf{r})}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \langle \mathbf{r} | \psi_{n,k} \rangle \quad \dots \text{(II-5-1)}$$

Avec :

\vec{k} : le vecteur d'onde de l'état propre appartenant à la première zone de Brillouin du semiconducteur et désigne la position de l'état dans la bande d'énergie n dans une direction bien précise.

Les fonctions $U_{n,k}(\mathbf{r})$ possède la périodicité du réseau cristallin, c'est à dire que pour tout vecteur du réseau cristallin \mathbf{r}_i on a :

$$U_{n,k}(\mathbf{r} + \mathbf{r}_i) = U_{n,k}(\mathbf{r})$$

De plus elles sont normalisées sur le volume de la cellule élémentaire V_i , c'est à dire :

$$\int_{V_i} |U_{n,k}(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r} = V_i \quad \dots \text{(II-5-2)}$$

On a normalisé les fonctions stationnaires sur une boîte fictive de volume $v = N \cdot V_i$ de telle sorte que :

$$\int_v |\psi_{n,k}|^2 d^3\mathbf{r} = 1 \quad \dots \text{(II-5-3)}$$

Ce qui a pour conséquence que les vecteurs \bar{k} sont pseudo-quantifiés.

Le semiconducteur est soumis à une onde électromagnétique dont l'Hamiltonien perturbatif d'interaction est :

$$w(r,t) = w \cos(k_{op}r - \omega t) = -qE\hat{r} \cos(k_{op}r - \omega t) \dots (II-5-4)$$

Où :

\hat{r} : est l'opérateur position

k_{op} : le vecteur d'onde de la lumière

E : le champ électrique

L'Hamiltonien d'interaction optique va donc coupler les deux états $|\Psi_{n,k}\rangle$ et $|\Psi_{n',k'}\rangle$.

Calculons maintenant l'élément de matrices $W_{n',k';n,k}$:

$$W_{n',k';n,k} = \langle \Psi_{n',k'} | w | \Psi_{n,k} \rangle$$

$$= \frac{-qE}{V} \iiint_{\text{reseau}} U_{n',k'}^*(r) e^{ik'r} e^{-ik_{op}r} U_{n,k}(r) e^{-ikr} d^3r \dots (II-5-5)$$

Cette dernière intégrale se simplifie, en remarquant que la fonction $e^{i(k'-k_{op}-k)r}$

Varie très lentement vis à vis du produit des deux fonctions $U_{n,k}$.

On peut donc la décomposer de la manière suivante :

$$W_{n',k';n,k} = -\frac{qE}{V} \sum_i e^{i(k'-k_{op}-k)r_i} \iiint_{\text{cellule}_i} U_{n',k'}^*(r) r U_{n,k}(r) d^3r \dots (II-5-6)$$

Or cette intégrale peut s'écrire sous la forme :

$$I = \iiint_{\text{cellule}_i} U_{n',k'}^*(R)(R+r) U_{n,k}(R) d^3R$$

$$= \iiint_{\text{cellule}_0} U_{n',k'}^*(R) R U_{n,k}(R) d^3R \dots (II-5-7)$$

Où :

R : décrit la cellule élémentaire autour de 0.

Le terme intégral en r_i s'élimine dans l'équation (II-5-7) puisque les fonctions de Bloch sont orthonormales entre elles pour $k \neq k'$.

Cette intégrale est donc indépendante de la cellule i où s'effectue l'intégrale, l'équation (II-5-6) devient alors :

$$W_{n,k,n',k'} = -\frac{qEI}{V} \sum_i e^{i(k-k_{op}-k')n} = -\frac{qE}{V_i} I \delta(k-k_{op}-k) \quad \dots(\text{II-5-8})$$

Le terme en argument de la fonction Kronecker exprime la conservation des moments dans l'interaction Electron-Photon.

$k' = k + k_{op}$ est la conservation des moments dans les transitions optiques.

Or les vecteurs d'ondes des électrons et des photons dans le domaine de la lumière visible et proche visible sont fort distincts :

$$k_{op} = \frac{2\pi}{\lambda} = 10^4 : 10^6 \text{ cm}^{-1}$$

Alors que les vecteurs d'onde de la zone de Brillouin sont de l'ordre de : $k = \frac{2\pi}{a}$
soit 10^8 cm^{-1} .

a : la distance inter atomiques.

Le vecteur d'onde de la lumière est donc négligeable devant celui des électrons des différentes bandes d'où : $k' \approx k$.

II-5-1-1 Transitions optiques verticales

La dernière équation $k' \approx k$, exprime que les transitions optiques sont verticales. Evidemment, cette règle de transition verticale ne peut être respecté que si la bande interdite est directe, c'est à dire que le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence se situe au même point dans la zone de Brillouin.

Dorénavant, on ne s'intéresse plus qu'aux transitions optiques entre la bande de conduction et la bande de valence, on note $U_{c,k}$ les parties périodiques des fonctions de Bloch dans la bande de conduction et $U_{v,k}$ celle de la bande de valence, l'élément de la matrice dipolaire $W_{vc}(k)$ entre la bande de valence et la bande de conduction est alors :

$$W_{vc}(k) = -qE_{vc} \delta(k' - k) \quad \dots(\text{II-5-9})$$

$$r_{vc} = \frac{1}{V_i} \iiint U_{c,k}^*(R) R U_{v,k}(R) d^3R \quad \dots(\text{II-5-10})$$

Cette dernière équation représente l'élément de la matrice dipolaire de transition B_v vers B_c .

II-5-2 Susceptibilité optique dans un semiconducteur

Afin de calculer la susceptibilité optique associée aux transitions de la bande de valence vers la bande de conduction, on considère un cristal semiconducteur de volume V soumis à une condition de pseudo quantification, les structures de la bande de valence et la bande de conduction sont supposées parabolique et bien décrites par leurs masses effectives m_v et m_c , les transitions optiques sont verticales, nous nous sommes intéressés par la susceptibilité optique $\chi^k(\omega)$ dû à la transition vers les éléments de la bande de conduction de même \bar{k} , nous avons la relation entre les énergies de la bande de conduction $E_c(k)$ et celle de la bande de valence $E_v(k)$ couplées par la transition optique :

$$E_c(k) - E_v(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{1}{m_c} + \frac{1}{m_v} \right) + E_g \quad \dots(\text{II-5-11})$$

Où k est la norme du vecteur \vec{k} , il est intéressant d'introduire la masse effective réduite :

$$\frac{1}{m_r} = \frac{1}{m_c} + \frac{1}{m_v} \quad \dots(\text{II-5-12})$$

La susceptibilité optique associée à la transition entre les niveaux quasi discrets $E_v(k)$ et $E_c(k)$ est donnée par :

$$\chi_k(\omega) = \frac{q^2 \chi_{vc}(k) T}{\epsilon_0 \hbar} \frac{(\omega - \omega_{vc}(k))^{T-i}}{(\omega - \omega_{vc}(k))^2 T^2 + 1} (N_v(k) - N_c(k)) \quad \dots(\text{II-5-13})$$

Où : $\chi_{vc}(k) = \chi_{vc}$ représente l'élément de transition dans une direction (ox) que l'on a arbitrairement privilégié, pour alléger les notations.

T présente le temps de relaxations des électrons dans les bandes.

$N_c(k)$ et $N_v(k)$ présente la densité de particules pour les niveaux E_c et E_v .

La susceptibilité totale $\chi(\omega)$ est alors donnée par la somme de ces termes de susceptibilité sur tous les vecteurs \vec{k} de la structure des bandes :

$$\chi(\omega) = 2 \sum_k \frac{q^2 \chi_{vc}(k)^2 T}{\epsilon_0 \hbar} \frac{(\omega - \omega_{vc}(k))^{T-i}}{(\omega - \omega_{vc}(k))^2 T^2 + 1} (N_v(k) - N_c(k)) \quad \dots(\text{II-5-14})$$

Où le facteur 2 correspond à deux états de spin par vecteur \vec{k} .

II-5-3 Temps de vie radiative dans un semiconducteur

On considère un semiconducteur de volume V , et un niveau $E_v(k)$ dans la bande de valence et un niveau $E_c(k)$ dans la bande de conduction. Pour un état \vec{k} bien défini.

Sous l'effet d'une onde électromagnétique de spectre large, le taux de transmission optique dans tout le volume V du niveau E_v au niveau E_c est proportionnel à la probabilité que l'état E_v soit occupé, à celle que l'état E_c soit vide.

soit :

$$g_w(k) = B_{vc} f_v(E_v)(1-f_c(E_c))\rho_{ph}(\hbar\omega) \quad \dots\dots(\text{II-5-15})$$

Où g_{vc} : taux de transitions optique en (s^{-1}).

$\rho_{ph} (j^{-1})$ est la densité de photons par unité d'énergie dans le volume V et B_{vc} présente le taux de transition par photon dans la cavité, s'obtient à partir de la règle d'or de Fermi sous la forme :

$$B_{vc} = \frac{\pi}{2\hbar} q^2 E_0^2 \chi_{vc}^2 \quad \dots(\text{II-5-16})$$

Où :

E_0 est le champ électrique associé à un photon de volume V donnée par :

$$E_0^2 = \frac{2\hbar\omega}{\epsilon_0 n_{op}^2 V} \quad \dots(\text{II-5-18})$$

D'où :

$$B_{vc} = \frac{\pi q^2 E_p}{2\epsilon_0 n_{op}^2 m_e \omega V} \quad \dots (\text{II-5-20})$$

Notons la présence du terme V au dénominateur : ceci provient du caractère délocalisé des fonctions d'ondes de Bloch, qui nous ont obligées à prendre comme volume d'interaction électron - photon le volume V du cristal. On rappelle de plus que la conservation de l'énergie impose :

$$\hbar\omega = \hbar\omega_{vc} = E_{vc}(k) = E_c(k) - E_v(k) \quad \dots(\text{II-5-21})$$

Le taux correspondant à l'émission stimulée qui est donnée par :

$$g_{cv}(k) = B_{cv} f(E_c) (1 - f_v(E_v)) \rho_{ph}(h\nu)$$

A cela il faut bien sûr ajouter le taux d'émission spontanée r_{spont} , qui est indépendant de la densité de photons dans le semiconducteur, elle est donnée par :

$$r_{\text{spont}}(k) = A_{cv} f_c(E_c) (1 - f_v(E_v)) \quad \dots (\text{II-5-22})$$

A_{cv} présente le taux de transition spontanée dans le volume V .

Nous allons nous intéresser d'abord à l'équilibre thermodynamique. La densité de photons par unité d'énergie dans le volume V est donnée par le spectre du corps noir divisé par $h\nu$ pour obtenir une densité numérique et non une densité d'énergie, et h pour le ramener par unité d'énergie et non de fréquence.

La condition de stationnarité à l'équilibre thermodynamique s'écrit :

$$B_{vc} f(E_v) [1 - f(E_c)] \rho_{ph}(E_{vc}) = B_{cv} f(E_c) [1 - f(E_v)] \rho_{ph}(E_{vc}) + A_{cv} f(E_c) [1 - f(E_v)] \quad (\text{II-5-23})$$

et :

$$\frac{A_{vc}}{B_{vc} \exp\left(\frac{E_{vc}}{kT}\right) - B_{cv}} = \frac{8\pi n_{op}^3 E_{vc}^2 V}{h^3 c^3 [\exp\left(\frac{E_{cv}}{kT}\right) - 1]} \quad \dots(\text{II-5-24})$$

Ceci ne peut être vrai à toute température que si les coefficients d'Einstein B_{vc} , B_{cv} et A_{vc} vérifient le système d'équations (II-5-24) ci dessous :

$$B_{vc} = B_{cv}$$

$$A_{vc} = \frac{8\pi n_{op}^3 E_{vc}^2 V}{h^3 c^3} B_{cv} \quad \dots(\text{II-5-24})$$

Nous pouvons remplacer maintenant B_{vc} par son expression (II-5-20) ce qui donne :

$$A_{vc} = \frac{1}{\tau_r}$$

Où : τ_r présente la durée de vie radiative donnée finalement par la relation :

$$\frac{1}{\tau_r} = \frac{q^2 n_{op} E_g E_p}{2\pi c^3 \hbar^2 \epsilon_0 m_e} \quad \dots(\text{II-5-25})$$

On notera la même tendance pour les durées de vie radiative dans les semiconducteurs que dans les atomes, plus la bande interdite est large, plus la durée de vie radiative sera petite et le système sera difficile à inverser. Ceci est vérifié lorsque l'on passe de semiconducteur dans le proche infrarouge (InAs) au semiconducteur à Bande Interdite large comme le GaN [10].

II-5-4 Coefficient d'absorption

Nous considérons à partir de maintenant une situation radicalement différente, cela veut dire qu'on va chercher, l'absorption d'une onde monochromatique de fréquence ν incidente sur le cristal, c'est à dire que ρ_{ph} est une fonction de Dirac, (il y a un photon dans le volume V de la cavité).

L'absorption $R_{abs}(h\nu)$ provoquée dans le volume V par les transitions sur toute la zone de Brillouin est donnée par :

$$R_{abs}(h\nu) = 2 \sum_{k_n} r_{abs}(k_n) = \int \rho_c r_{abs}(k) d^3k \quad \dots (II-5-26)$$

étant donnée la condition de conservation de l'énergie :

$$\hbar\omega_{vc} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r} + E_g \quad \dots (II-5-27)$$

et la transformation des variables :

$$\rho_c dk = \rho_j(\omega_{vc}) d\omega_{vc} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_r}{\hbar} \right)^{3/2} \left(\omega_{vc} - \frac{E_g}{\hbar} \right)^{1/2} d\omega_{vc} \quad \dots (II-5-27)$$

Ceci conduit à un taux d'absorption :

$$R_{abs}(h\nu) = \int \rho_j(h\nu) V B_{vc} [f_v(E_v) - f_c(E_c)] \beta(h\nu) dE = \rho_j(h\nu) V B_{vc} [f_v(E_v) - f_c(E_c)] \quad \dots (II-5-28)$$

Le coefficient d'absorption $\alpha(h\nu)$ est obtenue en examinant l'expérience d'écrite comme suit :

Une plaque de semiconducteur de surface S et d'épaisseur ΔZ reçoit un photon d'énergie $\hbar\omega$. L'énergie absorbée pendant un temps Δt est égal à $R_{abs} \hbar\omega \Delta t$ (dans un volume $V = S \cdot \Delta Z$) et l'énergie qui va traverser la surface est de $\frac{\hbar\omega c}{n_{op} \Delta t}$

le rapport entre ces deux énergies est justement $\alpha(h\nu) \Delta Z$ ce qui s'écrit :

$$\alpha(\hbar\omega) = (\text{puissance absorbée par unité de volume}) / (\text{puissance incidente par unité de surface})$$

$$= \frac{R_{abs} \hbar\omega}{(\hbar\omega c) / n_{op}}$$

En tenant compte des équations (II-5-26) et de l'équation : $\hbar\omega = \frac{1}{2} n_{op}^2 \epsilon_0 E_0^2 V$

le coefficient d'absorption peu s'écrire comme suit :

$$\alpha(\omega) = \frac{\pi q^2 \chi_{vc}^2 \omega}{\epsilon_0 n_{op} c} \rho_j(h\nu) [f_v(h\nu) - f_c(h\nu)] \quad \dots (II-5-29)$$

II-5-5 taux d'émission spontanée

Bien évidemment, l'effet que nous venons de fournir n'est pas seulement destiné à vérifier la cohérence entre les approches fondées sur la matrice densité et celle fondée sur les équations du bilan d'einstein.

Nous avons en plus dans cette dernière approche la possibilité de calculer le taux d'émission spontanée $R_{abs}(h\nu)$ due à une répartition de porteurs en quasi-équilibre thermodynamique dans un semiconducteur. Ce taux est donnée par la sommation de l'équation (II-5-22) sur la zone de Brillouin :

$$R_{spon}(h\nu) = 2 \sum_k r_{spon}(k) = 2 \sum_k \frac{1}{\tau_r(k)} f_c(k)(1-f_v(k)) \delta(h\nu) \dots (II-5-30)$$

avec : $h\nu = E_c - E_v$

Cette sommation est effectuée pour tous les vecteurs \vec{k} vérifiant la condition de conservation de l'énergie :

$$E_c(k) - E_v(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r} + E_g$$

d'où :

$$R_{spon}(h\nu) = \frac{1}{\tau_r} \rho_f(h\nu) f_c(E_c(h\nu))(1-f_v(E_v(h\nu))) \dots (II-5-31)$$

La formule (II-5-31) exprime la répartition spectrale du taux de recombinaison radiative dans un semiconducteur.

Le taux d'émission spontanée peu se mettre sous la forme suivante :

$$R_{spon} = \frac{\alpha(h\nu) 8\pi n_{op}^2 (h\nu)^2}{h^3 c^2} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} \dots (II-5-32)$$

La relation (II-5-32) dite relation de shockley, permet de calculer le spectre d'émission spontané $R_{spon}(h\nu)$ à partir du spectre d'absorption, elle exprime uniquement le micro-équilibre pour chaque énergie de photon $h\nu$ entre l'émission spontanée et l'absorption due au spectre du corps noir.

Les fonctions de fermi Dirac dans l'équation (II-5-31) peuvent être approximées par les fonctions de Boltzmann :

$$f_c(E_c) \approx \exp\left(-\frac{E_c - E_{Fc}}{kT}\right)$$

$$1 - f_v(E_v) \approx \exp\left(-\frac{E_{Fv} - E_v}{kT}\right)$$

d'où :

$$f_c[E_c(h\nu)][1 - f_v(E_v(h\nu))] \approx \exp\left(-\frac{h\nu}{kT} + \frac{\Delta E_F}{kT}\right)$$

où ΔE_F est la différence des quasi niveaux de Fermi $\Delta E_F = E_{Fc} - E_{Fv}$

Par conséquent on aura la relation suivante :

$$R_{spon}(h\nu) = K_{spon}(h\nu - E_g)^{1/2} \exp\left(-\frac{h\nu - E_g}{kT}\right) \dots (II-5-33)$$

Qui représente la répartition spectrale du taux d'émission spontanée.

$$\text{Avec } K_{spon} = \frac{(2m_r)^{3/2}}{\pi \hbar^2 \tau_r} \exp\left(\frac{\Delta E_F - E_g}{kT}\right)$$

II-5-6 Indice optique

La connaissance de l'indice optique des semiconducteurs se révèle être primordiale pour la réalisation de composants électroniques. C'est un sujet assez complexe car les modèles diffèrent suivant les gammes de longueurs d'onde envisagées, deux régions optiques présentent des comportements particulièrement différents.

II-5-6-1 Moyen et lointain infrarouge

L'interaction entre un semiconducteur et une onde électromagnétique dans l'infrarouge moyenne et lointain met en jeu un phonon optique du matériau.

Pour l'infrarouge lointain cette région se dénomme la région de Reststrahlen où le matériau est massivement absorbant et dispersif.

Dans ces gammes de longueur d'onde, l'absorption et l'indice optique sont bien décrits par un modèle à un oscillateur harmonique dont la fréquence propre est celle du phonon optique transverse (ν_{TO}). Le modèle nécessite la connaissance des paramètres suivants :

- la constante diélectrique à fréquence nulle ϵ_s ,
- la constante diélectrique à fréquence infinie.
- la fréquence de résonance, et la constante d'amortissement.

Une extension triviale du modèle de Lagrange donne alors la constante diélectrique :

$$\epsilon = \epsilon_1 - i\epsilon_2 = (n_{op} - ik_{op})^2 = \epsilon_\infty + (\epsilon_s - \epsilon_\infty) \frac{\nu_{TO}^2}{\nu_{TO}^2 - \nu^2 + i\gamma\nu} \quad \dots(\text{II-5-34})$$

loin de la résonance, cette relation se simplifie aisément est donne :

$$n_{op} \approx \sqrt{\epsilon_1} \approx \left[\epsilon_\infty - (\epsilon_s - \epsilon_\infty) \frac{1}{\left[\left(\frac{\nu}{\nu_{TO}} \right)^2 - 1 \right]} \right]^{1/2} \quad \dots(\text{II-5-35})$$

Cette relation est dite relation de Sellmeier. Elle permet de calculer l'indice optique pour un nombre très important de semiconducteur et même pour des isolants.

CHAPITRE III

**Simulation par la méthode
de Monte Carlo**

III-1 Méthode de Monte Carlo

Le domaine des composants microélectroniques où l'on bénéficie depuis longtemps de l'apport des techniques de simulation permettant d'étudier le comportement de ces dispositifs. Celles ci sont souvent basées sur la résolution d'équations macroscopiques et incorporant une représentation simplifiée du matériau en terme de paramètres (masse effective, coefficient de diffusion...). Le progrès des techniques de calculs vont rendre ces approches de plus en plus réalistes, les processus microscopiques (ex : barrière pour la diffusion,...) et la structure de bandes réelles sont mieux décrits [26].

La simulation par la méthode de Monte Carlo est l'une des rares méthodes offrant la possibilité de reproduire fidèlement les divers phénomènes microscopiques résidant dans les matériaux semiconducteurs. C'est une technique puissante qui donne des résultats exacts.

Elle est devenue un outil très important pour l'étude des propriétés de transport de particules non stationnaires. La simulation employée dans notre cas, permet donc de suivre les évolutions de particules représentatives dans les diverses couches de matériaux, au cours du temps [25].

L'histoire de ces particules est constituée d'une séquence de vols libres résultant de l'action des champs électriques régnant dans la structure, entrecoupée d'interactions perturbant ainsi la trajectoire de particules [25].

L'approche microscopique ou particulaire de Monte Carlo consiste à suivre le comportement de chaque électron soumis à un champ électrique dans l'espace réel et dans l'espace des vecteurs d'ondes, pour cela :

-on a associé pour chaque porteur dont on va simuler la trajectoire, un vecteur d'onde initial \vec{k}_0 et une position initiale \vec{r}_0 .

-On a utilisé la procédure du self scattering. Cette dernière consiste à construire une distribution des durées de vol libre suivant une loi dont l'expression est simplifiée par l'introduction d'une interaction fictive aux effets nul dite « self scattering ».

-Pour le porteur numéro "p" on connaît donc :

$$\vec{K}_p(t), \vec{r}_p(t), E_p(t) = E(\vec{K}_p) \quad \dots \text{(III-1)}$$

-on effectue un vol libre de durée Δt on aura donc:

$$\begin{cases} \vec{K}_p(t + \Delta t) = \vec{K}_p(t) + \frac{e\vec{E}}{\hbar} \Delta t \\ \vec{E}_p(t + \Delta t) = \vec{E}(\vec{K}_p(t + \Delta t)) \\ \vec{r}_p(t + \Delta t) = \int_t^{t+\Delta t} \vec{v}_p(t) dt \end{cases} \quad \dots \text{(III-2)}$$

-on cherche s'il y a eu une interaction pendant l'intervalle du temps Δt par tirage au sort d'un nombre aléatoire:

-s'il n'y a pas on ne modifie pas l'état du porteur.

-S'il y a eu interaction, on place l'interaction précisément a l'instant $t + \Delta t$ et on cherche \vec{K}'_p après le choc par tirage au sort d'un nombre aléatoire, son état maintenant est défini par:

$$\begin{aligned} \vec{K}'_p(t + \Delta t) \\ \vec{E}'_p(t + \Delta t) = \vec{E}(\vec{K}'_p(t + \Delta t)) \\ \vec{r}'_p(t + \Delta t) = \vec{r}_p(t + \Delta t) \end{aligned} \quad \dots \text{(III-3)}$$

III-2 Présentation de la simulation

Au cours du temps les électrons de la bande de conduction vont avoir un comportement qui résulte de l'action extérieure du champ électrique appliqué ainsi que l'effet des interactions relatives à la présence du réseau cristallin.

Le temps est distribué suivant une loi dont l'expression est simplifiée par l'introduction d'une interaction fictive qui n'a pas d'effets sur le comportement des porteurs, cette procédure est appelée "self scattering", l'état d'un électron est décrit à chaque instant par son vecteur d'onde et son énergie.

L'effet des interactions et l'action extérieure du champ se traduisent simplement par une variation Δt du vecteur d'onde, ce dernier devient sous l'action accélératrice du champ entre t et $t + \Delta t$ sous la forme:

$$k(t + \Delta t) = k(t) + qE \Delta t / \hbar \quad \dots \text{(III-4)}$$

Chaque pas Δt commence par une phase dite phase de vol libre dont l'électron n'est soumis qu'à l'action du champ électrique, au bout de ce pas la probabilité pour qu'il subisse une interaction est déterminée par tirage au sort d'un nombre aléatoire [22].

Après avoir subi les effets d'une interaction l'électron est mis à nouveau dans une autre phase de vol libre pendant un temps Δt , pour qu'un nouveau cycle d'évolution puisse avoir lieu.

III-2-1 Procédure du choix de l'interaction

Quand le réseau agit sur le parcours du porteur ses possibilités d'interaction sont multiples. La densité de probabilité par unité de temps $S(\vec{K}, \vec{K}')$ pour qu'une interaction donnée j fasse passer l'électron d'un état \vec{K} à un état \vec{K}' est supposée connue pour chacune d'entre elles. L'intégration sur tout les états finaux \vec{K}' fournit la probabilité $\lambda_{j,K}$ par unité de temps pour qu'un porteur dans l'état \vec{K} subisse l'interaction j . $\lambda_{j,K} \Delta t$ est alors la probabilité P_j pour que l'interaction ait lieu au bout du temps Δt .

Si N est le nombre d'interaction possible, la probabilité d'interaction totale est donnée par :

$$P = \sum_{j=1}^N P_j .$$

Le pas est choisi au préalable suffisamment petit pour qu'à chaque instant $P < 1$. $1-P$ représente alors la probabilité pour que le porteur poursuive son parcours sans perturbation provenant du réseau.

Du point de vue pratique, chaque interaction j est représentée par un intervalle P_j . Tous les intervalles P_j sont rangés dans un ordre donné bout à bout à l'intérieur d'un intervalle d'amplitude 1.

Ils occupent au totale une fraction $P = \sum_{j=1}^N P_j$ de l'intervalle unitaire. Un nombre réel est choisi au hasard entre 1 et 0 suivant une distribution uniforme. La probabilité d'appartenir à l'un quelconque de ses intervalles ne dépend que de la largeur de chacun d'entre eux et pas de l'ordre puisque la distribution est uniforme.

Afin d'appliqué la méthode de Monte Carlo sur l'arséniure d'indium, nous avons traduit les différentes étapes de cette dernière sous formé d'un logiciel écrit en langage C en respectant toutes les étapes décrites sur l'organigramme présenté par la figure (III-1).

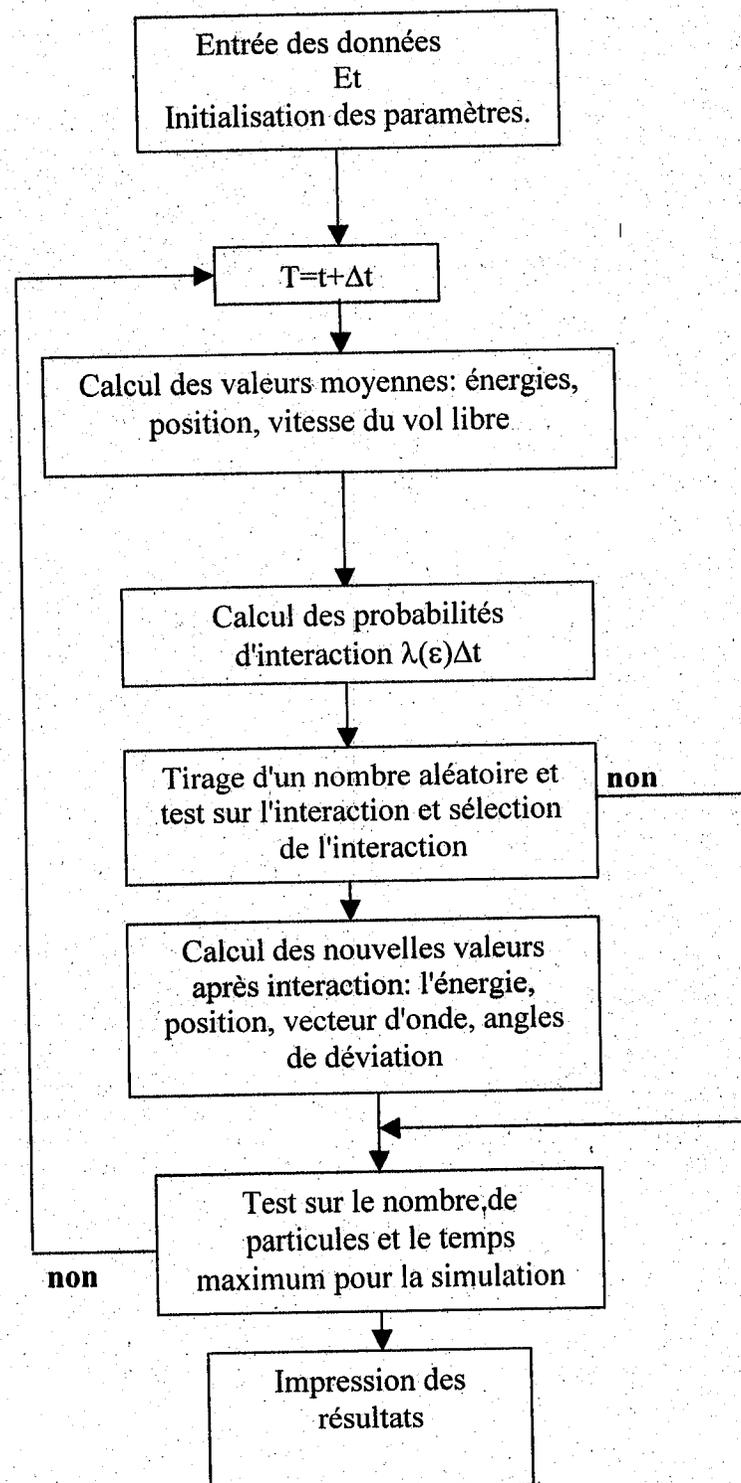


Figure (III-1) : Organigramme général de la méthode de Monte Carlo

III-2-2 procédure du Self scattering

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

Ce qui fournit une expression particulièrement simple pour $p(\Delta t)$.

$$p(\Delta t) = \Gamma e^{-\Gamma \Delta t} \dots (III-5)$$

et si r est un nombre aléatoire à distribution uniforme entre 0 et 1 on aura :

$$\Delta t = -\frac{1}{\Gamma} \text{Lnr} \dots (III-6)$$

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

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

Etant donné que pour utiliser la relation (III-5) il faut se fixer à l'avance la valeur de Γ , 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 Δt déterminée, on calcule l'ensemble des probabilités des interactions susceptibles de se produire à l'instant considéré. Comme on a nécessairement par définition:

$$\sum_{i=0}^N \lambda_i(\vec{k}) = \Gamma \quad (III-7)$$

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

$$r < \sum_{i=0}^m \lambda_i(\vec{k}) = \lambda_{sc} + \sum_{i=1}^m \lambda_i(\vec{k}) \quad (III-8)$$

ET pour tout m , de choisir le processus d'interaction qui interviendra effectivement. Il apparaît dans ce test que la collision choisie peut être une collision fictive dont la probabilité est λ_{SC} . Si c'est le cas, elle laissera le vecteur d'onde inchangé et le mouvement se poursuivra directement pour le Δt suivant. Dans le cas contraire, de nouveaux nombres aléatoires permettent de définir la position du vecteur d'onde après le choc. Il y a avantage dans cette procédure à choisir la valeur de Γ de manière à minimiser le nombre de collisions fictives puisque ces collisions ne jouent aucun rôle sur la trajectoire de l'électron.

Il faut signaler que cette méthode a été utilisée par de nombreux auteurs pour étudier un grand nombre de matériaux. En particulier, elle est décrite aussi sur un plan un peu plus général par Albengi Quaranta, Jacoboni et Ottaviani en ce qui concerne l'étude des composés III-V et II-VI [28].

III-2-3 Mouvement des électrons

Les propriétés relatives aux déplacements des porteurs sous l'influence des forces appliquées sont appelées phénomènes de transport.

Le mouvement de l'électron dans l'espace des vecteurs d'ondes et dans l'espace réel est présenté dans les figures (III-2) et (III-3).

IL est modifié par les champs électriques et magnétiques, (les gradients de température, les charges d'espaces, etc....).

Chaque modification de direction correspond à une interaction dont les propriétés sont les suivantes:

- Collision avec les atomes du réseau, atomes d'impuretés, défaut.
- Collision entre porteurs.

Les ions ont une influence insignifiante au niveau local, mais globalement ils empêchent le porteur de quitter le cristal.

La probabilité d'avoir une collision pendant un intervalle de temps donné est constante.

Le porteur perd en moyenne à chaque choc l'excédent d'énergie fourni par le champ électrique lors du libre parcours moyen, cet apport au cristal se traduit par un échauffement : c'est l'effet joule.

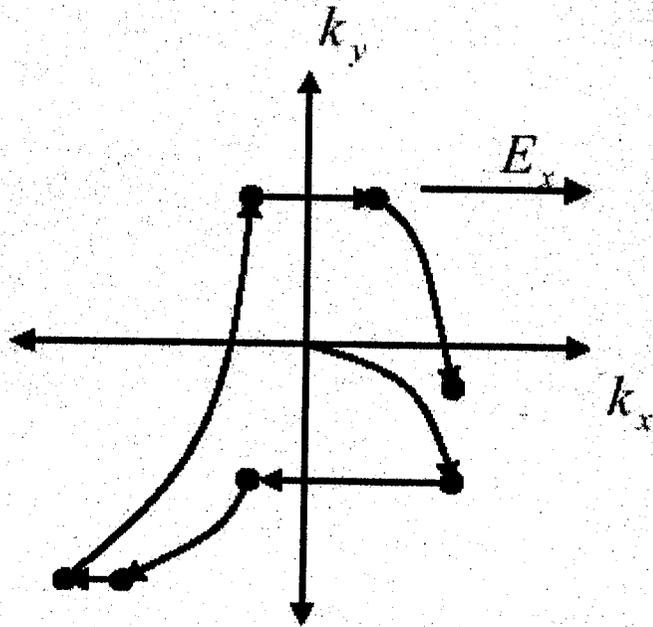


Figure (III-2) : Mouvement du porteur dans l'espace des vecteurs d'onde

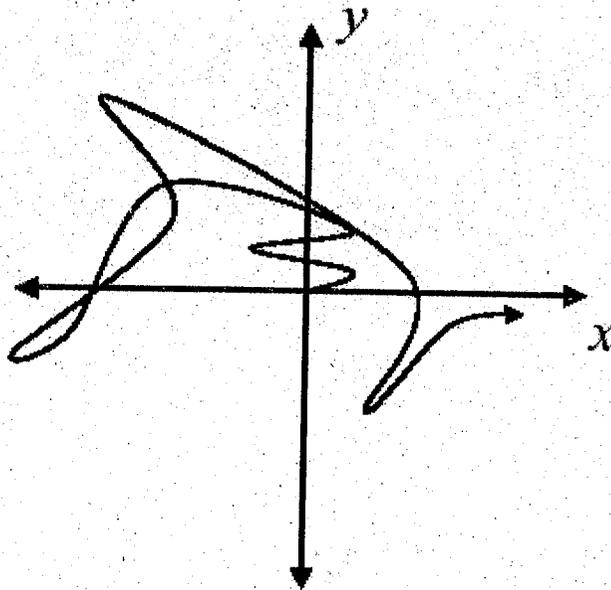


Figure (III-3) : Mouvement d'un porteur dans l'espace réel

La simulation que nous avons utilisé nécessite une bonne connaissance des caractéristiques du matériau étudié, en l'occurrence l'InAs. Plus précisément les caractéristiques de la bande de conduction jouent un rôle important dans l'étude des phénomènes de transport.

Les niveaux minimaux des vallées présentées dans le tableau (III-1) indiquent l'énergie à partir de laquelle un électron peut être transféré, dans une vallée donnée, l'évolution de l'énergie en fonction de son vecteur d'onde détermine la masse effective de l'électron, dont il pourra accéder à des vitesses plus au moins grandes suivant ça masse effective.

	Vallée Γ	Vallée L	Vallée X
Masse effective	0.023 m_0	0.29 m_0	0.64 m_0
Coefficient de non parabolicité	1.25 eV ⁻¹	0.44 eV ⁻¹	0.2 eV ⁻¹
Niveau d'énergie de vallées	0.35 eV	1.08 eV	1.37 eV

Tableau (III-1) : Les paramètres essentielle caractérisant les différentes vallées dans l'InAs

II-3 Mécanisme 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.

Au cours de ces interactions, son vecteur d'onde passe de l'état \vec{k} à l'état \vec{k}' et la probabilité d'interaction par unité de temps λ 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}' :

$$\lambda(\vec{k}) = \int_{\vec{k}'} S(\vec{k}, \vec{k}') \delta^3 \vec{k}' \quad \dots \text{(III-9)}$$

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 β qui les sépare. Dans les semiconducteurs III-V comme le GaAs ou l'InAs, les vallées Γ sont isotropes et le module de \vec{k} est relié de façon biunivoque à l'énergie ϵ (mesurée par rapport au bas de la vallée dans laquelle se trouve l'électron) :

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \epsilon(1 + \alpha\epsilon) \quad \dots \text{(III-10)}$$

On peut donc exprimer les densités de probabilités S en fonction des énergies ϵ et ϵ' et de l'angle β .

III-3-1 TYPES D 'INTERACTIONS

Lorsqu'on applique un champ électrique à un semiconducteur certains électrons vont pouvoir gagner un excédent d'énergie, au dessus de la bande de conduction. Ils vont donc transmettre cette énergie au cours des interactions, ils seront transférés vers des hautes vallées. Au cours de ce transfert, l'électron peut changer de trajectoire selon le type d'interaction qu'il a subi.

III-3-1-1 Les interactions acoustiques

Les interactions acoustiques sont de nature élastique c'est à dire qu'elles se manifestent à une énergie constante.

Après avoir subi une interaction acoustique, le vecteur d'onde du porteur concerné ne change pas de module dans la même vallée et reste constant. L'angle de déviation β entre le vecteur d'onde $\vec{K}_i(t)$ et le nouveau vecteur d'onde $\vec{K}'_i(t)$ est tiré par une distribution uniforme qui varie entre $[0, \pi]$, cette interaction est très faible en Γ .

Quand un porteur passe de l'état $\vec{K}_i(t)$ à l'état $\vec{K}'_i(t)$ sa densité de probabilité par unité de temps est donnée par:

$$S_{ac}(\vec{k}_i, \vec{k}'_i) = \frac{2\pi}{\hbar} B_{ac}(\vec{K}_i, \vec{K}'_i) N_{ac} \delta[E_i(\vec{K}'_i) - E_i(\vec{K}_i)] \quad \dots \text{(III-11)}$$

Où :

$$B_{ac}(\vec{K}_i, \vec{K}'_i) = \frac{2\hbar}{2\rho_{SV}} E_{ac}^2 |\vec{K}_i - \vec{K}'_i| G(\vec{K}_i, \vec{K}'_i)$$

$$G(\vec{K}_i, \vec{K}'_i) = \left[\frac{\sqrt{(1+\alpha_i E_i)(1+\alpha_i E_i)}}{\sqrt{(1+2\alpha_i E_i)(1+2\alpha_i E_i)}} + \frac{\sqrt{\alpha_i E_i \alpha_i E_i}}{\sqrt{(1+2\alpha_i E_i)(1+2\alpha_i E_i)}} \cos \beta \right]$$

La probabilité par unité de temps est donnée par:

$$\lambda_{ac}(E_i) = \frac{K_B T E_{ac}^2 m_i^*}{\rho_s^2 \hbar^4 3\pi\sqrt{2}} \gamma_i^{1/2} \frac{3(1 + \alpha_i E_i)^2 + (\alpha_i E_i)^2}{1 + 2\alpha_i E_i} \quad \dots \text{(III-12)}$$

III-3-1-2 Interaction piézoélectrique

Ce type d'interaction est aussi élastique, leurs influences sont presque absentes à forte énergie, du fait que la probabilité est inversement proportionnelle à la racine carrée de l'énergie.

Quand le porteur change d'état la densité de probabilité par unité de temps est donnée par:

$$S_{pi}(\vec{K}_i, \vec{K}_i) = \frac{e^2 K_B T P_{pi}^2}{4\pi^2 \hbar^2 E_0 E_s} \frac{G(\vec{K}_i, \vec{K}_i)}{|\vec{K}_i - \vec{K}_i|^2} \delta[E_i(\vec{K}_i) - E_i(\vec{K}_i)] \quad \dots \text{(III-13)}$$

la probabilité par unité de temps est donnée par :

$$\lambda_{pi}(E_i) = \frac{e^2 K_B T P_{pi}^2 m_i^{*1/2}}{4\pi\sqrt{2} \hbar^2 E_0 E_s \gamma_i^{1/2}} \frac{I}{(1 + 2\alpha_i E_i)} \quad \dots \text{(III-14)}$$

$$I = (1 + 2\alpha_i E_i)^2 \ln \left| \frac{2}{1 - \cos a} \right| - 2\alpha_i \varepsilon_i (1 + 2\alpha_i \varepsilon_i) (1 + \cos a) + \frac{(\alpha_i \varepsilon_i)^2}{2} [4(1 - \cos a)^2]$$

avec P_{pi} : potentiel piézoélectrique.

a : angle < 0.01 radian.

III-3-1-3 Interaction avec les impuretés

De nombreuses théories ont été développées pour rendre compte des interactions entre les porteurs d'énergie et les impuretés dans les solides. le modèle de H. Brooks et C. Herring tient compte des effets de charge d'espace au niveau de l'expression du potentiel $V(r)$, crée par chaque impureté supposée ionisée. Ils ont supposé que pour des concentrations en impuretés inférieures à $3 \cdot 10^{17} \text{cm}^{-3}$, les impuretés sont encore effectivement toutes ionisées et que les interactions électron-électron sont encore très peu probables.

Ce modèle est préféré au modèle de E.M.Conwell et V.F.Weisskopf dans lequel ce potentiel est simplement coulombien.

L'interaction avec les impuretés est une interaction élastique dont la probabilité est indépendante de la concentration en impuretés ; cette concentration n'intervient que dans l'expression de la distribution de l'angle β de déviation qui se réduit à une fonction de dirac $\delta(\beta)$. Pour une concentration en impuretés $N=0$; l'effet de l'interaction est nul. Cette distribution tend à être uniforme quand le dopage est élevé, contribuant dans ce cas à diminuer d'autant plus la vitesse moyenne de l'électron.

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

Son effet principal sera donc de diminuer la valeur de la mobilité en champ faible.

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

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2} \cdot \pi \cdot N_D \cdot e^4 \cdot \varepsilon^{-3/2}}{(4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot \varepsilon S)^2 \cdot m^{*1/2}} \cdot \frac{(1+2\alpha \cdot \varepsilon)}{(1+\alpha \cdot \varepsilon)^{3/2}} \cdot I \quad \dots \text{(III-15)}$$

Avec :

$$I = \frac{[1 + 2e_k^2 (\theta/2k)^2]^2}{4(\theta/2k)^2 [1 + (\theta/2k)^2]} + e_k^2 [1 + 2e_k^2 (\theta/2k)^2] \text{Ln} \left[\frac{(\theta/2k)^2}{1 + (\theta/2k)^2} \right] + e_k^4$$

Où

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

Où le paramètre d'écran θ est lié à la concentration en impuretés N_D des électrons par :

$$\theta^2 = \frac{N_D \cdot e^2}{\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_s \cdot K_B T}$$

La probabilité d'interaction sous ça forme simple est donnée par :

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{e^2 m^{*1/2} k_B T}{4\pi \varepsilon_0 \varepsilon_s \hbar^2 \sqrt{2}} \cdot \frac{1 + 2\alpha \varepsilon}{\gamma \cdot \varepsilon^{1/2}} \quad \dots(\text{III-16})$$

III-3-1-4 Interaction optique polaire

Dans les deux types d'interactions précédentes nous avons négligé l'énergie $\hbar\omega$ devant celle des porteurs mais dans le cas des interactions optique polaire l'énergie du phonon $\hbar\omega$ est comparable à celle des électrons à la température ambiante. Ce type d'interaction est de nature inélastique, l'interaction optique polaire est très importante dans toutes les vallées.

Quand le porteur change d'état ça densité de probabilité par unité de temps est donnée par l'équation (III-17):

$$S_{op}(k_i, k_i') = \frac{2\pi}{\hbar} \beta_0(\bar{K}_i, \bar{K}_i') (N_{op} + 1/2 \pm 1/2) \delta[E_i(\bar{K}_i') - E_i(\bar{K}_i) \pm \hbar\omega_{op}]$$

Après intégration sur tous les états K_i probable la probabilité par unité de temps sera donnée par l'équation suivante (III-18) :

$$\lambda_{op}(E_i) = \frac{e^2 \omega_{op} m_i^{*1/2}}{4\sqrt{2E_0\hbar}} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right) \frac{\gamma_i^{1/2}}{1+2\alpha_i \varepsilon_i} \left[-2g_1(E_i) + 2g(E_i) \ln \left| \frac{\gamma_i^{1/2} - \gamma_i'^{1/2}}{\gamma_i'^{1/2} - \gamma_i^{1/2}} \right| \right] (N_{op} + 1/2 \pm 1/2)$$

Avec :

$$g(E_i) = \left[\frac{\alpha_i E_i E_i' (\gamma_i + \gamma_i')^2}{8\gamma_i^{3/2} \gamma_i'^{3/2}} + \frac{\alpha_i (\gamma_i \gamma_i')}{2\gamma_i^{1/2} \gamma_i'^{1/2}} + \frac{(1 + \alpha_i E_i)(1 + \alpha_i E_i')}{2\gamma_i^{1/2} \gamma_i'^{1/2}} \right]$$

$$g_1(E_i) = \alpha_i + \frac{\alpha_i^2 E_i E_i' (\gamma_i + \gamma_i')}{4\gamma_i \gamma_i'}$$

III-3-1-5 les interactions inter-vallées équivalentes et non équivalentes

Ce type d'interaction est aussi de nature inélastique c'est à dire que l'énergie du porteur change après avoir subi ce dernier une interaction. on peut conclure de la structure des bandes que ses interactions ne peuvent se produire qu'à des valeurs élevées d'énergie, elles ont donc une probabilité très faible à faible champ.

Les vallées du départ et d'arrivée influent sur les énergies des phonons absorbés ou émis pendant des interactions inter-vallées.

La condition pour qu'une interaction inter-vallée ait une chance d'intervenir est :

$$E_i \pm \hbar\omega_{ij} + \Delta_i - \Delta_j \geq 0.$$

Δ_i : l'écart d'énergie entre le bas de la vallée du départ i et celui de la vallée $\Gamma\langle 000 \rangle$.

Δ_j : l'écart d'énergie entre le bas de la vallée d'arrivée j et de la vallée Γ .

E_i : énergie mesurée par rapport au bas de la vallée i .

Quand un électron est transféré dans une autre vallée, les effets directs de la collision s'ajoutent les variations dues à la non équivalence éventuelle entre les vallées d'arrivées et de départ.

Lorsqu'un transfert éventuel ait lieu de la vallée Γ vers les vallées de symétrie $L\langle 111 \rangle$ et $X\langle 100 \rangle$, la vitesse moyenne diminue car d'une part dans ces vallées les masses sont plus grandes que dans la vallée centrale et d'autre part les directions de la vitesse sont aléatoires.

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

$$\lambda_{ij}(\varepsilon_i) = \frac{Z_{ij} \cdot m_j^{*1/2} \cdot E_{ij}}{\pi \sqrt{2} \cdot \rho \cdot \omega_{ij} \hbar^3} \cdot \left(N_{ij} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta_j(\varepsilon') \cdot \frac{(1 + \alpha_i \cdot \varepsilon_i(k))(1 + \alpha_j \cdot \varepsilon_j(k'))}{(1 + \alpha_i \cdot \varepsilon_i(k))} \quad (\text{II.31})$$

Où 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} le nombre de vallée d'arrivée de type j quand on part de la vallée i .

III-3-1-6 Les interactions optiques non polaire

L'interaction optique non polaire est intravallée et inélastique, elle n'intervient que dans les vallées de type $L\langle 111 \rangle$.

Elle s'exprime comme les collisions inter-vallées équivalentes avec $Z_{ij}=1$, l'énergie du phonon optique non polaire est d'environ 43 meV. Elle est accompagnée d'une absorption ou émission d'un phonon optique non polaire.

III-3-2 Etat de l'électron après interaction

Si on choisit une interaction, elle est supposée instantanée, celle ci va provoquer une discontinuité dans l'évolution de l'état de l'électron. Cet effet sera traduit 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.

En effet, le module du vecteur d'onde est relié d'une façon biunivoque à l'énergie relative à l'électron par rapport au fond de la vallée où il se trouve par la relation :

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

avec (III-19)

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

Où α : représente le coefficient de non parabolicité.

m^* : la masse effective du porteurs au fond de la vallée ou il se trouve.

E_g : énergie de gap

Donc tout changement éventuel d'énergie au cours de l'interaction se traduit au niveau du vecteur d'onde par une variation brutale de son module qui dépend seulement des énergies initiales et des énergies finales.

Il y aura un changement d'orientation du vecteur d'onde (figure [III-4]) qui décrit la déviation subit par l'électron, le nouveau vecteur d'onde k' est repéré par rapport au vecteur d'onde initial par un angle de déviation β .

La densité de probabilité $S(k, k')$ relative au passage d'un état k à un autre k' ne dépend généralement que des modules de k et k' , c'est à dire qu'elle ne dépend que des valeurs d'énergies avant et après interaction ε et ε' , ainsi que l'angle β entre le vecteur d'onde initiale k et le nouveau vecteur d'onde k' .

En fait, il existe une infinité d'états k possibles et équivalents, qui décrivent uniformément un cône d'axes k d'angles β .

L'intégration sur tous les états possibles k s'écrit donc :

$$p(\varepsilon) = 2\pi \frac{V}{8\pi^3} \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} S(\bar{k}, \bar{k}') k'^2 \sin \beta d\beta dk' \quad \dots \text{(III-20)}$$

Où $V/8\pi^3$: présente la densité d'état dans l'espace des moments.

Après avoir effectué une intégration par rapport à l'énergie, d'une autre façon par rapport au module k' , la probabilité d'interaction peut se mettre sous la forme suivante :

$$p(\varepsilon) = c_{\varepsilon} \int_0^{\pi} f_{\varepsilon}(\beta) d\beta \quad \dots \text{(III-21)}$$

La forme normalisée donne la fonction suivante :

$$g_{\varepsilon}(\beta) = \frac{f_{\varepsilon}(\beta)}{\int_0^{\pi} f_{\varepsilon}(\beta') d\beta'} \quad \dots \text{(III-22)}$$

Cette fonction définit donc la loi suivant laquelle l'angle β est distribué.

Si $f(\beta)$ représente la fonction de répartition de l'angle β , et par définition $df = g_{\varepsilon} d\beta = dr$.

où r : présente un nombre aléatoire uniformément distribué entre 0 et 1.

Pour chaque nombre aléatoire r tiré au hasard suivant la relation :

$$r = \int_0^\beta g_\varepsilon(\beta') d\beta' \quad \dots \text{(III-23)}$$

On associe un angle β dont la fonction de distribution est g_ε , suivant cette procédure on aura déterminé l'angle β entre les vecteurs k et k' après interaction.

Le cas particulier où $S(k, k')$ ne dépend que de l'énergie finale ε , tous les états finaux sont équiprobables sur une sphère de rayon k' dans l'espace des moments et pour chaque nombre aléatoire compris entre 0 et 1 correspond un angle β tel que :

$$r = \frac{1}{2} \int_0^\beta \sin \beta' d\beta' = \frac{1}{2} (1 - \cos \beta) \quad \dots \text{(III-24)}$$

D'où : $\cos \beta = 1 - 2r$

L'angle φ est déterminé lui aussi par tirage au sort d'un nombre aléatoire r' suivant une distribution dépendante du type de l'interaction choisie on se place dans un repère lié au vecteur d'onde k avant la collision figure (III-5) :

$$\varphi = 2\pi.r'$$

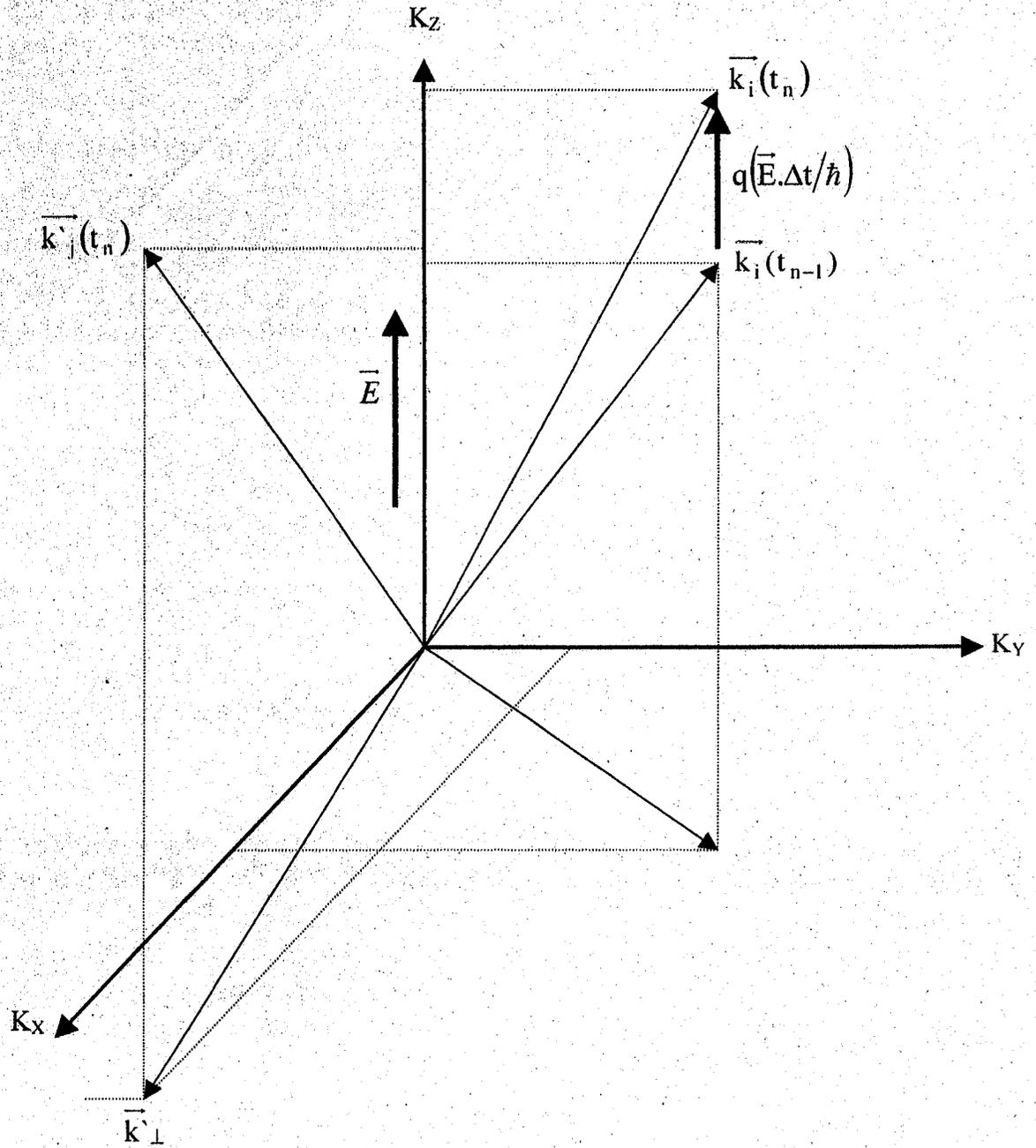


Figure (III-4) : Direction du vecteur d'onde

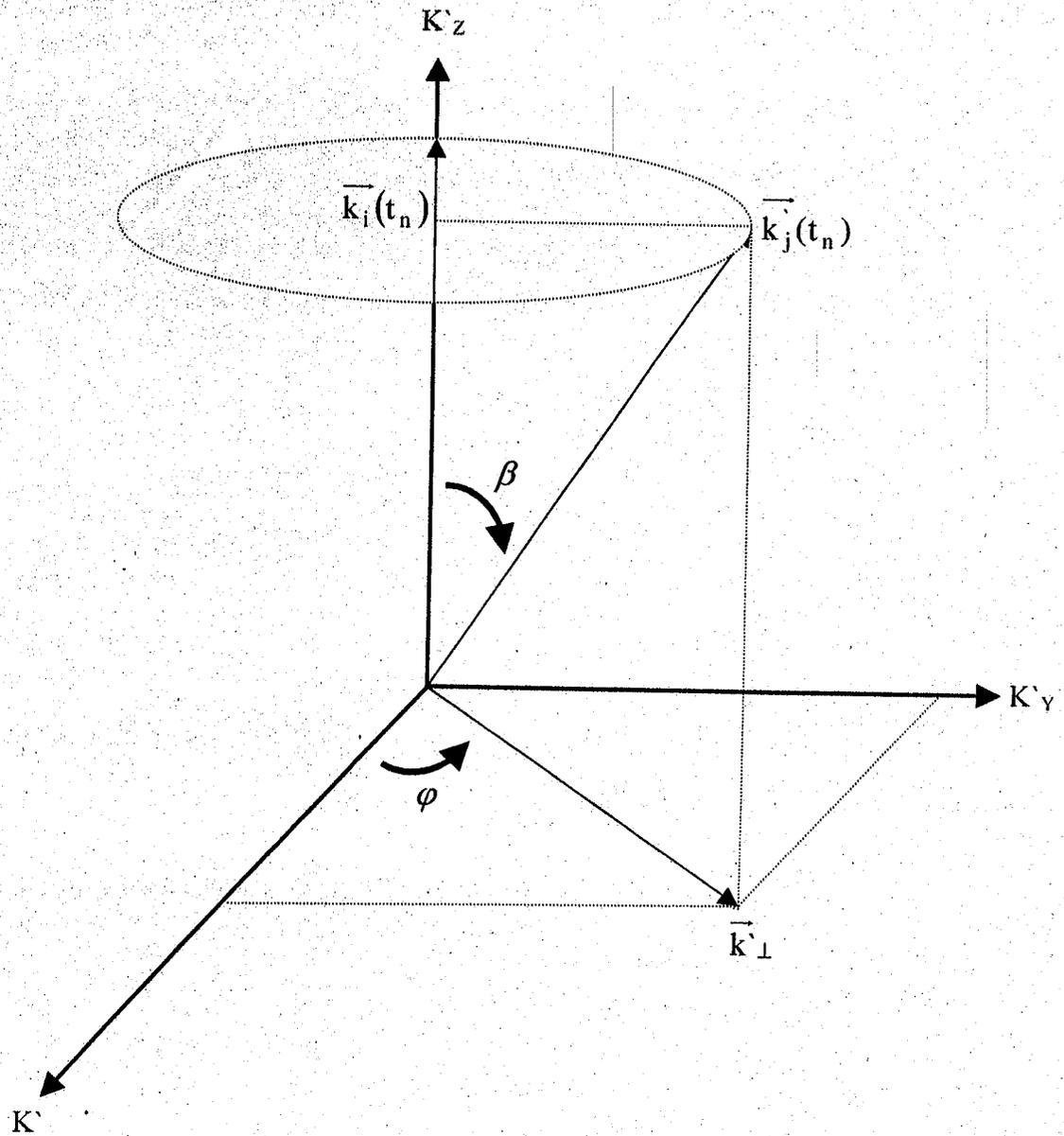


Figure (III-5) Les angles de déviation

III-3-3 Temps de vol libre

Le mouvement des particules est constitué d'un ensemble de vols libres sous l'influence d'un champ électrique, interrompue par des interactions instantanées.

$\lambda(k(t))\delta t$ représente la probabilité pour qu'un porteur subit une interaction entre t et $t+\delta t$.

La probabilité pour qu'un porteur ne subit pas une interaction est donnée par la relation :

$$P_f(t) = \prod_i (1 - \lambda(k(t))\delta t) \quad \dots \text{(III-25)}$$

Ce qui conduit à :

$$P_f(t) = \exp\left(-\sum_i \lambda(k(t))\delta t_i\right) \quad \dots \text{(III-26)}$$

Où

$$P_f(t) = \exp\left(-\int_0^t \lambda(k(t'))\delta t'\right) \quad \dots \text{(III-27)}$$

A partir de la formule (III-27) on peut calculer la probabilité pour que l'électron pourra avoir un temps de vol libre, elle est formulée sous l'expression suivante :

$$p(\Delta t) = \int_0^{\Delta t} \lambda(k(t)) \cdot \exp\left[-\int_0^t \lambda(k(t'))\delta t'\right] \delta t \quad \dots \text{(III-28)}$$

$$= 1 - \exp\left[-\int_0^{\Delta t} \lambda(k(t))\delta t\right] \quad \dots \text{(III-29)}$$

C'est l'expression (III-29) qui donne les durées de vols libres qui seront effectivement suivie par des interactions.

La procédure adoptée initialement par KUROSAWA pour déterminer le temps de vol libre consiste à tirer des nombres aléatoires à distribution uniforme entre 0 et 1 et de résoudre l'équation suivante qui suit :

$$\int_0^{\Delta t} \lambda(k(t)) dt = -\text{Ln}r \dots \text{(III-30)}$$

Dans le cas générale l'expression (III-29) est difficile à résoudre analytiquement et l'équation (III-30) n'est pas intégrable analytiquement, ce qui rend les choses plus difficile, afin de simplifier l'expression (III-29), REES a suggéré d'ajouter à l'ensemble des mécanismes de collisions un processus d'interaction qui ne modifie pas l'état du porteur, c'est le processus "Self Scattering".

CHAPITRE IV

Résultats et Interprétations

IV-1 Interactions prédominantes dans l'InAs

Nous avons effectué une étude microscopique sur le matériau semiconducteur III-V, arséniure d'indium InAs, il présente un gap direct et une bande de conduction avec un modèle de trois types de vallées différentes (Γ , L et X).

Dans la simulation, nous avons étudié le modèle de bande non parabolique, qui présente une approximation réelle du matériau.

Le coefficient de non parabolicité α joue un rôle important, il relie l'énergie au vecteur d'onde \vec{k} par la relation suivante :

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon) \quad \text{avec :} \quad \alpha = \frac{1}{E_g} \left(1 - \frac{m^*}{m_0}\right)^2$$

E_g est le gap d'énergie, m_0 est la masse de l'électron libre et m^* est la masse effective du porteur dans la vallée où il se trouve.

En fait, dans tous les matériaux il existe un nombre important d'interactions, mais à cause de la structure des bandes d'énergie et la structure cristalline pour chaque matériau, certaines interactions se manifestent d'une façon forte que les autres types d'interactions dans un matériau, alors qu'ils sont presque absentes dans un autre.

Dans le cas de l'arséniure d'indium « InAs », il existe quatre interactions qui sont prédominantes.

IV-1-1 Interaction acoustique

L'interaction acoustique, est une interaction de nature élastique c'est à dire qu'elle se manifeste à une énergie constante. Après avoir subit une interaction acoustique le vecteur d'onde ne change pas de module dans la même vallée est reste constant.

Elle est presque inexistante en vallée centrale, on la trouve généralement dans les vallées latérales.

IV-1-2 Interaction piézoélectrique

L'interaction piézoélectrique est aussi de nature élastique, ses effets sont presque absents à forte énergie, du fait que sa probabilité d'interaction est inversement proportionnelle à la racine carrée de l'énergie.

Elle n'intervient que pour des énergies inférieure à 0.03 (eV).

Son effet est très faible et ne provoque quasiment aucune déviation sur le porteur.

IV-1-3 Interaction optique polaire

L'interaction optique polaire se présente d'une façon forte dans toutes les vallées, lors de cette interaction il y a un échange de phonon optique polaire, et elle est spécifiée par une anisotropie très forte sur l'ensemble des états finaux probables.

Les états correspondant à une déviation quasi nulle du vecteur d'onde sont très fortement favorisés, donc le porteur entraîné dans la direction du champ électrique pendant la phase du vol libre ne sera que très peu détourné de ça direction.

Par sa forte probabilité et malgré ses effets relativement faibles sur la trajectoire du porteur libre, l'interaction optique polaire joue un rôle déterminant sur la mobilité du porteur en faible champ grâce à ça forte probabilité d'y être.

IV-1-4 Interaction avec les impuretés

L'interaction avec les impuretés est élastique, ça probabilité est indépendante de la concentration en impuretés.

Son influence est importante en présence d'un champ électrique faible, Son effet principal donc est la diminution de la valeur de la mobilité.

IV-2 Résultats et interprétation

La méthode de Monte Carlo, nous à offert l'avantage d'étudier l'évolution au cours du temps de toutes les grandeurs intéressantes, quelles que soient les variations du champ appliqué. Néanmoins, c'est une simulation qui demande beaucoup de paramètres caractérisant les différentes vallées (Γ , L, X) existantes dans la bande de conduction du matériau traité (InAs).

Après avoir injecter ses paramètres dans un programme traduit sous le langage turbo C, on a pu mettre en évidence les caractéristiques les plus importantes tel que la vitesse de dérive et l'énergie de l'arséniure d'indium, que ça soit en régime stationnaire ou non stationnaire.

IV-2-1 Régime stationnaire

Les grandeurs moyennes accessibles directement dans la simulation sont la vitesse de dérive et l'énergie, nous avons tracé ses grandeurs en fonction du champ électrique: figures (IV-1) et (IV-2).

I

V-2-1-1 Vitesse en fonction du champ

La figure (IV-1) illustre la variation de la vitesse en fonction du champ électrique, on constate que la vitesse moyenne prend une valeur maximale à $E=3.63(\text{kV/cm})$ puis elle commence à diminuer jusqu'à atteindre un régime stationnaire c'est à dire:

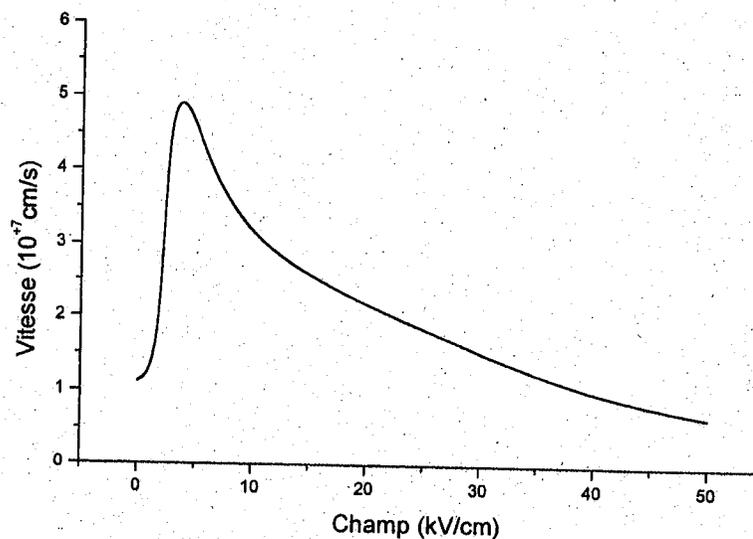


Figure (IV -1) : Vitesse en fonction du champ

Qu'a des valeurs de champ supérieures à 50 (kV/cm), la vitesse électronique ne change pratiquement pas, par contre à faible champ l'électron est accéléré rapidement vers une valeurs maximale. L'explication de ce comportement se trouve dans la structure de bande de ce semiconducteur.

A l'équilibre thermique, les états de ces vallées ne sont guère peuplés. Néanmoins, l'application d'un champ fort peut accélérer quelques électrons de la vallée Γ à des énergies proches de celle de la vallée L dans laquelle ils pourront alors être transférés sous l'effet d'une diffusion.

Après le transfert, la vitesse de l'électron est fortement réduite, et quoique l'électron puisse être à nouveau accéléré par le champ dans cette vallée, sa mobilité est nettement inférieure à celle des électrons de la vallée Γ à cause d'une masse effective m_l plus lourde que m_Γ .

A l'état stationnaire, pour une augmentation du champ, la population de la vallée satellite à mobilité réduite croît, et il est donc envisageable que la vitesse moyenne de tous les électrons puisse décroître comme il est illustré dans la figure (IV-1).

IV-2-1-2 Energie en fonction du champ

Nous remarquons qu'à champ nul l'énergie des porteurs est d'environ 50 meV, elle est équivalente à $3/2 k_B T$ (énergie thermique), dès qu'on applique un champ faible l'énergie des électrons est subitement excédentaire par rapport aux nouvelles conditions d'équilibre, les électrons vont donc transmettre cette énergie au court des interactions.

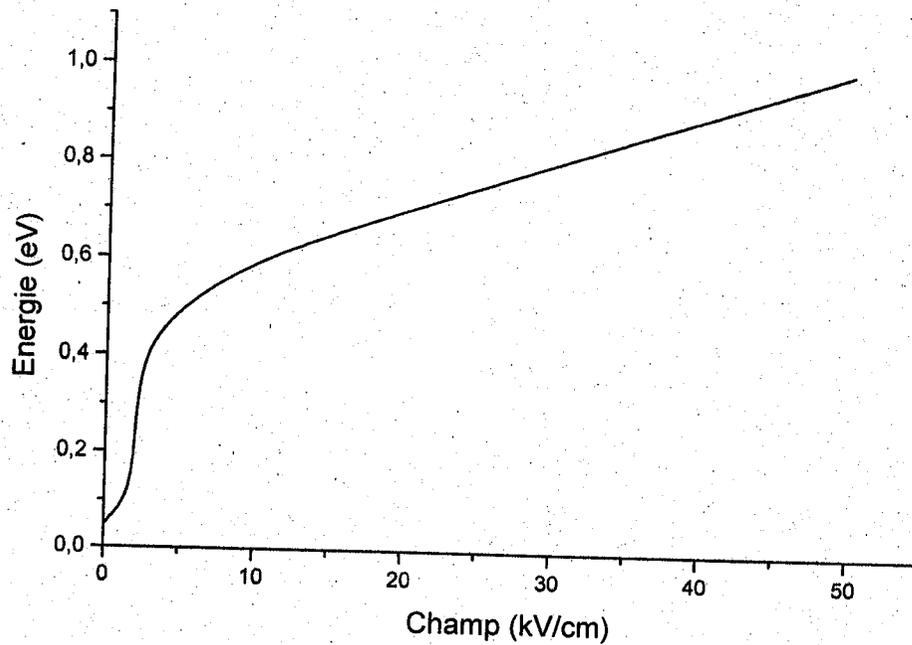


Figure (IV-2) : énergie en fonction du champ

Cette énergie va prendre des valeurs croissantes mais dans un intervalle des valeurs de champ assez petit qui varie de 0 (kV/cm) à 3.63 (kV/cm) . Une fois qu'on dépasse cette valeur de champ, le porteur va avoir une énergie qui aura une variation linéaire en fonction du champ.

Cela signifie que lorsque le porteur se trouve dans des hautes vallées et lors de l'application des champs forts, l'augmentation de l'énergie devient moins rapide, puisque ses vallées sont moins peuplées.

IV-2-2 Régime non stationnaire

De nombreux auteurs ont examiné le comportement des porteurs libres dans les semiconducteurs lorsqu'ils sont soumis à un champ électrique variant au cours du temps, ils n'ont pas manqué de souligner l'intérêt des différents phénomènes qui se manifeste dans ce régime et surtout au niveau des composants submicroniques.

IV-2-2-1 profil de la Vitesse et l'énergie en fonction du temps

La figure (IV-3) représente la caractéristique $v=f(t)$ pour différents champs, on a remarqué un phénomène très important c'est le phénomène de survitesse, c'est un phénomène transitoire ou la vitesse d'un paquet d'électrons peut prendre des valeurs supérieures à la vitesse du régime stationnaire.

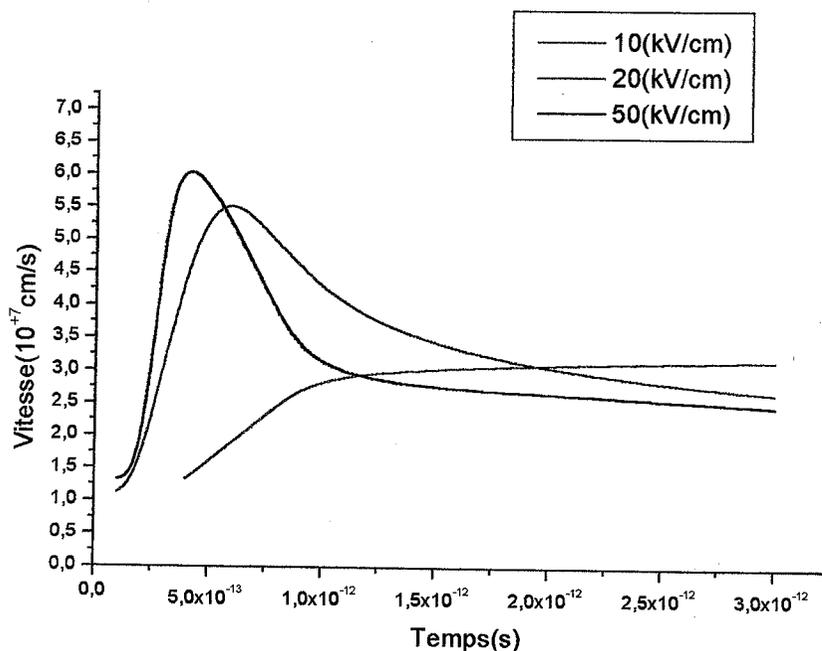


Figure (IV-3) : Vitesse en fonction du temps.

- Pour le champ 10(kV/cm) on remarque bien l'absence de ce phénomène qui traduit l'absence des électrons excédentaires par rapport aux conditions d'équilibre relative au champ fort appliqué.

-Pour le champ (20kV/cm) le phénomène de survitesse se présente entre 10^{-13} (s) et 10^{-12} (s).

-Pour le champ(50kV/cm) ce phénomène se situe entre 10^{-13} (s) et 8.10^{-13} (s).

Par conséquent on peut conclure qu'il y a une diminution de la valeur maximale de la vitesse avec la diminution du champ appliqué ; par contre quand le champ augmente le phénomène de survitesse devient instantané.

Le rôle du phénomène de survitesse est très important au niveau de la détermination des performances en fréquences et en puissance des composants réalisés à partir du matériau étudié.

Le phénomène de survitesse est conditionné par sa durée, le temps de transfert des électrons sur une distance donnée, on a comparé les possibilités offertes par l'InAs avec d'autres matériaux tel que le GaAs et l'InP et on a constaté que l'arséniure d'indium « InAs » représente mieux le phénomène de survitesse, point de vue durée de pic ainsi que la valeur maximale de la vitesse atteinte par le porteur.

La figure (IV-4) illustre la variation de l'énergie en fonction du temps pour différents champs électriques [10(kV/cm), 20(kV/cm), 50(kV/cm)].

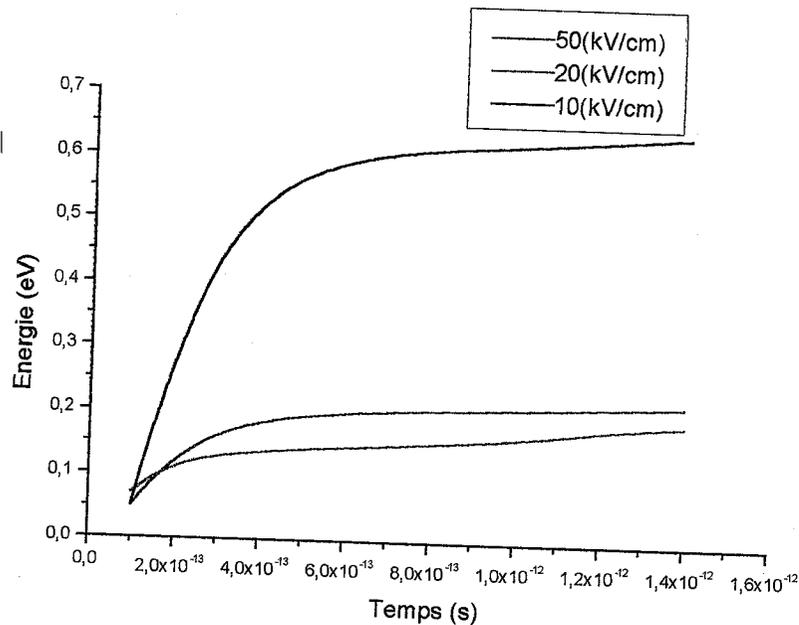


Figure (IV-4) : profil de l'énergie en fonction du temps

Comme on peut le constater l'énergie prend des valeurs croissantes jusqu'à atteindre une valeur stationnaire.

Cela signifie qu'au début le porteur se trouve dans la vallée centrale. A cause des interactions intervalles, l'électron va pouvoir gagner le nécessaire d'énergie pour être transféré de cette vallée vers une des vallées latérales L ou X.

Une fois le porteur sera dans des hautes vallées, son énergie va converger vers une valeur stationnaire puisque toute énergie gagnée par l'électron va compenser la quantité d'énergie qu'il a cédé au réseau cristallin.

IV-2-2-2 Influence du dopage

Nous avons présenté la variation de la vitesse en fonction du champ pour différentes concentrations : $N_D=0$, $N_D=10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $N_D=10^{14} \text{ cm}^{-3}$

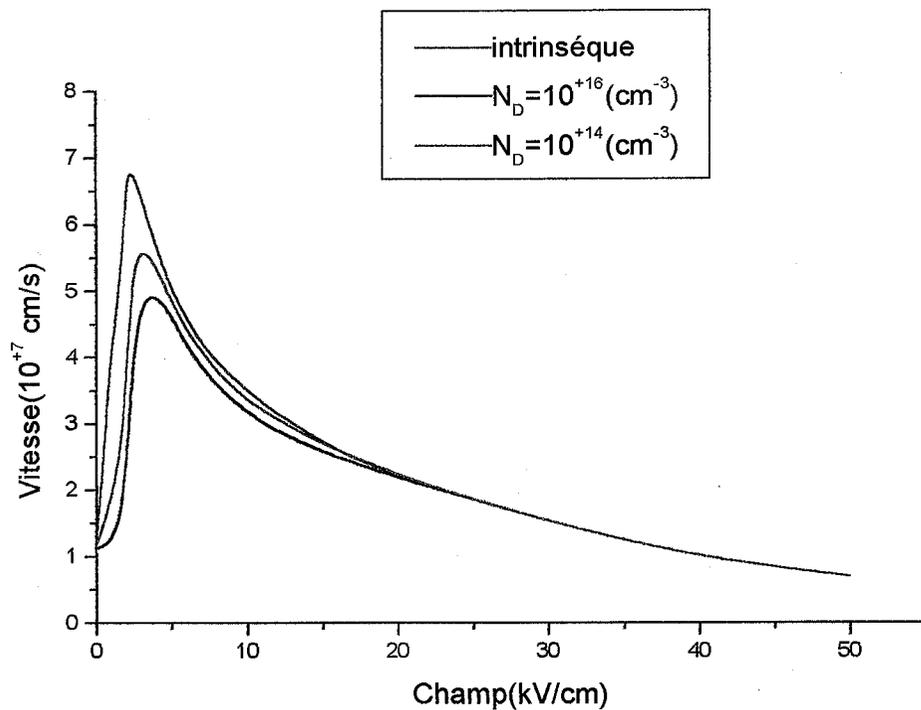


Figure (IV-5) : Influence du dopage

Cette représentation est caractérisée par une diminution de la vitesse de pic et une légère augmentation du champ de seuil et par conséquent une diminution de la mobilité en faible champ.

Dans le cas d'un semi-conducteur intrinsèque le champ de seuil est égal à 2.13 (kV/cm) qui correspond à une vitesse de $6.78 \cdot 10^7$ (cm/s), alors que pour la concentration de 10^{16} (cm⁻³) il est égal à 3.63 (kV/cm) pour une vitesse de $4.91 \cdot 10^7$ (cm/s), ainsi pour 10^{14} cm⁻³ le champ de seuil est égal à 3.31(kV/cm) pour une vitesse de $5.56 \cdot 10^7$ (cm/s). L'effet du dopage sur la vitesse du porteur se situe au niveau d'application des faibles champs, alors que pour les forts champs, cet effet peut être négligé puisque nous avons une convergence des courbes.

IV-2-2-3 Influence de la température

La figure (IV-6) montre la variation de la vitesse en fonction du champ pour différentes températures, on a pu constater que pour 300 K la vitesse maximale est égale a $4.91 \cdot 10^7$ (cm/s) pour un champ de seuil de (3.63 kV/cm), alors que pour 200 K le champ de seuil est de 4.08 (kV/cm) qui correspond à une vitesse de $3.71 \cdot 10^7$ (cm/s), ainsi pour 77 K le champ de seuil est de 5 (kV/cm) qui correspond à une vitesse maximale de $2.13 \cdot 10^7$ (cm/s).

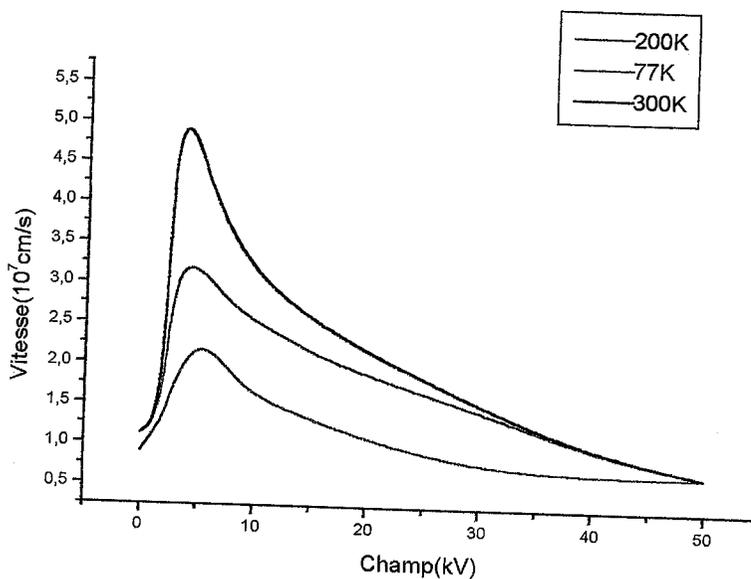


Figure (IV-6) : effet des faibles températures.

A partir de ses valeurs, on peut dire que l'influence de la température est importante à faible champ. Le champ de seuil diminue quand la température augmente par contre la vitesse maximale augmente.

Quand on augmente la température l'énergie du porteur augmente par conséquent son énergie cinétique va aussi augmenter c'est à dire que sa vitesse va augmenter et son besoin à la force résultante du champ diminue, C'est ce qui explique la diminution du champ de seuil.

Finalement l'effet de la température s'alterne pour des champs forts, car on remarque que les courbes convergent asymptotiquement lorsqu'on atteint des champs forts.

On peut constater de la figure (IV-6) que l'effet des hautes températures est caractérisé par une diminution de la vitesse des porteurs libres.

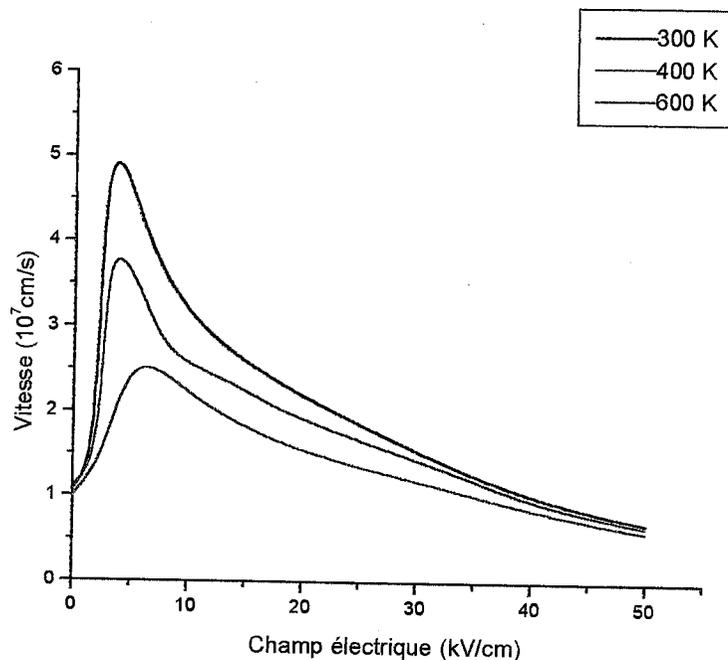


Figure (IV-7) : effet des hautes températures.

On remarque que pour la température 300 K la vitesse maximale est de $4.91 \cdot 10^7$ (cm/s) pour un champ de seuil de (3.63 kV/cm), alors que pour 400 K le champ de seuil est de 3.86 (kV/cm) qui correspond à une vitesse de $3.78 \cdot 10^7$ (cm/s). Pour la température 600 K le champ de seuil est de 6 (kV/cm) correspondant à une vitesse maximale de $2.51 \cdot 10^7$ (cm/s).

Cela est dû à une grande partie de l'effet de l'agitation thermique qui conduit à une augmentation des interactions ce qui n'offre pas à l'électron le temps nécessaire pour acquérir de fortes vitesses.

IV-2-2-4 Influence de la longueur

Nous avons étudié le comportement de la vitesse en fonction du champ pour différentes longueurs du matériau.

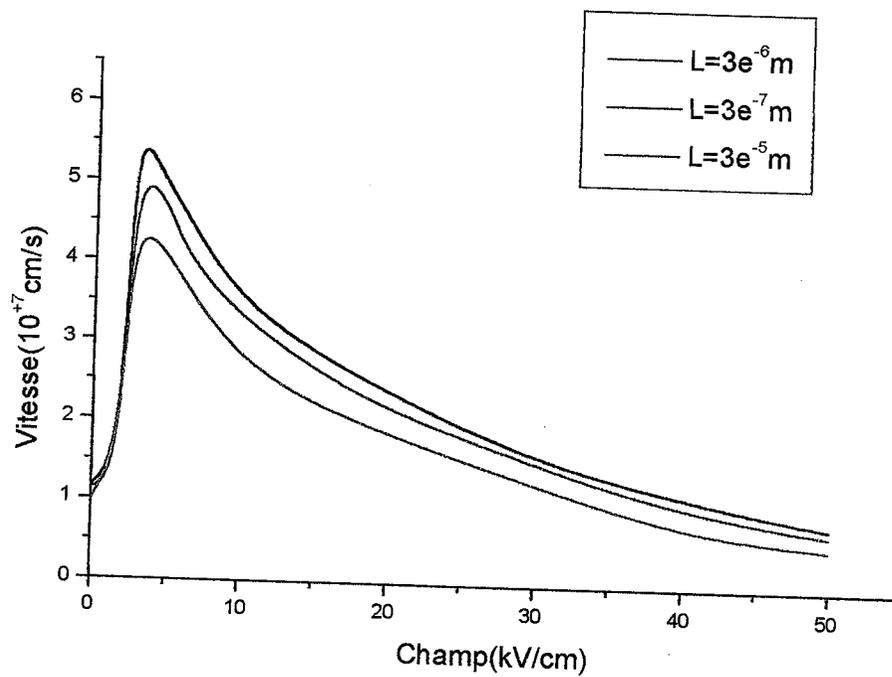


Figure (IV-8) : Influence de la longueur du matériau.

D'après les résultats obtenus, on peut discuter ses courbes en deux phases :

- A faible champ.

-Et lors de l'application des champs forts.

Une fois qu'on ait au dessus de champ de seuil à quelques (kV/cm) la vitesse diminue lorsqu'on augmente la longueur du matériau, or quand la longueur augmente le nombre des porteurs libres augmente, par conséquent le nombre d'interactions croit aussi, d'où la diminution de la vitesse.

L'effet de la longueur du matériau se poursuit pour les forts champs comme pour les faibles champs, car comme il est illustré dans la figure (IV-8) nous avons une convergence asymptotique des courbes.

Finalement on peut dire que la diminution des dimensions de la zone active à des valeurs nanométriques constitue le principal challenge des prochaines années.

IV-2-2-5 variation de la Vitesse en fonction de la distance

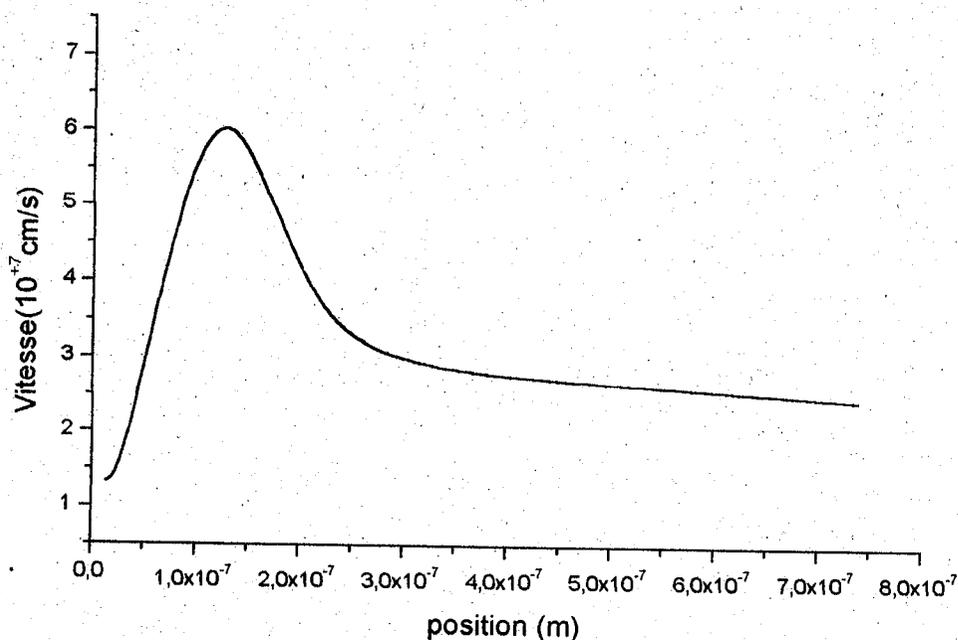


Figure (IV-9) : Vitesse en fonction de la position.

Comme on peut le constater, le phénomène de survitesse apparaît aussi dans la figure (IV-9) qui représente la variation de la vitesse au cours de la distance parcouru par le porteur.

Dans un domaine de distance très étroit, la vitesse prend des valeurs extrêmement croissantes puis elle commence à diminuer jusqu'à atteindre une vitesse stationnaire.

Au début, le porteur libre dès qu'il gagne une énergie excédentaire, il va être accéléré jusqu'à ce qu'il atteigne une vitesse maximale, cela est due à sa faible masse dans la vallée Γ , ainsi que sa mobilité élevée.

Quand le porteur sera dans une nouvelle vallée (vallée L la plus proche), sa vitesse diminue jusqu'à ce qu'il aboutit à un régime stationnaire.

Parce que, une fois le porteur est dans une nouvelle vallée il va changer de masse et sera alourdi, par conséquent sa mobilité va diminuer. Ainsi il sera bloqué par les autres porteurs existants dans la nouvelle vallée.

IV-3 Comparaison des résultats

Dans les deux figures (IV-10) et (IV-11) qui suivent on a fait une comparaison de nos résultats obtenus par la méthode de Monte Carlo sur l'arséniure d'indium (InAs) et des résultats obtenus par la même méthode sur l'arséniure de gallium (GaAs), on a comparé l'évolution de la vitesse en fonction du champ pour les deux matériaux.

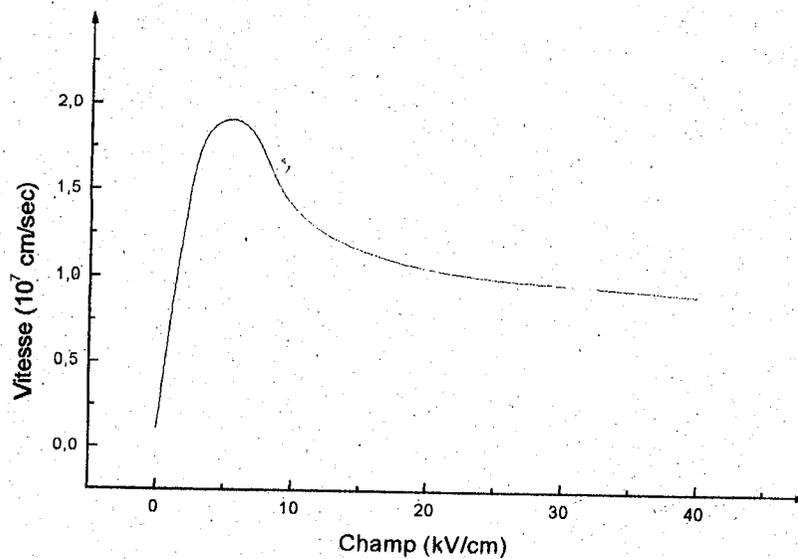


Figure (IV-10): Vitesse en fonction du champ pour le GaAs.
Résultat obtenu par la méthode de Monte Carlo.

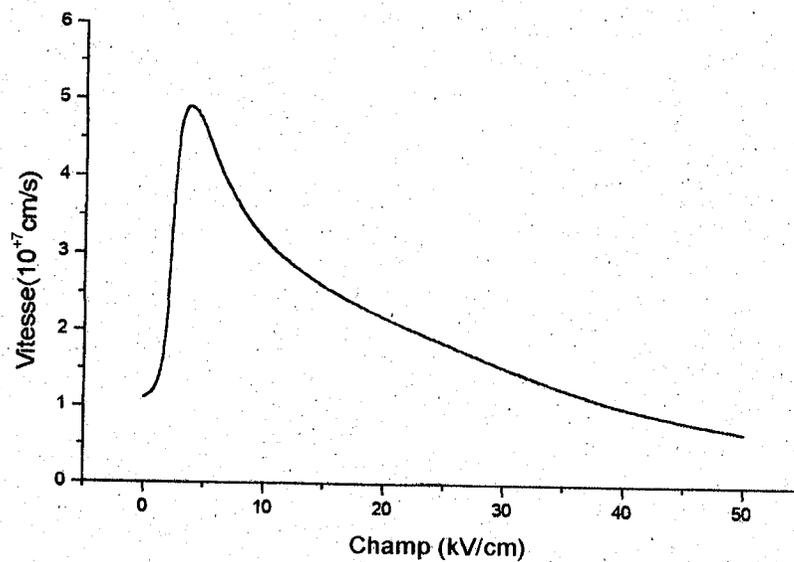


Figure (IV-11) : vitesse en fonction du champ pour l'InAs.

On peut remarquer que le champ de seuil est de 5 (kV/cm) pour le GaAs alors qu'il est égal à 3.63 (kV/cm) pour l'InAs.

Le porteur existant dans l'arséniure d'indium a besoin d'un champ électrique inférieur à celui appliqué aux GaAs pour avoir une vitesse de pic supérieur que celle atteinte dans le cas du GaAs. Cela est dû à la faible masse des porteurs dans la vallée centrale et par conséquent la mobilité élevée.

Pour l'InAs $m_{\Gamma}^* = 0.022m_0$ alors que pour le GaAs $m_{\Gamma}^* = 0.063m_0$.

Cela est due aussi aux distances énergétiques qui séparent les vallées latérales de la vallée centrale, qui sont plus grandes que les distances énergétiques pour le GaAs, et 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.

$$\text{GaAs : } \Delta E_{\Gamma L} = 0.33 \text{ eV}$$

$$\text{InAs : } \Delta E_{\Gamma L} = 0.87 \text{ eV}$$

En ce qui concerne la deuxième comparaison effectuée dans les figures (IV-12) et (IV-13), on l'a consacré à l'évolution de l'énergie en fonction du champ.

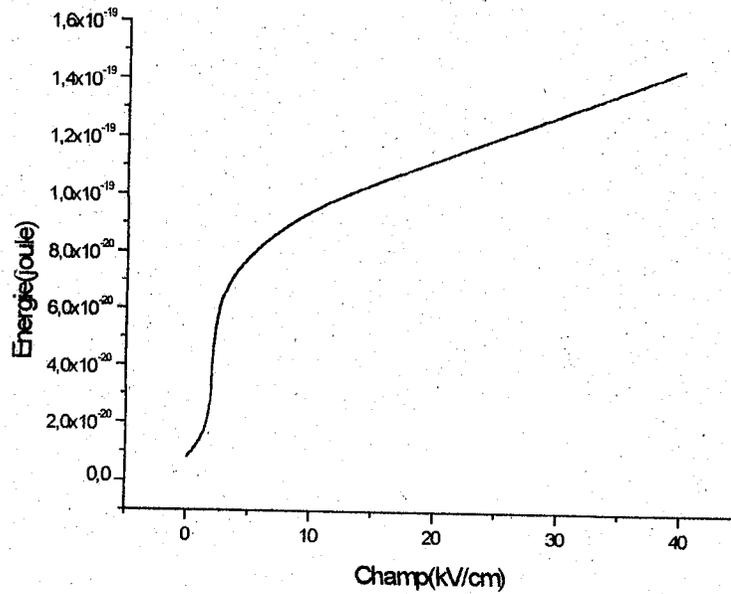


Figure (IV-12) : Energie en fonction du champ pour l'InAs.

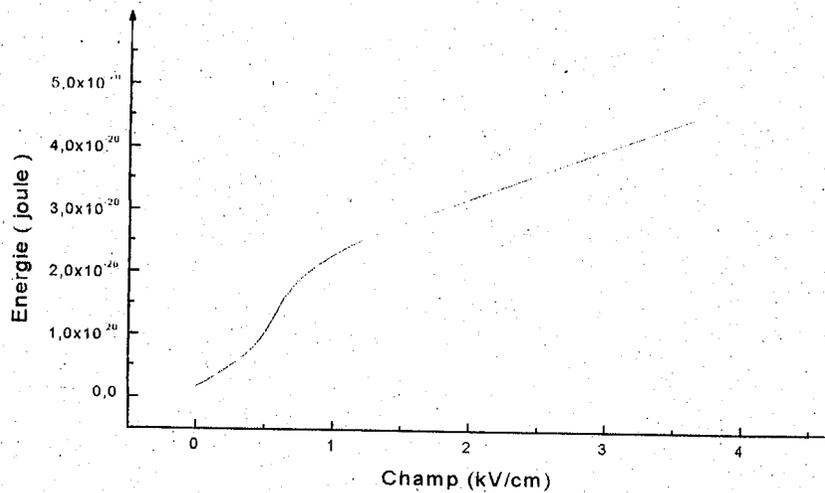


Figure (IV-13) : Energie en fonction du champ pour le GaAs.

On a procédé à une interpolation de la partie supérieure des deux courbes, c'est à dire où ces derniers commencent à changer d'allure à une fonction linéaire, nous avons constaté que l'arséniure d'indium possède une pente $\frac{d\varepsilon}{dE}$ supérieure que celle trouvée pour le GaAs.

C'est à dire que dans les mêmes conditions extérieures (champ électrique appliqué) l'énergie transportée par le porteur dans l'InAs est plus grande que celle transportée par un autre porteur dans le cas du GaAs.

IV-4 Conclusion

La méthode de Monte Carlo que nous avons appliquée dans notre simulation, nous a permis une compréhension plus nette du comportement des porteurs dans l'arséniure d'indium et de mettre en évidence les caractéristiques les plus importantes des propriétés de ce matériau en régime stationnaire et en régime non stationnaire.

Au cours de ce travail on a abouti à des résultats intéressants, parmi les résultats importants obtenus est celui de la survitesse, qui caractérise le temps de réponse du matériau et au cours duquel la vitesse du porteur peut dépasser très largement la vitesse en régime non stationnaire.

La simulation par la méthode de Monte Carlo présente une souplesse au niveau de la détermination des caractéristiques du matériau en régime non stationnaire, ainsi on peut remarquer nettement les deux paramètres qui favorisent le phénomène de survitesse, la faible masse effective en vallée centrale et l'écart énergétique entre la vallée centrale et les vallées latérales les plus accessibles, ce phénomène joue un rôle important au niveau des applications technologiques surtout en hyperfréquences.

**CONCLUSION
GENERALE**

CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES

Une étude microscopique à été effectuée sur l'arséniure d'indium, nous avons décrit le comportement des porteurs de point de vue dynamique et énergétique dans le régime stationnaire, et non stationnaire, cette étude à été réalisée à partir d'une simulation utilisant la méthode de Monte Carlo.

Cette dernière méthode nous à permis la connaissance des différentes interactions prédominantes dans l'arséniure d'indium. Ainsi, la possibilité de prévoir le comportement des porteurs dans ce matériau, envers les différentes conditions extérieurs (température, dopage, longueur du matériau, champ appliqué).

La simulation des phénomènes de transport par la méthode de Monte Carlo constitue donc une étape essentielle vers la connaissance des propriétés des différents matériaux. Sa souplesse d'emploi en fait un outil adaptable à une grande diversité d'applications.

Le domaine d'application de l'arséniure d'indium « InAs » est très vaste, nous citons à titre d'exemples les applications en électronique Ultrarapide (application numérique). Il est très conseillé d'être utilisé pour des circuits intégrés qui sont utilisés à leur tour dans la réalisation des calculateurs, cela est confirmé par les résultats obtenus en régime non stationnaire dans la courbe qui représente la variation de la vitesse au cours du temps, où l'on a constaté une vitesse de pic très grande avec un temps de réponse instantané.

Le domaine de la technologie microélectronique connaît actuellement un développement très grand, cela est dû à une grande partie au développement des techniques de simulations utilisées pour la compréhension des phénomènes microélectroniques. Donc, on a intérêt à fournir plus d'efforts dans ce domaine pour pouvoir comprendre mieux les différents phénomènes qui se manifestent à l'échelle microscopique au niveau des différents matériaux afin d'améliorer les performances des dispositifs électroniques utilisés dans les différents domaines technologiques.

En fait, la méthode de Monte Carlo nous a permis une description du comportement des porteurs libres dans des situations et des conditions extérieures différentes, d'une autre façon on peut dire qu'elle à jouer un double rôle :

- Interprétatif : c'est à dire qu'elle nous a permis d'interpréter le comportement des porteurs.
- Prédicatif : c'est à dire que cette méthode nous a conduit a donné des prévisions sur le comportement des porteurs dans des différentes conditions extérieurs.

Enfin, l'étude qui vient d'être effectuée sur l'Arséniure d'indium peut être transposable à n'importe quel autre matériau III-V, elle peut même être généralisée pour des composés ternaire et quaternaire. Ainsi on aura la possibilité d'effectuer des études comparatives et améliorer les performances des différents dispositifs à base de semiconducteurs, selon l'application envisagée, avant même toute réalisation technologique.

ANNEXE A

Notion de la masse effective

La relation qui décrit l'énergie en fonction du vecteur d'onde k se situe au voisinage des extrémités de la bande interdite principale. Prenons un cas unidimensionnel et plaçons nous au voisinage d'un extremum (E_0, k_0) , ainsi nous allons effectuer un développement limité de l'énergie E en fonction du vecteur d'onde k on aura :

$$E = E_0 + \left. \frac{dE}{dk} \right|_{k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 E}{dk^2} \right|_{k_0} (k - k_0)^2 \approx E$$

avec :

$$\left. \frac{dE}{dk} \right|_{k_0} \approx 0$$

d'où :

$$E = E_0 + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 E}{dk^2} \right|_{k_0} (k - k_0)^2$$

On pose :

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\left. \frac{d^2 E}{dk^2} \right|_{k_0}}$$

d'où :

$$E - E_0 = \frac{\hbar^2 (k - k_0)^2}{2m^*}$$

La quantité m^* homogène à une masse appelé masse effective :

- Si E_0 est un minimum : $m^* > 0$ on parlera de la masse effective de l'électron.
- Si E_0 est un maximum : $m^* < 0$ on parlera de la masse effective des trous.

Masse effective: lien avec l'électron peu perturbé

Une bonne interprétation du concept de la masse effective - et de la relation avec la largeur de la bande interdite - vient lors de l'examen du modèle de l'électron faiblement perturbé. Le potentiel avait été développé sous forme d'une série de Fourier (périodicité oblige). Et on y avait appliqué les conditions de bord périodiques, ou conditions de Born-von Karman. Ces conditions de bord font l'hypothèse que le cristal est en fait une chaîne repliée sur elle-même. De cette manière, il est possible de développer la fonction d'onde en série de Fourier sur la longueur du cristal L :

$$\psi(x) = \sum_k C_k e^{ikx} \dots (1)$$

où $k = \frac{2\pi n}{L}$

n : est un entier. L'équation de Schrödinger s'écrit:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \sum_G V_G e^{iGx} \right) \psi = E \psi \dots (2)$$

En remplaçant ψ par son développement:

$$\sum_k \left(\frac{\hbar^2}{2m} C_k k^2 - E \right) e^{ikx} + \sum_k \sum_G V_G C_{k-G} e^{i(k-G)x} = 0 \dots (3)$$

Dans le deuxième terme, on substitue $k' = G+k$ et donc $C_k = C_{k'-G}$:

$$\sum_k \left(\frac{\hbar^2}{2m} C_k k^2 - E \right) e^{ikx} + \sum_{k'} \sum_G V_G C_{k'-G} e^{ik'x} = 0 \dots (4)$$

Par définition, chacun des termes d'un développement de Fourier doit être nul pour que leur somme soit nulle et donc:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} C_k k^2 - E C_k + \sum_G V_G C_{k-G} \right) = 0 \dots (5)$$

pour tout k .

L'équation (4) est difficile à résoudre dans le cas général, car une infinité de C_k sont couplés à une infinité de V_k . Regardons néanmoins une solution simplifiée dans le cas où $k = \frac{\pi}{n}$, donc au bord de la zone de Brillouin là où la bande interdite va s'ouvrir. Posons aussi:

$$g = \frac{2\pi}{n}$$

égal à la largeur de la zone de Brillouin. Pour simplifier l'écriture, appelons le terme

cinétique $\lambda_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ et remarquons aussi que $\lambda_{g/2} = \lambda_{-g/2}$.

Nous n'allons ici garder que le premier terme de la série de Fourier (aussi bien pour le potentiel que pour la fonction d'onde). L'équation (4) s'écrit pour $k = \pm g$ avec $\lambda = \lambda_{g/2}$:

$$(\lambda - E)C_{g/2} + V_g C_{-g/2} = 0 \quad \dots (6)$$

$$(\lambda - E)C_{-g/2} + V_{-g} C_{g/2} = 0$$

Ce qui aboutit à l'équation caractéristique suivante:

$$\lambda^2 - 2E\lambda + E^2 - |V_g|^2 = 0 \quad \dots (7)$$

dont la solution est évidemment

$$E = \lambda \pm \sqrt{\lambda^2 - |V_g|^2} \quad \dots (8)$$

Nous avons maintenant montré par le calcul l'existence d'une bande interdite au bord de la zone de Brillouin dont la largeur est de $2|V_g|$. De plus, nous pouvons aussi construire les fonctions d'ondes à l'aide des coefficients $C_{\pm g/2}$, en particulier ces coefficients remplissent la condition

$$\frac{C_{g/2}}{C_{-g/2}} = \pm 1 \quad \dots (9)$$

On peut donc construire la fonction d'onde à l'aide des deux possibilités pour les coefficients:

$$\psi(x) = e^{i/2gx} \pm e^{-i/2gx} \dots (10)$$

Essayons de développer la solution autour de $(g/2)$. Pour cela, gardons les mêmes fonctions de base pour développer la fonction d'onde mais en changeant les coefficients $C(k)$ et $C(k-g)$:

$$\psi(x) = C(k)e^{ikx} + C(k-g)e^{i(k-g)x} \dots (11)$$

Cette fonction d'onde introduite dans l'équation (4) nous donne le système suivant à résoudre:

$$(\lambda_k - E)C(k) + V_g C(k-g) = 0 \dots (12)$$

$$(\lambda_{k-g} - E)C(k-g) + V_{-g} C(k-g) = 0$$

Dont l'équation caractéristique est

$$(\lambda_k - E)(\lambda_{k-g} - E) - |V_g|^2 = 0 \dots (13)$$

qui mène à la solution

$$E = \frac{1}{2}(\lambda_k + \lambda_{k-g}) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(\lambda_k - \lambda_{k-g})^2 + V_g^2} \dots (14)$$

Il nous faut encore un peu de calcul pour bien comprendre ce résultat.

Le mieux est d'exprimer la valeur de l'énergie en fonction d'un vecteur d'onde dont l'origine est en bord de zone ($k = k - g/2$). On aura les termes:

$$\lambda_k = \frac{\hbar^2}{2m} \left(k + \frac{g}{2}\right)^2 \dots (15)$$

$$\lambda_{k-g} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(k - \frac{g}{2}\right)^2$$

d'où les quantités:

$$\frac{1}{2}(\lambda_k + \lambda_{k-g}) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(k^2 + \frac{g^2}{4} \right) \quad \dots(16)$$

$$\frac{1}{4}(\lambda_k - \lambda_{k-g})^2 = 4 \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^2 \left(\frac{k g}{2} \right)^2 = 4 \lambda \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Finalement, les solutions s'écrivent

$$E_{\pm} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(k^2 + \frac{g^2}{4} \right) \pm \sqrt{4 \lambda \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + |V_g|^2} \quad \dots(17)$$

Ces solutions peuvent être simplifiées encore en développant la racine avec

l'approximation $\sqrt{1+E} = 1 + \frac{E}{2}$:

$$E_{\pm} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \lambda \pm |V_g| \left(1 + \frac{2\lambda}{|V_g|^2} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \quad \dots(18)$$

$$E_{\pm} = \lambda \pm |V_g| + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(1 \pm \frac{2\lambda}{|V_g|} \right)$$

Cette solution est esquissée sur la figure (1).

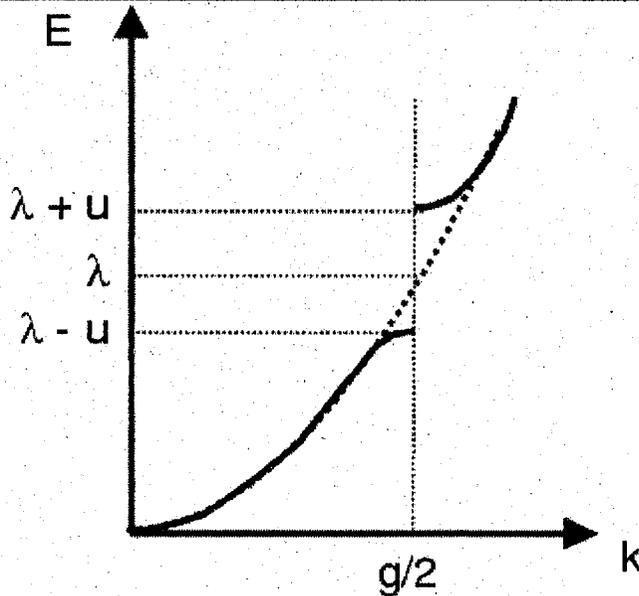


Figure (1) : Formation d'une bande interdite pour un électron faiblement perturbé

L'équation (17) est très intéressante car elle montre des phénomènes très généraux pour la formation de bandes de cristaux. Nous savons que, une perturbation périodique du potentiel d'un électron mène à la formation d'une bande interdite. De plus, dans l'équation (17), on montre que ces bandes sont paraboliques pour les valeurs de k proches de celles où la bande interdite apparaît. On peut donc définir une masse effective à partir de l'équation suivante :

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m} \left(1 \pm \frac{2\lambda}{|V_g|} \right)$$

et donc m^* est d'autant plus faible que $\frac{\lambda}{|V_g|}$ est grand et donc que $|V_g|$ est petit (à λ fixé).

Ce résultat s'observe en pratique dans la grande majorité des semi-conducteurs avec une bande interdite directe. Prenons des cas pratiques: le GaAs a une bande interdite $E_g = 1.5eV$ et une masse effective $m^* = 0.067m_0$, l'InAs a une bande interdite beaucoup plus faible $E_g = 0.36eV$ et une masse effective aussi plus faible $m^* = 0.022m_0$.

ANNEXE B

CALCUL DES PROBABILITES D'INTERACTION, AINSI QUE L'ANGLE DE DEVIATION

Dans cette partie, on va calculer la probabilité d'interaction par unité de temps d'un électron avec les phonons du réseau cristallin ainsi que les impuretés. On va déterminer aussi, l'angle de déviation β du vecteur d'onde correspondant au porteur au cours de l'interaction.

I. Forme générale de probabilité par unité de temps

On considère un porteur, dont le vecteur d'onde au cours d'une interaction, passe de \vec{k} à \vec{k}' . La probabilité d'interaction $\lambda(\varepsilon)$ par unité de temps pour qu'un porteur qui se trouve dans l'état k subisse une interaction, se calcule en intégrant sur tous les états finals, la densité de probabilité $S(\vec{k}, \vec{k}')$ de passage de l'état \vec{k} à \vec{k}' au cours de l'interaction. En notant β l'angle entre \vec{k} et \vec{k}' , la probabilité s'écrit alors :

$$\lambda(k) = \frac{V}{8\pi^3} \cdot 2\pi \cdot \int_0^\pi \int_0^\infty S(\vec{k}, \vec{k}') k'^2 dk' \sin \beta \cdot d\beta \quad \dots (A-1)$$

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

La première des choses est que l'intégration se fait par rapport au module k' . grâce aux relations entre le module du vecteur d'onde et l'énergie :

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} = \varepsilon(1 + \alpha \cdot \varepsilon) \quad \dots (A-2)$$

et

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} = \varepsilon'(1 + \alpha \cdot \varepsilon') \quad \dots (A-3)$$

il devient donc possible de tout exprimer en fonction des énergies ε et ε' .

Après intégration sur l'énergie ,la probabilité $\lambda(\varepsilon)$ devient :

$$\lambda(\varepsilon) = c_\varepsilon \cdot \int_0^\pi P_\varepsilon(\beta') \cdot d\beta' \quad \dots (A-4)$$

La réalisation de cette intégration, nous permet de calculé la probabilité d'interaction. Il s'agit donc de résoudre l'équation $\int_0^\beta P_\varepsilon(\beta') d\beta' = r \int_0^\pi P_\varepsilon(\beta') d\beta$ en fonction du paramètre r , tiré au hasard entre 0 et 1, pour avoir un angle β de déviation suivant la distribution $P_\varepsilon(\beta)$.

1.1. Interaction optique polaire

L'interaction optique polaire est une interaction inélastique : elle est accompagnée d'une émission ou d'une absorption d'un phonon d'énergie $\hbar\omega_0$. Les seules énergies possibles après interaction ont la forme suivante :

$$\varepsilon' = \varepsilon \pm \hbar\omega_0 \quad \dots (A-5)$$

la densité de probabilité qui décrit le passage d'un état \vec{k} à un autre état \vec{k}' est donnée par la formule suivante :

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot B_0(\vec{k}, \vec{k}') \left(N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \cdot \delta(\varepsilon(k')) \cdot \delta(\varepsilon(k') - \varepsilon(k) \pm \hbar\omega_0) \quad \dots(A-6)$$

où

$$B_0(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi \cdot e^2 \cdot \hbar \cdot \omega_0}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot |\vec{k} - \vec{k}'|^2} \cdot \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right) \cdot G(k, k') \quad \dots(A-7)$$

avec :

$$G(k, k') = \left[\left(\frac{1 + \alpha \cdot \varepsilon(k)}{1 + 2\alpha \cdot \varepsilon(k)} \cdot \frac{1 + \alpha \cdot \varepsilon(k')}{1 + 2\alpha \cdot \varepsilon(k')} \right)^{1/2} + \left(\frac{\alpha \cdot \varepsilon(k)}{1 + 2\alpha \cdot \varepsilon(k)} \cdot \frac{\alpha \cdot \varepsilon(k')}{1 + 2\alpha \cdot \varepsilon(k')} \right)^{1/2} \cdot \cos \beta \right]^2 \quad (A-8)$$

et

$$N_0 = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_0 / K_B \cdot T) - 1} \quad \dots(A-9)$$

où

N_0 représente la fonction de répartition des phonons.

$G(k, k')$ est l'intégrale de recouvrement, prenant en compte la non parabolicité des bandes d'énergie.

ε_∞ et ε_s sont les permittivités diélectriques relatives.

T est la température du réseau.

K_B la constante de Boltzmann.

\hbar la constante de planck .

e la charge de l'électron.

I.1.1. Calcul de la probabilité d'interaction [1],[2] :

Comme nous l'avons vu L'intégration sur tous les états \vec{k} s'écrit sous la forme:

$$\lambda(k) = \frac{V}{8.\pi^3} . 2\pi. \int_0^\pi \left[\int_0^\infty S(\vec{k}, \vec{k}') k'^2 dk' \right] \sin \beta. d\beta \quad \dots \text{(A-10)}$$

Le changement de variable donnée par la formule (A-3) : $\varepsilon'(1 + \alpha.\varepsilon') = \frac{\hbar^2 . k'^2}{2m^*}$

Puis l'intégration immédiate sur ε' compte tenu des propriétés de la fonction de dirac donnent, après avoir posé :

$$\delta(\varepsilon) = \varepsilon.(1 + \alpha.\varepsilon)$$

et

$$\delta(\varepsilon') = \varepsilon' . (1 + \alpha.\varepsilon')$$

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{e^2 . m^{*1/2} . \omega_0}{\hbar . \sqrt{2.4.\pi.\varepsilon_0}} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_S} \right) \cdot \frac{\sqrt{\delta(\varepsilon')}}{1 + 2\alpha.\varepsilon} \quad \dots \text{(A-11)}$$

$$\times \int_0^\pi \frac{(\sqrt{1 + \alpha.\varepsilon} . \sqrt{1 + \alpha.\varepsilon'} + \alpha\sqrt{\varepsilon\varepsilon'} . \cos \beta)^2}{\delta(\varepsilon) + \delta(\varepsilon') - 2 \cos \beta . \sqrt{\delta(\varepsilon)\delta(\varepsilon')}} . \sin \beta. d\beta . \left(N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right)$$

Après intégration sur l'angle β on aura :

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{e^2 . m^{*1/2} . \omega_0}{\hbar . \sqrt{2.4.\pi.\varepsilon_0}} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_S} \right) \cdot \frac{1 + 2\alpha.\varepsilon'}{\sqrt{\delta(\varepsilon)}} . F(\varepsilon, \varepsilon') \left(N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \quad \dots \text{(A-12)}$$

où

$$F(\varepsilon, \varepsilon') = \frac{1}{C} \left(A \cdot \text{Ln} \left| \frac{\delta^{1/2}(\varepsilon) + \delta^{1/2}(\varepsilon')}{\delta^{1/2}(\varepsilon) - \delta^{1/2}(\varepsilon')} \right| + B \right) \quad \dots (A-13)$$

avec

$$A = [2.(1 + \alpha.\varepsilon).(1 + \alpha.\varepsilon') + \alpha(\delta(\varepsilon) + \delta(\varepsilon'))]^2 \quad \dots (A-14)$$

$$B = -2\alpha(\delta(\varepsilon).\delta(\varepsilon'))^{1/2}.[4.(1 + \alpha.\varepsilon).(1 + \alpha.\varepsilon') + \alpha(\delta(\varepsilon) + \delta(\varepsilon'))] \quad \dots (A-15)$$

$$C = 4(1 + \alpha.\varepsilon).(1 + \alpha.\varepsilon').(1 + 2\alpha.\varepsilon).(1 + 2\alpha.\varepsilon') \quad \dots (A-16)$$

II.1.2. Détermination de l'angle β

L'équation (A-11) donne la possibilité d'écrire la fonction $P_\varepsilon(\beta)$ de distribution de l'angle β sous la forme suivante :

$$P_\varepsilon(\beta) = \frac{(\sqrt{1 + \alpha.\varepsilon}.\sqrt{1 + \alpha.\varepsilon'} + \alpha\sqrt{\varepsilon.\varepsilon'}.\cos\beta)^2}{\delta(\varepsilon) + \delta(\varepsilon') - 2\cos\beta.\sqrt{\delta(\varepsilon).\delta(\varepsilon')}} \cdot \sin\beta \quad \dots (A-17)$$

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

$$r \cdot \int_0^\pi P_\varepsilon(\beta') d\beta' = \int_0^\beta P_\varepsilon(\beta') d\beta' \quad \dots (A-18)$$

après avoir intégré la dernière équation (A-18) elle aura donc la forme suivante :

$$\frac{A}{2} \cdot \text{Ln} \left(1 + \frac{2\sqrt{\delta(\varepsilon)}\delta(\varepsilon')\cdot(1-\cos\beta)}{(\sqrt{\delta(\varepsilon)}-\sqrt{\delta(\varepsilon')})^2} \right) + \frac{B}{2}(1-\cos\beta) - \alpha^2 \cdot \delta(\varepsilon)\delta(\varepsilon')\cdot(1-\cos^2\beta)$$

$$= r \cdot \left[A \cdot \text{Ln} \frac{\sqrt{\delta(\varepsilon)} + \sqrt{\delta(\varepsilon')}}{|\sqrt{\delta(\varepsilon)} - \sqrt{\delta(\varepsilon')}|} + B \right] \quad \dots (A-19)$$

Cette dernière expression ne nous donne pas la possibilité d'exprimer $\cos\beta$ sous forme analytique. On peut toute fois remarquer que α a été introduit en développant en série au premier ordre en ε , la relation de dispersion. Il est donc légitime de faire la même démarche pour l'équation (A-20). En développant (A-20) au second ordre en α , il vient :

$$\cos\beta = \frac{1+f - (1+2f)^r}{f} \quad \dots (A-20)$$

avec :

$$f = \frac{2\sqrt{\varepsilon\varepsilon'}}{(\sqrt{\varepsilon} - \sqrt{\varepsilon'})^2} \quad \dots (A-21)$$

1.2. Interaction intervallée équivalente et non équivalente [1], [2]

Ce type de transitions permettent le transfert des porteurs d'une vallée à une autre vallée équivalente ou non équivalente. Elles sont accompagnées d'une émission ou d'une absorption d'un phonon intervallé dont la valeur dépend de la vallée de départ et de la vallée d'arrivée. Une interaction intervallée, ne peut avoir lieu que si l'énergie après absorption ou émission du phonon est supérieure à l'énergie du fond de la vallée d'accueil. Les énergies étant repérées par rapport au bas de vallée centrale Γ .

La densité de probabilité de passage de l'état \vec{k} à l'état \vec{k}' qui permette le transfert de la vallée i vers la vallée j équivalente ou non, s'écrit sous la forme :

$$S_{ij}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot B_{ij}(k, k') \left(N_{ij} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \cdot \delta[\varepsilon_j(k') - \varepsilon_i(k) + \Delta_j - \Delta_i \pm \hbar\omega_{ij}] \dots (A-22)$$

où

$$B_{ij}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{Z_{ij} \cdot \hbar \cdot E_{ij}^2 \cdot (1 + \alpha_i \cdot \varepsilon_i) \cdot (1 + \alpha_j \cdot \varepsilon_j)}{2\rho \cdot \omega_{ij} \cdot V \cdot (1 + 2\alpha_i \cdot \varepsilon_i) \cdot (1 + 2\alpha_j \cdot \varepsilon_j)} \dots (A-23)$$

et

$$N_{ij} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_{ij}/K_B \cdot T) - 1} \dots (A-24)$$

$\hbar\omega_{ij}$ représente l'énergie du phonon échangé.

Δ_i et Δ_j sont les énergies relatives aux fonds des vallées i et j.

ε_i et ε_j sont les énergies relatives dans chaque vallée.

α_i et α_j sont les coefficients de non parabolicité.

Z_{ij} est le nombre de vallées d'arrivée de type j quand on part de la vallée i.

E_{ij} est le potentiel de déformation intervallée entre la vallée i et la vallée j.

ρ désigne la masse volumique du matériau.

L'intégration sur tous les états \vec{k}' finals conduit à la formule suivante :

$$\lambda_{ij}(\varepsilon_i) = \frac{Z_{ij} \cdot m_j^{*3/2} \cdot E_{ij}^2}{\pi \cdot \sqrt{2} \cdot \rho \cdot \omega_{ij} \cdot \hbar^3} \left(N_{ij} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \cdot \frac{\delta_j(\varepsilon') \cdot (1 + \alpha_i \cdot \varepsilon_i) \cdot (1 + \alpha_j \cdot \varepsilon_j')}{(1 + 2\alpha_i \cdot \varepsilon_i)} \dots (A-25)$$

On constate que $S(\vec{k}, \vec{k}')$ ne dépend pas de l'angle de déviation β , sur la sphère représentatrice de l'énergie finale, tous les états finals \vec{k}' sont équiprobables. L'angle β est alors obtenu en tirant au hasard un réel r entre 0 et 1 tel que :

$$r = \int_0^\beta \frac{\sin \beta \cdot d\beta}{2} \dots (A-26)$$

soit :

$$\cos \beta = 1 - 2r \quad \dots (A-27)$$

1.3. Interaction acoustique [1]

Ce type d'interaction est aussi élastique, la densité de probabilité s'écrit sous la forme :

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot B_{ac}(\vec{k}, \vec{k}') N_{ac} \cdot \delta(\varepsilon(k') - \varepsilon(k)) \quad \dots (A-28)$$

avec

$$B_{ac}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\hbar}{2\rho \cdot s \cdot V} \cdot E_{ac}^2 \cdot |\vec{k} - \vec{k}'| \cdot G(k, k') \quad \dots (A-29)$$

L'expression de $G(k, k')$ est donnée par :

$$G(k, k') = \left[\left(\frac{1 + \alpha \cdot \varepsilon(k)}{1 + 2\alpha \cdot \varepsilon(k)} \cdot \frac{1 + \alpha \cdot \varepsilon(k')}{1 + 2\alpha \cdot \varepsilon(k')} \right)^{1/2} + \left(\frac{\alpha \cdot \varepsilon(k)}{1 + 2\alpha \cdot \varepsilon(k)} \cdot \frac{\alpha \cdot \varepsilon(k')}{1 + 2\alpha \cdot \varepsilon(k')} \right)^{1/2} \cdot \cos \beta \right]^2$$

Et

$$N_{ac} = \frac{1}{(\exp(\hbar \cdot s \cdot |\vec{k} - \vec{k}'| / K_B \cdot T) - 1)} \approx \frac{K_B \cdot T}{|\vec{k} - \vec{k}'| \cdot \hbar \cdot s} \quad \dots (A-30)$$

E_{ac} : est le potentiel de déformation acoustique

s : est la vitesse du son.

ρ : la masse volumique du matériau.

L'intégration sur l'énergie donne :

$$\lambda_{ac}(\varepsilon) = \frac{K_B \cdot T \cdot E_{ac}^2 \cdot m^{*3/2}}{\pi \cdot \rho \cdot s^2 \cdot \hbar^4 \cdot \sqrt{2}} \cdot \delta^{1/2}(\varepsilon) \int_0^\pi (1 + \alpha \varepsilon + \alpha \varepsilon \cos \beta)^2 \cdot \sin \beta \cdot d\beta \quad \dots (A-31)$$

Elle devient après intégration complète sous la forme :

$$\lambda_{ac}(\varepsilon) = \frac{K_B \cdot T \cdot E_{ac}^2 \cdot m^{*3/2}}{\rho \cdot s^2 \cdot \hbar^4 \cdot 3\pi \cdot \sqrt{2}} \cdot \delta^{1/2}(\varepsilon) \cdot \frac{3(1 + \alpha \varepsilon)^2 + (\alpha \varepsilon)^2}{(1 + 2\alpha \varepsilon)} \quad \dots (A-32)$$

L'expression (A-31) fait apparaître la fonction de distribution de l'angle. Après tirage au hasard d'un réel r compris entre 0 et 1, on obtient l'angle β en résolvant l'équation :

$$r \cdot \int_0^\pi (1 + \alpha \varepsilon + \alpha \varepsilon \cos \beta)^2 \sin \beta \cdot d\beta = \int_0^\beta (1 + \alpha \varepsilon + \alpha \varepsilon \cos \beta)^2 \sin \beta \cdot d\beta \quad \dots (A-33)$$

dont la solution s'écrit sous la forme:

$$\cos \beta = \frac{\left((1 + 2\alpha \varepsilon)^3 \cdot (1 - r) + r \right)^{1/3} - 1}{\alpha \varepsilon} \quad \dots (A-34)$$

Généralement $\alpha \varepsilon$ est petit devant 1 ; cette distribution est alors quasi-uniforme.

1.4. Interaction piézo-électrique [1], [2]

C'est une interaction élastique dont la densité de probabilité relative au passage d'un état \vec{k} à un état \vec{k}' s'écrit sous la forme :

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{e^2 \cdot K_B \cdot T \cdot P^2 \cdot G(k, k')}{4\pi^2 \cdot \hbar \cdot \epsilon_0 \cdot \epsilon_S \cdot |\vec{k} - \vec{k}'|^2} \cdot \delta(\epsilon - \epsilon') \quad \dots (A-35)$$

L'expression de $G(k, k')$ est la même déjà donnée pour l'interaction optique polaire et l'interaction acoustique.

La constante P qui intervient est un coefficient piézo-électrique sans dimension qui s'exprime en fonction de constantes piézo-électriques connues h_{14} , c_{11} , c_{12} et c_{44} par la relation :

$$P^2 = \frac{1}{35} \cdot h_{14}^2 \cdot \epsilon_0 \cdot \epsilon_S \cdot \left(\frac{12}{c_l} + \frac{16}{c_t} \right) \quad \dots (A-36)$$

$$\text{où} \begin{cases} c_l = \frac{3c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44}}{5} \\ c_t = \frac{c_{11} - c_{12} + 3c_{44}}{5} \end{cases} \quad \dots (A-37)$$

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

$$\lambda(\epsilon) = \frac{e^2 K_B T P^2 \cdot m^{*1/2}}{4\sqrt{2} \cdot \pi \cdot \hbar^2 \cdot \epsilon_0 \epsilon_S \cdot (1 + 2\alpha\epsilon) \cdot \delta^{1/2}(\epsilon)} \cdot \int_0^\pi \frac{(1 + \alpha\epsilon + \alpha\epsilon \cos \beta)^2 \cdot \sin \beta \cdot d\beta}{1 - \cos \beta} \quad \dots (A-38)$$

L'intégrale sur β présente une indétermination à l'origine, la loi de probabilité au voisinage de β est impropre, cette difficulté est purement mathématique, car pour $\beta \rightarrow 0$; $\lambda(\epsilon) \rightarrow \infty$. Mais, si on se concentre sur $\lambda(\epsilon)$ en fonction de l'énergie, nous constatons que l'interaction piézo-électrique est la plus improbable parmi toutes les interactions étudiées. De plus l'interaction piézo-électrique est élastique. Si, l'interaction n'a aucun effet sur le parcours de l'électron. Pour contourner cette difficulté purement liée aux limites du

modèle mathématique, la borne inférieure est ramenée à une valeur « a » suffisamment petite pour que la perturbation apportée par cette approximation soit inopérante; en l'occurrence, $a=0.01$ radians. L'expression de la probabilité d'interaction s'écrit alors, après intégration :

$$\lambda_{pi} = \frac{e^2 \cdot k_B \cdot T \cdot P_{pi}^2 \cdot m^{*1/2}}{4\sqrt{2} \cdot \pi \cdot \hbar^2 \cdot \epsilon_0 \cdot \epsilon_S \cdot \delta^{1/2}(\epsilon)} \cdot \frac{I}{(1 + 2\alpha \cdot \epsilon)} \quad \dots (A-39)$$

où

$$I = (1 + 2\alpha \cdot \epsilon)^2 \cdot \text{Ln} \left| \frac{2}{1 - \cos a} \right| - 2\alpha \cdot \epsilon \cdot (1 + 2\alpha \cdot \epsilon) \cdot (1 + \cos a) + \frac{(\alpha \cdot \epsilon)^2}{2} \cdot [4 - (1 - \cos a)^2] \quad \dots (A-40)$$

L'équation (A-38) fait apparaître la fonction de distribution de l'angle β . Après avoir tiré un réel r compris entre 0 et 1, l'angle β de déviation est obtenu en résolvant l'équation :

$$r = \frac{1}{I} \int_a^\beta \frac{(1 + \alpha \epsilon + \alpha \epsilon \cos \beta')^2}{1 - \cos \beta'} \cdot \sin \beta' \cdot d\beta' \quad \dots (A-41)$$

qui peut se mettre sous la forme :

$$\frac{\alpha^2 \epsilon^2}{2} [(1 - \cos \beta)^2 - (1 - \cos a)^2] - 2\alpha \epsilon (1 + 2\alpha \epsilon) [(1 - \cos \beta) - (1 - \cos a)] + (1 + 2\alpha \epsilon)^2 \cdot \text{Ln} \left(\frac{1 - \cos \beta}{1 - \cos a} \right) - r \cdot I = 0 \quad \dots (A-42)$$

C'est une équation qui est très difficile à résoudre analytiquement.

Elle est résolue numériquement par une méthode de dichotomie initialisée à la valeur la plus probable $\beta = a$.

1.5. Interaction optique non polaire [1], [2]

L'interaction optique non polaire est inélastique, intravallée et ne peut y être que dans les vallées de symétrie L. Elle est accompagnée d'une absorption ou émission d'un phonon optique non polaire.

La densité de probabilité $S(\vec{k}, \vec{k}')$ aura la même forme que celle des interactions intervallées (avec $j=i$). Le traitement de cette interaction est donc comparable à celui des interactions intervallées.

1.6. Interaction avec les impuretés ionisées [1]

Pour ce type d'interaction on ne tient compte que d'interactions avec les impuretés totalement ionisées. La densité de probabilité relative au passage d'un état \vec{k} à un état \vec{k}' au cours de cette interaction élastique s'écrit :

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{32\pi^3 \cdot e^4 \cdot N_D}{(4\pi \cdot \epsilon_0 \epsilon_s)^2 \cdot \hbar \cdot V} \cdot \frac{G(k, k')}{(|\vec{k} - \vec{k}'| + \theta)^2} \cdot \delta(\epsilon(k') - \epsilon(k)) \quad \dots (A-43)$$

N_D est la concentration en impuretés

θ est l'inverse de la distance d'écran, elle est reliée à la concentration en impuretés par :

$$\theta^2 = \frac{N_D \cdot e^2}{\epsilon_0 \epsilon_s K_B T} \quad \dots (A-44)$$

$G(k, k')$ a la même expression que l'interaction optique polaire.

Après intégration sur l'énergie, la probabilité d'interaction aura la forme suivante :

$$\lambda(\epsilon) = \frac{e^4 N_D m^{*3/2} \cdot \delta^{1/2}(\epsilon)}{\sqrt{2\pi} (\epsilon_0 \epsilon_s)^2 \cdot \hbar^4} \int_0^\pi \frac{(1 + \alpha\epsilon + \alpha\epsilon \cos \beta)^2}{(2k^2(1 - \cos \beta) + \theta^2)^2} \cdot \sin \beta \cdot d\beta \quad \dots (A-45)$$

qui devient après intégration complète :

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2} \cdot \pi \cdot N_D \cdot e^4 \cdot \varepsilon^{-4/2} \cdot (1 + 2\alpha \cdot \varepsilon)}{(4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_S)^2 \cdot m^{*1/2} \cdot (1 + \alpha \cdot \varepsilon)^{3/2}} \cdot I \quad \dots (A-46)$$

avec
$$I = \frac{[1 + 2 \cdot e_k^4 \cdot (\theta/2k)^2]^2}{4 \cdot (\theta/2k)^2 \cdot [1 + (\theta/2k)^2]} + e_k^2 \cdot [1 + 2e_k^2 \cdot (\theta/2k)^2] \cdot \text{Ln} \left[\frac{(\theta/2k)^2}{1 + (\theta/2k)^2} \right] + e_k^4 \dots (A-47)$$

où

$$e_k = \left(\frac{\alpha \cdot \varepsilon}{1 + 2\alpha \cdot \varepsilon} \right)^{1/2} \quad \dots (A-48)$$

Nous avons constaté dans l'expression I, que les 2^{èmes} et 3^{èmes} termes sont négligeables devant le 1^{er} terme. La probabilité d'interaction s'écrit alors sous une forme simplifiée :

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{e^2 \cdot m^{*1/2} \cdot k_B \cdot T}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_S \cdot \hbar^2 \cdot \sqrt{2}} \cdot \frac{1 + 2\alpha \cdot \varepsilon}{\delta(\varepsilon)^{1/2}} \quad \dots (A-49)$$

L'équation (A-45) met en évidence la fonction de distribution de l'angle de déviation β . La dernière approximation peut s'appliquer pour le calcul de l'angle de déviation β et après avoir tiré au hasard un réel r entre 0 et 1, l'angle de déviation β correspondant sera donné après calcul, par la relation qui suit :

$$\cos \beta = 1 - \frac{2r}{1 + (1-r)(4 \cdot k^2 / \theta^2)} \quad \dots (A-50)$$

ANNEXE C

Principaux paramètres du matériau InAs Utilisé dans la simulation de Monte Carlo

I. Paramètres relatifs au matériau

Constante du réseau = $5.05 \text{ e-}10 \text{ m}$

Densité = $5.67 \text{ e}3 \text{ Kg-m}^3$

Affinité électronique = $7.34 \text{ e-}19 \text{ joule}$

Constante piézo-électrique = 0.027 C-m^{-2}

énergie du phonon LO= $48.128 \text{ e-}19 \text{ joule}$

vitesse acoustique longitudinale = $4.28 \text{ e}3 \text{ m/sec}$

constante diélectrique statique = 15.15

constante diélectrique en haute fréquence = 12.75

II. PARAMETRES RELATIFS A LA STRUCTURE DE BANDE

		Vallée Γ	Vallée L	Vallée X
Masse effective (kg)		2.093 e-32	2.639 e-31	5.824 e-31
Coefficient de non parabolicité (joule ⁻¹)		7.8125 e18	1.612 e18	1.25 e18
Gap par rapport à la bande de valence (joule)		5.6 e-20	1.728e-19	2.192 e-19
Energie qui sépare les vallées (joule)		0	1.168 e-19	1.632e-19
Potentiel de déformation acoustique (joule)		9.408 e-19	17.28 e-19	15.36 e-19
Potentiel de déformation optique (joule/m)		6.064 e-9	6.064 e-9	6.064 e-9
Energie du phonon optique (joule)		5.232 e-21	5.888 e-21	6.176 e-21
Nombre de vallées équivalentes		1	4	3
Potentiel de déformation intervallée (joule/m)	Γ	0	1.2512 e-19	1.8112 e-19
	L	1.2512e-19	1.0224 e-19	1.088 e-19
	X	1.8112e-19	1.088 e-19	1.3648 e-19
énergie du phonon intervallée (joule)	Γ	0	4.064 e-21	4.112 e-21
	L	4.064 e-21	3.888 e-21	4.832 e-21
	X	4.112 e-21	4.832 e-21	4.528 e-21

REFERENCES
BIBLIOGRAPHIQUES

REFERENCES

- [1]- A.Kaszynski, « étude des phénomènes de transport dans les matériaux semiconducteurs par les méthodes de Monte Carlo : application à l'Arséniure de Gallium de type N », thèse de Docteur Ingénieur, Université des Sciences et Techniques de Lille, 1979.
- [2]- M.Fadel, « contribution à l'étude du bruit et du transport en régime d'électrons chauds dans l'InP », thèse de Docteur de 3^{ème} Cycle Electronique, Université des Sciences et Techniques du Languedoc, 1983.
- [3]- J.Zimmermann, « Etude par la méthode de Monte Carlo des phénomènes de transport électronique dans le Silicium de type N en régimes stationnaires et non stationnaires. Application à la simulation de composants submicroniques », Thèse de Doctorat d'état, Université de Lille 1, 1980.
- [4]- Yasuko Hori, Effect of strain on band structure and electron transport in InAs. Solide State Electron Fundamental research Laboratories, Ibaraki 305-8501, Japan 1999.
- [5]- A.K. Ghorai and D. P. Bhattacharya <<Mobility characteristics of non- equilibrium carriers in III -V compounds at low lattice temperatures>>, department of physics, jadavpur university, calcutta.
- [6]-W.T.Anderson <<Simulation of Semiconductor Device Failure Mechanisms>>, Naval research Laboratory, washington. D. C; 2. Fraunhofer Institute, Freiburg, Germany.
- [7]- P.N.Favennec, « technologies pour les composants à semiconducteurs », Edition Masson, 1996.

- [8]-Conwell E.M. High field transport in semiconducteurs academic press, new york (1967).
- [9]-Nag B.R. Electron transport in compound semiconducteurs. Springer, Berlin (1980).
- [10]-Ferry D.K. Semiconductors. Maxwell macmillan . Internationnal new york (1991).
- [11]-Nakayama T, et al. Enhancement of electron mobility by preventing pint formation at the $\text{In}_{0.52}\text{Ga}_{0.48}\text{As}/\text{In}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{As}$, heterointerface using an inserted $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ layer. J cryst Growth 1995; 150;1220.
- [12]-Nakayama T, et al . High electron mobility 18300 (Cm^2/Vs) in the InAlAs/InGaAs pseudomorphique structure obtained by channel indium composition modulation. J Electron mater 1996,25, 555
- [13]- Kleimman L, Bbylander DM. Efficacious form for model pseudopotentials, Phys Rev Lett 1982, 48, 1425.
- [14]-C jeng KY . Cho Ay, Christman SB, Peasall TP, Rowe JE. Measurement of the Γ -L separation in GaInAs by ultraviolet photoemission. Appl Phys Lett 1982,40,423.
- [15]-Ridely BK. Anatomy of the transferred electron effect in III-V semiconductors. J Appl Phys 1977,48,754.
- [16]-Brennan K, Hess K. High field transport in GaAs, InP and InAs. Solide state Electron 1984, 27, 347.
- [17]-Brennan KF, Mansour MS. Monte Carlo Coluculation of electron impact ionization in bulk InAs and HgCdTe, J Appl phys 1991; 69,7844.

- [18]-Feschetti MV. Monte Carlo simulation of transport in technologically significant semiconductors of the diamond and Zinc Blend structures, Part I : Homogeneous transport 1991, 38,634.
- [19]- K. Blotcjaer. Transport équations for electrons in two valley semiconductors,IEEE Trans.
- [20]- P.T. Landsberg and S.A. hope, two formulations of semiconducteurs transport equations, solide state, electronics.
- [21]- K. Hannacy, N. Goldsman and I.D. Mayergoyz, 2 dimensional solution to the Boltzmann transport équation to arbitrarily high order accuracy, proc. Int workshop on computational electronics, Leeds, 1993, 118-122.
- [22]- M.V- Fishitti and S.E. Laux, Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band- structure and space charge effects, physical Rev. B, 9721-9730.
- [23]- C. R Crowell and S.M. Sze, Température dependence of avalanche multiplication in semiconductors, Appl, phys. Lett, 242-244.
- [24]- C. Jacoboni and L.Reggiani, the Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials, Rev, modern physics.
- [25]- F. Banse, J. L. Dekeyser, R. Fauquembergue, « Parallélisation d'une méthode de Monte Carlo pour la simulation des composants semiconducteurs », publication interne Laboratoire Informatique de Lille (LIFL) Février 1999.

[26]- B. BOUAZZA, « Etude de phénomènes de transport dans les matériaux III-V par la méthode de Monte Carlo : Application au GaAs ». Communication à la conférence Maghrébine en Génie Electrique CMGE'01, novembre 2001.

[27]- P.Hesto, « simulation Monte Carlo du transport non stationnaire dans les dispositifs submicroniques : importance du phénomène balistique dans GaAs à 77 k », Thèse de docteur en sciences, Université de Paris-Sud, Centre d'Orsay, 1984.

[28] C. SAYAH «Application de la méthode de Monte Carlo aux composés III-V », université de Tlemcen abou-bekr belkaïd, Thèse de Magister Avril 2002.