

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

وزارة التعليم العالي و البحث العلمي

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

جامعة أبي بكر بلقايد- تلمسان -

Université Aboubakr Belkaïd- Tlemcen -



THESE

Présentée pour l'obtention du **grade** de **DOCTEUR EN SCIENCES**

En : Electronique

Spécialité : Microélectronique

Par : Youcef BELHADJI

Sujet

Analyse et modélisation des mécanismes de transport électronique dans les dispositifs à effet de champ à l'aide des techniques Monte Carlo : Application au MESFET à base de carbure de silicium, GaSb, et ternaires

Soutenue publiquement, le 08 / 12 / 2016, devant le jury composé de :

Mme BOUAZZA née GUEN Ahlam	Professeur	Univ. Tlemcen	Président
M. BOUAZZA Benyounès	MCA	Univ. Tlemcen	Directeur
M. CHABANE-SARI Nasr Eddine	Professeur	Univ. Tlemcen	Examineur 1
Mme AYACH née SAYAH Choukria	MCA	Centre Univ. Aïn Temouchent	Examineur 2
M. BENALLAL Rafik	MCA	École Préparatoire des Sciences et Techniques, EPSTT. Tlemcen	Examineur 3

Patience Mène à Science

Proverbe Italien



Dédicace

Je dédie cette thèse

À mes parents.

À ma femme.

À mes frères.

À mes amis.

Remerciements

Au nom d'Allah le tout Miséricordieux et que la prière et la paix soient sur notre prophète Mohammed.

Au début, je commence par remercier Allah le tout puissant d'avoir me donner la puissance, la patience et le courage pour réaliser cette thèse. Je vous remercie Allah de m'entourer de personnes formidables qui ont, chacune à leur façon, et ce, à différentes étapes de mon cheminement, contribué, d'une manière ou d'une autre, à la réalisation de ce travail.

Je remercie très chaleureusement mon directeur de thèse, monsieur BOUAZZA Benyounès, d'avoir assuré la direction de cette thèse. Je lui suis toujours reconnaissant de m'avoir assuré un encadrement rigoureux tout au long des années de préparation de cette thèse. Il me donna souvent la possibilité de trouver par moi-même mon cheminement personnel. Sa compétence, sa rigueur scientifique et sa clairvoyance m'ont beaucoup appris. Mr. BOUAZZA m'a toujours accordé, généreusement, le temps nécessaire pour partager les idées et de bénéficier de sa grande expérience dans le domaine de l'électronique. Aussi, tout au long de cette thèse, il n'a ménagé ni ses commentaires, toujours rigoureux, ni ses encouragements et ses soutiens morales. J'ai particulièrement apprécié la confiance qu'il a su garder en ma capacité et mes compétences durant tout mon cursus d'étude, à rendre ce travail à terme. Pour tout ça, il trouve ici l'expression de ma profonde gratitude. Merci beaucoup Mr. Bouazza.

Je suis grandement reconnaissant à madame BOUAZZA née Guen Ahlam, d'abord pour sa modeste, ses conseils et ses commentaires judicieux, lesquels m'ont permis de raffiner et d'enrichir d'avantage mon esprit scientifique, et aussi d'avoir m'honorer de présider le jury de cette thèse.

Les examinateurs M. CHABANE-SARI Nasr Eddine, Mme AYACH née SAYAH Choukria et Mr. BENALLAL Rafik, qui ont accepté de siéger sur le jury de cette thèse, doivent aussi trouver ici l'expression de ma profonde reconnaissance.

Mes remerciements vont particulièrement à mes parents, qui m'ont constamment encouragés et soutenu tout au long de mes années d'étude. Je ne saurais passer sous silence l'apport inestimable de mes frères qui m'ont soutenu, de près ou de loin. Également j'exprime ma sincère gratitude à ma chère femme pour l'amour qu'elle me témoigne. Les mots me manquent pour la remercier, à sa juste valeur, pour ses soutiens moral indispensables durant la finalisation de cette thèse et pour maintenir ce travail à flot, au travers des aléas de la vie et pour avoir cru en mes capacités intellectuelles et à mon sens de l'organisation pour réaliser ce travail. Je la remercie grandement d'avoir beaucoup m'encouragé et me donner l'espoir et la volonté, dans les moments difficiles afin de finir ce travail.

Je ne saurais terminer sans souligner le soutien amical et chaleureux de mes amis et collègues Ahmed Amine El-Ouchdi, Fateh Moulahcène, Abdallah Ikhlef et Samir Belmahi pour leurs apports scientifiques et sociaux trop marquants dans la réalisation de cette thèse.

Je remercie tous les personnes qui m'ont soutenu durant mon parcours doctoral.

Merci à tous et à toutes.

Youcef Belhadji

Table des Matières

INTRODUCTION GENERALE	(11)
------------------------------------	------

CHAPITRE 1

1. Introduction	(14)
2. Historique sur le Carbure de Silicium	(16)
3. Propriété du Carbure de Silicium	(17)
3.1. Propriétés cristallographiques	(19)
3.1.2. Liaison Si-C	(19)
3.1.2. Notion de Polytypisme	(20)
3.1.3 Facteurs de Mérite	(23)
3.2. Structure de bande et zone de Brillouin	(25)
4. La fabrication du Carbure de Silicium	(27)
Références	(30)

CHAPITRE 2

1. Introduction	(33)
2. Mode de fonctionnement	(35)
2.1. Structure	(35)
2.2. Principe	(36)
2.3. Régimes de fonctionnement et caractéristiques	(39)
3. Les MESFETs en Carbure de Silicium	(41)
3.1. Description.....	(41)
3.2. Structure et caractéristiques.....	(43)
4. Le transport électronique dans le SiC-MESFET	(45)
Références	(47)

CHAPITRE 3

1. Introduction	(49)
2. Transport de charge dans les semiconducteurs	(52)
2.1. Fonction de Bloch	(52)
2.2. Modèle de bandes paraboliques	(53)
2.3. Modèle de bandes non-paraboliques.....	(54)
2.4. L'équation de Boltzmann.....	(55)

Table des Matières

2.4.1. Modèle mathématique.....	(55)
2.4.2. La mobilité et l'équation de Boltzmann.....	(57)
3. Transport de charges dans les dispositifs semiconducteurs.....	(62)
Références	(63)

CHAPITRE 4

1. Introduction	(65)
2. Description de la méthode de Monte Carlo	(66)
3. Démarches d'implémentation de la méthode	(69)
3.1. Création du vol libre	(73)
3.2. Technique Self Scattering	(75)
3.3. Sélection des interactions et calcul de l'angle de déviation	(77)
3.4. Formulation des interactions	(79)
4. Applications: Simulation du transport électronique dans les substrats semiconducteurs.....	(80)
4.1. Exemple de simulation du Transport électronique dans le GaSb : Régime stationnaire et non-stationnaire	(81)
4.1.1. Vitesse de dérive	(82)
4.1.2. Distribution de l'énergie et du potentiel électrostatique... ..	(85)
4.1.3. Transport en régime non-stationnaire.....	(85)
4.2. Transport électronique dans le Carbure de silicium	(87)
4.2.1. Fonction de distribution des électrons	(87)
4.2.2. Distribution de l'énergie moyenne	(88)
4.2.3. Vitesse de dérive	(91)
4.2.4. Transport électronique transitoire sous l'effet de forts champs électriques	(92)
4.2.5. Effet de la température sur les caractéristiques de transport	(94)
Références	(97)

CHAPITRE 5

1. Introduction	(100)
2. Effet de la miniaturisation sur la simulation des dispositifs	(103)
3. Equations de transport pour la simulation du Transistor MESFET.....	(104)

Table des Matières

4. Démarches de Simulation du Transistor MESFET par la méthode de Monte Carlo	(106)
4.1. Condition aux limites	(106)
4.2. Maillage des particules et calcul du potentiel.....	(109)
5. Présentation du simulator Monte Carlo	(113)
5.1. Description	(113)
5.2. Organigramme de simulation	(115)
6. Applications : Simulation du MESFET submicronique	(116)
6.1. Exemple d'un MESFET à base de matériaux III-V.....	(117)
6.1.1. MESFET en GaSb	(119)
6.1.2. MESFET à base du $Al_{0.23}In_{0.78}Sb$	(122)
6.2. Simulation du MESFET latéral à base du 4H-SiC	(124)
6.2.1. Effet de la température sur les caractéristiques de transport électronique du 4H-SiC-MESFET	(127)
6.2.2. Caractéristique I(V)	(130)
Références	(131)
CONCLUSION GENERALE & PERSPECTIVES	(134)
ANNEXE.....	(138)
PUBLICATIONS SCIENTIFIQUES	

Table des figures

Fig.1.1 Echantillon de carbure de silicium.....	15
Fig.1.2 Comparaison des performances du Si et le SiC dans le cas de la diode Schottky	19
Fig.1.3 Structure tétraédrique formé par un atome de carbone entouré par quatre atomes de silicium.....	20
Fig. 1.4 Les séquences d'empilement des principaux polytypes du Carbure de Silicium	21
Fig.1.5 Zone de Brillouin	25
a. réseau cubique, b. réseau hexagonal	
Fig.1.6 Structure de bande	26
3C-SiC b. 2H-SiC	
Fig. 1.7 Représentation de la technique PVT.....	28
Fig.1.8 Actualité de la technologie des substrats SiC	29
Fig.2.1 Structure d'un MESFET	34
Fig.2.2 Schéma de principe du MESFET	36
Fig.2.3 Polarisation d'un MESFET	37
Fig.2.4 Démonstration du pincement du canal.....	38
Fig.2.5 Diagramme d'énergie du barrière Schottky montrant la tension la tension de Built-in V_{bi}	39
Fig.2.6 Caractéristique $I_{DS}=f(V_{DS})$ à V_{GS} constant	40
Fig.2.7 Les structures du transistor MESFET :.....	41
a. Structure latérale b. Structure verticale	
Fig.2.8 Evolution de la densité de puissance en fonction de la tension du drain pour des MESFET en Si, GaAs, 4H-SiC et GAN	43
Fig. 2.9 Vue en coupe transversale de la structure d'un 4H-SiC MESFET	44
Fig.2.10 Caractéristique $I_{DS}=f(V_{DS})$ à V_{GS} constant d'un 4H-SiC MESFET	44
Fig. 2.11 Comparaison des caractéristiques de transport électronique, extraites des simulations Monte Carlo, dans le MESFET en 3C-SiC, GaN et GaAs.....	46
a. La Mobilité en fonction de dopage ; b. L'énergie moyenne en fonction de la distance, c. Caractéristiques $I_{DS}=f(V_{DS})$.	
Fig.3.1 Représentation schématique du déplacement des électrons, dans un semiconducteur, sous une excitation extérieure.....	50
Fig.3.2 Représentations sous forme de bandes d'énergie d'un semiconducteur	51
Fig.3.3 Démonstration de l'effet de la non-parabolicité	55
a. La dispersion d'énergie parabolique et de Kane pour ($E=0$).....	55
b. Effet du coefficient de non-parabolicité sur le coefficient Seebeck	55

Table des figures

Fig.3.4 Evolution de la mobilité en fonction du dopage dans le 3C-SiC à faible champ électrique.....	60
Fig.3.5 Evolution de la mobilité de Hall, dans le 6H-SiC, en fonction de la température et pour différents niveaux de dopages	61
Fig.3.6 Vitesse de dérive pour certain types de semiconducteurs.....	61
Fig.4.1 Représentation des interactions inter-vallées et intra vallées autorisées dans une zone de Brillouin cubique à trois dimensions.....	67
Fig.4.2 Représentation de la trajectoire d'un électron à six dimensions	69
Fig. 4.3 Démonstration Historique des modèles Monte Carlo utilisés pour l'implémentation des bandes d'énergie.....	70
Fig. 4.4 Organigramme d'implémentation de la méthode de Monte Carlo.	71
Fig.4.5 Représentation du Self Scattering	77
Fig.4.6 Procédure de sélection d'une interaction.....	78
Fig. 4.7 Représentation des angles de déviation du vecteur d'onde après interaction.....	79
Fig. 4.8 Vitesse de dérive des électrons dans le GaSb :.....	83
a. Ensemble Monte Carlo	
b. Simulateur Monte Carlo 2D(en fonction de la distance)	
Fig.4.9 Evolution des coefficients de repopulation, en fonction du temps, dans les trois vallées Gamma, L et X.....	84
Fig.4.10 Illustration 2D de :.....	85
a. L'énergie, b. Potentiel électrostatique dans le substrat GaSb de type N	
Fig.4.11 Vitesse de dérive des électrons dans le GaSb pour différentes valeurs du champ électrique.....	86
Fig.4.12 Distribution des électrons :	88
a. Initiale : en absence du champ électrique.	
b. Après l'application du champ électrique	
Fig. 4.13 Evolution de l'énergie moyenne des électrons dans le 3C-SiC et 4H-SiC	89
Fig.4.14 Evolution des coefficients de repopulation dans les vallées Gamma, L, et X pour un champ électrique de 200KV et une concentration des dopants de 8.10^{19} at/cm ³	90
Fig.4.15 Vitesse de dérive des électrons dans le 3C-SiC et 4H-SiC.....	91
Fig.4.16 Vitesse moyenne des électrons sous l'effet des forts champs électriques	93
a. Dans le 3C-SiC, b. Dans le 4H-SiC ; c. Comparaison entre les deux polytypes	

Table des figures

Fig.4.17 Effet de la température sur la moyenne du taux d'intercation dans les vallées Γ , L et X, pour le 4H-SiC:.....	95
a. Acoustique b. Optique polaires d'émission	
Fig.4.18 Effet de la température sur:.....	96
a. Le pic de vitesse de dérive b. La vitesse de dérive des électrons	
Fig.5.1 Distribution des électrons issue d'une simulation Monte Carlo d'un SiC-MESFET vertical.....	102
Fig. 5.2 Structure à deux dimensions d'un MESFET latéral	103
Fig. 5.3 Principe de l'approche NGF.....	111
Fig. 5.4 Principe de l'approche l'approche CIC.....	112
Fig. 5.5 Représentation de :.....	114
a. Profile de densité des électrons dans un MESFET	
b. Profile de densité des électrons dans une diode	
Fig. 5.6 Organigramme montrant les étapes adoptées pour la simulation du dispositif par le simulateur Archimedes	115
Fig. 5.7 Structure de base d'un MESFET latéral.....	117
Fig. 5.8 Structure du MESFET latéral simulée.....	119
Fig. 5.9 Représentation de :	120
a. Distribution de l'énergie des électrons; b. Densité des électrons.	
Fig. 5.10 Répartition spatiale du champ électrique dans le GaSb :.....	120
a. la composante transversale (direction x) ; b. la composante longitudinale (direction y)	
Fig. 5.11 Répartition spatiale du potentiel électrostatique dans le GaSb :.....	121
Fig. 5.12 Vites des électrons dans le GaSb.....	121
a) la composante transversale (direction x) ; b) la composante longitudinale (direction y)	
Fig. 5.13 Représentation de la :	122
a) La densité des électrons ; b) La distribution de l'énergie des électrons.	
Fig. 5.14 Vitesse des électrons dans l' $\text{Al}_{0.23}\text{In}_{0.77}\text{Sb}$:.....	123
a) la composante transversale (direction x) ; b) la composante transversale (direction y)	
Fig. 5.15 Répartition spatiale du champ électrique dans l' $\text{Al}_{0.23}\text{In}_{0.77}\text{Sb}$:.....	123
a) la composante transversale (direction x) ; b) la composante transversale (direction y)	123

Table des figures

Fig. 5.16 Répartition spatiale du potentiel électrostatique dans l' $\text{Al}_{0.23}\text{In}_{0.77}\text{Sb}$	124
Fig. 5.17 Géométrie du SiC-MESFET simulé.....	125
Fig. 5.18 Répartition spatiale, dans le 4H-SiC MESFET, du :.....	126
a) Potentiel électrostatique; b) Composante longitudinale du champ électrique ; c) Densité des électrons ; d) Vitesse des électrons	
Fig. 5.19 Effet de la température sur la répartition de la densité des électrons dans le 4H-SiC MESFET	128
Fig. 5.20 Effet de la température sur la composante longitudinale de la vitesse des électrons dans le 4H-SiC MESFET	129
Fig. 5.21 Caractéristique courant-tension pour le 4H-SiC-MESFET	130

La demande actuelle sur des dispositifs microélectroniques capables d'opérer dans des milieux hostiles (hautes températures et fortes puissance) a conduit à une amélioration remarquable des procédés de fabrication et donc les performances électriques de ces dispositifs. Cette amélioration s'appuie sur l'utilisation de nouveaux matériaux semiconducteurs à larges bandes interdites appelés semiconducteurs de troisième génération comme le carbure de silicium (SiC). Les propriétés électriques et cristallographiques de ce dernier, les rend un matériau incontournable pour les applications de fortes puissances et de hautes températures. Le polymorphisme du SiC reste la propriété la plus avantageuse en comparaison avec d'autres semiconducteurs de même type. Ainsi, pour bénéficier des propriétés électriques du SiC et améliorer le rendement des dispositifs à base de ce matériau, une modélisation approfondie des phénomènes physiques régissant le comportement de ces dispositifs est toujours exigée. L'étude du transport de charges constitue un outil adéquat pour le suivi et l'analyse du comportement des charges électriques (électrons/trous) que se soit dans les massifs ou les dispositifs, sous de différentes conditions (température, polarisation, etc.). Aussi, l'étude du transport de charges fait souvent appel aux fameuses équations de transport : de **Boltzmann** et celle de **Poisson**. Or, la complexité mathématique de ces deux équations a, pour longtemps, constitue un défi pour la résolution analytique. L'amélioration des moyens de calcul numérique a donné l'opportunité aux chercheurs d'implémenter des méthodes numériques capables de surmonter cette complexité. Elles permettent aussi la résolution numérique de ces équations dans un temps largement réduit. La méthode de Monte Carlo présente un moyen efficace pour la simulation et l'analyse numérique des phénomènes physiques. Dans le cadre du transport de charges, cette méthode offre un outil statistique performant pour l'extraction correcte des différentes caractéristiques électriques. L'implémentation numérique de la méthode de Monte Carlo, dépend fortement du modèle de la structure de bande utilisé ainsi que la géométrie du dispositif simulé. Une autre contrainte, présente dans l'implémentation est le temps de calcul. Donc, de plus en plus que le modèle mathématique utilisé devient complexe, cette méthode devient consommatrice en ressources de calcul, à moins d'utiliser des approches simplificatrices.

Introduction Générale

C'est dans ce contexte que l'objectif de cette thèse a été défini. Il consiste à une modélisation physique détaillée du transport électronique dans le SiC-MESEFT submicronique. Afin d'envisager l'efficacité de la méthode de Monte Carlo, cette modélisation est suivie par de nombreuses simulations du transport électronique dans le substrat SiC et dans d'autres matériaux semiconducteurs. Dans le cas du MESFET, les simulations sont effectuées sur un simulateur Monte Carlo à deux dimensions qui prend en considération les effets quantiques intervenant durant la modélisation des dispositifs submicroniques. De même, l'effet de différentes interactions élastiques et inélastiques, sur les caractéristiques de transport, est considéré.

Pour la bonne coordination entre la partie théorique et la partie simulation, la présente thèse est organisée en cinq chapitres. Dans le premier chapitre, l'état de l'art du carbure de silicium est évoqué. Les propriétés électroniques et cristallographiques des principaux polytypes seront de même discutées. De plus, un aperçu sur le procédé technologique exploité pour l'élaboration du carbure de silicium est présenté.

Dans le deuxième chapitre, nous présentons une description du principe de fonctionnement du transistor à effet de champ : MESFET avec quelques caractéristiques de transport électronique dans le cas du SiC-MESFET. Concernant, la théorie du transport électronique dans les substrats semiconducteurs et les dispositifs au même temps, elle sera discutée dans le troisième chapitre. Les démarches de la résolution des équations de Boltzmann et de Poisson sont aussi exposées dans ce chapitre. Le quatrième chapitre sera consacré pour la discussion du modèle Monte Carlo, utilisé pour la simulation du transport électronique dans les massifs. Aussi, les démarches adoptées pour l'implémentation de ce modèle seront présentées. Le modèle a été exploité pour le suivi des déplacements d'un ensemble d'électrons dans le GaSb (comme exemple) et dans deux polytypes différents du carbure de silicium : cubique (3C-SiC) et hexagonal (4H-SiC). De même, les différentes caractéristiques de transport en régime stationnaire et non-stationnaire, dans les trois matériaux étudiés seront analysées.

Introduction Générale

Le dernier chapitre, consacré pour l'étude du dispositif, sera organisé en deux parties : Une première partie dans laquelle une modélisation du transport électronique dans transistor à effet de champ MESFET est présentée. Nous discuterons par la suite les étapes de simulation et les différentes conditions à les considérer dans ce genre d'étude. La deuxième partie est réservée pour l'analyse des différents résultats obtenus. On note que ces résultats sont enregistrés sous différentes conditions de température, de dopage et de polarisation. A la fin de ce travail une conclusion générale avec quelques perspectives utiles pour les futurs travaux, seront proposées.

1. Introduction

Pourquoi le carbure de silicium ?

La technologie de croissance des semiconducteurs peut être retracée au moins **150-200 ans** en arrière. Ceci, lorsque les scientifiques et les ingénieurs, qui vivaient sur les rives ouest du lac **Victoria**, réalisent de l'acier au carbone fabriqué à partir de cristaux de fer, plutôt que par le frittage des particules solides [Har95]. Depuis ce temps, le silicium et ces composés ont joué un rôle majeur dans le développement des technologies modernes des dispositifs à semiconducteurs. Cependant, le choix du silicium, dans la majorité des applications, est dû plus à la maîtrise de la technologie de fabrication qu'à ses propriétés intrinsèques. En effet, ce matériau rencontre rapidement ses limites de fonctionnement lorsqu'il est confronté à des températures élevées ou à des milieux agressifs. Or, la nécessité en termes de dispositifs fonctionnant aux milieux sévères (l'automobile, l'aéronautique, l'aérospatial, etc.) a mener à une révolution technologique dans le domaine de la microélectronique. Cette dernière se traduit par la maîtrise de nouveaux matériaux à fortes potentialités technologiques qui sont les semiconducteurs à large gap (*wide bandgap semiconductor*) tels que le GaN et le Carbure de Silicium.

Le carbure de silicium (SiC) a tiré beaucoup d'attention par les avantages énormes qu'offre au-dessus d'autres matériaux dans un grand nombre d'applications industrielles : militaires, d'optoélectroniques (à courtes longueurs d'onde), de hautes températures et fortes puissances. Cependant, l'intérêt grandissant du SiC, dans le domaine industriel, est dû essentiellement à la disponibilité de substrats aux diamètres remarquables et d'une qualité meilleure.



Fig.1.1 Echantillon de carbure de silicium [\[Web01\]](#)

Au court de ce chapitre, on propose d'établir un bilan sur l'état des connaissances du carbure de silicium. L'historique de ce matériau, ses propriétés structurales, physiques et électroniques, qui lui confèrent les aptitudes remarquables pour des utilisations très diversifiées, seront discutés. De même, un aperçu sur le procédé de croissance employé pour l'élaboration de ce matériau est évoqué.

2. Historique sur le Carbure de Silicium

Le SiC est un composé IV-IV de la table périodique des matériaux. En fait ce composé n'est pas un nouveau venu sur la scène des semiconducteurs, certains diront qu'il est l'arrière-grand-père de tous les semiconducteurs. Les premières analyses physiques sur le carbure de silicium remontent au **1824** [Com95]. La découverte est attribuée au scientifique suédois **Jöns Jacob Berzelius** [Ber24], alors même que ce dernier essayait de synthétiser le diamant. Sur terre, y a pas du SiC sous forme naturelle, la majorité des échantillons existants sont souvent d'origine extra-terrestre, apportés par des météorites. Les propriétés de ce matériau étaient alors inconnues, et c'était jusqu'au **1892** [Van06], qu' **E. G. Acheson** a réussi de faire croître une couche de carbure de silicium. Alors c'est lui qui l'identifia sous forme d'un **siliciure de carbone** et lui donna le nom de sa formule chimique : SiC [Ach82]. Ce résultat est une tentative de synthèse accidentelle du diamant [Van06]. En **1905 Moissan** découvrit un des échantillons du SiC sur une météorite dans le célèbre « **meteor Crater** » en **Arizona** [Nal01] d'où le nom '**Moissanite**'. En **1955 Lely** [Lei55] proposa un nouveau concept pour la croissance du SiC monocristallin (de hautes qualités) par sublimation du SiC poly-cristallin.



J. Jac. Berzelius.
Daguerrotyp, 1845, tagen av Prof. N. Mitscherlich,
Berlin.

A cause de la taille extrêmement faible des cristaux obtenus par la méthode de **Lely** et l'apparition de plusieurs formes allotropiques lors de la croissance, **Tairov** et **Tsvetkov** en **1978**, proposaient une amélioration salvatrice de la méthode de **Lely**. Cette amélioration consistait à l'introduction d'un germe du SiC monocristallin dans la chambre de croissance [Tai78]. Cette technique est appelée technique de croissance par sublimation ou technique « **Lely modifiée** ». Dès la fragilité relative des substrats SiC, issus de cette technique, ainsi que leurs coût extrêmement élevé, on l'en préfère de travailler sur des couches minces. Une meilleure alternative actuellement adoptée est l'intégration du SiC sur des substrats de silicium [Cou00]. Dans la suite le principe d'élaboration de ce matériau, ainsi que les principaux essais réalisés dans ce domaine seront exposés.

3. Propriété du Carbure de Silicium

Afin de répondre à l'exigence croissante de composants électroniques fonctionnant en hautes fréquences, hautes températures et hautes puissance, les scientifiques se sont intéressés par de nouveaux matériaux à hautes potentialité notamment le carbure de silicium. Ce dernier possède un gap indirect jusqu'à trois fois plus élevé (de **2.4 à 3.3 eV** selon le polytype considéré) que ceux des semiconducteurs utilisés jusqu'alors, comme le silicium **Si**, le germanium **Ge** ou l'arséniure de gallium **GaAs**.

Les propriétés physico-chimiques et électroniques du carbure de silicium les rend un redoutable concurrent pour de nombreux matériaux. Leur avantage apparaît surtout dans les applications optoélectroniques, les applications de hautes températures (**1200-1750K**), et les fortes puissances. D'autres paramètres significatifs sont aussi à citer comme la vitesse de saturation des électrons de l'ordre de **$2 \cdot 10^7$ cm/s**, sa grande mobilité de porteurs **1000 cm²/vs**, sa grande stabilité thermique, sa résistance chimique, ainsi que leur conductivité thermique **$\sim 5 \cdot 10^7$ W/cmK**.

Les applications industrielles du SiC remonte en **1980** [Sad04] après la commercialisation de la première et la seul LED Bleu. Aujourd'hui, suite à la demande croissante sur des composants opérants en haute fréquence, le carbure de silicium forme un marché émergent pour de nombreuses applications telles que : le transistor MESFET [Ram14],[Ale13] (voir deuxième chapitre), les capteurs de gaz chimique SiC-FET [Kan11], [Dar14] ainsi que les diodes Schottky en SiC à forte tension de claquage, capables d'opérer sous températures très élevées [Ste93], [Ton01], [Fis14]. Cependant, le plein potentiel de la matière SiC n'a pas encore été réalisé. La figure 1.2 présente une comparaison des caractéristiques des diodes Schottky en Si et en SiC. Elle montre qu'il y ait une plus grande répartition de l'intensité du champ électrique dans le cas du SiC, qui permet une réduction de la longueur du dispositif de **1/10** de celle requis pour Si.

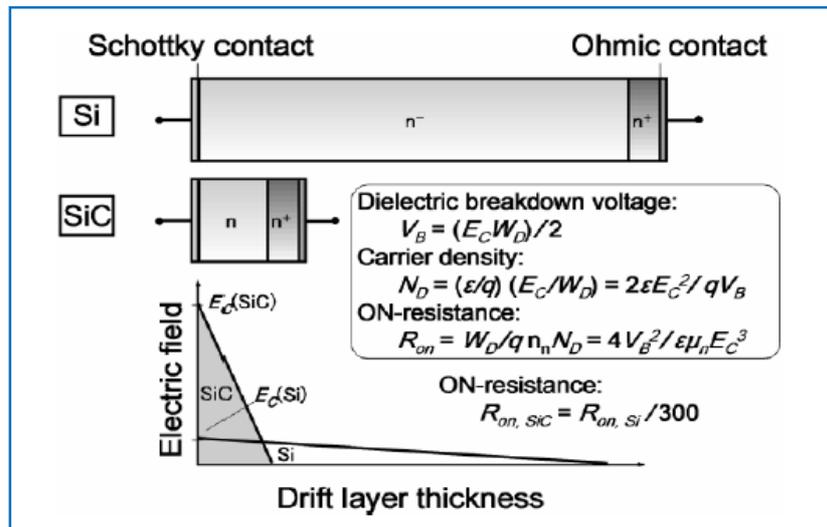


Fig.1.2 Comparaison des performances du Si et le SiC dans le cas de la diode Schottky [Sad04]

3.1. Propriétés cristallographiques

3.1.2. Liaison Si-C

L'une des exceptionnelles propriétés du carbure de silicium est la possibilité de se cristalliser sous différentes formes. La cellule de base est une structure tétraédrique formée par un atome de silicium entouré de quatre atomes de carbone et vice versa (par une rotation de **180°** par rapport à la première on tombe sur la deuxième voir figure1.3). La distance atomique entre le carbone et le silicium est de **1.89 Å** et celle entre les atomes de carbone est de **3.09 Å**. Aussi, la découpe du matériau se fait au niveau de la liaison Si-C, le résultat obtenu est deux faces, l'une appelé « face Si » et l'autre « face C ».

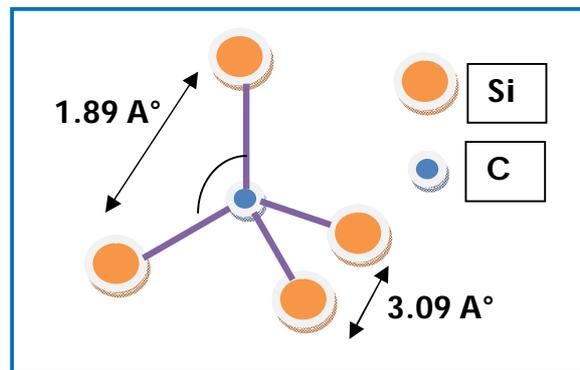
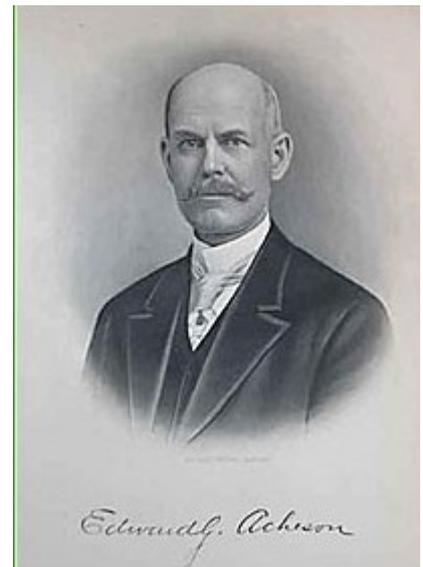


Fig.1.3 Structure tétraédrique formée par un atome de carbone entouré par quatre atomes de silicium.

3.1.2. Notion de Polytypisme

Lorsque le chimiste américain **E. G. Acheson** à instaurer les premières plaquettes du carbure de silicium, il a pensé qu'elles ont une structure hexagonale, mais quand il a envoyé une plaquette à **B.W. Franzier**, professeur à l'université de **Lehigh (USA)**, il a identifié qu'ils ont des structures différentes, et c'est apparu la notion de **polytypisme** du SiC. Le polytypisme est une forme particulière du



polymorphisme dans une direction privilégiée. Cette forme ne nécessite pas forcément un changement du système cristallin [Gas06]. En **1915**, **Braumhauer** [Cie05] été le premier à identifier trois formes cristallographiques différentes du SiC. Aujourd'hui, on compte plus de **200** polytypes identifiés dans la littérature [Sad04].

Chaque polytype se caractérise par une séquence d'empilement de bicouches Si-C (voir figure 1.4). Chaque bicouche est un empilement, compact, d'atomes de silicium et de carbone selon trois emplacements **A**, **B**, et **C** arbitrairement référenciés.

Selon les séquences d'empilements, on distingue trois structures de base du SiC :

- **Structure cubique** : formée par un seul polytype de type zinc-blende qui est le β -SiC
- **Structures hexagonale et rhomboédrique** : regroupées sous le nom générique α -SiC.

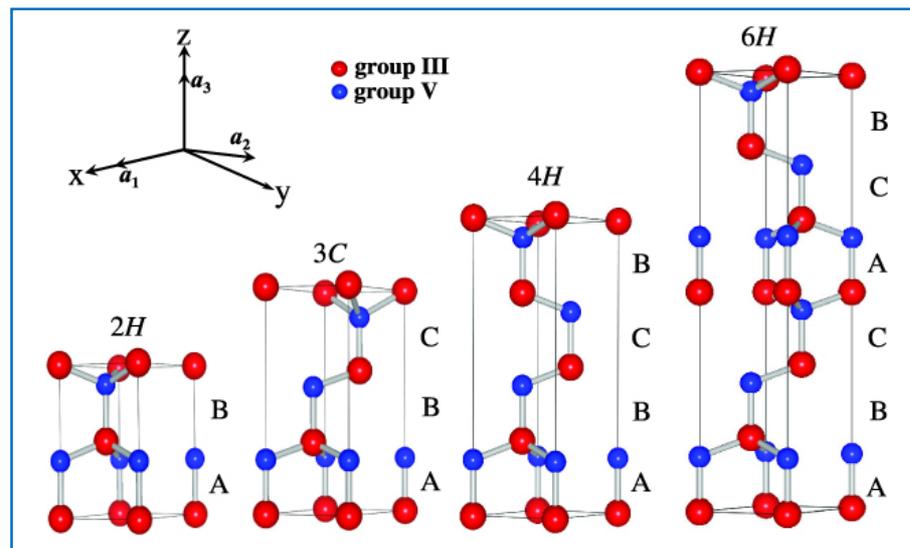


Fig. 1.4 Les séquences d'empilement des principaux polytypes du Carbure de Silicium [Bec13].

De plus, quelle que soit la variété allotropique, chaque atome de silicium se lie toujours à 4 atomes de carbone par des liaisons sp^3 afin de former des tétraèdres. Au sein de ces tétraèdres un atome de carbone est entouré de quatre atomes de silicium comme le montre la figure 1.3. L'environnement des atomes vis à vis de leurs premiers voisins est donc identique dans toute la structure cristalline du SiC. Les tétraèdres sont arrangés de telle sorte que les atomes se situent dans des plans parallèles contenant des nœuds d'hexagones réguliers. Les polytypes se diffèrent alors seulement par la séquence et la période d'empilement de ces plans ou des bicouches silicium-carbone.

Les polytypes élémentaires les plus répondus dans les applications microélectroniques sont: le cubique composé par un seul polytype **3C-SiC**, le rhomboédrique (**15R-SiC**) et l'hexagonal (**2H**, **4H** et **6H-SiC**). On note que ces polytypes peuvent changer de formes à cause des effets thermiques. Par exemple, il a été prouvé que le 3C-SiC peu se transformer en 6H-SiC au dessus de 2150°C [Ott99]. Pour mieux différencier entre les différents polytypes, une notation décrivant la séquence d'empilement des bicouches Si-C à été attribuée à chaque polytype. La notation la mieux adoptée pour la nomination de ces polytypes est celle de **Ramsdell** [Ram47]. Dans cette notation, chaque polytype est noté **NX** où **N** représente le nombre des bicouches qui le constitue et **X** la manière d'empilement de ces dernières (cubique, hexagonale, etc....).

En plus de la notation de **Ramsdell**, il y a d'autres qui sont moins adoptées comme celle de **Hägg** et **Jagodzinski** [Jag49] et celle de **Zhadanov** [Zha45]. Ces notations restent plus au moins intéressantes, du point de vue qu'elles précisent l'environnement de chaque site. Par exemple, la notation de **Jagodzinski**, utilise le "h" pour désigner la configuration hexagonale des seconds voisins tel que l'atome **B** dans la séquence **ABA**, et le "k" pour la configuration cubique comme **B** de la séquence **ABC**. Le tableau I.1 regroupe les principales notations adoptées par **Ramsdell** comparées aux celles de **Jagodzinski** et **Zhadanov**.

Notation de Ramsdell	Séquence d'empilement	Notation de Jagodzinski	Nombre de sites de Si (ou C)	Notation de Zahdanov
3C-SiC	ABC...	k	1	--
2H-SiC	AB...	h	1	11
4H-SiC	ABAC...	hk	2	22
6H-SiC	ABCACB...	hkk	3	33
15R-SiC	ABCBACABACBCACB	hkkhk	5	(32) ₃

Tab. I.1 Notations des principaux polytypes du SiC [Ram47], [Jag49], [Zha45].

3.1.3 Facteurs de Mérite

Puisqu'ils existent plusieurs matériaux à large gap, et afin de différencier entre eux, certains auteurs comme **Johnson** [Joh66], **Keyes**[Key72] et **Baliga** [Bal89] ont proposé un autre facteur appelé « facteur de mérite ». Ce facteur définit les meilleures aptitudes du matériau semiconducteur pour une application désirée (voir tableau 1.2).

Facteur	Formule	Description
Facteur de Johnson JMF [Joh66]	$JMF = \left(\frac{E_c \cdot V_{sat}}{2\pi} \right)^2$ <p> E_c: champ électrique critique V_{sat}: vitesse de saturation des porteurs </p>	Johnson prend en considération la valeur critique du champ électrique et la vitesse de saturation. Ce facteur détermine l'aptitude du matériau pour les applications de forte puissance et haute fréquence.
Facteur de Baliga BMF [Bal89]	$BMF = \epsilon_r \mu \cdot E_c^3$ <p> μ: mobilité des porteurs </p>	Le facteur de Baliga apporte une appréciation en terme de tenue en tension en inverse et une faible résistance en direct.
Facteur de Keyes KMF [Key72]	$KMF = \lambda \left(\frac{c \cdot V_{sat}}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_r} \right)$ <p> C: vitesse de la lumière </p>	Keyes à établit un facteur décrivant l'aptitude du matériau pour la réalisation des circuits intégrés, en tenant compte de la vitesse de communication des transistors et de leur limitation par auto-échauffement.

Tab.1.2 Facteurs de Mérite

Le tableau ci-dessous regroupe les valeurs, existantes dans la littérature, de ces facteurs de mérite. On note que ces valeurs sont normalisés par rapport au silicium.

	Si	GaN	4H-SiC	3C-SiC
JMF	1.0	790	410	64
KMF	1.0	1.8	5.1	4.7
BMF	1.0	910	290	130

Tab.1.3. Facteurs de mérite de quelques semiconducteurs [\[Dri13\]](#).

3.2. Structure de bande et zone de Brillouin

Après l'invention du Carbure de Silicium, plusieurs travaux ont été orientés vers l'étude (d'une manière intensive) de sa structure de bande dans le but de comprendre ses propriétés physiques et électroniques. Une grande partie de ces travaux été concentré sur la structure électronique du matériau pur et dopé, ainsi que sur ses propriétés optiques et électriques [Now01]. Les caractéristiques des bandes d'énergie électroniques sont obtenues en traçant les valeurs propres de l'énergie des électrons pour différentes valeurs du vecteur d'onde « \mathbf{k} » dans la zone de Brillouin (voir figure 1.5). Cette zone représente la cellule la plus petite dans le réseau réciproque. Ce dernier est invariant sous le même groupe de points que pour le réseau direct correspondant.

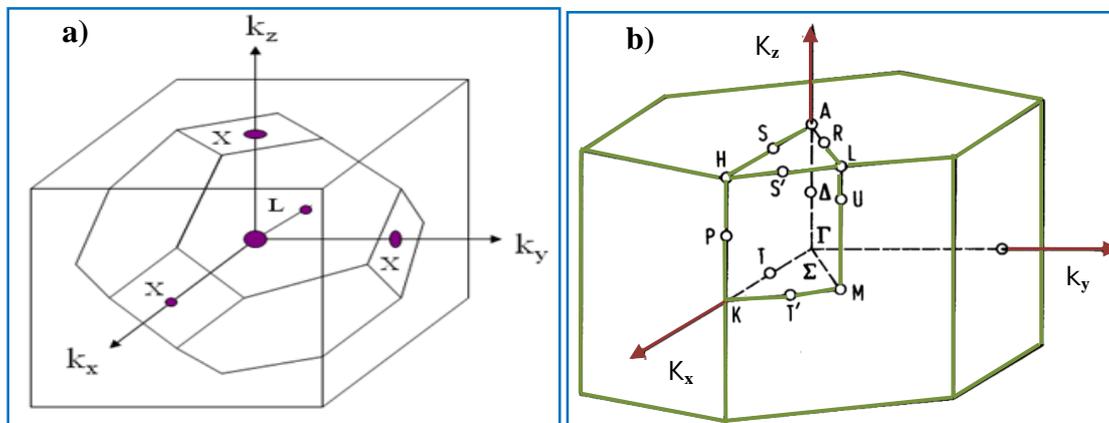


Fig.1.5 Zone de Brillouin
 a. réseau cubique
 b. réseau hexagonal

Dans le cas du SiC, Les propriétés électriques des différents polytypes sont pas les même. Ceci est dû à la position du minimum de la bande de conduction qui n'est pas la même pour tous les polytypes. D'après la figure 1.6 on aperçoit que les deux ploytypes 3C-SiC et 2H-SiC sont à gap indirecte mais la position du minimum sa diffère : (X_{1c} - Γ_{15v}) pour le 3C-SiC et (K_{2c} - Γ_{8v}) pour le 2H-SiC. Aussi, la méthode la plus conviviale, pour la détermination de la structure de bande, dans le cas du SiC est la méthode empirique pseudo-potentiel (**EPM**). Cette méthode permet la reproduction, d'une manière plus efficace, de la forme de la structure de bande et aussi reste facile à interpréter par rapport à d'autres méthodes comme la théorie de la densité fonctionnelle (**DFT**).

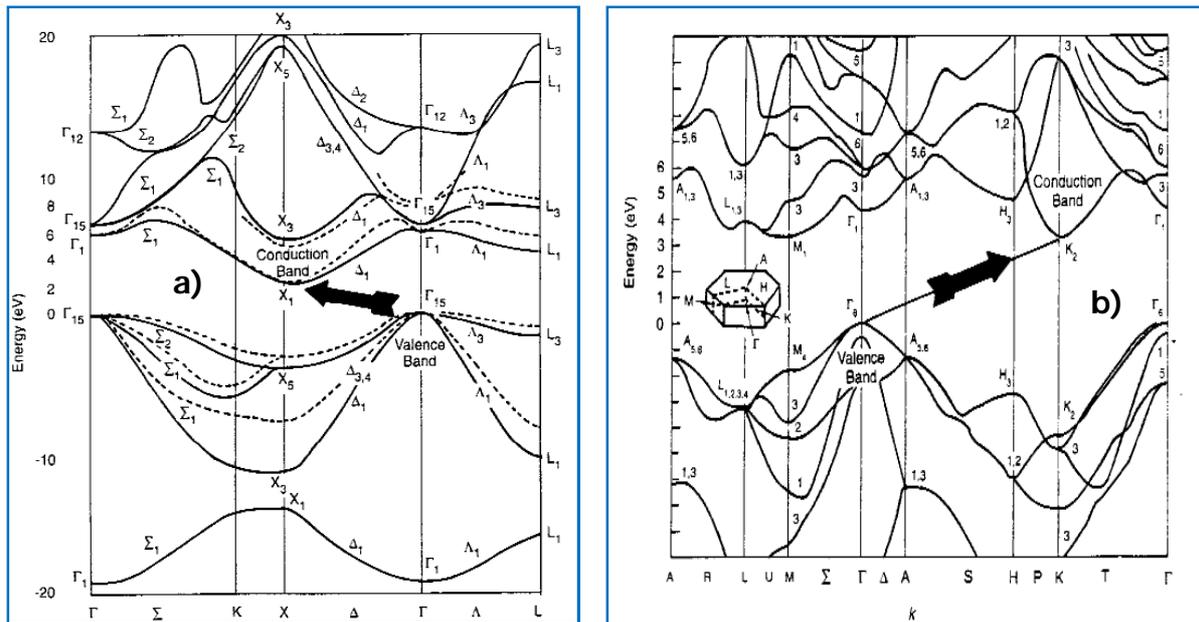


Fig.1.6 Structure de bande [Com95]
 a. 3C-SiC b. 2H-SiC

4. La fabrication du Carbure de Silicium

Produire des substrats SiC de haute qualité était l'un des défis les plus rencontrés par les industriels des semiconducteurs. Ceci est dû au fait que la croissance d'un substrat SiC monocristallin parfait s'attache directement à la nature physico-chimique de celui-ci. Le procédé de croissance du SiC est souvent connu sous le nom procédé par sublimation. Le SiC se sublime à une température environ de 1800C°. **Lely** [Le155] est celui qui a réussi, en **1955**, la première croissance de cristal SiC monocristallin en sublimant le SiC polycristallin. Une percée majeure est venue vers **1980** avec l'introduction du germe, au procédé de sublimation. Ce dernier est souvent connue sous le nom : méthode de transport en phase vapeur (**PVT**) ou la méthode **Lely** modifiée (voir figure 1.7). Cette méthode a été affinée afin de produire des substrats SiC de grande surface [Ste92], [Bar93] Jusqu'à aujourd'hui, la **PVT** reste une technique dominante et considérée comme un standard pour la croissance du carbure de silicium. Les lingots SiC issus de cette méthode, sont de haute qualité et peuvent atteindre des dimensions allant jusqu'à **100 mm**. Actuellement, des couches homo-épitaxiales de 4H-SiC et 6H-SiC (de haute qualité), avec différentes épaisseurs et différents niveaux de dopages, sont disponibles. Le 3C-SiC gagne également l'attention d'être croître par un procédé d'hétéro-épitaxie sur divers matériaux, spécifiquement sur le silicium.

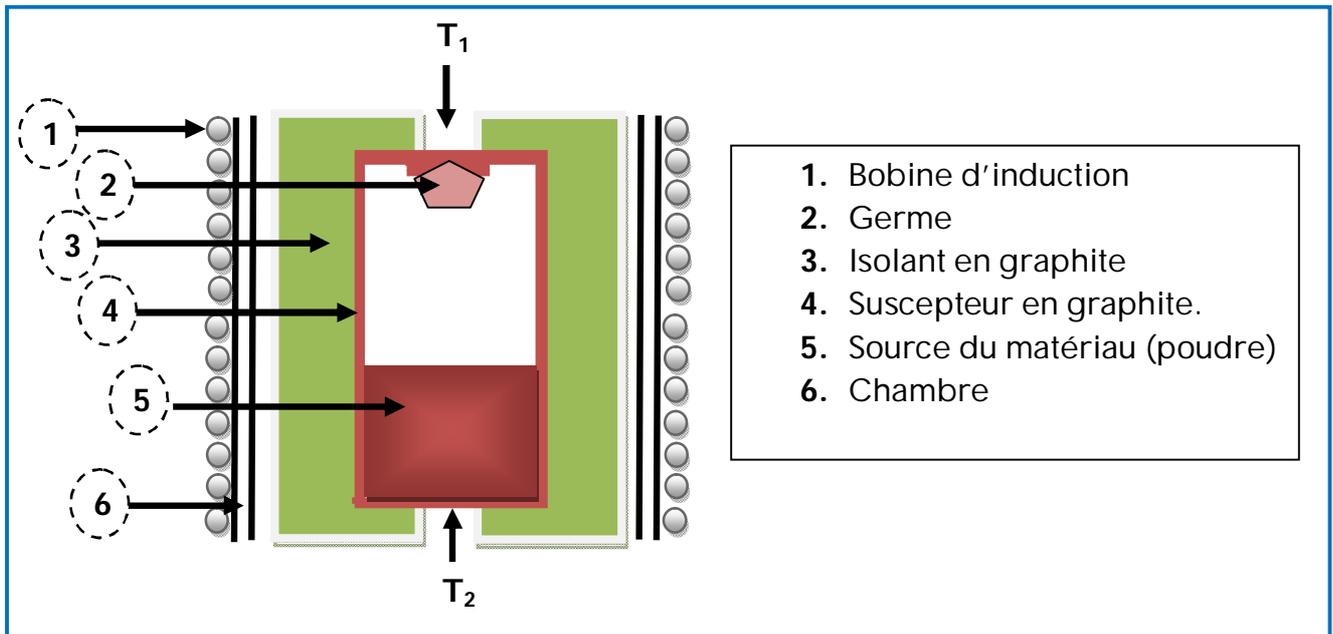


Fig. 1.7 Représentation de la technique PVT [Wij11]

Le principe de la PVT est assez simple. Un système formé d'un creuset en graphite, partiellement rempli en poudre du SiC , est chauffé à une température dite de sublimation ($>1800^\circ\text{C}$). À cette température le SiC commence à se sublimer lentement. Par la suite le matériau sera transporter de la source vers un germe placé au couvercle du creuset (plus au moins froid) afin de se condensé. Les principaux constituants qui se forment au cours de l'opération de sublimation sont : Si , SiC_2 , et Si_2C (voir équations 1.1, 1.2, 1.3)



Cependant, pour compenser les limites technologiques de la PVT et améliorer de plus en plus la qualité des substrats SiC, d'autres techniques ont été développées. Parmi celles nous citons la **CVD** en haute température **HTCVD** (**H**igh **T**emperature **C**himical **V**apor **D**eposition) et ses dérivées. La figure ci-dessous donne un comparatif entre les technologies exploitées pour l'élaboration des substrats SiC.

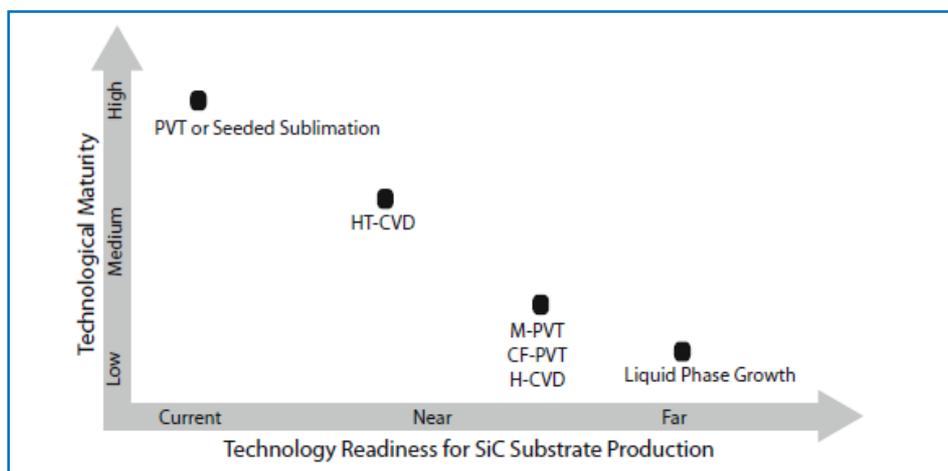


Fig.1.8 Actualité de la technologie des substrats SiC

Références

- [Ach82] **E.G. Acheson**, "Production of artificial crystalline carbonaceous materials", US492767, (1982).
- [Ale13] **M. Alexandru, V. Banu, P. Godignon, M. Vellvehi, J. Millan**, "4H-SiC MESFET specially designed and fabricated for high temperature integrated circuits", IEEE- Solid-State Device Research Conference (ESSDERC), pp. 16-20, (2013).
- [Bal89] **B. Baliga**, "Power semiconductor device figure of merit for high frequency applications", IEEE: Electron Device Letter, Vol. 10, N° 10, pp. 455-457, (1989).
- [Bar93] **D. L. Barrett, J. P. McHugh, H. M. Hobgood, R. H. Hopkins, P. G. McMullin, et R. C. Clarke**, "Growth of large SiC single crystals", Journal of Crystal Growth, Vol. 128(1), pp. 358, (1993).
- [Bec13] **F. Bechstedt, A. Belabbes**, "Structure, energetics, and electronic states of III-V compound polytypes", Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 25, N° 27, (2013).
- [Ber24] **J. Berzelius**, Annalen der Physik, 169, (1824).
- [Cie05] **R.R. Ciecchonski**, "Device characteristics of sublimation grown 4H-SiC layers", Thèse, Université de Linköping, (2005).
- [Com95] **Committee on materials for high temperature semiconductor devices**, "Material for high temperature SC devices", National academy press USA, (1995).
- [Cou00] **C. Gourbeyre**, "Caractérisation et modélisation de couches minces de 3C-SiC sur Si pour applications aux microsystèmes en environnement sévères", Thèse, INSA, (2000).
- [Dar14] **Z. Darmastuti**, "SiC-FET gas sensors developed for control of the flue gas desulfurization system in power plants, experimental and modeling", Thèse, Linköping University, (2014).
- [Dri13] **S. B. Driad**, "Réalisation et caractérisation de transistors HEMTs GaN pour des applications dans le domaine millimétrique", Thèse, Université de Lille, (2013).

- [Eli04] **A. Ellison, B. Magnusson, B. Sundqvist, G. Pozina, JP. Bergman, E. Janzen, A. Vehanen**, "SiC crystal growth by HTCVD", Materials Science Forum, 457-460:9-14, (2004).
- [Fis14] **C.A. Fisher, M. R. Jennings, Y. K. Sharma, D. P. Hamilton et P. M. Gammon**, "Improved Performance of 4H-SiC PiN Diodes Using a Novel Combined High Temperature Oxidation and Annealing Process", IEEE Trans. on semiconductor manufacturing, Vol. 27, N° 3, pp.443-451, (2014).
- [Gas06] **M. Gassoumi**, "Etude des défauts électriquement actifs dans les composants hyperfréquences de puissance dans les filières SiC et GaN", Thèse, INSA- université de Monastir, (2006).
- [Har95] **G. L. HARRIS**, "Properties of silicon carbide edited", INSPEC, (1995).
- [Jag49] **H. Jagodzinski**, *Acta Crystallogr.*, Vol. 2, pp.201-215, (1949).
- [Joh66] **E. Johnson**, "Physical limitations on frequency and power parameters of transistors", IRE International Convention Record, Vol. 13, pp 27-34, (1966).
- [Kan11] **J. Kanungo, M. Andersson, Z. Darmastuti, S. Basu, P. O. Käll, L. Ojamäe et A. L. Spetz**, "Development of SiC-FET methanol sensor", Sensors and actuators. B, Chemical, (160), N°01, 72-78, (2011).
- [Key72] **R. Keyes**, "Figure of merit for semiconductors for high-speed switches" proceeding IEEE, Vol. 60, N° 2, pp 225-232, (1972).
- [Lei55] **J. A. Lely**, " Darstellung von Einkristallen von Silizium Karbid und Beherrschung von Art und Menge der Eingebauten Verunreinigungen" , Ber, Deur, Keram, Ges, Vol. 32, pp. 229-236, (1955).
- [Nal01] **F. Nallet**, "Conception, réalisation et caractérisation d'un composant limiteur de courant en carbure de silicium", Thèse, INSA, (2001).
- [Now01] **S. Nowak**, "Crystal lattice dynamics of various silicon-carbide polytypes", International Conference on Solid State Crystals 2000: Growth, Characterization, and Applications of single crystals, SPIE Proc., Vol. 4412, (2001).
- [Ott99] **L. Ottaviani**, "Réalisation de jonctions pn dans le carbure de silicium 6H par implantation ionique d'aluminium", Thèse, INSA, (1999).

- [Ram14] **Z. Ramezani, A. A. Orouji, P. Keshavarzi**, "A novel double-recessed 4H-SiC MESFET using scattering the electric field for high power and RF applications", *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* ; Vol. 59, pp. 202–209, (2014).
- [Ram47] **R.S. Ramsdell**, *Am. Mineral. (USA)* vol.32 p.64-82, (1947).
- [Sad04] **S. E Saddow et A. Agarwal**, "Advanced in silicon carbide processing and Application", Artech house, (2004).
- [Ste92] **R. A. Stein et P. Lanig**, "Influence of surface-energy on the growth of 6H-SiC and 4H-SiC polytypes by sublimation", *Materials Science and Engineering B*, Vol.11(1-4):pp. 69–71, (1992).
- [Ste93] **A. J. Steckl et J. N. Su**, "High voltage, temperature-hard 3C-SiC Schottky diodes using all-Ni metallization", *IEEE trans. electron devices*, pp.695-698, (1993).
- [Tai78] **Y. M. Tairov, V.F. Tsvetkov**, "Investigation of growth processes of ingots of silicon carbide single crystal", *J. Crystal Growth*, Vol.43, N°2, pp. 209-212, (1978).
- [Ton01] **K. Tone, J. H Zhao, M. Weiner et M. Pan**, "4H-SiC junction-barrier Schottky diodes with high forward current densities", *Semiconductor Science and technology*, Vol. 16, N°7, (2001).
- [Van06] **H. Vang**, "Optimisation des étapes technologiques pour la fabrication de composants de puissance en carbure de silicium", Thèse, INSA, (2006).
- [Web01] <http://www.paulslab.com/crystals/silicon-carbide.html>
- [Wij11] **B. J. M. Wijensundara et R. G. Azevedo**, "Silicon carbide microsystems for harsh environments", Springer, (2011).
- [Zel06] **S. Zelmat**, "Etude des propriétés électriques d'un matériau polyimide à haute température : application à la passivation des composants de puissance en carbure de silicium", Thèse, université de Toulouse III, (2006).
- [Zha45] **G.R. Zhadanov**, *C. R. Acad. Sci*, Vol.48, pp.39-55, (1945).

1. Introduction

Le transistor à effet de champ est le type concurrent du transistor bipolaire. C'est un composant actif unipolaire, c'est-à-dire la conduction électrique est assurée par un seul type de porteurs de charges : électrons ou trous. Il existe de nombreux types de transistors à effet de champ. La différence entre eux réside dans le procédé de fabrication exploité et la structure interne de ceux-ci. Les transistors **MESFET** et **MOSFET** sont les types les plus sollicités pour les domaines hostiles où la précision et le meilleur rendement sont exigés. Au cours de ce chapitre une modélisation électrique du transistor MESFET sera exposée. L'invention du premier transistor à effet de champ à barrière Schottky **MESFET** : Metal-semiconductor- field- effect-transistor date en **1966** par **Carver Mead** [Mea66]. Cette idée d'introduire une barrière Schottky, a été exploitée en **1967** par **Hooper** et **Lehrer** [Hoo66], dans le but de réaliser un MESFET à base d'Arsénure de Galium (**GaAs**). Ce MESFET été élaboré à partir d'un substrat GaAs semi-isolant sur lequel une couche GaAs, dopée N, est déposée par épitaxie. Pour les contacts, la grille été fabriqué de **l'Aluminium** tandis-que les le drain et la source sont fabriqués à l'aide de **l'étain-tellure** (voir figure 2.1). Aussi, le plus souvent le MESFET est réalisé sur un substrat fortement dopé, dans le but de minimiser la résistance parasite au niveau du drain [Ber04].

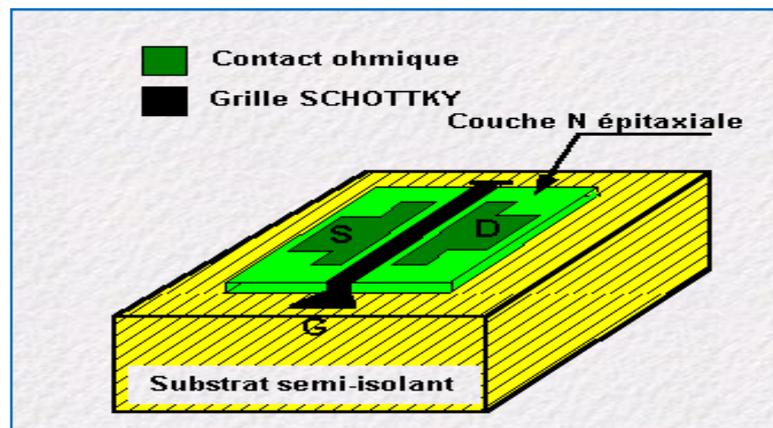


Fig.2.1 Structure d'un MESFET [Web01].

De plus, la barrière Schottky a pour rôle de moduler un flux de courant à travers le dispositif. Par rapport au **MOSFET** (et même le **JFET**), la structure du **MESFET** élimine les captures, par les centres de défauts, au niveau de l'interface métal-oxyde-semiconducteur et réduit considérablement l'instabilité des porteurs minoritaires [Neu09]. Un autre avantage apporté par le MESFET est que la grille en métal nécessite un processus de croissance à faible température en comparaison avec la grille en jonction PN qui se croit sous haute température.

De même, la jonction métal-semiconducteur améliore grandement la vitesse du transistor. Les avantages cités ci-dessus ont rendus le MESFET un redoutable dispositif pour les applications micro-ondes, de radiofréquences et de fortes puissances. En **1970**, **Middlehoek** [Mid70] réalisa le premier MESFET, en silicium et d'une longueur de grille de **1 μ m**, capable d'atteindre une fréquence d'oscillation **>12GHz**.

Après l'amélioration de la technologie de croissance et l'apparition de nouveaux substrats semiconducteurs à large gap, les scientifiques sont intéressés de faire opérer le MESFET en hautes températures et fortes puissances. A titre d'exemple nous citons : les oscillateurs à base du SiC-MESFET fonctionnant à une température de **475°C** [Sch05] et les amplificateurs de puissance à haut rendement [Dub03].

2. Fonctionnement du MESFET

2.1. Structure

La structure de base d'un MESFET est exposée dans la figure 2.2. Ce transistor possède trois contacts : **Grille**, **Source** et **Drain**. Suite à la jonction métal-semiconducteur, une zone de charge d'espace **ZCE** (zone dépeuplée des charges) est naturellement formée au dessous de la grille. Le courant dans la ZCE est nul. La largeur de cette zone dépend fortement de la tension appliquée au niveau de la grille. Cette polarisation a aussi pour effet d'accélérer les électrons de la source vers le drain, en traversant une région non-désertée appelée "**Canal**".

La résistance du MESFET évolue inversement avec la largeur de la ZCE selon la relation ci-dessous :

$$R = \frac{L}{S_{ZCE}} \quad (2.1)$$

ρ : La résistivité du matériau qui dépend fortement de la concentration des dopants (dans notre cas c'est N_D) ; L : est la longueur de la grille.

S_{ZCE} : Représente la surface de la ZCE qui dépend des dimensions géométriques du MESFET (voir figure 2.2) et de la largeur de la ZCE « w », de telle sorte que

$$S_{ZCE} = y \cdot (x - w).$$

Selon l'épaisseur de la couche épitaxiale et le dopage utilisé, on distingue deux types du MESFET :

- MESFET à appauvrissement (Normally On).
- MESFET à enrichissement (Normally Off).

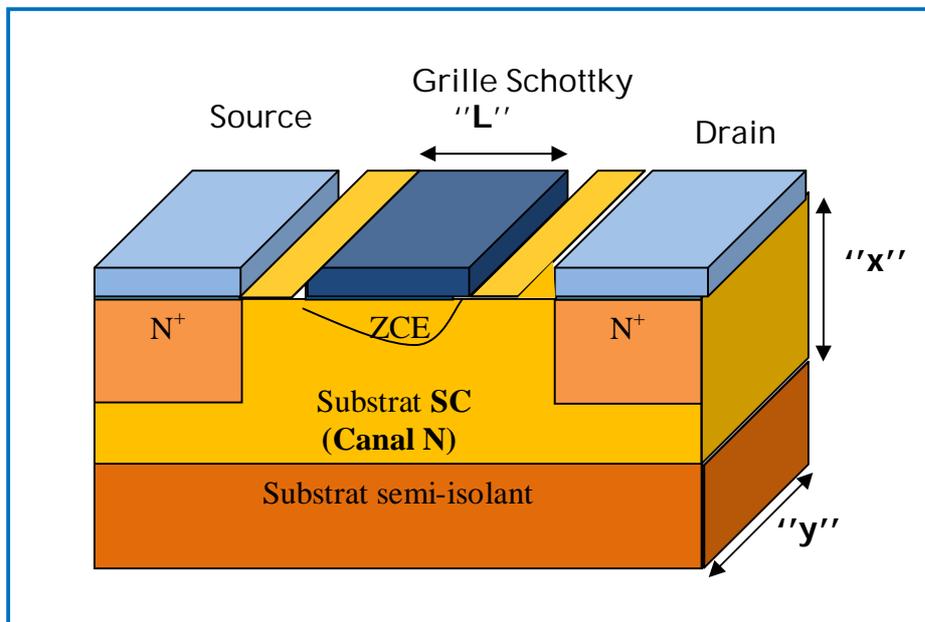


Fig.2.2 Schéma de principe du MESFET

2.2. Principe

Le fonctionnement de tous les transistors à effet de champ peut être assimilé à un même principe. Il consiste à moduler un flux de courant électrique dans le canal. Cette dernière est formée au dessous de la grille sous l'effet d'une polarisation extérieure V_{GS} (tension grille-source positive ou négative selon le type du transistor).

La polarisation a pour but de créer un champ électrique longitudinal attractif ou répulsif, afin de former un canal à enrichissement ou à appauvrissement respectivement. Donc on parle d'un canal contrôlé en courant. Le courant I_{DS} ne circule dans le canal sauf si une tension V_{DS} suffisante est appliquée aux bornes du drain et de la source (figure 2.3).

- Pour $V_{DS}=0$ (quelque soit V_{GS}):
 - Transistor bloqué ($I_{DS}=0$)
- Pour $V_{DS} > 0$:
 - Lorsque V_{GS} devient négative, elle favorise de plus en plus la pénétration de la ZCE dans la couche active en rétrécissant le canal. Ce rétrécissement va par la suite limiter la circulation des électrons entre la source et le drain, donc limité le courant.

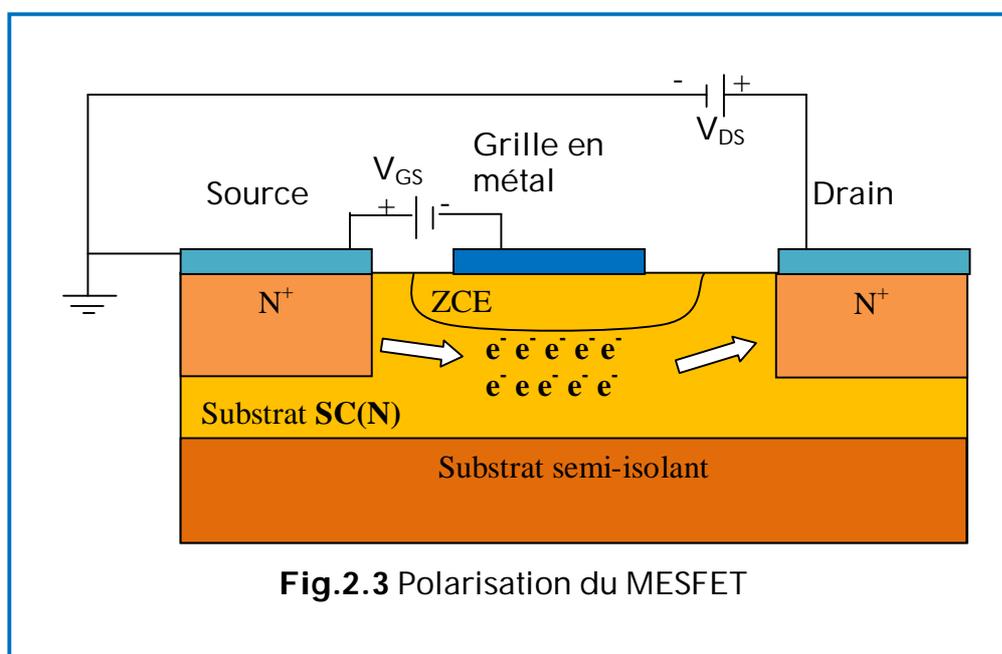
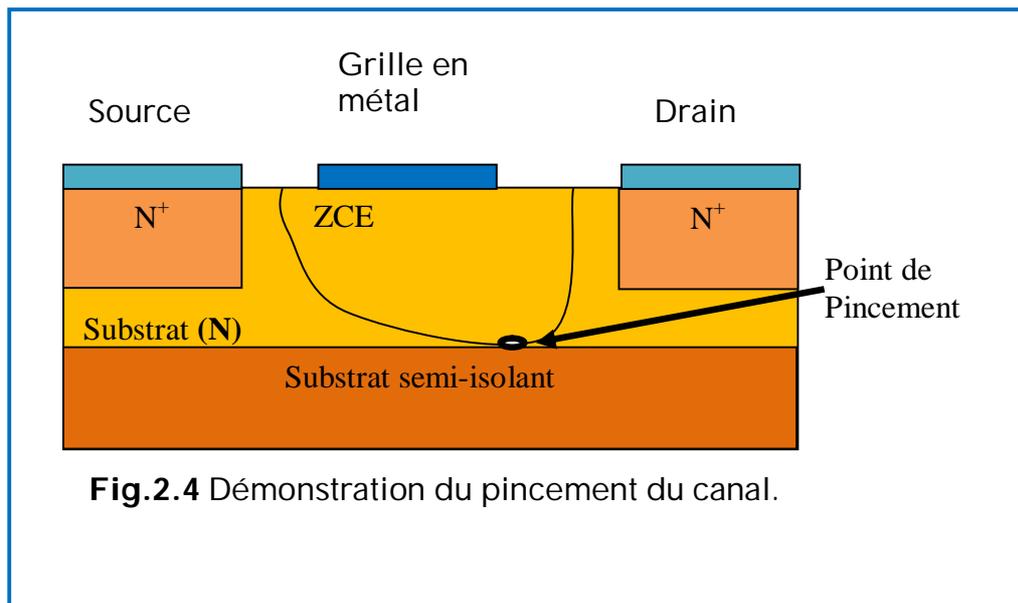


Fig.2.3 Polarisation du MESFET

- De plus en plus que V_{GS} devient négative ($V_{GS} \geq V_P$ avec V_P représente la tension de pincement du canal), un phénomène de pincement du canal se produira du côté du drain (voir figure 2.4). Ce pincement a pour effet d'annuler le courant ($I_{DS} = 0$).



- Pour V_{GS} constant
 - L'augmentation de V_{DS} entrainera une augmentation dans la quantité des électrons circulant dans le canal donc augmentation du courant I_{DS} .
 - Lorsque V_{DS} atteint une valeur dite de saturation V_{DSSat} , le courant ne va plus augmenter et donc le transistor sera saturé. V_{DSSat} est équivalente à une largeur « w », de la ZCE, égale à l'épaisseur « x » de la couche épitaxiale. Elle se traduit par : [Man05]

$$V_{DSSat} = x^2 \frac{qN_d}{2\epsilon} - V_{bi} \quad (2.2)$$

V_{bi} : c'est la tension de built-in, c'est une tension résultante de la barrière Schottky (voir figure 2.5).

Quand la ZCE vient de se coller au substrat, la valeur de V_{D_s} s'écrit :

$$V_{D_{ssat}} = x^2 \frac{qN_d}{2\epsilon} - V_{bi} - |V_{GS}| \quad (2.3)$$

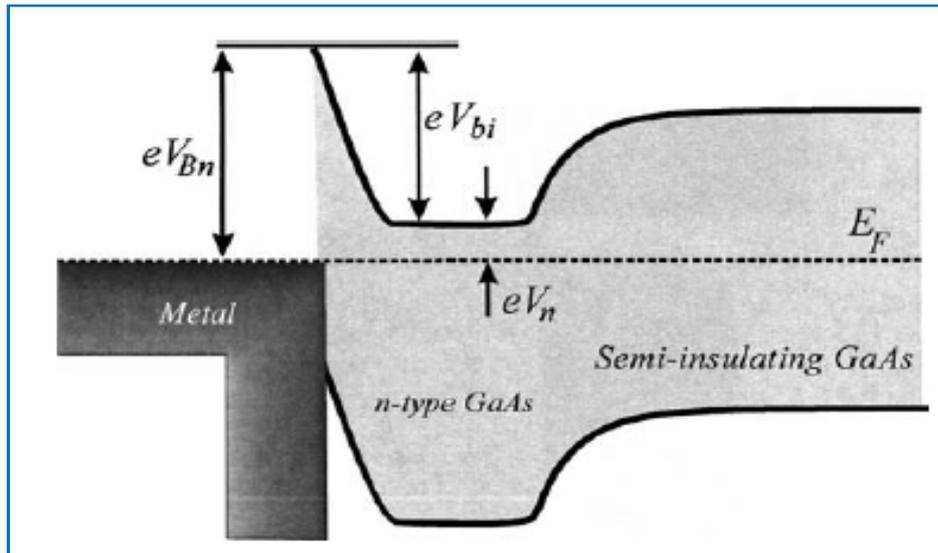


Fig.2.5 Diagramme d'énergie du barrière Schottky montrant la tension de Built-in V_{bi} [Man05]

2.3. Régimes de fonctionnement et caractéristiques

La caractéristique courant-tension $I_{DS}=f(V_{DS})|_{V_{GS}st}$ du transistor MESFET est donnée dans la figure 2.6. En analysant cette caractéristique on peut envisager deux régimes de fonctionnement:

- **Régime linéaire** : Aussi appelé régime ohmique où le courant varie proportionnellement avec la variation de V_{DS} . Donc le transistor se comporte comme une résistance variable. Dans cette zone et pour des faibles valeurs de V_{DS} , le courant croît linéairement et le canal garde une section sensiblement uniforme [Dub03] au dessous de la grille.

- **Régime de saturation** : Dans cette zone, le transistor se comporte comme une source de courant qui ne dépend que de la valeur de V_{GS} . Lorsque $V_{GS}=0$, le courant I_{DS} atteint sa valeur maximale de saturation I_{DSS} . Cette saturation est produite suite à l'élargissement de la ZCE. Cet élargissement réduira considérablement la section du canal et limitera par la suite le courant (quelque soit la valeur de V_{DS}).

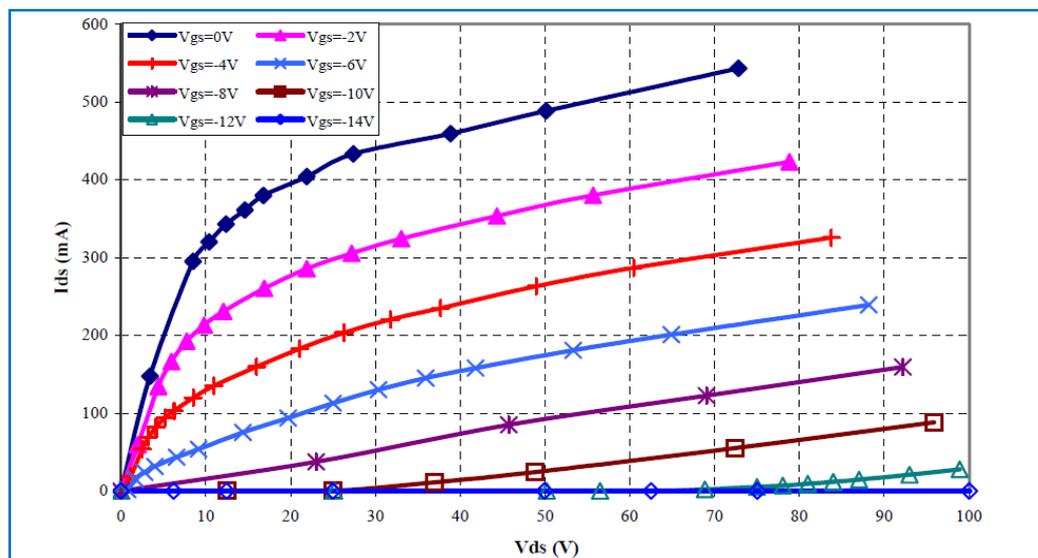


Fig.2.6 Caractéristique $I_{DS}=f(V_{DS})$ à V_{GS} constant.

Un paramètre important caractérisant le MESFET est sa transconductance. Cette dernière traduit la variation du courant de drain par rapport aux variations de la tension V_{GS} . Cette transconductance diffère d'une structure à une autre (latérale, verticale, etc.)

$$g_m = \left. \frac{\partial I_{DS}}{\partial V_{GS}} \right|_{V_{DS}} = cst \quad (2.4)$$

Pour des faibles valeurs de V_{DS} , la transconductance s'écrit sous la forme :

$$g_m \approx \frac{1}{2} \frac{I_p}{V_p} \frac{V_{DS}}{\sqrt{V_p(|V_{GS}| + V_{bi})}} \quad (2.4)$$

V_p et I_p Sont respectivement la tension et le courant de pincement.

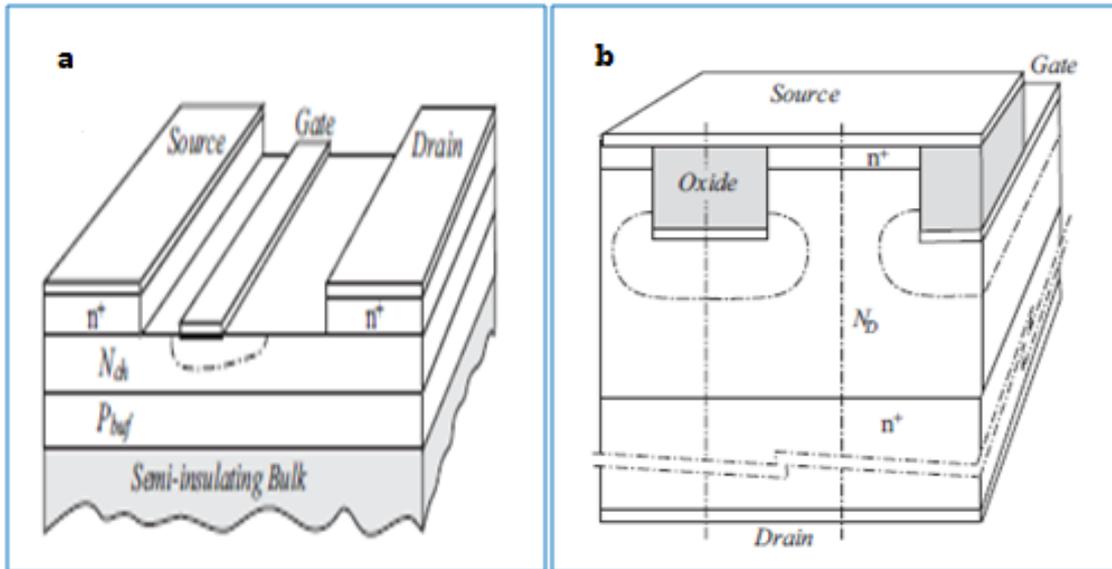


Fig.2.7 Les structures du transistor MESFET [Ber04] :

- a. Latérale (la plus adoptée).
- b. Verticale.

3. Le MESFET en Carbure de Silicium

3.1. Description

Le MESFET à base du carbure de silicium : SiC-MESFET, est considéré comme un redoutable composant, de la nouvelle génération des transistors à effet de champs, dédié aux applications de fortes puissance et hautes températures.

Cette exceptionnalité tire profit de ses meilleures caractéristiques électriques, physiques et thermiques qui le rendent un vrai concurrent pour les autres transistors. A cause de la qualité des substrats SiC disponibles, les SiC-MESFETs sont souvent fabriqués à base du 6H-SiC et le 4H-SiC. Le tout premier transistor en carbure de silicium, été à base du 6H-SiC fabriqué en **1977** par **Muench et al.** [Mue77], [Mu77].

Ce MESFET a été réalisé sur un substrat 6H-SiC dopé P, sur lequel est déposé, par épitaxie à phase liquide (LPE), une fine couche SiC dopé N (Nitrogène de l'ordre de 10^{16} at.cm⁻³). **Muench et al.** ont utilisé un mélange d'Or et du Titane pour réaliser la grille et un alliage d'Aluminium et du Silicium (Al-Si) pour fabriquer le drain et la source. Après les performances encourageantes obtenues par le 6H-SiC-MESFET, les chercheurs sont orientés vers les autres polytypes comme le 4H-SiC et le 3C-SiC. Le premier MESFET en 4H-SiC été fabriqué sur un substrat semi-isolant [Par98]. En **1987** **Yoshida et al.** [Yos87] et **Kelner et al.** [Kel87] fabriquent le premier MESFET en 3C-SiC. Par la suite de nombreux efforts ont été menés afin d'améliorer la qualité des substrats et d'optimiser de plus en plus les performances du MESFET à base de ce matériau [Bum88], [Dav89], [Kon87], [Pow06], [Tre91]. Un autre avantage du SiC-MESFET est qu'il peut être combiné facilement avec un SiC-MOSFET pour réaliser un MOSFET de haute tension [Mog11].

La figure 2.8 donne une comparaison du SiC-MESFET avec d'autres MESFETs dans le domaine de puissance. Cette figure illustre l'évolution de la densité de puissance en fonction de la tension du drain, pour quatre types de MESFET. Celui à base de 4H-SiC présente une meilleure densité de puissance qui le rend un bon candidat pour ce domaine.

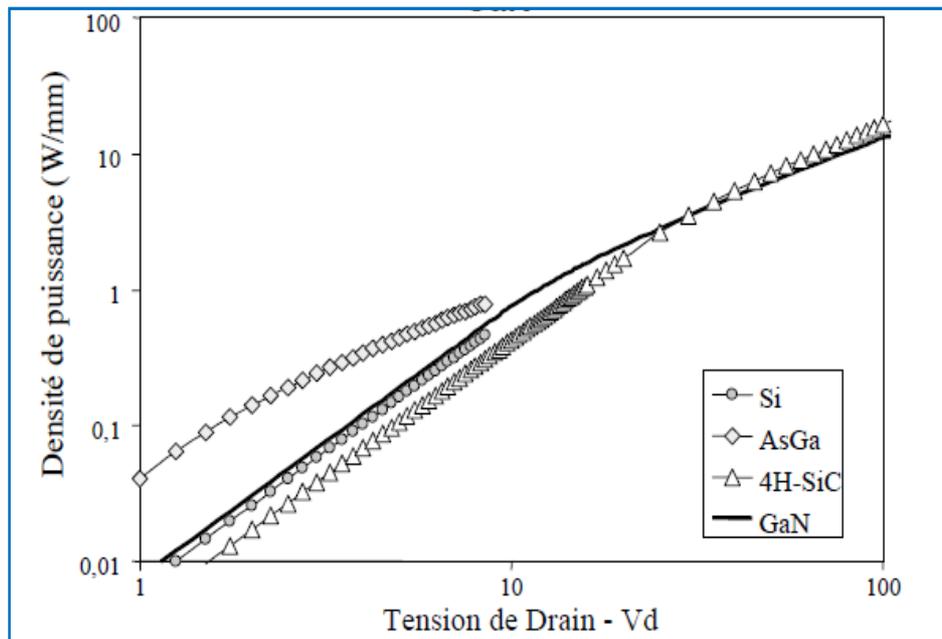


Fig.2.8 Evolution de la densité de puissance en fonction de la tension du drain pour des MESFET en Si, GaAs, 4H-SiC et GAN [Qué01].

3.2. Structure et caractéristiques

La structure du SiC-MESFET diffère selon le type du polytype utilisé et l'application désirée. La figure 2.9 montre la structure d'un 4H-SiC MESFET fabriqué sur un substrat conducteur pour une application radiofréquence.

Le rôle de la couche buffer est d'améliorer les performances en puissance du transistor. Aussi, elle permet d'optimiser, de plus, la conduction lorsqu'elle est fortement dopée et à faible épaisseur.

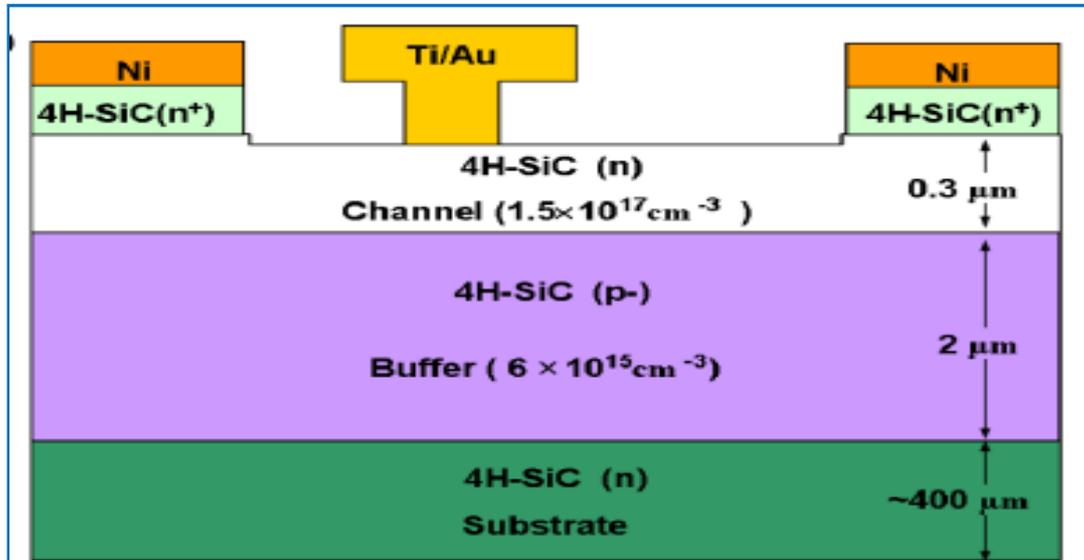


Fig. 2.9 Coupe transversale d'un 4H-SiC MESFET [Son04]

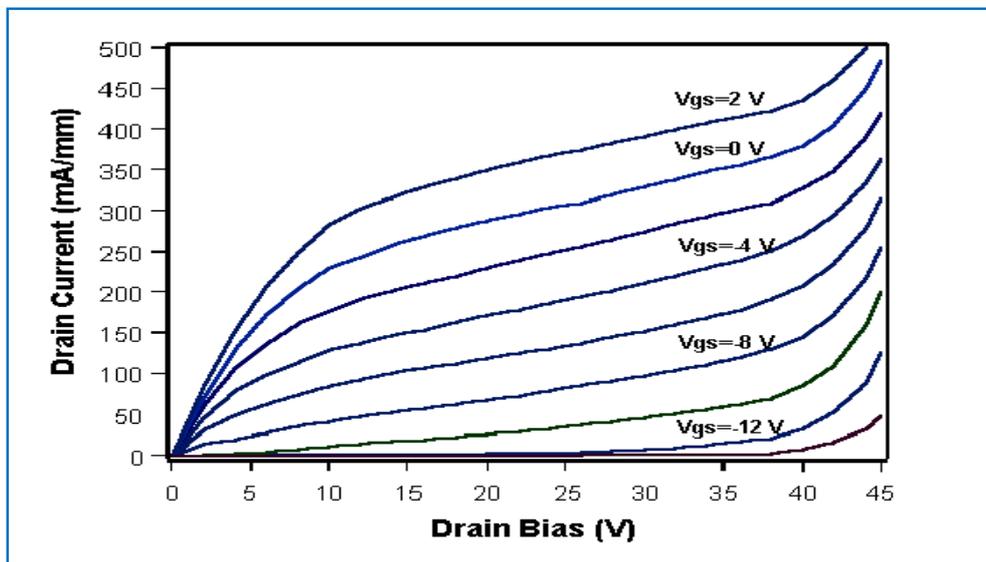


Fig.2.10 Caractéristique $I_{DS}=f(V_{DS})$ à V_{GS} constant d'un 4H-SiC MESFET [Son04].

Les travaux de recherches réalisés sur les SiC-MESFET montrent que ce dernier est trop sensible à quelques effets parasites menaçant leur rendement. Parmi ces effets nous citons : ceux de canaux courts, les défauts de structure dans le substrat (micro-pipes) et les effets thermiques et d'avalanche. Donc, afin de neutraliser au maximum possible ces effets parasites, les modèles mathématiques de ces derniers doivent être considérés au cours de la conception.

4. Le transport électronique dans le SiC-MESFET

Le choix d'un MESFET, pour une application bien déterminée, repose toujours sur la connaissance de ses propriétés électroniques et notamment ses caractéristiques de transport de charges. Ces caractéristiques nous renseignent tant que sur la densité de courant que peut dissiper le transistor que sur les conditions maximales d'opérations comme le champ de claquage, la vitesse de saturation, la température maximale supportée, etc. La détermination de ces caractéristiques s'appuie d'un côté, sur la bonne modélisation des phénomènes physiques mis en jeu et d'autre côté, sur l'exploitation de techniques (plus souvent numériques telle que la technique de Monte Carlo) capables de reproduire, d'une manière fiable, les effets des phénomènes pris en compte.

L'étude du transport de charge dans les SiC-MESFET a beaucoup pris d'attention ces dernières années. Les figures ci-après montrent quelques résultats extraits des études basées sur la technique de Monte Carlo. Une étude détaillée du transport électronique dans le SiC ainsi que le MESFET à base de ce matériau, par la méthode de Monte Carlo, sera présentée dans les chapitres 04 et 05.

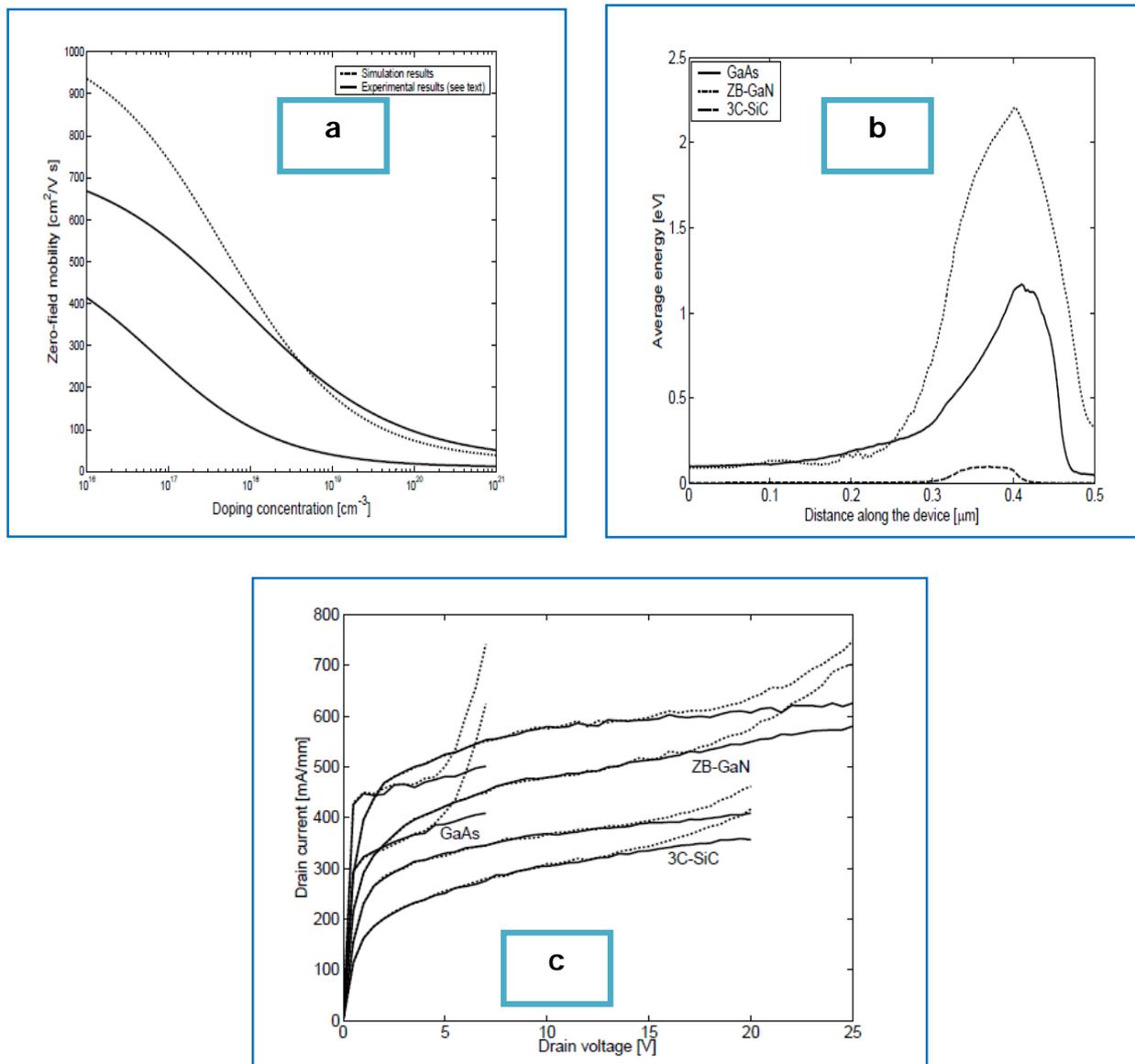


Fig. 2.11 Comparaison des caractéristiques de transport électronique, extraites des simulations Monte Carlo, dans le MESFET en 3C-SiC, GaN et GaAs [Web05]:
a. La Mobilité en fonction de dopage, **b.** L'énergie moyenne en fonction de la distance, **c.** Caractéristiques $I_{DS}=f(V_{DS})$.

Références

- [Ber04] **Kent Bertilsson**, "Simulation and Optimization of SiC Field Effect Transistors", Thèse, KTH, Stockholm, (2004).
- [Bum88] **J. W. Bumgamer, H. S. Kong, H. J. Kim, J. W. Palmour, J. A. Edmond, J. T. Glass, R. F. Davis**, "Monocrystalline & SiC semiconductor thin films: epitaxial growth, doping and FET device development", Proc. 38th Electronics Components Con., pp. 342-349, (1988).
- [Dav89] **F. Davis**, "Epitaxial growth and doping of and device development in monocrystalline β -SiC semiconductor thin films", Thin Solid Films, Vol. 181, pp. 1-15, (1989).
- [Dub03] **N. Dubuc**, "Modélisation électrothermique de transistors MESFET SiC et optimisation d'une architecture Doherty pour l'amplification de puissance à haut rendement", Thèse, Université de Limoges, (2003).
- [Hoo66] **W. Hooper et al.**, "An epitaxial GaAs field effect transistor", Proceedings of the IEEE, Vol. 55, (1966).
- [Kel87] **G. Kelner, S. Binari, K. Sieger, H. Kong**, IEEE Electron Device Lett., Vol.8, pp. 428-430, (1987).
- [Kon87] **H. S. Kong, J. W. Palmour, J. T. Glass, R. F. Davis**, "Temperature dependence of the current-voltage characteristics of metal-semiconductor field-effect transistors in n-type β -SiC grown via chemical vapor deposition", Appl. Phys. Lett., Vol. 51, pp. 442-444, (1987).
- [Man05] **O. Manasreh**, "Semiconductor heterojunctions and nanostructure", McGraw-Hill Companies, (2005).
- [Mea66] **C. Mead**, "Schottky barrier gate field effect transistor," Proceedings of the IEEE, vol. 54, pp. 307-308, (1966).
- [Mid70] **S. Middelhoek**, "Metallization processes in fabrication of Schottky-barrier FET's", IBM, J. Res. and Develop. Vol. 14, Is. 2, pp. 148-151, (1970).
- [Mog11] **H. A. Moghadam, J. Mahabadi, S. Rajabi**, "Combination of a 4H-SiC MESFET with a 4H-SiC MOSFET to realize a high voltage MOSFET", IEEE, (ICSCCN), (2011).

- [Mue77] **W. V. Muench, P. Hoeck, E. Pettenpaul**, "Silicon carbide field-effect and bipolar transistors", *ZEEE Znt. Electron Device*, pp. 337-339, (1977).
- [Mu77] **W. V. Muench et E. Pettenpaul**, "Saturated electron drift velocity in 6H silicon carbide", *J. Appl. Phys.*, Vol. 48, pp. 4823-4825, (1977).
- [Neu09] **P. G. Neudeck, S. L. Garverick, D. J. Spry, L. Y. Chen, G. M. Beheim, M. J. Krasowski, M. Mehregany**, "Extreme temperature 6H-SiC JFET integrated circuit technology", *Physica Status Solidi A*, Vol. 206, pp. 2329-2345, (2009).
- [Par98] **Y. S. PARK**, "SiC materials and devices", *Semiconductors and semimetals*, (1998).
- [Pow06] **A. Powell, J. Jenny, S. Muller, H. McD. Hobgood, V. Tsvetkov, R. Lenoard, C. Carter**, "Growth of SiC substrates", *International journal of high speed electronics and systems*, Vol. 16, N° 3, pp.751-777, (2006).
- [Qué01] **R. Quéré, P. Bouysse, J. P Teyssier, J. M. Nébus**, "Caractérisation et modélisation des transistors FET SiC et GaN: Influence des effets de pièges et des effets thermiques", *Institut de Recherche en Communications Optiques et Micro-ondes*, (2001).
- [Sch05] **Z. D. Schwartz1 et G. E. Ponchak**, "High Temperature Performance of a SiC MESFET Based Oscillator", *IEEE: MTT-S Int. Microwave Symp. Dig.*, (2005).
- [Son04] **N. J. Song, J. Kim, C. K. Choi, J. Burm**, "Fabrication of 4H-SiC MESFETs on Conducting Substrates and Analysis of Their Premature Breakdown » *Journal of the Korean Physical Society*, Vol. 44, No. 2, pp. 418_422, (2004).
- [Tre91] **R. Trew, J. B. Yan, P. M. Mock**, "The Potential of Diamond and SiC Electronic Devices for Microwave and Millimeter- Wave Power Applications", *Proc of the IEEE*, Vol. 79, N°. 05, (1991).
- [Web05] **M. Weber**, "Analysis of Zincblende-Phase GaN, Cubic-Phase SiC, and GaAs MESFETs Including a Full-Band Monte Carlo Simulator", *Thèse, GIT*, (2005).
- [Web01] <http://www.polytech-lille.fr/coursatomecircuitintegre/unip/unip650.htm>
- [Yos87] **S. Yoshida, K. Endo, E. Sakuma, S. Misawa, H. Okumura, H. Daimon, E. Muneyama, M. Yamanaka**, "Electrical properties of 3C-SiC and its application to FET", *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, Vol.97, pp. 259-264, (1987).

1. Introduction

Après la découverte de l'électron en 1897 [Web01], par le physicien anglais **Joseph John Thomson** (lauréat du prix Nobel en 1906), les recherches sont orientés vers la compréhension et la modélisation physique du transport électronique (trous). Donc, parlé du transport de charge revient à étudier les mécanismes physiques régissant le mouvement de ces charges. Pour le cas des semiconducteurs, le déplacement des charges est fortement lié au gap $E_g(\text{eV})$ de ceux-ci. Ce gap définira l'énergie minimum nécessaire pour que les électrons puissent être transférer de la bande de valence vers la bande de conduction laissant derrières des trous "h" (voir figure 3.1). Au niveau de la bande de conduction les électrons seront plus libres à se déplacer. Ce transfert n'aura lieu sauf si une excitation extérieure d'une énergie $E \geq E_g$, est fournie aux électrons. Cette énergie peut être soit un gradient de température, une excitation lumineuse ou une énergie électrique.



Dans le cas d'une excitation lumineuse, cette énergie doit vérifier la relation :

$$E(\text{eV}) = h\nu \geq E_g, \text{ Avec : } \nu = \frac{c}{\lambda}, h : \text{ est la constante de Planck, } c : \text{ la vitesse}$$

de la lumière, λ : la longueur d'onde lumineuse et ν : sa fréquence.

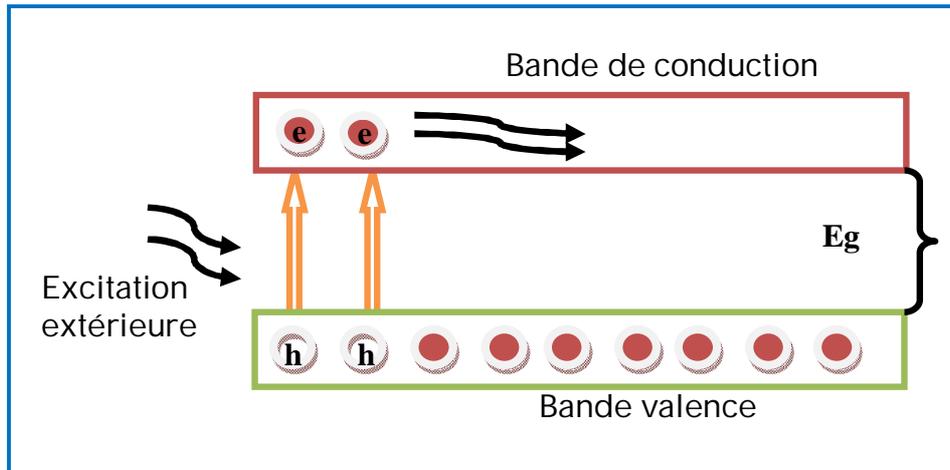


Fig.3.1 Représentation schématique du déplacement des électrons, dans un semiconducteur, sous une excitation extérieure.

Aussi, le transport de charges est assuré à la fois par : les charges négatives (électrons) et les charges positives (trous). Pour améliorer la conductivité d'un matériau semiconducteur, nous faisons recours au procédé de dopage. Pour le carbure de silicium, par exemple, les meilleurs dopants sollicités sont :

- Le **Nitrogène** pour le dopage de type « N » (donneur) : il crée un niveau donneur à **50-80meV** [Got93], [Sch99] de la bande conduction.
- L'**Aluminium** pour le dopage de type « P » (accepteur) : Il possède une énergie d'ionisation environ 200 meV [Got93].

De plus, la structure de bande d'énergie et la concentration des porteurs de charges, sont des paramètres clés dans la détermination des propriétés électriques des semiconducteurs. Dans le cas des semiconducteurs à large gap, la concentration intrinsèque est totalement responsable du bruit thermique et du courant de fuite dans les dispositifs. Cette concentration est souvent négligeable au-delà de 600°C [Ber04].

Cependant, les électrons qu'ils contribuent principalement au transport de charges sont ceux ayant une énergie avoisinante des minima, les plus faibles de la bande de conduction appelés « vallées ». L'énergie séparant les minima E_c de la bande de conduction et les maxima E_v de la bande de valence, définira par la suite le type du semiconducteur : soit à gap direct soit à gap indirect (voir figure 3.2). Pour la plupart des applications électroniques une description simplifiée, basée sur des modèles analytiques simples, est adoptée pour décrire le transport de charges. Dans ce chapitre, le transport de charge dans les massifs semiconducteurs ainsi que dans les dispositifs unipolaires tel que le MESFET, sera présenté.

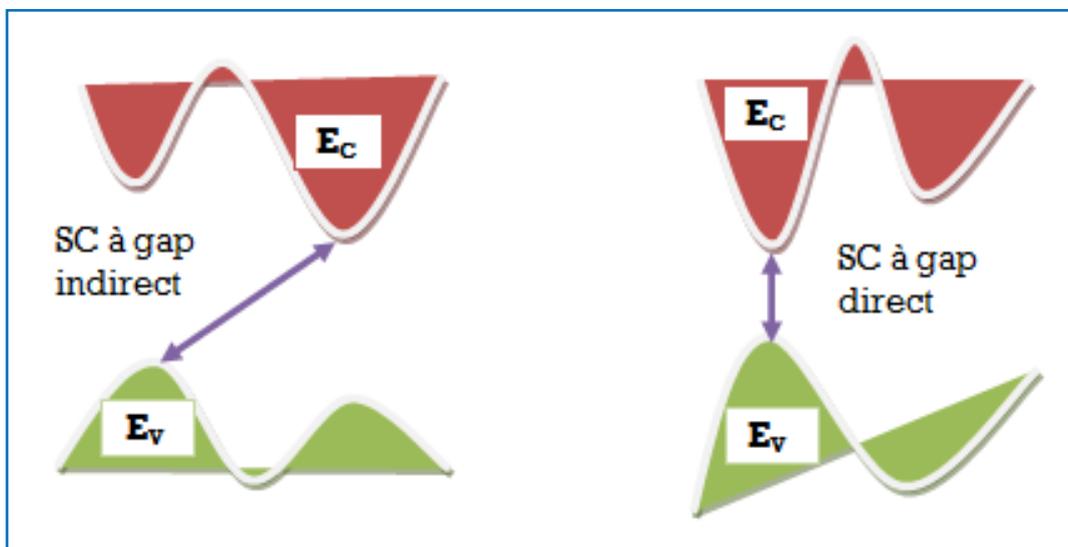


Fig.3.2 Représentations sous forme de bandes d'énergie dans un semiconducteur.

2. Transport de charge dans les semiconducteurs

Puisque les propriétés électroniques, optiques et magnétiques des semiconducteurs s'attachent directement à la forme de leurs structures de bande, et dépendent fortement des phénomènes physiques régissant le transport de charges dans ces semiconducteurs, la connaissance de la structure de bande (ou au moins une portion de celle-ci) dans laquelle se trouvent ces charges est toujours exigée. Dans ce contexte, plusieurs approximations analytiques ont été élaborées pour le calcul des structures de bande. Toutes ces approximations se basent sur la fonction d'onde de **Bloch**.

2.1. Fonction de Bloch

Considérons un réseau périodique dans l'espace de volume " Ω " et de période " R ". Le théorème de Bloch affirme que l'équation de Schrödinger, dans ce réseau accepte une solution de la forme [Pet99]:

$$\Psi(k, r) = \exp(ik \cdot r) u(k, r) \quad (3.1)$$

$\Psi(k, r)$: la fonction d'onde de Bloch, $u(k, r)$; la fonction du réseau

Du fait que la fonction de réseau a la symétrie de translation que le réseau directe, c'est à dire : $u(k, r) = u(k, r + R)$. Cette symétrie nous offre la possibilité de simplifier la classification des structures de bandes, donc les états électroniques.

Quand l'électron se trouve dans un potentiel nul, la fonction de Bloch prend la forme :

$$\Psi(k, r) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \exp(iK \cdot r) \quad (3.2)$$

Selon l'approximation utilisée, pour le calcul de la structure de bande, deux principaux modèles se distinguent : modèle parabolique isotrope et modèle non-parabolique.

2.2. Modèle de bandes paraboliques

Dans ce modèle, la relation de dispersion d'énergie pour une vallée « i » est exprimée par :

$$E_i(k_i) = \frac{\hbar^2 |k_i|^2}{2m_i^*} \quad (3.3)$$

k_i : est le vecteur d'onde dans la vallée "i", m_i^* : la masse effective des électrons dans la vallée "i", \hbar : est la constante de Planck réduite.

Dans tel type de structure de bande, la vitesse qu'acquièrent les électrons s'exprime par la formule ci-dessous :

$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(k) \quad (3.4)$$

Ou tout simplement :

$$v(k_i) = \frac{\hbar k_i}{m_i^*} \quad (3.5)$$

2.3. Modèle de bandes non-paraboliques

Dans ce modèle, le coefficient de non-parabolicité (dans chaque vallée) est considéré dans le calcul de la structure de bande. Ce coefficient dépend fortement de la pression et affecte directement les caractéristiques thermoélectrique du matériau. Aussi, les travaux de **J. Kundu et al.** [Cho99], effectués sur le substrat InSb dopé N, ont montré que la non-parabolicité des bandes d'énergie a un effet remarquable sur le coefficient d'absorption des porteurs libres dans ce matériau. Ce coefficient apparaît directement dans l'équation de Schrödinger [Vil93] et donc dans l'équation de dispersion d'énergie. Selon l'approximation de **Kane**, l'équation de dispersion s'exprime par l'équation 3.6 telle que [Ani03] :

$$E_i(k_i)[1 + \alpha_i E_i(k_i)] = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_i^*} \quad (3.6)$$

Où α_i : représente le coefficient de non-parabolicité dans chaque vallée considérée.

Dans ce cas la vitesse des électrons s'exprime par la relation ci-dessous :

$$v(k_i) = \frac{\hbar k_i}{m_i^*[1+2\alpha_i E_i(k_i)]} \quad (3.7)$$

La figure 3.3 indique l'effet du coefficient de non-parabolicité sur la dispersion d'énergie. Selon cette figure, pour un fort dopage, une décroissance rapide de la valeur de la masse effective a été enregistrée pour la dispersion de Kane (figure 3.3.b).

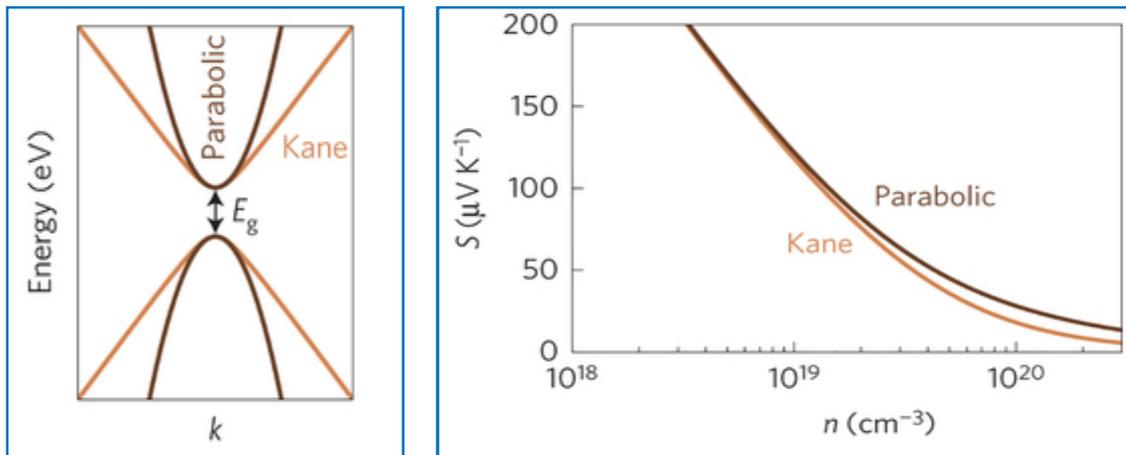


Fig.3.3 Démonstration de l'effet de la non-parabolicité [Web02] :
 a. Sur la dispersion d'énergie parabolique et de Kane pour ($E=0$)
 b. Sur le coefficient de Seebeck.

2.4. L'équation de Boltzmann

Lorsqu'il s'agit d'étudier le transport de charges, dans les substrats semiconducteurs, une équation clé à tenir en considération est celle de **Boltzmann**. Elle est considérée comme une équation de continuité de la fonction de distribution (dans l'espace des phases (r, k, t)) dans les conditions hors-équilibre. L'avantage de cette équation est qu'elle peut décrire finement l'évolution d'une population de particules, subissant des collisions binaires.

2.4.1. Modèle mathématique

Dans l'approche semi-classique [Bre99], les électrons contribuant à la conduction peuvent être considérés comme des particules semi-classiques. Ces particules ont une masse effective et sont fortement liées à la courbure de la bande d'énergie (proche du minimum).

En absence du champ magnétique, l'équation de Boltzmann pour les électrons de la bande de conduction peut être dérivée de l'approximation du temps de relaxation. Suivant cette approximation, toutes les interactions qui peuvent subir les électrons sont traitées comme élastiques c'est à dire traitées par un même temps de relaxation. Dans ce cas, l'équation de Boltzmann prend la forme [Fer88]:

$$\frac{\partial f(r, k, t)}{\partial t} + v^i(k) \frac{\partial f(r, k, t)}{\partial x^i} - \frac{eE^i}{\hbar} \frac{\partial f(r, k, t)}{\partial k^i} = C[f(r, k, t)] \quad (3.8)$$

Avec $f(r, k, t)$ représente la fonction de distribution des électrons en fonction du temps ($t > 0$), du vecteur d'onde et de la position spatiale. E^i : est le champ déduit de l'équation de Poisson. $C[f]$: Exprime les effets des interactions. En absence de ces interactions le transport est dit balistique.

Sous l'effet des interactions, un électron aura une probabilité $P(\vec{K}, \vec{K}')$ de se transiter d'un état énergétique \vec{K} à un autre état \vec{K}' telle que :

$$C[f] = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = \int [P(\vec{K}', \vec{K}) f(\vec{K}') (1 - 4\pi^3 f(\vec{K})) - P(\vec{K}, \vec{K}') f(\vec{K}) (1 - 4\pi^3 f(\vec{K}'))] dK \quad (3.9)$$

Le terme $(1 - 4\pi^3 f(\vec{K}))$ rend compte du principe d'exclusion de Pauli. $P(\vec{K}, \vec{K}')$ et $P(\vec{K}', \vec{K})$ rendent compte des probabilités de transitions $(\vec{K} - \vec{K}')$ et $(\vec{K}' - \vec{K})$ respectivement.

Dans le cas d'un gaz d'électron dilué, le facteur de collision s'écrit de la forme :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = \int [P(\vec{k}', \vec{k}) f(\vec{k}') - P(\vec{k}, \vec{k}') f(\vec{k})] dK \quad (3.10)$$

Selon l'équation (2.10) l'équation de Boltzmann prend la formule (3.11) telle que :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v^i(k) \frac{\partial f}{\partial x^i} - \frac{eE^i}{\hbar} \frac{\partial f}{\partial k^i} = \int [P(\vec{k}', \vec{k}) f(\vec{k}') - P(\vec{k}, \vec{k}') f(\vec{k})] dK \quad (3.11)$$

2.4.2. La mobilité et l'équation de Boltzmann

La description mathématique complexe des taux d'interactions ainsi que la prise en compte des conditions aux limites (pour le cas du dispositif) dans la résolution de l'équation de Boltzmann rend la solution analytique de celle-ci trop difficile à obtenir. Aussi, la forme **intégro-différentielle** de cette équation implique l'utilisation de certaines hypothèses simplificatrices, de la fonction de distribution, telle que la formulation de **Maxwell** dérivée : Drifted Maxwellian Formulation. Pour surmonter ces contraintes, l'utilisation des méthodes numériques pour la résolution de l'équation de Boltzmann est sollicitée. Ces méthodes numériques offrent un outil adéquat pour l'extraction des différentes caractéristiques du transport électronique à partir de l'équation de Boltzmann. Parmi les méthodes, largement utilisées, y on a la méthode itérative [Nou73] et celle de monte Carlo [Jac83].

La méthode d'itération a été développée en 1973 par Rode [Rodb73] dans le but de calculer la mobilité des électrons en présence d'un faible champ électrique. Aussi, selon le type des interactions agissant sur les électrons, la mobilité de ces derniers peut être déduite directement de l'équation de Boltzmann. En utilisant cette méthode ou l'approximation du taux de relaxation, la mobilité s'exprime par l'équation ci-dessous [Kun07] :

$$\mu = \frac{e\langle\tau\rangle}{m^*} \quad (3.12)$$

$\langle\tau\rangle$: est le taux de relaxation moyen par rapport à l'énergie des électrons.

De même, la résolution de l'équation de Boltzmann permet de déterminer la fonction de distribution modifiée, sous l'effet du champ électrique constant. Dans ce cas la fonction de distribution a pour forme :

$$f_k = f_0 + xg_k \quad (3.13)$$

Où f_0 est la fonction de distribution de **Fermi-Dirac**, g_k : représente la fonction de distribution modifiée (sous perturbation) et x : le cosinus directeur entre le vecteur d'onde et le champ électrique appliqué. Une forme itérative peut être attribué à g_k de telle sorte que [Roda73] [Fer00] :

$$g_{k,i+1} = \frac{g_{k,i} + qE \frac{df_0}{dk}}{S_0} \quad (3.14)$$

Après que la fonction de distribution g_k est résolue (avec une précision arbitraire), on obtient :

$$\mu = \frac{h}{3m^*} \frac{\int k^3 (g_k/E) dk}{\int k^2 f_0 dk} \quad (3.15)$$

A faible champ électrique et en dépendance de la température, la mobilité pour le cas du 4H-SiC s'écrit [Ros01] :

$$\mu_0 = \mu_{min} + \frac{\mu_{max} - \mu_{min}}{1 + (\frac{N}{N_{ref}})^\alpha} \quad (3.16)$$

Pour le 3C-SiC cette mobilité reste toujours difficile à déterminer. Ceci est souvent dû à la qualité des substrats disponibles (par hétéro-épitaxie) présentant une forte densité de défauts. Un modèle adapté, utilisant certaines hypothèses simplificatrices de la mobilité de dérive, est celui donné par **Matthias Roschke** [Ros01] :

$$\mu_0 = \frac{\mu_{max} + C \cdot (\frac{N}{N_{ref}})^{\alpha - \delta}}{1 + (\frac{N}{N_{ref}})^\alpha} \quad (3.17)$$

N : représente la concentration du dopage global, μ_{max} : est la mobilité dans les régions non-dopées ou dopées d'une manière non-intentionnelle. μ_{min} : est la mobilité dans les régions fortement dopées où les interactions par impuretés sont dominantes. N_{ref} : représente la concentration du dopage là où la valeur de la mobilité est moyenne (entre μ_{max} et μ_{min}). α : est une mesure de la vitesse de changement de la mobilité entre μ_{max} et μ_{min} . δ : c'est une constante.

On note que μ_{max} , μ_{min} , N_{ref} , α , δ sont des paramètres spécifiques à chaque polytype du carbure de silicium. Pour le 3C-SiC et le 4H-SiC ces paramètres prennent les valeurs citées dans le tableau 3.1.

Paramètres	3C-SiC [Ros01]	4H-SiC [Ros01]
$\mu_{max}(\text{cm}^2/\text{Vs})$	$650 * (\frac{T}{300(\text{°K})})^{-2.5}$	$950 * (\frac{T}{300(\text{°K})})^{-2.4}$
$\mu_{min}(\text{cm}^2/\text{Vs})$	//////	$40 * (\frac{T}{300(\text{°K})})^{-0.5}$
$N_{ref} (\text{cm}^{-3})$	$2. 10^{16}$	$2. 10^{17} * (\frac{T}{300(\text{°K})})$
α	0.8	0.76
δ	0.2	//////
$C (\text{cm}^2/\text{Vs})$	$330 * (\frac{T}{300(\text{°K})})^{-2.5}$	//////

Tab.3.1 Principaux paramètres définissant la mobilité dans le 3C-SiC et 4H-SiC.

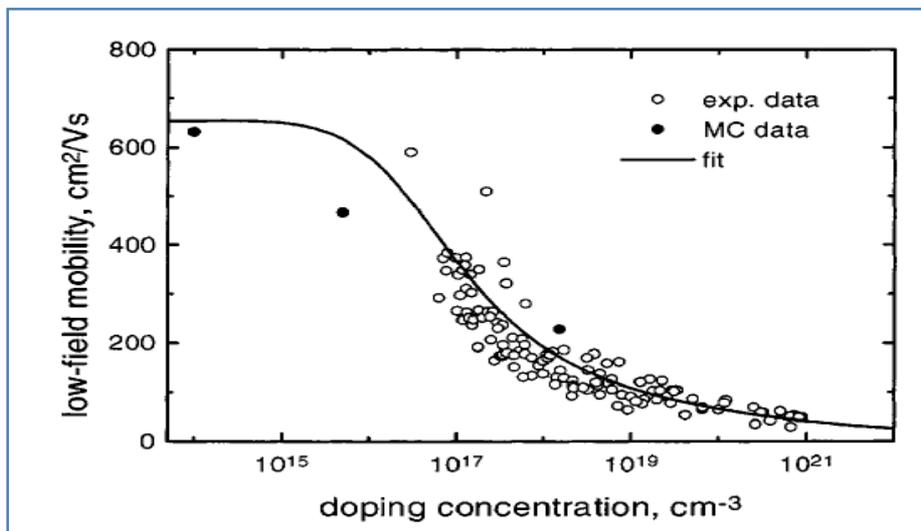


Fig.3.4 Evolution de la mobilité en fonction du dopage dans le 3C-SiC à faible champ électrique [Ros01].

La figure 3.4, donne une comparaison entre des résultats expérimentaux et d'autres tirés des simulations Monte Carlo de l'évolution de la mobilité en fonction du dopage, dans le cas du 3C-SiC. On note que **Rode** [Rodb73] a aussi présenté une autre technique d'itération par l'introduction un champ magnétique variable pour le calcul de la mobilité de **Hall** (voir figure 3.5) [Nga09]. Dans le cadre de la modélisation du transport de charges une forte mobilité est toujours associée à une vitesse de dérive maximale. Cette dernière nous renseigne sur la quantité de charges (courant électrique), en mouvement, dans un composant à semiconducteur. Donc, la connaissance de la vitesse de dérive est primordiale pour tout éventuel choix d'un composant pour une application désirée. La figure 3.6 donne des caractéristiques des vitesses de dérive pour certains semiconducteurs. À partir de cette figure les semiconducteurs à large gap tel que le 3C-SiC, sont ceux possédant le pic de vitesse le plus élevé.

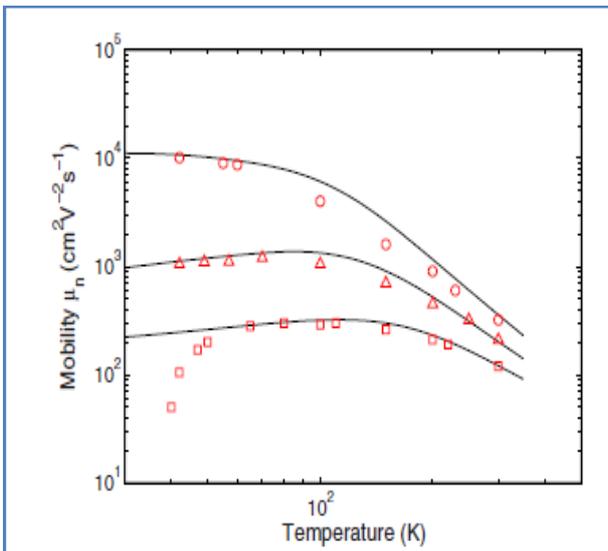


Fig.3.5 Evolution de la mobilité de Hall, dans le 6H-SiC, en fonction de la température et différents niveaux de dopage [Nga09].

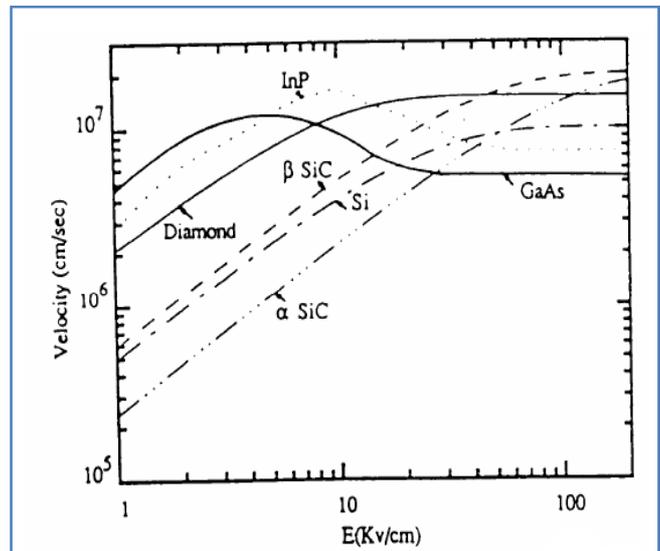


Fig.3.6 Vitesse de dérive pour certains semiconducteurs [Tre94].

3. Transport de charges dans les dispositifs semiconducteurs

L'étude du transport de charges dans les dispositifs à semiconducteurs nécessite une modélisation plus approfondie. L'une des démarches adoptées est basée sur la résolution de l'équation couplée **Poisson-Boltzmann**. L'équation de Poisson exprime la relation entre le potentiel électrostatique et la distribution de charge dans le dispositif. Pour un modèle à deux dimensions cette équation a pour formule :

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = - \frac{\rho(x,y)}{\epsilon} \quad (3.16)$$

ϕ : est le potentiel électrostatique, $\rho(x,y)$ la distribution de charge à deux dimensions, ϵ est la constante diélectrique.

L'équation (3.16) peut être résolue analytiquement, mais à cause de la complexité de la distribution de charge, la solution numérique est plus favorisée. Une description détaillée de la résolution numérique, par la méthode de Monte Carlo, de cette équation sera évoquée dans le chapitre 05.

Références

- [Ani03] **A.M. Anile, W. Allegretto, C. Ringhofer**, "Mathematical problems in semiconductor physics", Springer, (2003).
- [Ber04] **K. Bertilsson**, "Simulation and optimization of SiC Field Effect Transistors", Thèse, Université de Stockholm, (2004).
- [Bre99] **K F. Brennan**, "The physics of semiconductors with Applications to optoelectronic devices", Cambridge University Press, (1999).
- [Cho99] **W. C. Chong et L. Chau-Jy**, "Effect of nonparabolicity on free-carrier absorption in n-type InSb Plms for polar optical phonon scattering", Physica B, 263D264, pp.208-210, (1999).
- [Fer88] **D.K. Ferry**, "Semiconductors", McMillan, New York, (1988).
- [Fer00] **K. Ferry**, "Semiconductor Transport", Taylor & Francis, New York, (2000).
- [Ham64] **J.M. Hammersley et D.C Handscomb**, "Monte Carlo Method", John Wiley & Sons, (1964).
- [Got93] **W. Götz, A. Schöner, G. Pensel, W. Suttrop, W. J. Choyke, R. Stein, S. Leibenzeder**, "Nitrogen donors in 4H-silicon carbide", Journal of Applied Physics, Vol.71, N°07, pp. 3332-3338, (1993).
- [Jac83] **C. Jacoboni et L. Reggiani**, "The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials", Reviews of Modern Physics, Vol.55, N°03,pp.645, (1983).
- [Kun07] **J. Kundu¹, C.K. Sarkar, P.S. Mallick**, "Calculation of electron mobility and effect of dislocation scattering in GaN", Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics, Vol. 10, N° 01, pp. 1-3, (2007).
- [Nga09] **G. Nga, D. Vasileska, D. K. Schroder**, "Calculation of the electron Hall mobility and Hall scattering factor in 6H-SiC", Journal of Applied Physics, Vol. 106, pp.053719 (2009).
- [Nou73] **J. P. Nougier et M. Rolland**, "Mobility, Noise Temperature, and Diffusivity of Hot Holes in Germanium", Phys. Rev. B, vol. 8, pp. 5728, (1973).

[Pet99] **Peter Y. Yu. et M. Cardona**, "Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials properties", Springer, (1999).

[Roda73] **L. Rode**, "Low field electron transport", Semicond. Semimetals, Vol. 10, pp. 1-89, (1973).

[Rodb73] **L. Rode**, "Theory of electron galvanomagnetism in crystals- Hall effect in semiconductors and semimetals", Phys. Status Solidi B, Vol. 55(2), pp. 687-696, (1973).

[Ros01] **M. Roschke, F. Schwierz**, "Electron Mobility Models for 4H, 6H, and 3C SiC", IEEE Trans. On Elec. Dev., Vol. 48, N°07, pp 1442-1447, (2001).

[Sch99] **A. Schöner, S. Karlsson, T. Schmitt, N. Nordell, M. Linnarsson, K. Rottner**, "Hall effect investigation of 4H-SiC epitaxial layers on semiinsulating and conducting substrates", Material Science and Engineering, B61-62, pp. 389-394, (1999).

[Tre94] **R. J. Trew et M. W. Shin**, "Wide bandgap semiconductor MESFETs for high temperature applications", IEEE conferences, pp.109-123, (1994).

[Vil93] **J. A. L. Villanueva, I. Melchor, P. Cartujo, J.E Carceller**, "Modified Schrödinger equation including non parabolicity for the study of a two-dimensional gas", physical review B, Vol.48, N°3, (1993).

[Web01] <http://www-sprof.gsfc.nasa.gov/Education/Fwhelect.html>

[Web02] http://www.nature.com/nmat/journal/v14/n12/fig_tab/nmat4430_F2.html

1. Introduction

L'étude du transport de charges dans les semiconducteurs est l'une des clés du développement rapide de l'industrie des composants électroniques. Cette étude nécessite une bonne modélisation des phénomènes physiques décrivant le comportement des charges (électrons/trous) dans le réseau cristallin. Cette modélisation s'appuie sur des modèles mathématiques, utilisant les lois de la mécanique quantique. L'équation de Boltzmann reste un bon atout pour la description et l'analyse du comportement des charges, dans les semiconducteurs. Cette description est basée sur la détermination de la fonction de distribution d'énergie. Le plus souvent nous faisons appel à des méthodes numériques pour effectuer la résolution de cette équation. Au cours de ce chapitre, les étapes de la résolution numérique de l'équation de Boltzmann, par la méthode de Monte Carlo, seront exposées. L'utilisation de cette méthode, non seulement fournira la fonction de distribution, vérifiant l'équation de Boltzmann, mais aussi offre des indications sur les fluctuations qu'elle subira cette fonction au cours du temps [Jac89].

2. Description de la méthode de Monte Carlo

La spécificité de la méthode de Monte Carlo est sa capacité de simuler numériquement (avec précision), les phénomènes microscopiques, à partir des modèles mathématiques détaillés. Elle reproduit efficacement la nature stochastique de nombreux systèmes physiques complexes, en utilisant les nombres aléatoires. **T. Kurosawa** [Kur66] et **W. Fawcett et al.** [Faw70] sont les premiers à appliquer cette méthode pour l'étude du transport électronique dans les semiconducteurs notamment dans l'Arséniure de Galium. Par la suite, la méthode de Monte Carlo est devenue un outil très général et puissant pour l'étude du transport électronique dans les matériaux et les dispositifs à semiconducteurs à la fois. De plus, la méthode de Monte Carlo donne une solution exacte de l'équation Boltzmann et fournira les paramètres (de transport électronique) utiles pour les simulateurs macroscopiques.

Afin d'aboutir à une meilleure description du comportement des charges (électrons), la méthode de Monte Carlo nécessite la bonne définition de la structure de bande, dans laquelle se trouvent les électrons. Aussi, la connaissance des paramètres physiques du matériau étudié, tels que : la masse effective, le potentiel de déformation, la vitesse de son, etc., reste aussi importante. Le principe de cette méthode est basé sur un procédé de tirage au sort (génération de nombres aléatoires) à partir des lois de probabilité. Ces lois nous offre la possibilité d'analyser l'effet des interactions, sur la fonction de distribution des électrons sous différentes conditions de champ électrique, de température, etc.

Les interactions se produisent au court des transitions, qu'ils effectuent les électrons, dans les bandes d'énergie. Ces transitions peuvent être classées en deux types (voir figure 4.1) :

- ❖ Les transitions intra-vallées : Lorsque les transitions, d'un état énergétique à un autre, s'effectuent dans une même vallée.
- ❖ Les transitions inter-vallées : Quand les électrons transitent d'une vallée à une autre.

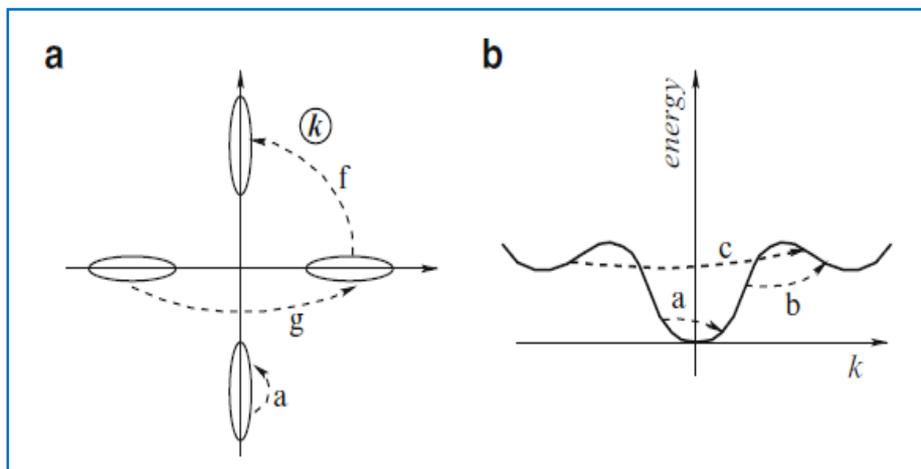


Fig.4.1 Représentation des différentes transitions possibles dans un semiconducteur [Jac10] :

- a)** Dans le Silicium
- b)** Dans l'Arséniure de Gallium.

Les principales causes des interactions sont les phonons (acoustiques ou optiques), les impuretés (neutres ou ionisées) ainsi que les alliages sont les principales causes des interactions. Dans le cas des semiconducteurs à large gap, à cause de la variété des processus de croissance donnant naissance à des différentes propriétés de symétrie cristallographique, une formulation mathématique précise des interactions doit être effectuée.

De même, la dépendance en énergie, pour la formulation des taux d'interactions, n'est pas toujours utile [Kur66]. Pour la résolution de l'équation de Boltzmann, une bonne approche est basée sur l'approximation des taux de relaxation ou l'approximation des moments. Cette dernière apparaît directement dans le membre décrivant les interactions suivant l'équation 4.1 [Jac10] :

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} f(k) \right|_{coll} = \frac{f - f_F}{\tau(\epsilon)} = -\frac{f_1(k)}{\tau(\epsilon)} \quad (4.1)$$

Où : $\tau(\epsilon)$ représente le taux de relaxation. Il est assumé à une fonction de l'énergie.

Cette approximation reste très utile, lorsqu'il s'agit de traiter la réponse linéaire de l'équation de Boltzmann. Aussi pour décrire finement le comportement en régime hors équilibre. Sous l'effet d'un fort champ électrique, les électrons gagnent plus d'énergie, donc acquièrent plus de vitesse en donnant naissance à un régime de transport non-linéaire. Dans le cadre de la modélisation des dispositifs, le régime non-linéaire est souvent décrit par le phénomène des électrons chauds. Dans la suite de ce chapitre nous discuterons en détails, les principales étapes d'implémentation de la méthode de Monte Carlo pour la simulation du transport électronique dans les semiconducteurs ainsi que les différents résultats obtenus.

3. Démarches d'implémentation de la méthode

L'approche utilisée pour résoudre l'équation de Boltzmann s'appuie sur le suivi continu des trajectoires d'un ensemble d'électrons en mouvement. Cette approche utilise un algorithme de génération de nombres aléatoires couplé avec un algorithme de discrétisation pour la résolution des intégrales multidimensionnelles et l'évaluation des effets d'interactions. Les trajectoires des électrons sont à six dimensions : trois dans l'espace réel et trois dans l'espace des vecteurs d'onde (voir figure 4.2). On note que le suivi des électrons à travers leurs trajectoires, permet l'extraction des informations macroscopiques, d'une manière statistique, sur les déplacements des électrons. Ces informations sont déduites en utilisant des estimateurs microscopiques.

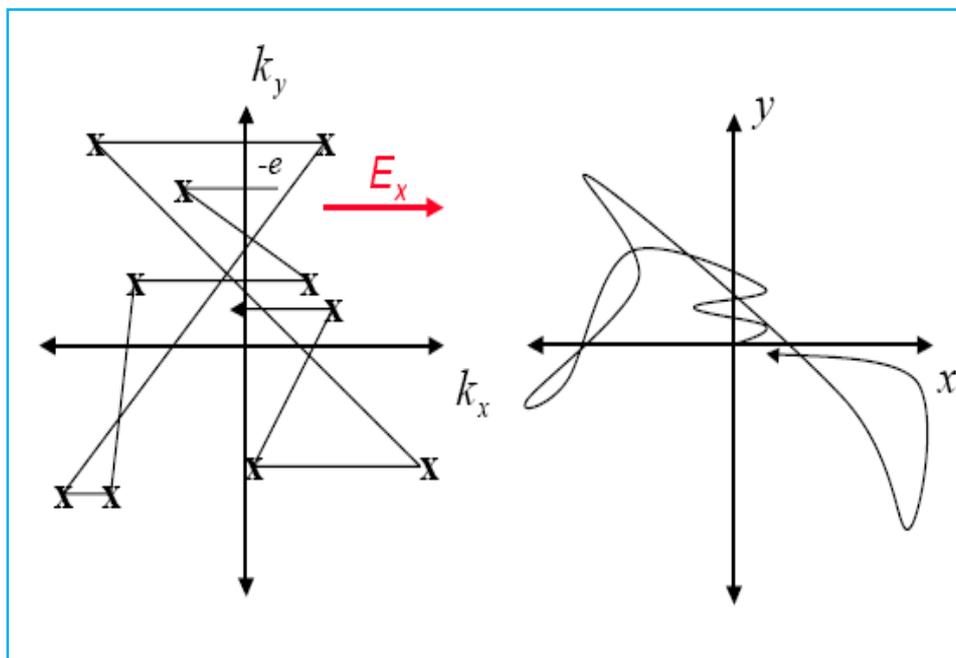


Fig.4.2 Représentation, à six dimensions, de la trajectoire d'un électron [Bel09].

L'implémentation numérique de la méthode de Monte Carlo, nécessite la prise en compte de certains paramètres qui sont:

- ❖ Le modèle de la structure de bande : bande complète (Full band), trois vallées, parabolique ou non-parabolique, etc. (voir figure 4.3).

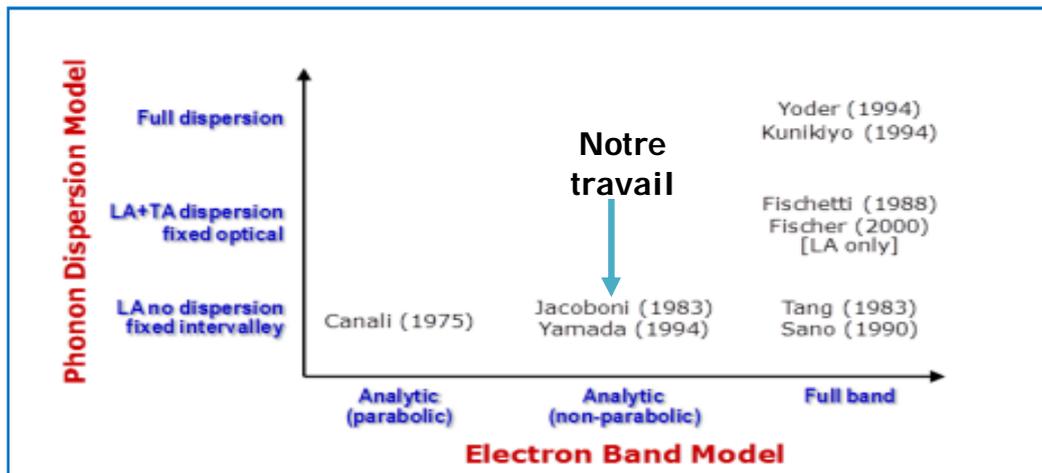


Fig. 4.3 Démonstration Historique des modèles Monte utilisés Carlo pour l'implémentation des bandes d'énergie.

- ❖ Le principe d'exclusion de **Pauli**.
- ❖ Les phénomènes d'interactions présent en considération.
- ❖ Les modèles mathématiques des différents facteurs, caractérisant le transport électronique (interactions, énergie, etc.).
- ❖ Le nombre d'électrons simulés : simulation d'un ensemble Monte Carlo ou une seul particule à la fois.
- ❖ Le temps global de simulation.
- ❖ La technique de sélection des interactions.

L'organigramme de la figure 4.4 donne les étapes de la résolution de l'équation de Boltzmann par la méthode de Monte Carlo.

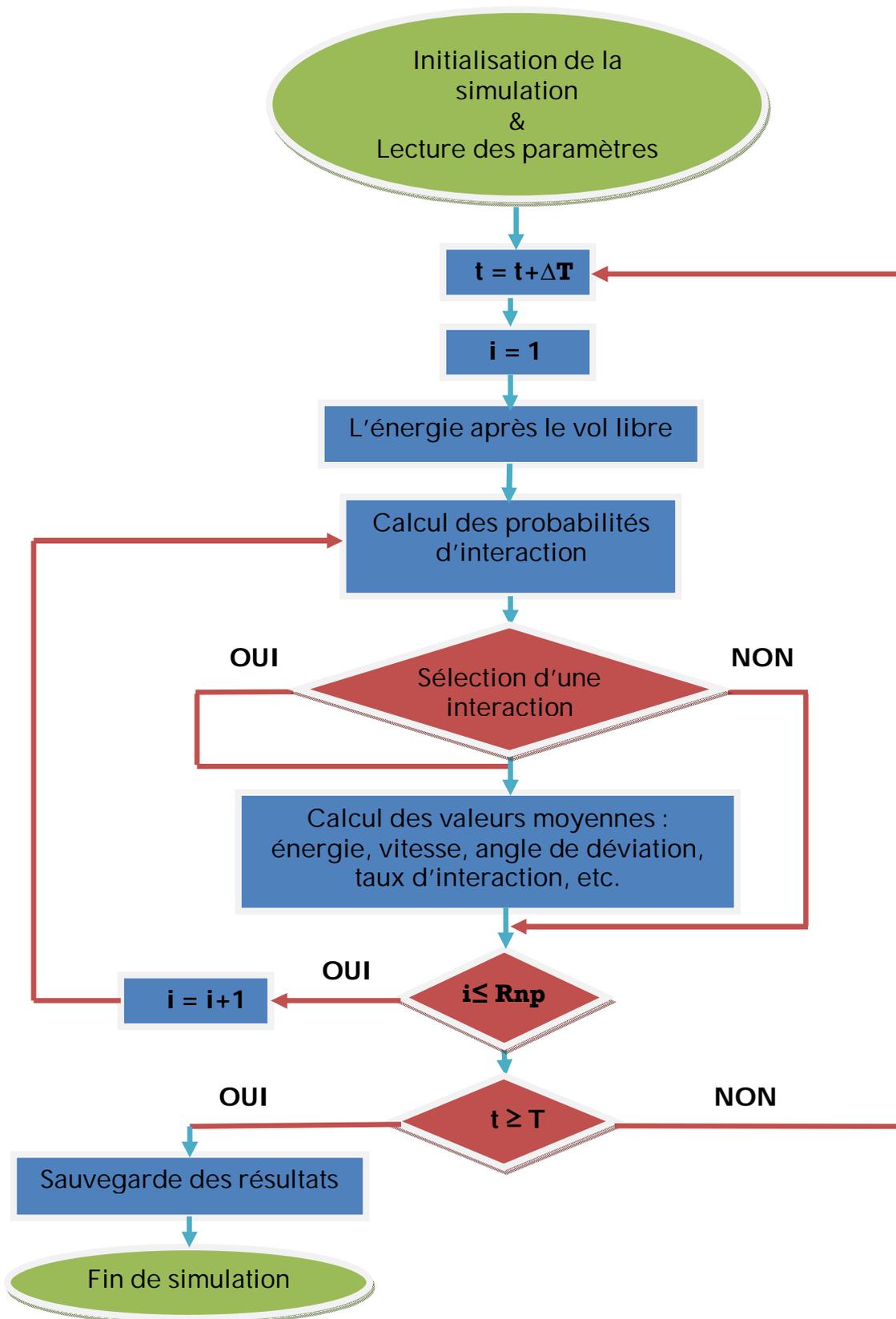


Fig. 4.4 Organigramme d'implémentation de la méthode de Monte Carlo pour la simulation du transport de charges dans les semiconducteurs.

Selon l'organigramme de la figure 4.4, le suivi des trajectoires des électrons ainsi que l'extraction des caractéristiques de transport s'effectuent comme suit:

1. Génération des particules simulées par un procédé de génération de nombres aléatoires. Dans notre travail « **20000** » particules sont considérées.
2. Initialisation de la structure de bande et lecture des paramètres physiques du matériau étudié.
3. Application d'un champ électrique et création d'un vol libre de durée ' ΔT ' (mouvement sans interactions). Cette durée reste faible en comparaison avec le temps moyen séparant deux interactions consécutives (voir section 3.1).
4. Sélection, par tirage au sort, d'une interaction à la fin de chaque vol libre.
5. Si une interaction est sélectionnée, elle sera placée à « $t+\Delta T$ » pour calculer sa probabilité. Sinon le procédé du vol libre et le tirage au sort d'une interaction seront répétés.
6. Après chaque interaction le vecteur d'onde change de direction. Donc une mise à jour du moment et de l'énergie des particules est demandée à la fin de chaque interaction.
7. Quand le temps de simulation « T » est achevé, le programme sauvegarde les résultats : occupation de la bande de conduction, la distribution d'énergie, la vitesse de dérive, etc.

On note que les taux de transition des particules peuvent être utilisés pour le calcul de certaines constantes décrivant le temps moyen nécessaire à un ensemble de particules de se disperser d'un état énergétique K à un état K' . Ces constantes sont de trois types :

- ❖ La durée de vie moyenne : c'est le temps moyen met par l'ensemble des particules dispersées une seule fois.
- ❖ Le taux de relaxation des moments d'énergie.
- ❖ Le taux de relaxation d'énergie.

3.1. Création du vol libre

Toutes simulations Monte Carlo du transport de charges nécessitent la génération des séquences de vol libre. Ces séquences correspondent à des densités de probabilité inconnues [Yor86]. On appelle temps du vol libre d'une particule, au sein d'un réseau cristallin, le temps séparant deux interactions consécutives. C'est un mouvement sans dispersion. Les interactions que peuvent subir les particules chargés sont considérées **Markoviennes**. Elles sont dues aux : collisions électrons-phonons, électrons-impuretés et électrons-électrons. Chaque vol libre a une durée générée aléatoirement pour chaque particule. Quand une particule subira une interaction donnée, on procède à l'identification de sa nature (élastique ou inélastique) tout en calculant sa probabilité.

Supposons que $P(k(t))dt$ est la probabilité qu'une interaction se produit durant la durée dt . Dans un intervalle de temps $[0, t]$, en absence d'interactions, cette probabilité s'écrit :

$$W(t) = \exp \left[- \int_0^t P(k(t_i)) dt_i \right] \quad (4.2)$$

Le temps « t » représente la durée du vol libre.

Pour créer un vol libre d'une manière stochastique, nous faisons un tirage au sort d'un nombre « r » à partir d'une distribution uniforme, entre **0** et **1**, de nombres aléatoires. Par la suite nous essayons de résoudre l'équation :

$$W(t) = r \quad (4.3)$$

En introduisant le logarithme dans l'équation (4.3) on obtient, dans l'intervalle $[0, \Delta t]$, l'équation (4.4) telle que :

$$-\ln(r) = \int_0^{\Delta t} P(k(t_i)) dt_i \quad (4.4)$$

Pour une implémentation efficace de la méthode de Monte Carlo, certaines techniques ont été introduites pour la résolution de l'équation (4.4) telles que:

- ❖ La Technique de Self Scattering.
- ❖ La Technique du Constante Temps.

Cependant, l'utilisation des deux méthodes ci-dessus introduit certaines erreurs au niveau des pas temporelles comme [Mus08] :

- ❖ L'erreur de fractionnement ou "**Splitting error**" [Ste09] qui est souvent due au champ électrique mal appliqué, et qui est évalué à la fin de chaque pas de temps.

- ❖ L'erreur due aux fausses trajectoires des particules : cette erreur peut être optimisée par un solveur spécifique comme l'**ODE**.
- ❖ L'erreur due à la fausse évolution du taux d'interaction surtout dans la technique de la constante du temps.

Dans ce travail, pour tenir compte des effets des interactions, nous sommes servis de la technique de Self-Scattering pour la résolution de l'équation (4.4).

3.2. La Technique Self Scattering

Puisque l'équation (4.4) n'est pas intégrable analytiquement, et dans le but de simplifier la résolution, **Rees** [Ree68] a suggéré d'introduire un processus d'interaction fictif P_{ss} appelée « Self-Scattering » (voir figure 4.5). Cette dernière est sans effet sur les trajectoires des particules chargées. Donc les particules gardent leurs paramètres (énergie + vecteur d'onde) inchangés après l'interaction. Aussi, la technique Self-Scattering n'altère pas la distribution statistique des interactions réelles mais la probabilité globale change. L'avantage majeur de cette technique est qu'elle est simple à implémenter. Dans l'autre côté, elle reste consommatrice du point de vue ressources de calcul. Pour cela, certaines améliorations ont été proposées par **Yorston** [Yor86] afin de réduire le nombre des interactions Self-Scattering et donc améliorer le temps de calcul.

Ainsi, pour une bonne mise en œuvre de la technique Self-Scattering et une minimisation des erreurs systématiques, certaines méthodes comme celles de **Gamma individuelle** [Mus08] (**Individual-Gamma scheme**) et la méthode de la **constante Gamma** [Ree68] (**Constant-Gamma scheme**) sont exploitées. En appliquant cette dernière, la Self Scattering sera implémentée de la façon suivante :

Soit Γ un nombre supérieur au plus grand taux de probabilité possible. L'interaction Self Scattering P_{SS} sera choisie de telle sorte que la probabilité totale est :

$$\Gamma = P_{SS} + \sum_i P_i = cste \quad (4.5)$$

La probabilité $P(\Delta T)$ s'écrit alors :

$$P(\Delta T) = \Gamma e^{-\Gamma \Delta T} \quad (4.6)$$

En appliquant l'équation (4.4) dans (4.5) on obtient :

$$\Delta T = -\frac{1}{\Gamma} \cdot \text{Lnr} \quad (4.7)$$

Pour utiliser l'équation (4.6) il faut que Γ soit fixé au préalable. Ceci revient à connaître (de priori) la valeur maximale qu'elle prendra la somme des taux d'interactions. Une fois ΔT est choisit, nous serons capable de calculer cette somme et déterminer les interactions susceptibles de se produire à l'instant considéré.

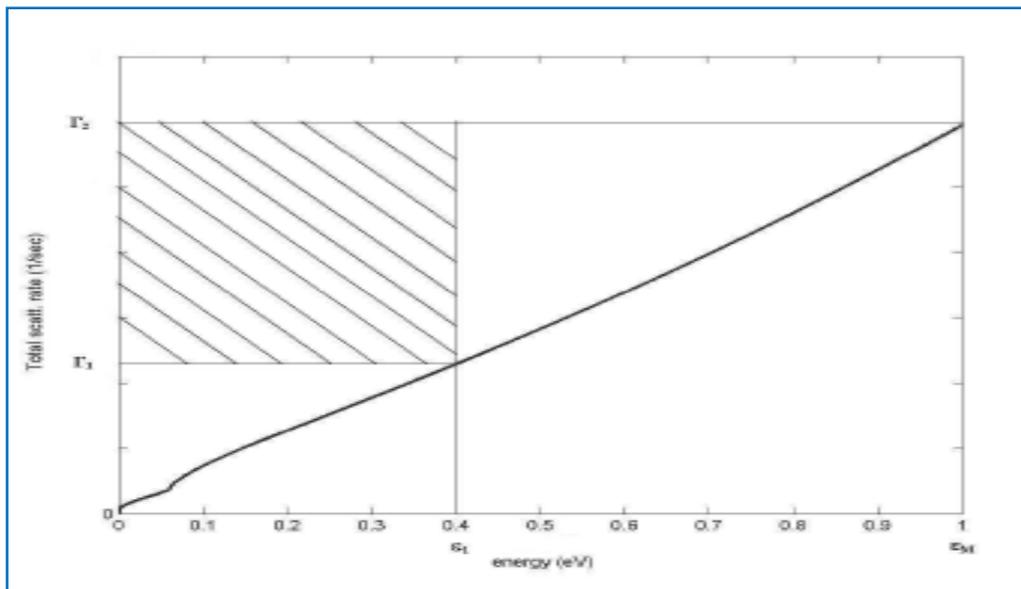


Fig.4.5 Représentation du Self Scattering

3.3. Sélection des interactions et calcul de l'angle de déviation

La sélection des interactions est réalisée par un tirage au sort. L'ensemble des interactions, présent en considération durant la simulation, sont normés par rapport à la probabilité totale " Γ ". Donc chaque interaction " i " est représentée par un intervalle d'amplitude " P ". L'ensemble des amplitudes est rangée dans un ordre bien défini entre $[0, 1]$ (voir figure 4.6). Ainsi, le type d'interaction (vrai P_i ou Self Scattering P_{ss}) sera sélectionné à chaque fin de vol libre. Si l'interaction Self Scattering est sélectionnée la particule garde son énergie et son vecteur d'onde inchangés.

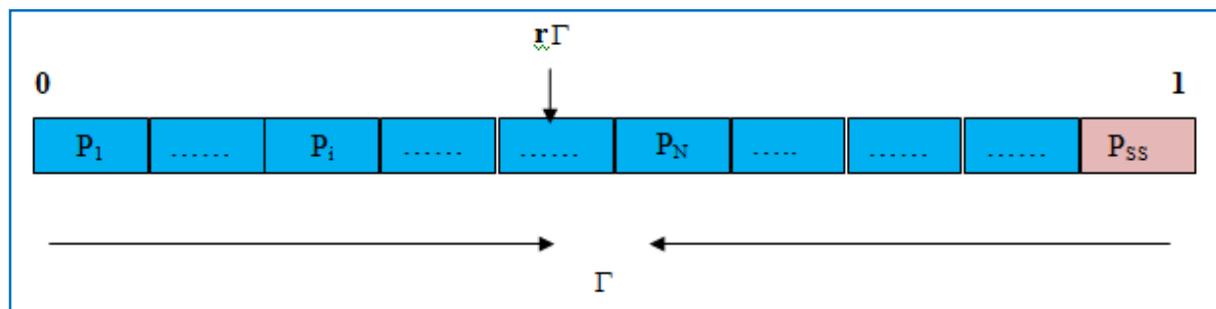


Fig.4.6 Procédure de sélection d'une interaction

La sélection d'une interaction se fait de telle sorte que :

$$\Gamma = \Gamma_{ss}(n, k) + \Gamma_1(n, k) + \Gamma_2(n, k) + \dots + \Gamma_N(n, k) \quad (4.8)$$

Le nombre « n » représente l'indice de bande (ou de vallée) de la particule et k son vecteur d'onde à la fin de chaque vol libre. Au cours de la simulation, pour certain nombre de valeurs d'énergie « ε » allant de 0 à ε_{\max} (énergie maximale considérée), les valeurs des taux d'interactions réels sont stockées dans une table dite de tabulation (look-up table). Quand une particule subira une interaction, supposée instantanée, entre un état K et un état K', le vecteur d'onde changera de direction (voir figure 4.7). Ce changement de direction est repéré par des angles θ et φ (coordonnées cartésiennes), dites de déviation. Le choix de ces angles est fondé sur un tirage au sort de deux nombres réels aléatoires « r_1 » et « r_2 ». Ce tirage se fait suivant des distributions dépendants de l'interaction sélectionnée, tels que :

$$\begin{cases} \varphi = 2\pi.r_1 \\ \cos(\theta) = 1 - 2r_2 \end{cases} \quad (4.8)$$

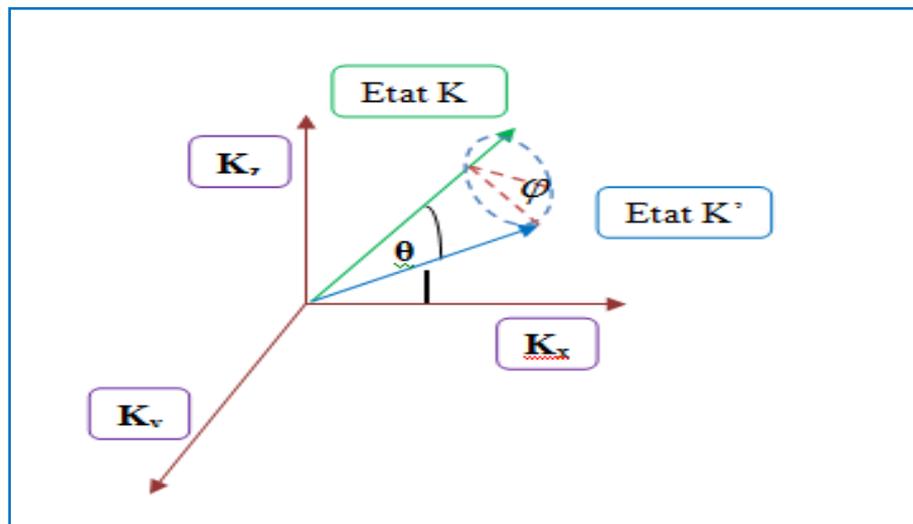


Fig. 4.7 Représentation des angles de déviation du vecteur d'onde après interaction.

3.4. Formulation des interactions

Suivant leurs effets sur les électrons, les interactions se divisent en deux types : élastiques et inélastiques. Au cours de la simulation les interactions prises en compte sont : les interactions avec les phonons acoustiques et les phonons optiques polaires, les interactions inter-vallées et intra-vallées, les interactions avec les impuretés ionisés (coulombiennes) et ainsi que les interactions piézoélectriques. L'évaluation des taux d'interactions nécessite l'utilisation de d'une théorie largement exploitée en mécanique quantique à savoir la théorie de **Fermi-Golden**. Le choix de cette dernière tire profit de sa simplicité d'implémentation et son efficacité de prendre en considération la dépendance en temps des probabilités d'interactions. La formule de **Fermi-Golden** est [Man05]:

$$w_{v-c} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle k'_c | H' | k_v \rangle|^2 \delta(E_{k'_c} - E_{k_v} - \hbar\omega) \quad (4.9)$$

Avec k'_c et k_v représentent les états de **Bloch** dans la bande de conduction et la bande valence respectivement. La fonction « δ » est introduite pour désigner la conservation d'énergie. L'implémenter cette théorie et la détermination de la matrice élémentaire des transitions, implique l'identification du potentiel d'interaction en exploitant la théorie de perturbation du premier ordre. Par la suite, les taux d'interactions peuvent être calculés suivant la formule (4.10) tel que [Man05]:

$$\tau^{-1} = N_t \sigma_t \vartheta_{th} \quad (4.10)$$

Avec :

- N_t représente la densité globale des centres d'interactions.
- σ_t : est la section globale des interactions.
- ϑ_{th} : est la vitesse thermique moyenne.

Les formules des différents taux d'interactions, inclus dans la simulation, sont données dans l'annexe.

4. Applications : Simulation du transport électronique dans les substrats semiconducteurs

Comme déjà cité au par avant, la simulation du transport électronique dans les matériaux semiconducteurs est un excellent atout pour l'extraction des caractéristiques électroniques des semiconducteur. Aussi, elle facilite beaucoup le choix d'un dispositif électronique pour application désirée (optoélectronique, de puissance, etc.).

Les résultats de simulations présentées ci-après sont obtenus) partir d'un modèle trois vallées (Γ , L , et X) sphériques et non-paraboliques de la structure de bande. Ce modèle été utilisé pour le suivi des trajectoires de 20000 électrons (super-particules) à la fois, sous l'effet d'un champ électrique variable ou constant et pour différentes valeurs de la température. Ce modèle prend en considération les différents paramètres cristallographiques, tels que les masses effectives ainsi que les potentiels de déformation dans chacune des vallées considérées, la densité, les coefficients de non parabolicité, etc. Aussi, les différentes interactions élastiques et inélastiques déjà citées sont incluses dans ce modèle. Les étapes de simulation sont celles citées dans la section 3. Dans ce qui suit nous présentons les caractéristiques de transport électronique dans le GaSb (comme exemple) et dans deux polytypes du carbure de silicium 3C-SiC et 4H-SiC.

4.1. Exemple de simulation du Transport électronique dans le GaSb : Régime stationnaire et non-stationnaire

Le GaSb est l'un des semi-conducteurs, à faible gap direct (0,7eV), finement élaboré et purifié [Bel12]. Les propriétés de transport électronique de ce matériau le rend un excellent promoteur pour une variété d'applications civil et militaires telles que les diodes laser à faible tension de seuil, les photo-détecteurs, les dispositifs travaillant en hautes fréquences, les cellules solaires, etc. Comme un premier essai, nous exposons dans ce qui suit les caractéristiques de transport électronique dans le GaSb extraites de notre modèle Monte Carlo.

Des études récentes du transport électronique dans la GaSb sont disponibles dans la littérature [Pod05], [Zhe02], [Mes02], [Bel12]. Dans cette partie, les résultats de simulation en régime stationnaire et non-stationnaire pour différentes valeurs de températures et de champ électrique seront discutés.

4.1.1. Vitesse de dérive : Régime stationnaire

La détermination de la caractéristique de la vitesse de dérive est importante et indispensable dans toutes études du transport de charges dans les semiconducteurs. La figure 4.8 donne l'évolution de la vitesse de dérive des électrons à **300°K** dans le cas du GaSb. Nous avons relevé un pic de vitesse de **$2.5 \cdot 10^7$ cm /s** enregistré au faible champ électrique. Ce résultat est en bon accord avec celle obtenu par **Arabshahi** [Ara11]. La cause de ce pic est que les électrons sont plus légers (une masse effective égale à $0.039m_0$) dans la vallée centrale Γ . Ceci rend les électrons faiblement attachés au réseau cristallin, donc libres pour se déplacer dans la même vallée ou vers les autres vallées. Sous l'effet du champ électrique, les électrons seront plus accélérés et atteindront un pic de vitesse autour de **1KV/cm**. Cette vitesse permet aux électrons d'acquérir des énergies plus grandes en comparaison avec celles des phonons. Par la suite, des transitions de la vallée centrale vers les vallées supérieures (L et X) seront favorisées.

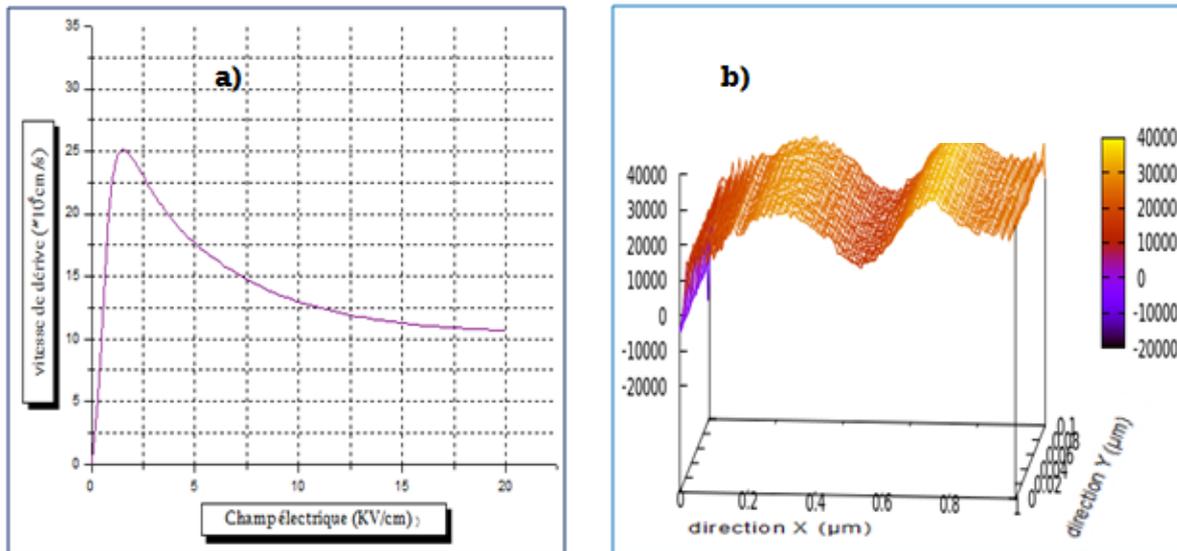


Fig.4.8 Vitesse de dérive des électrons dans le GaSb :
 a) Ensemble Monte Carlo [Bel12]
 b) Simulateur Monte Carlo 2D (en fonction de la distance)

Quand le champ électrique dépasse un certain seuil du champ électrique (>1KV/cm) la vitesse tendre à se décroître pour atteindre une valeur stationnaire environs $1.1 \cdot 10^7 \text{cm/s}$. La cause directe de cette décroissance est les électrons qui seront plus lourds dans les vallées L et X. Les interactions dominantes dans ce cas sont les interactions intra et inter-vallées. Ces derniers induisent un inversement de population dans les trois vallées. La variation, en fonction du temps, des coefficients de repopulation des électrons dans les vallées gamma, L et X est exposée dans la figure 4.9. Les courbes ont été relevées pour un champ électrique de 400 KV/cm. Ces courbes montrent que l'inclusion des vallées satellite (L et X) dans la simulation est très importante.

Lorsque le champ électrique dépasse la valeur de seuil, les interactions inter-vallée deviennent importantes dans les vallées satellites L et X. Une explication à cette augmentation du taux de ces interactions est que les électrons, liés aux minimums des vallées, ont des petites énergies cinétiques et donc fortement dispersés. De plus, la combinaison des effets de la faible masse effectif dans la vallée gamma, la faible énergie de séparation ($\Delta_{\Gamma-L}$ et $\Delta_{\Gamma-X}$) ainsi que les faibles taux d'interactions optiques polaires et acoustiques dans la vallée centrale, rend les interactions inter-vallées les plus dominantes dans le GaSb.

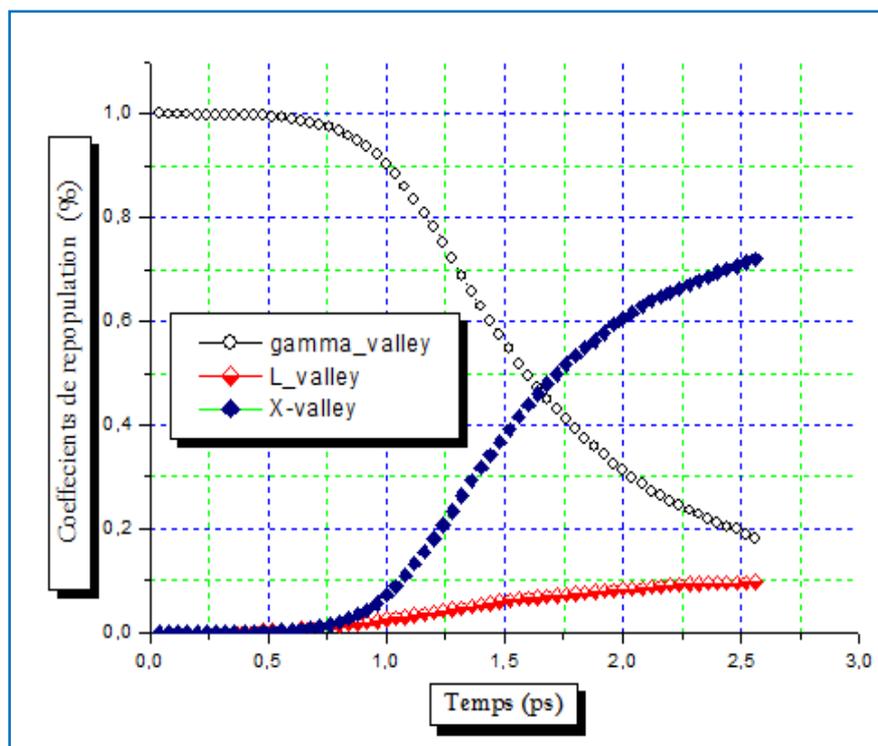


Fig.4.9 Evolution des coefficients de repopulation, en fonction du temps, dans les trois vallées Gamma, L et X [Bel12]

4.1.2. Distribution de l'énergie et du potentiel électrostatique

Les figures ci-dessous montrent la distribution à deux dimensions (en fonction de la distance) de l'énergie (figure 4.10.a) et du potentiel électrostatique (figure 4.10.b) dans le GaSb. Les résultats obtenus montrent que, sous l'effet du champ électrique, les électrons acquièrent une énergie maximale dans un temps très court.

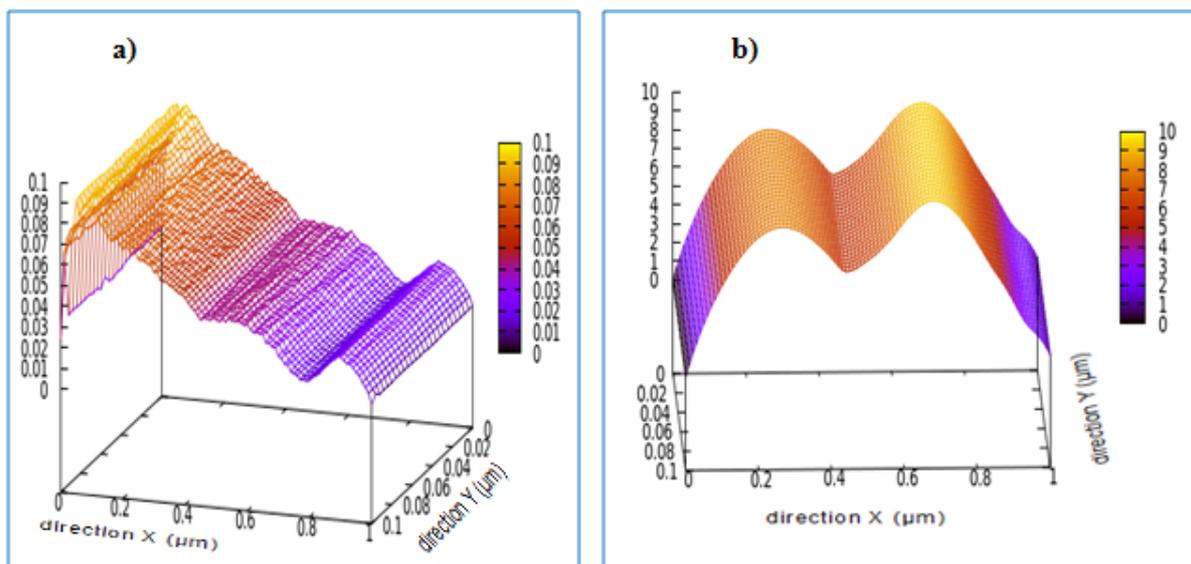


Fig.4.10 Illustration 2D de : **a)** L'énergie, **b)** Le potentiel électrostatique dans le substrat GaSb de type N.

4.1.3. Transport en régime non-stationnaire

Quand les électrons sont soumis à un champ électrique, largement variable dans le temps (régime non-stationnaire), un phénomène de survitesse apparaîtra. Ce phénomène a été largement étudié par de nombreux auteurs, qui n'ont pas manqué de souligner l'intérêt pratique de ce phénomène, particulièrement au niveau des composants submicroniques.

La figure 4.11 donne un aperçu sur ce phénomène. Les caractéristiques sont obtenues, à la température ambiante, pour un champ électrique allant de **50 à 600 KV/cm**. Nous avons constaté un pic de vitesse maximal de **9.5×10^7 cm/s**. Ce pic a été enregistré pour un champ électrique de **600 KV/cm** et une concentration de **8×10^{17} atomes /cm³**. Pour les différentes valeurs du champ électrique, les pics de vitesse ont été enregistrés dans un intervalle de temps court de **[0,5ps - 4ps]**. Ce temps explique l'utilité de ce matériau pour les applications de hautes fréquences. Aussi, de plus en plus que l'énergie de relaxation devient effective, la vitesse des électrons tendre à se décroître rapidement.

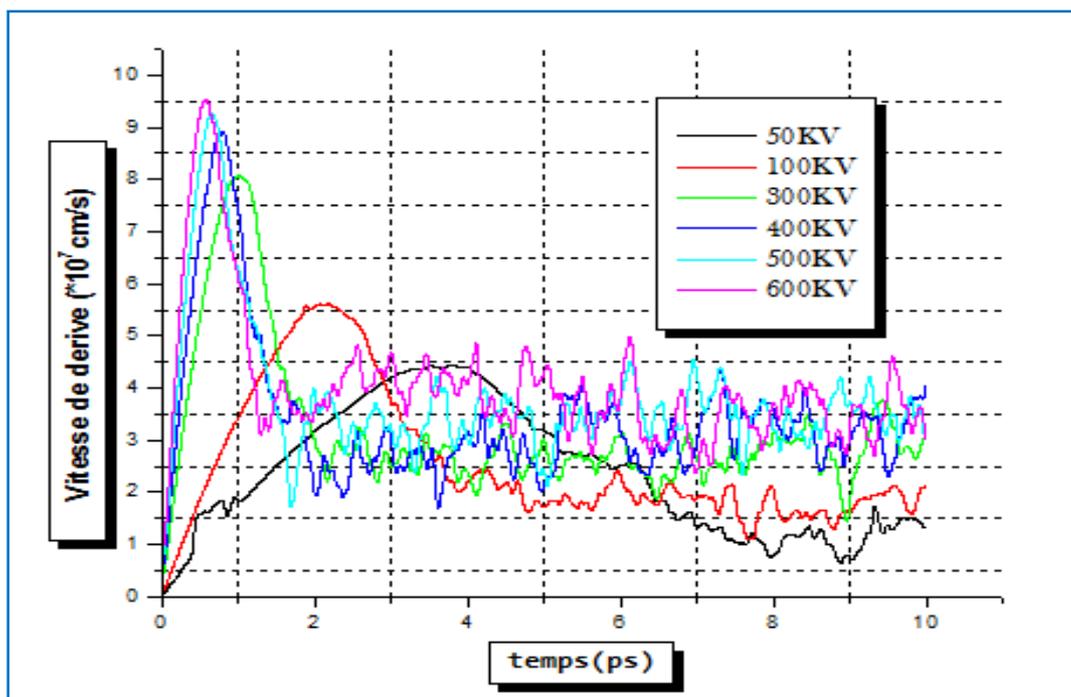


Fig.4.11 Vitesse de dérive des électrons dans le GaSb pour différentes valeurs du champ électrique [Bel12]

4.2. Transport électronique dans le Carbure de silicium

Le carbure de silicium est un composé thermiquement stable, c'est-à-dire que les dopants ne peuvent pas se diffuser sous l'effet de toute température raisonnable [Tir04]. Ainsi, afin d'améliorer les performances des dispositifs en carbure de silicium; la modélisation correcte des phénomènes physiques dans ce matériau est toujours exigée, notamment lorsqu'il s'agit d'étudier le transport électronique sous forts champs électriques et hautes températures. L'étude de transport sous de telles conditions a beaucoup tiré d'attention par les nombreux travaux théoriques et expérimentaux disponibles. Tous ces travaux montraient la potentialité des dispositifs en carbure de silicium d'opérer dans les environnements hostiles [Tir04], [Be99]. En se basant sur les résultats disponibles (dans un cadre comparatif), nous avons implémenté un modèle Ensemble Monte Carlo (EMC) à trois vallées de la bande de conduction, pour extraire les caractéristiques de transport électronique dans deux polytypes différents du carbure de silicium : cubique (**3C-SiC**) et hexagonale (**4H-SiC**). L'étude a été menée sous différentes conditions de température et de champ électrique.

4.2.1. Fonction de distribution des électrons

Au début de la simulation, et en absence du champ électrique, les électrons sont aléatoirement distribués suivant les trois directions du vecteur d'onde **K_x**, **K_y** et **K_z** (voir figure 4.12.a). En appliquant un champ électrique, les électrons seront plus accélérés et fortement distribués suivant la direction du champ électrique (**K_z**) (voir figure 4.12.b).

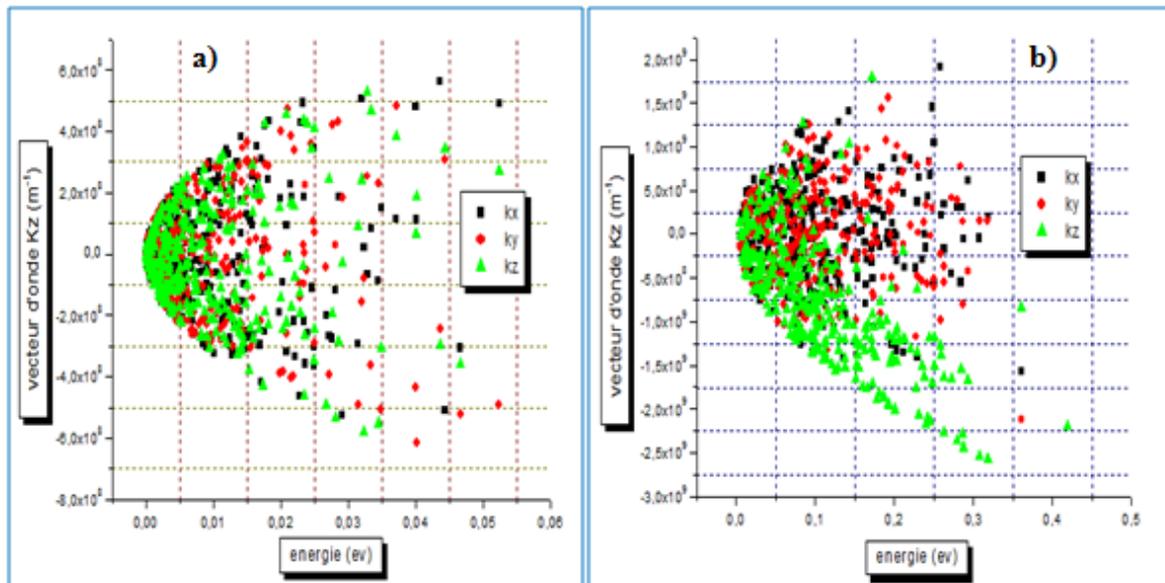


Fig.4.12 Distribution des électrons :
 a) Initiale : en absence du champ électrique.
 b) Après l'application du champ électrique.

4.2.2. Distribution de l'énergie moyenne

Le champ électrique a pour effet d'accélérer les électrons, donc les fournir une énergie suffisante (vitesse) pour se déplacer d'une vallée à une autre ou dans la même vallée parmi les trois vallées considérées. L'augmentation de vitesse a pour effet d'opposer le mouvement des électrons et favorisant par la suite les mécanismes d'interactions. Ces interactions vont appliquer une force opposée freinant le mouvement des électrons et réduisant leurs énergies. La figure 4.13 montre l'évolution de l'énergie des électrons en fonction du temps pour les deux polytypes 3C-SiC et 4H-SiC. La simulation est effectuée sous une température de **77°K**, un champ électrique de **200 KV/cm** et une concentration des dopants de **8×10^{19} atomes/cm³**.

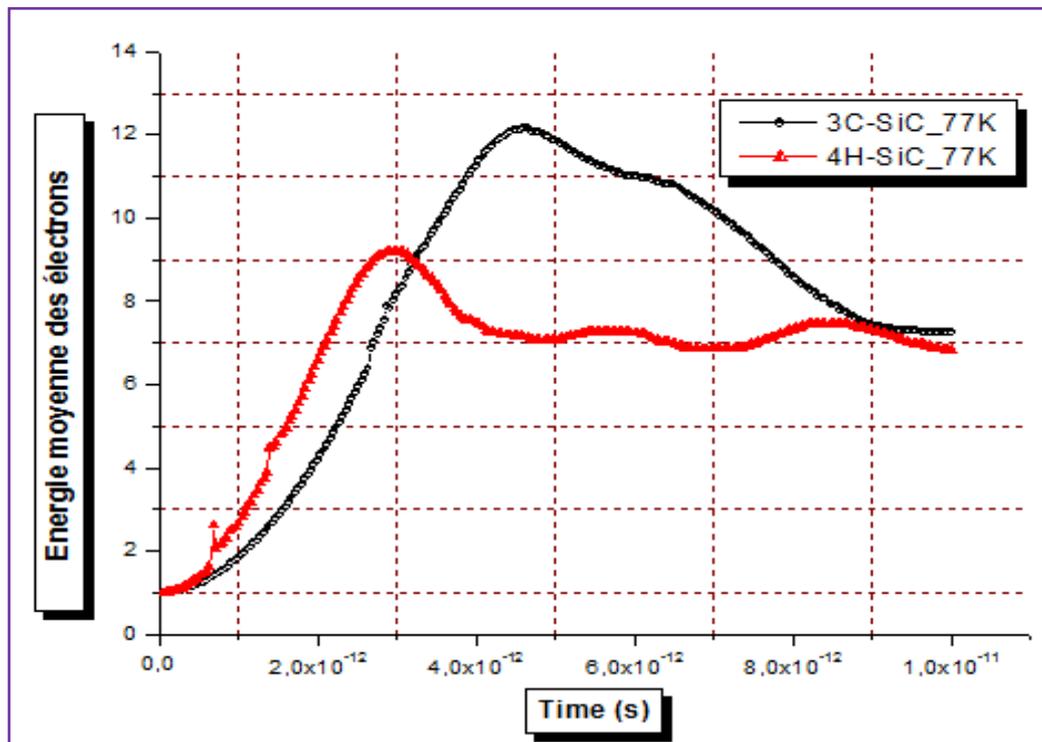


Fig. 4.13 Evolution de l'énergie moyenne des électrons dans le 3C-SiC et le 4H-SiC.

Selon la figure 4.13, par rapport au 3C-SiC, les électrons dans le 4H-SiC sont plus accélérés et leurs énergie atteint rapidement le régime stationnaire. Ce régime se produira suite à l'égalité des forces dues aux interactions et celle engendrée par le champ électrique. Ce dernier est enregistré dans un temps **~04 picosecondes** pour le 4H-SiC tandis qu'il est atteint à **~09 picosecondes** dans le cas du 3C-SiC. De même, l'apparition d'un pic d'énergie, pour les deux polytypes, signifie que le pic de vitesse de dérive est atteint.

De plus, les transitions inter-vallées (à partir de la vallée centrale où les électrons sont plus légers vers les vallées satellites X, L où les électrons sont plus lourds) sont directement responsables du pic de vitesse et partiellement responsables de l'augmentation de l'énergie moyenne (voir figure 4.14). Ces transitions peuvent se produire soit par effet des interactions soit par effet tunnel quand les électrons seront fortement accélérés. Ainsi, la prise en compte des transitions inter-vallées (durant la phase de dérive) reste primordiale pour une analyse correcte du comportement des électrons.

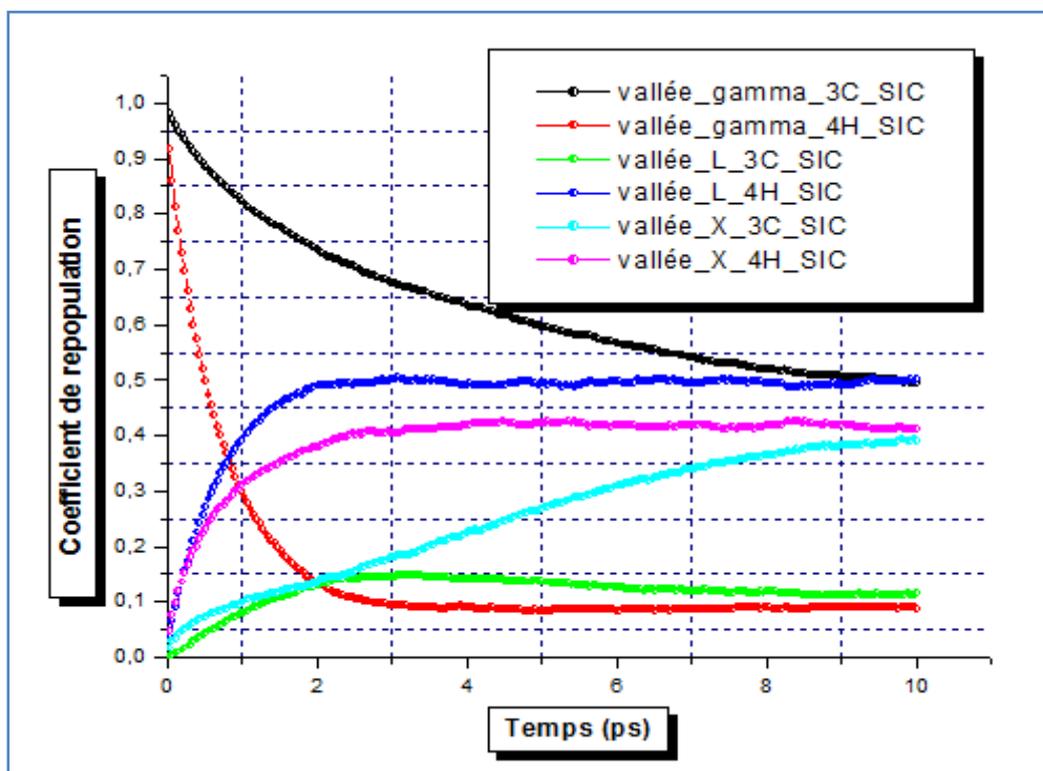


Fig.4.14 Coefficients de repopulation, dans les vallées Gamma, L, et X, pour un champ électrique de **200KV** et une concentration des dopants de **$8 \cdot 10^{19}$ at/cm³**.

4.2.3. Vitesse de dérive

Les caractéristiques de la vitesse de dérive pour les deux polytypes 3C-SiC et 4H-SiC sont données dans la figure 4.15. Ces résultats se coincident avec ceux obtenus par [Web05]. Ces résultats ont été relevés pour : un champ électrique allant de **50KV à 1MV**, une température de réseau de **300°K** et un dopage de **8×10^{19} atomes/cm³**. Un pic de vitesse de **2.5×10^7 cm/s** a été enregistré pour le 3C-SiC. Ce pic est obtenu à un champ critique environ le **400KV/cm**. Dans le cas du 4H-SiC, ce pic été de l'ordre de **2.1×10^7 cm/s**, obtenu à un champ critique de **600 KV/cm**. Aussi, pour les deux polytypes et de plus en plus que le champ électrique augmente, la vitesse de dérive tendre à se décroître jusqu'à une valeur dite de saturation. Les valeurs des champs critiques enregistrés, montrent l'avantage du SiC d'être un candidat promoteur pour les applications de forte puissance.

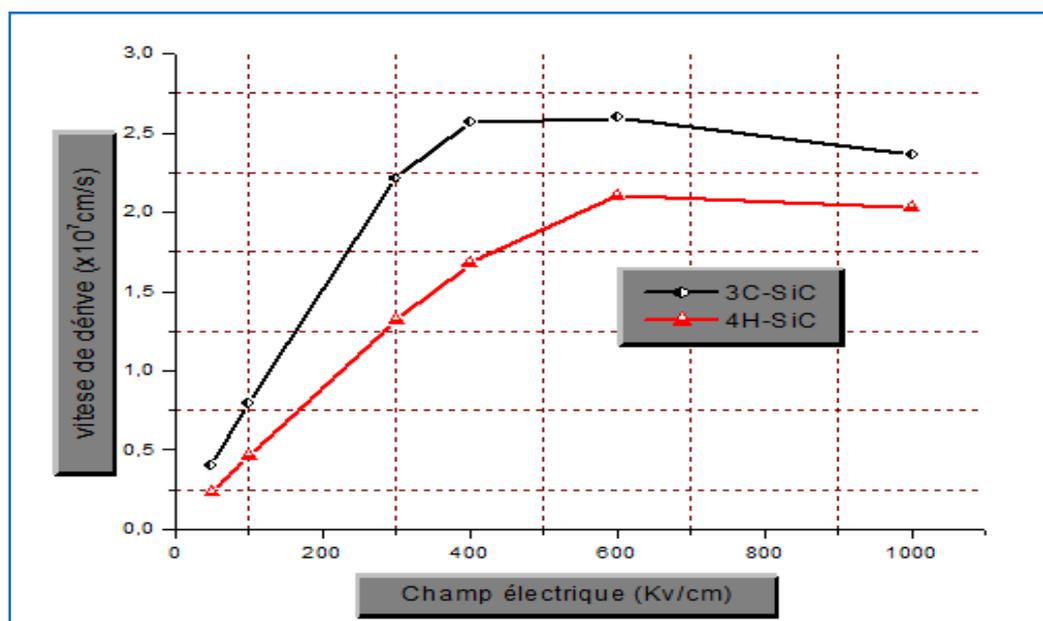


Fig.4.15 Vitesse de dérive des électrons dans le 3C-SiC et le 4H-SiC.

4.2.4. Transport électronique transitoire sous forts champs électriques

Le transport électronique dans le régime transitoire, a tiré plus d'attention reflétée par les nombreuses études et simulations effectuées dans les trois dernières décades. Cette attention avait pour but de modéliser le comportement des dispositifs submicroniques pour des éventuelles applications [Lur85], [Reg85]. Ainsi, l'étude de transport sous forts champs électriques nécessite une modélisation approfondie basée sur des modèles mathématiques adéquats. **G. Y. Hu et R. F. O'Connell** [Hu88] ont développé un modèle quantique non-linéaire pour l'étude de transport transitoire sous forts champs électriques. Ce modèle, considéré dans notre EMC, montre que l'effet du champ électrique n'altère pas seulement le temps de transport mais aussi la masse des électrons. Dans la figure 4.16 nous présentons les caractéristiques de vitesse en régime transitoire pour les deux polytypes 3C-SiC et 4H-SiC. Afin d'évaluer l'effet du fort champ électrique, les simulations sont effectuées pour des champs allant de **50KV/cm** jusqu'à **6MV/cm**, à la température ambiante. Suite aux résultats obtenus, nous avons constaté des pics de vitesse plus accentués vers les champs élevés. Pour un champ de **6MV** un pic de vitesse de l'ordre de **$3.9 \times 10^7 \text{cm/s}$** a été enregistré pour les deux polytypes. Ce pic apparaîtra dans un temps très court moins de '**0.2** pico-second' tandis que le régime stationnaire se produira aussi rapidement un temps moins de '**01** pico-second'. Aussi, pour des champs moins de **6 MV/cm** le pic de vitesse reste plus important dans le 3C-SiC que dans le 4H-SiC.

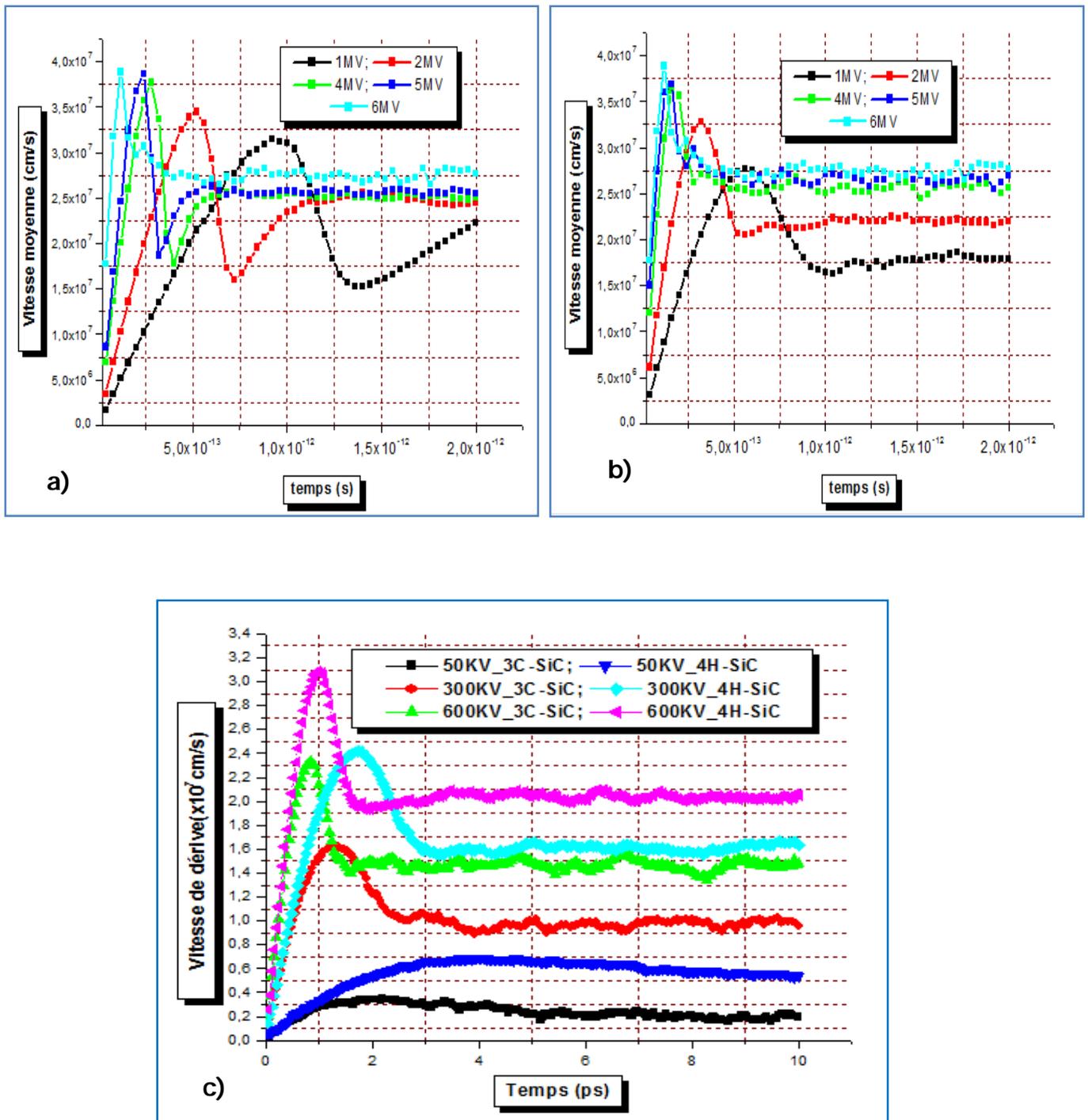


Fig.4.16 Vitesse moyenne des électrons sous l'effet des forts champs électriques
 a. Dans le 3C-SiC
 b. Dans le 4H-SiC
 c. Comparaison entre les deux polytypes

En outre, pour les forts champs électriques, certaines quantités d'électrons sont littéralement propulsées vers les hautes énergies où ils vont acquérir une vitesse élevée. Donc il devient possible de les transférer vers les vallées supérieures [Bel15]. Par conséquent, en raison de la valeur de la probabilité de transfert limitant à chaque pas de temps le nombre d'électrons transférés, une fraction des électrons légers reste dans la vallée centrale. Ces électrons seront rapidement portés à des vitesses plus grandes.

4.2.5. Effet de la température sur les caractéristiques de transport

Dans un réseau cristallin, la température est une grandeur physique très influente sur le comportement des électrons. Elle peut causer une destruction notable de la cohérence quantique des électrons dans les semiconducteurs, en modifiant leurs fonctions de distribution [Man05]. Cette dernière s'élargie quand la température augmente. Aussi, l'augmentation de la température peut engendrer des vibrations importantes (par agitation thermique) du réseau cristallin. Ces vibrations vont favoriser les interactions électrons-électrons et électrons-phonons, en réduisant leurs vitesses. Les courbes de la figure 4.17 donnent l'évolution des taux d'interactions acoustiques et optiques polaires, dans le 4H-SiC, en fonction de l'énergie du réseau et pour quelques valeurs de température. On note que l'effet de la température sur les taux d'interactions dans le cas du 3C-SiC est déjà étudié par **L. Tirino** [Tir04]. Ce dernier a montré que les interactions optiques polaires d'émissions restent les plus dominantes dans ce polytype.

Ainsi, puisque la formule mathématique du taux d'interaction acoustique est une fonction de la densité d'état (voir annexe), il va directement suivre sa forme. De même, comme pour le 4H-SiC, les figures 4.17.a et 4.17.b montrent que les interactions optiques polaires d'émission sont plus importantes que les interactions acoustiques et leur taux augmente avec l'augmentation de la température.

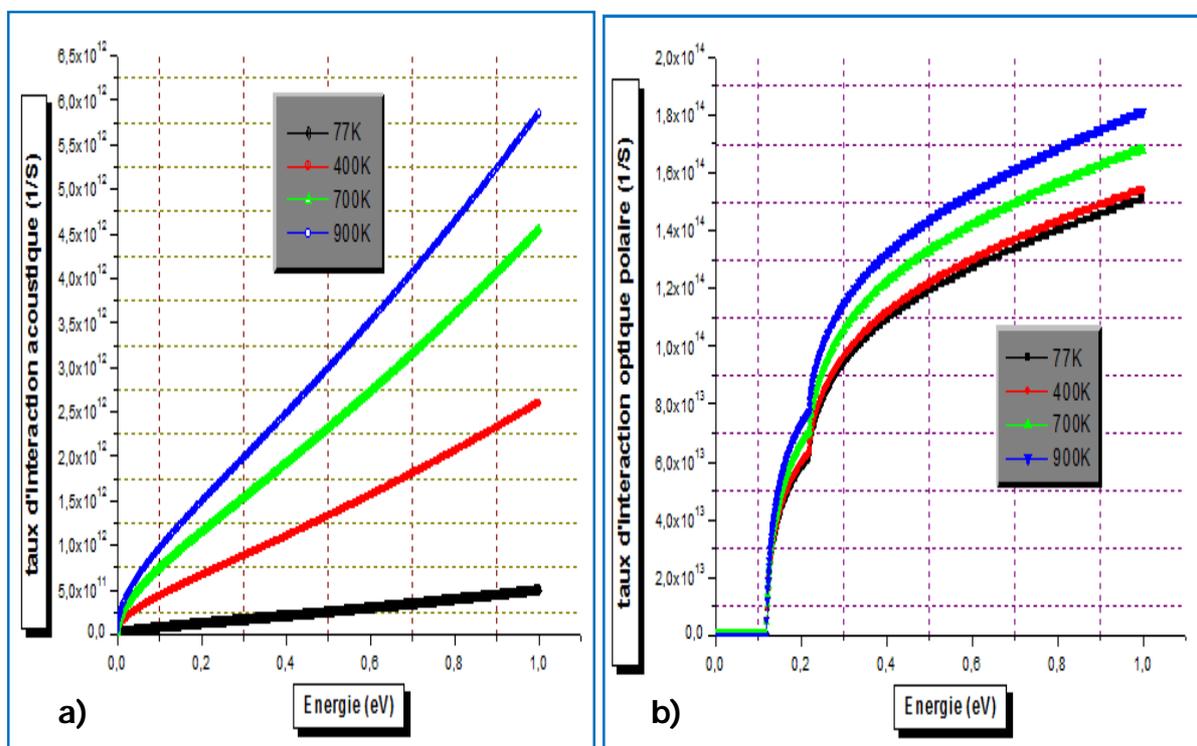


Fig.4.17 Effet de la température sur la moyenne des taux d'interactions dans les vallées Γ , L et X , pour le 4H-SiC:

- Acoustiques.
- Optiques polaires d'émission.

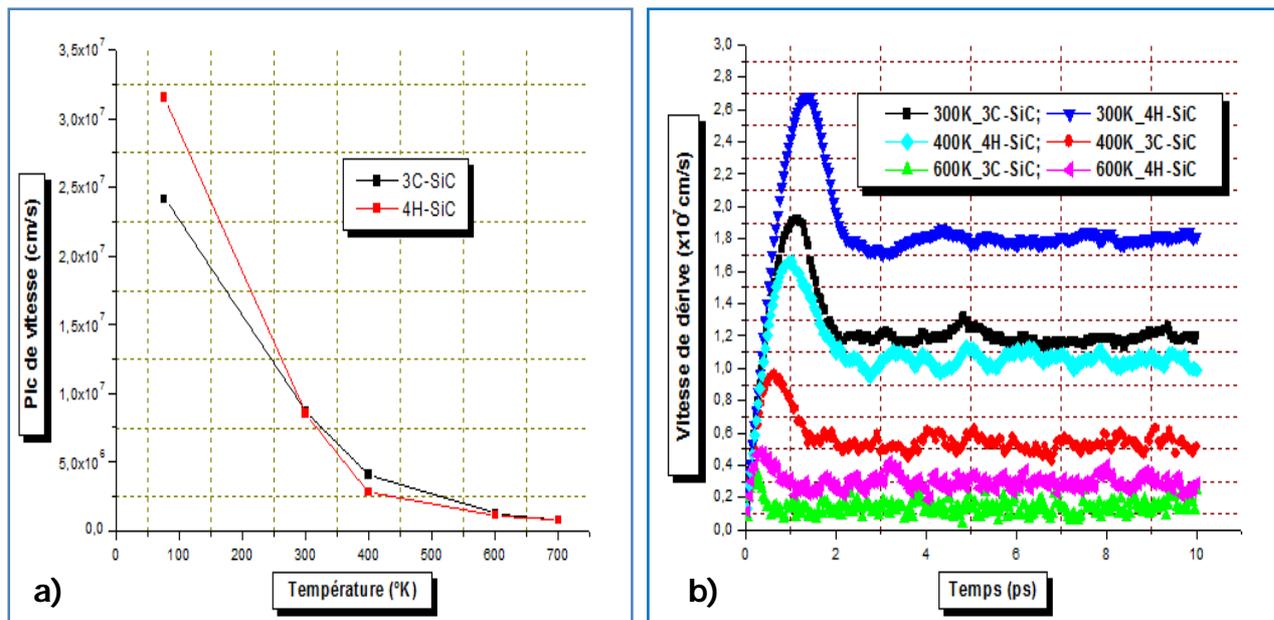


Fig.4.18 Effet de la température sur [Bel15]:

a) Le pic de la vitesse de dérive

b) La vitesse de dérive des électrons

L'effet de la température, sur la vitesse de dérive, est ainsi analysé pour les deux polytypes 3C-SiC et 4H-SiC. Les courbes exposées dans les figures 4.18.a et 4.18.b, sont obtenus sous l'effet d'un champ électrique de **200KV/cm** et une concentration des dopants de **8x10¹⁹ atomes/cm³**. De plus en plus que la température augmente, les courbes enregistrées montrent une décroissance remarquable au niveau du pic de vitesse. Cette décroissance, déjà expliquée par **Zhang et al. [Zha]** ainsi que **Bezzera et al. [Bez99]**, reste plus rapide dans le cas du 3C-SiC. Elle est fortement liée aux interactions acoustiques et optiques polaires qui deviennent importantes sous les fortes températures. Aussi, lorsque la température augmente, elle va induire plus de vibrations dans le réseau cristallin. Donc elles vont favoriser plus de transitions inter- et intra-vallées.

Références

- [Ara11] **H. Arabshahi**, "Three-valley model for the study of electron transport properties at very high electric field in bulk GaSb, Ga_{0.5}Sb_{0.5}As and GaAs materials", IJSAT. Vol.1, pp.19-23, (2011).
- [Be99] **E. F. Bezerra et al.**, "High-temperature effects on the velocity overshoot of hot electrons in 6H- and 3C-SiC", Semicond. Sci. Technol. Vol.14, pp.1007, (1999).
- [Bel00] **E. Bellotti , M. Farahmand , H.-E Nilsson, K. F. Brennan, P. P. Ruden**, "Monte Carlo based calculation of transport parameters for wide band gap device simulation", Mat. Res. Soc. Symp. Vol. 622, pp T6.24.1- T6.24.6, (2000).
- [Bel09] **Y. Belhadji**, "Simulation du transport électronique dans les composants microélectroniques : Application au carbure de silicium 3C-SiC", Magister, Université Abou bakr Belkaïd-Tlemcen, (2009).
- [Bel12] **Y. Belhadji et B. Bouazza**, "Steady state and transient study of the electron transport in N-type GaSb using three valley Monte Carlo model", IJCSI, Vol. 9, N° 1, pp. 160-164, (2012).
- [Bel15] **Y. Belhadji et B. Bouazza**, " Ensemble Monte Carlo analysis of subpicosecond transient electron transport in cubic and hexagonal silicon carbide for high power SiC-MESFET devices", IJMPB, Vol. 29, N° 16, pp. 1550107-1 - 1550107-8, (2015).
- [Bez99] **E. F. Bezerra, E. W. S. Caetano, V. N. Freire**, "High temperature behavior of subpicosecond electron transport transient in 3C-and 6H-SiC ", Brazilian Journal of Physics, Vol. 29, N°04, pp. 785-789, (1999).
- [Hu88] **G. Y. Hu, R. F. O'Connell**, "Quantum theory of transient transport in a high electric field", Physical review B, Vol.38, N° 3, pp.1721-1727, (1988).
- [Jac89] **C. Jacoboni et P. Lugli**, "The Monte Carlo method for semiconductor device simulation", Springer-Verlag, Wien, (1989).
- [Jac10] **C. Jacoboni**, "Theory of Electron Transport in Semiconductors", Springer-Verlag, (2010).
- [Kaw70] **W. Fawcett, A. D. Boardman, S. Swain**, "Monte Carlo determination of electron transport properties in Gallium Arsenide", Journal of Physics and Chemistry of Solids, Vol.31, pp. 1963-1990, (1970).

- [Kur66] **T. Kurosawa**, "Monte Carlo calculation of hot electron problems", Japan Physic Society, Suppl. 21, pp.424, (1966).
- [Lur85] **S. Luryi et A. Kastalsky**, "Hot-electron transport in heterostructure devices", Physica 134B, pp.453-462, (1985).
- [Man05] **O. Manasreh**, "Semiconductor heterojunctions and nanostructure", McGraw-Hill Companies, (2005).
- [Mes02] **L.G.O. Messias et E. Marega**, "Hole transport characteristics in pure and doped GaSb", Brazilian Journal of Physics, Vol.32, N°2a, pp.402-404, (2002).
- [Mus08] **O. Muscato, V. Di Stefano, W. Wagner**, "Numerical study of the systematic error in Monte Carlo schemes for semiconductors", Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (WIAS), N°1371, Berlin, (2008).
- [Pod05] **B. PÓDÖR**, "Hole scattering in GaSb: Scattering on space charge regions versus dipole scattering", Acta physica polonica A, Vol.108, No.5, pp. 837-844, (2005).
- [Ree68] **H. D. Rees**, "Calculation of steady state distribution functions by exploiting stability", Phys. Lett. A, Vol. 26, Is.9, pp. 416-417, (1968).
- [Reg85] **L. Reggiani**, "Hot electron transport in semiconductor", Physica 134B, pp. 453, (1985).
- [Ste09] **V. Di Stefano**, "Free-flight time generation in Direct Simulation Monte Carlo for carrier transport in Semiconductors", SiMAI Congress, Vol.3, pp. 223-234, (2009).
- [Tir04] **L. Tirino**, "Transport properties of wide bandgap semiconductors", Thèse, Georgia institute of technology, (2004).
- [Vas08] **M. Vashishath and A. K. Chatterjee**, "Theoretical analysis and design of double implanted MOSFET on 6H silicon carbide wafer for low power dissipation and large breakdown voltage" Maejo, Vol.2, pp.308-319, (2008).
- [Web05] **M. Weber**, "Analysis of zincblende-phase GaN, cubic-phase SiC, and GaAs MESFETs including a full-band Monte Carlo simulator", Thèse, GIT, (2005).

[Yor86] **R. M. Yorston**, "Free-flight time generation in the Monte Carlo simulation of carrier transport in semiconductors", Journal of Computational Physics, Vol.64, Is. 01, pp.177- 194, (1986).

[Zha] **Y. Zhang et Y. Zhang**, "High field and high temperature transport in N-type 3C-SiC", microelectronic institute, Xidian University, unpublished.

[Zhe02] **Y. Zheng, P.D. Moran, Z.F. Guan, S.S. Lau et al.**, Journal of Electronic Materials, Vol. 32, N° 2A, pp.402, (2002).

1. Introduction

L'amélioration des procédés technologiques de fabrication a conduit à une miniaturisation remarquable des échèles des dispositifs semiconducteurs. Ainsi, toute fabrication doit toujours passer par des simulations capables de reproduire quasi-fidèlement l'effet des phénomènes physiques définissant le comportement et les performances des dispositifs. Cependant, la compréhension du mécanisme de transport de charges, dans les dispositifs à semiconducteurs largement miniaturisés, reste l'un des défis de l'électronique moderne. Or, de plus en plus en partant vers des échèles submicroniques, certaines phénomènes quantiques, liées à la nature ondulatoire des porteurs de charges, sont à les considéré. Donc, on aura recours à des modèles mathématiques plus avancés, assurant une description physique approfondie et satisfaisante de la dynamique électronique. L'une des théories utilisées, pour décrire ces effets quantiques, est celle du potentiel effectif [Hei06]. Dans le cas du MESFET, et pour faciliter l'implémentation de ces théories, l'utilisation des méthodes numériques est majoritairement recommandée. Pour la simulation du MESFET par exemple, les méthodes adoptées peuvent se devisées en deux groupes [Ber04]:

- ❖ Les méthodes basées sur le suivi et le calcul de la concentration des particules : Elles sont classées selon les approximations utilisées comme les modèles hydrodynamiques ou de dérive-diffusion.

- ❖ Les méthodes basées sur le suivi et le calcul des trajectoires de particules chargées : Dans ce cas différents niveaux d'approximations sont introduites pour faire face à la complexité du problème.

Aujourd'hui, les modèles les plus avancés sont souvent basés sur la méthode de Monte Carlo. Un exemple de simulation Monte Carlo d'un MESFET vertical en carbure de silicium est donné dans la figure 5.1. Le SiC-MESFET présente un type offrant des meilleures performances (Radiofréquence, hautes températures et hautes puissances) en comparaison avec d'autres MESFET à base d'autres semiconducteurs [Ali97]. Aussi, la structure latérale, communément appelée MESFET, est une structure largement explorée par de nombreuses équipes de recherche [Ali97] (voir figure 5.2). Une autre structure, aussi répondue, est le MESFET vertical [Ber04]. Dans ce chapitre, des simulations Monte Carlo d'un SiC-MESFET submicronique latéral seront présentées. De même, les démarches d'implémentation de la méthode de cette méthode pour la résolution des équations de transport de **Poisson** et de **Boltzmann** couplées, ainsi que les différents résultats de simulation du transport électronique dans le SiC-MESFET seront discutées.

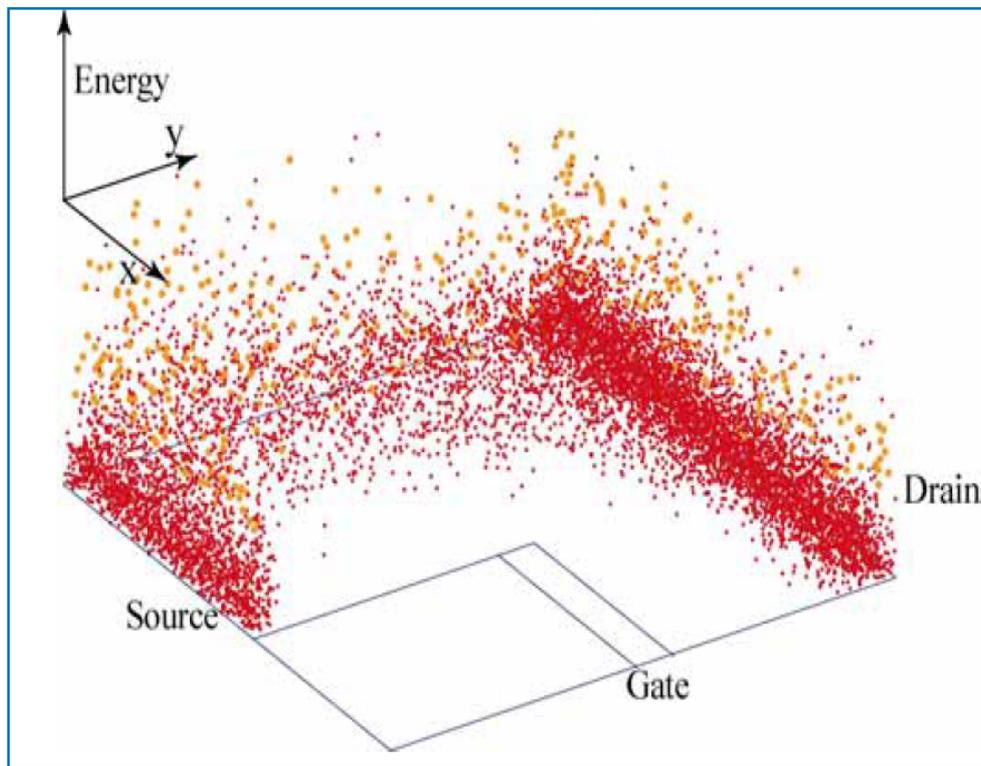


Fig.5.1 Distribution des électrons, issue d'une simulation Monte Carlo, dans un SiC-MESFET vertical [Ber04]

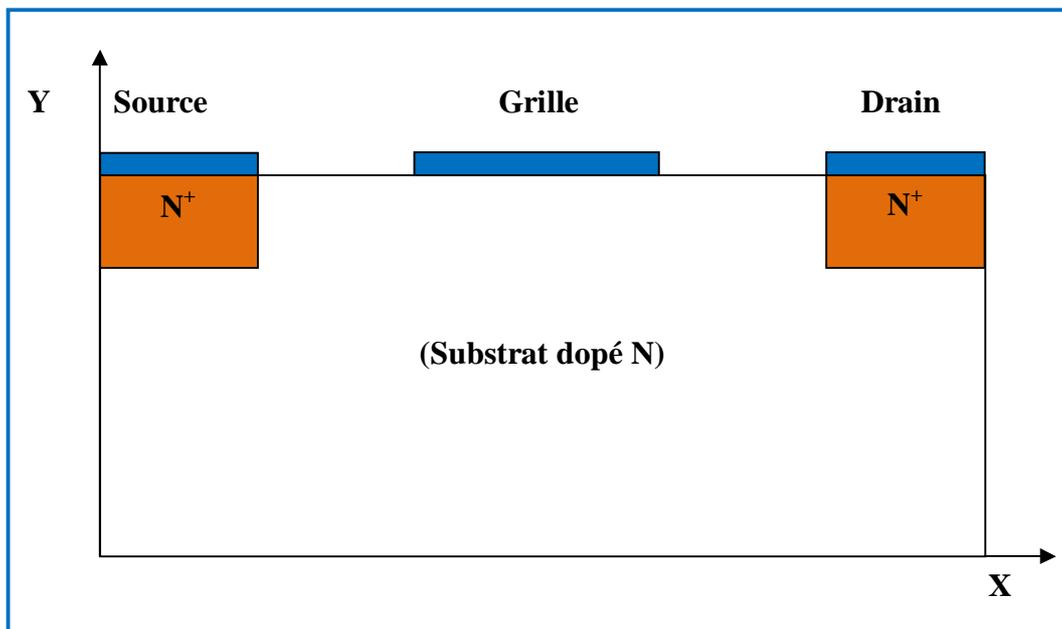


Fig. 5.2 Structure, à deux dimensions, d'un MESFET latéral.

2. Effet de la miniaturisation sur la simulation des dispositifs

En partant vers des échelles des transistors fortement submicroniques, ceci implique d'une part l'augmentation des effets de bord du côté de la grille et d'autre part une injection profonde des porteurs vers le substrat [Bou91] [Kur89] [Mat00]. Ainsi, il convient de noter que les effets quantiques dans les dispositifs, largement miniaturisés, restent plus difficiles à simuler (avec précision) en utilisant les modèles hydrodynamiques ou ceux de dérive-diffusion (restent limités). Pour cela, la méthode de Monte Carlo est beaucoup sollicitée. La force de cette méthode est le niveau d'abstraction élevé, où peu d'approximations doivent être effectuées. Aussi, pour cette méthode peu de paramètres empiriques sont impliqués. De même, la simulation Monte Carlo des dispositifs submicroniques présente un avantage remarquable en termes de temps de calcul suffisamment réduit. La réduction du temps du calcul, est due principalement à la réduction de la taille du transistor. Cela implique par la suite une réduction du nombre des super-particules (électrons) simulés, en comparaison avec les dispositifs plus grands. Néanmoins ce temps devient plus grand lorsque toute la structure de bande est considérée dans la simulation [jun99].

3. Equations de transport pour la simulation du Transistor MESFET

L'étude du transport électronique dans les transistors à effet de champ, notamment dans le MESFET, s'appuie souvent sur la résolution parallèle des équations de **Boltzmann** et de **Poisson** couplées. L'équation de Boltzmann (voir chapitre 3) représente une approche semi-classique pour la description du transport électronique dans les semiconducteurs, sous différentes conditions. Elle donne aussi une formulation statistique exacte, des mécanismes d'interactions affectant les électrons durant leurs déplacements tel que.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \nabla_k \epsilon \cdot \nabla_x f - \frac{e}{\hbar} E \nabla_k f = Q(f) \quad (5.1)$$

Pour mettre en évidence l'effet du potentiel quantique dû aux électrons et aux dopants donneurs, la résolution de l'équation de Poisson est recommandée. La résolution de cette équation nous permettra la détermination du potentiel quantique. Ce potentiel est en relation directe avec la densité volumique de charge. Sous l'effet d'un champ électrique, l'équation de Poisson s'écrit sous la forme:

$$\frac{\partial^2 V(x)}{\partial x^2} = - \frac{\rho(x)}{\epsilon_0 \epsilon_r} \quad (5.2)$$

Le champ électrique est déduit à partir du gradient du potentiel tel que :

$$E = -\nabla_x V(x) \quad (5.3)$$

Où $V(x)$ est le potentiel quantique, ϵ_0 et ϵ_r sont respectivement la permittivité du vide et la permittivité relative du matériau étudié. $\rho(x)$: La densité volumique de charge (sur une dimension) qui est une fonction de la concentration des dopants.

En présence des deux types de dopants (*donneurs* N_D^+ et *accepteurs* N_A^-) aux mêmes concentrations, la densité de charges sera uniformément distribuée en formant une charge neutre telle que :

$$\rho(x) = q(p + N_D^+ - n - N_A^-) = 0 \quad (5.4)$$

En tenant compte de la variation dans temps, la densité de charge $\rho(t, x)$ sera liée à la fonction de distribution des électrons suivant la relation 5.5 telle que :

$$\rho(t, x) = \int_{\mathbb{R}^3} f(t, x, k) dk \quad (5.5)$$

Dans le cas où les électrons et les dopants donneurs sont les seuls considérés, l'équation de Poisson prend la forme (sur une dimension) :

$$\frac{\partial^2 V(x)}{\partial x^2} = -q \frac{(N_D - n)}{\epsilon_0 \epsilon_r} \quad (5.6)$$

Dans le cas du MESFET (comme étant un composant unipolaire) la relation liant la variation spatiale de la densité des électrons $n(x)$ au minimum de la bande conduction $E_c(x)$ est :

$$n(x) = N_c \exp\left(-q \frac{E_c(x) - E_F}{K_B T}\right) \quad (5.7)$$

Avec N_c représente la densité effective des électrons. K_B et T : sont respectivement la constante de Boltzmann et la température. E_F : définit l'énergie du niveau de Fermi.

En absence du potentiel d'impuretés, on parle d'un minimum de la bande de conduction plat (Flat-band $E_c(\mathbf{r}) = E_{c0}$). Dans ce cas la densité des électrons sera uniforme et prend l'expression ci-dessous :

$$n_0 = N_c \exp\left(-q \frac{E_{c0} - E_F}{K_B T}\right) \quad (5.8)$$

On note que la présence d'un potentiel d'impuretés cause une perturbation dans la bande de conduction tel que $E_c(x) = E_{c0} + \delta V(x)$. Dans ce cas, la densité des électrons s'écrit selon l'équation (5.9) :

$$n(x) = N_c \exp\left(-q \frac{E_{c0} \delta V(x) + -E_F}{K_B T}\right) = n_0 \exp\left(-q \frac{\delta V(x)}{K_B T}\right) \quad (5.9)$$

Pour des faibles perturbations on peut écrire : $\delta V(x) \ll \frac{K_B T}{q}$ donc $(\exp(x) \approx 1 + x)$

$$n(x) = n_0 + \exp\left(\frac{qn_0}{K_B T} \delta V(x)\right) \quad (5.10)$$

En résolvant l'équation de Poisson, le potentiel $\delta V(x)$ peut être déduit de la distribution de charges. La charge de chaque électron sera distribuée à travers les cellules les plus proches du maillage adopté pour le transistor (voir § 4.2).

4. Démarches de Simulation du Transistor MESFET par la méthode de Monte Carlo

4.1. Condition aux limites

Le système d'équations (5.1), (5.2) et (5.3) forme le système de Poisson-Boltzmann [Car06]. Ce système d'équations tient en compte les interactions électrostatiques entre les particules chargées et les impuretés ionisées environnantes. Aussi, le système Poisson-Boltzmann est établi avec l'hypothèse d'un champ électrique moyen et prévoit toujours un potentiel répulsif. Dès la complexité de ce système, la résolution analytique s'avère plus complexe. Pour cette raison nous faisons appel à la méthode de Monte Carlo comme outil de discrétisation régulier et de suivie des trajectoires des électrons.

Lorsqu'un électron se déplace, le potentiel qui lui est associé change. Donc le potentiel doit être recalculé en permanence à partir de l'équation de Poisson (équation 5.2). Dans ce cas, une discrétisation spatiale est demandée. La méthode des différences finies, élaborée par **R.W. Hockney** [Hoc65], est considérée comme une méthode appropriée pour la discrétisation. L'implémentation de cette méthode est basée sur la transformée de Fourier rapide (**FFT**). En outre, l'utilisation de cette méthode fournit une solution rapide de cette équation, tout on la transforme d'une forme matricielle à une forme arithmétique discrète. De plus, les électrons traversant les contacts ohmiques (drain et source) contribuent fortement aux courants terminaux dans le dispositif. D'après **Shaw** [Ned89], un contact ohmique est considéré comme un contact idéal injecteur de charges majoritaires. Donc, il est capable de fournir tous les porteurs majoritaires excités (dans le substrat) sous l'effet du champ électrique appliqué. Pour la grille, c'est un contact à barrière de Schottky c'est-à-dire qu'un électron lorsqu'il atteint ce contact, il sera absorbé. Ainsi, aucune injection de porteurs de charges n'aura lieu à ce contact. Delà, une modélisation plus attentive doit être effectuée durant le maillage de ces contacts. Dans ce cas, deux principales conditions aux limites sont à les prendre en considération [Woo94] :

- ❖ Condition de **DIRICHLET** : où le potentiel électrostatique est imposé.
- ❖ Condition de **NEUMANN**: où la composante du champ électrique perpendiculaire à la face considérée est nulle.

L'application des conditions aux limites est basée sur la spécification de la valeur du potentiel (ou celle du champ électrique) et de la densité de charge dans les contacts ohmiques. Donc, au moins un point du maillage, doit vérifier les conditions de Dirichlet. Ceci permet de réaliser une connexion de la structure étudiée avec l'espace réel [Web01]. En plus, le pas du maillage ainsi que du temps seront limités par la longueur de **Debye** et le temps de relaxation diélectrique [Tom93]. La constante de décroissance spatiale dite longueur de Debye s'exprime par l'équation (5.11) [Web01]:

$$L_D = \sqrt{\frac{\varepsilon K_B T}{q^2 N_D}} \quad (5.11)$$

Avec N_D exprime la concentration des donneurs, q : la charge élémentaire, ε , K_B , T : sont respectivement la constante diélectrique, la constante de Boltzmann et la température du réseau.

Pour le temps de relaxation diélectrique, il définit comme étant le temps caractérisant les fluctuations de charges, sous l'influence du champ électrique qu'ils produisent. Ce temps peut être estimé par l'équation ci-dessous [Web01]:

$$\tau_d = \frac{\varepsilon}{q N_D \mu} \quad (5.12)$$

Où μ représente la mobilité des électrons.

Pour maintenir la charge conservée dans le dispositif, les électrons qui quittent les contacts ohmiques doivent être, à nouveau, réinjectés. En tenant compte des différentes vitesses de distribution, plusieurs modèles sont proposés pour modéliser les porteurs de charges injectés. Un modèle adéquat pour le maillage des contacts est celui proposé par **T. Gonzalez** et **D. Pardo** [Gon96].

4.2. Maillage des particules et calcul du potentiel

En assumant que les charges des particules en concentrations " N_D " et " n " (de l'équation (5.6)) peuvent être attribuées aux points de maillage " i ", l'équation de Poisson peut être discrétisée et résolue par un maillage à différence finie. Une approximation de différence finie centrée sur la deuxième dérivée du potentiel aux nœuds i, j s'écrit [Lio92] :

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = \frac{V_{i+1,j} - 2V_{i,j} + V_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} \quad (5.13)$$

Δx : Le pas du maillage (uniforme) suivant la direction des " x "

Pour un maillage à deux dimensions et plus, l'équation de Poisson s'écrira de la forme ci-dessous [Lio92] :

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} = \frac{V_{i+1,j} - 2V_{i,j} + V_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{V_{i+1,j} - 2V_{i,j} + V_{i-1,j}}{(\Delta y)^2} = -q \frac{N_i - n_i}{\epsilon_0 \epsilon_r} \quad (5.14)$$

N_i et n_i : Représentent respectivement les concentrations des dopants et des électrons projetées sur le nœud " i ".

Du fait que l'équation (5.14) s'écrira pour tous les nœuds (i, j) du maillage, un système algébrique sera donc formé. Lorsque les conditions aux limites sont imposées, diverses méthodes peuvent être exploitées pour la résolution de ce système algébrique. Ces méthodes se divisent en deux catégories :

- ❖ Méthodes Directes: comme la méthode d'élimination gaussienne [Buz70], ou la méthode basée sur la réduction cyclique [Sch76].
- ❖ Méthode d'itérations du gradient conjugué: comme la méthode ICCG : Incomplete Cholesky Conjugate Gradient [Ave91].

Afin d'éviter la grande allocation de mémoire pour les grandes matrices, la méthode ICCG relaxée [Tan06], [Bot97] reste largement adoptée pour la résolution rapide de ce système d'équation en 3D. Sur tous les nœuds du maillage, les potentiels résultant de la résolution de l'équation (5.14) par la méthode ICCG sont interpolées dans les forces des champs électriques ($\vec{F} = -q\vec{E}$). Deux approches sont couramment utilisées pour le maillage spatiale des super-particules (n_i électrons) :

- ❖ L'approche **NGP** (Nearest-Grid-Point): Cette approche se traduit par une interpolation d'ordre zéro. Elle est très simple et valable pour un maillage 1D, 2D ou 3D. A partir de cette approche, chaque particule est maillée au point le plus proche de la cellule. Par la suite, la charge de la particule sera concentrée au centre de la cellule considérée (voir figure 5.3).

Supposons, dans le cas d'un maillage à 2D, une particule de charge "q" est située à un point (x, y), avec "x" se situe entre les points x_i et x_{i+1} , "y" se situe entre les points y_j et y_{j+1} . Si la position (x, y) est plus proche au nœud (i, j), alors la densité de charge due à cette particule serait :

$$\rho_m = -\frac{q}{\varepsilon} \delta_{i,j} \quad (5.15)$$

Avec ρ_m représente la densité de charge dans le maillage, $\delta_{i,j}$ la fonction d'interpolation de **Kronecker**. Cette fonction prend la valeur de « 1 » au nœud "i, j" et « 0 » ailleurs telle que [Jac10] :

$$\delta_{i,j} = \begin{cases} 1 & |x| \leq \frac{\Delta x}{2} \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (5.16)$$

En appliquant la méthode des différences finies entre les cellules du maillage, et à partir de la densité de charge, on pourra facilement déduire les potentiels électrostatiques dans tous les nœuds du maillage considéré. Pour un nœud (i, j) d'un maillage uniforme, le champ électrique peut être exprimé par l'équation ci-dessous [Lio92]:

$$\vec{E} = (E_x, E_y) = -\left(\frac{V_{i+1,j} - V_{i-1,j}}{2\Delta x}, \frac{V_{i,j+1} - V_{i,j-1}}{2\Delta y}\right) \quad (5.17)$$

$\Delta x, \Delta y$: représentent les pas spatiales du maillage.

Une difficulté évidente de l'approche NGP est la densité de charge qui n'est pas lisse. Cependant, un inconvénient majeur de cette approche est la discontinuité du champ électrique à travers le maillage c'est-à-dire qu'une particule traversant une cellule, va rencontrer une discontinuité du champ électrique (la force).

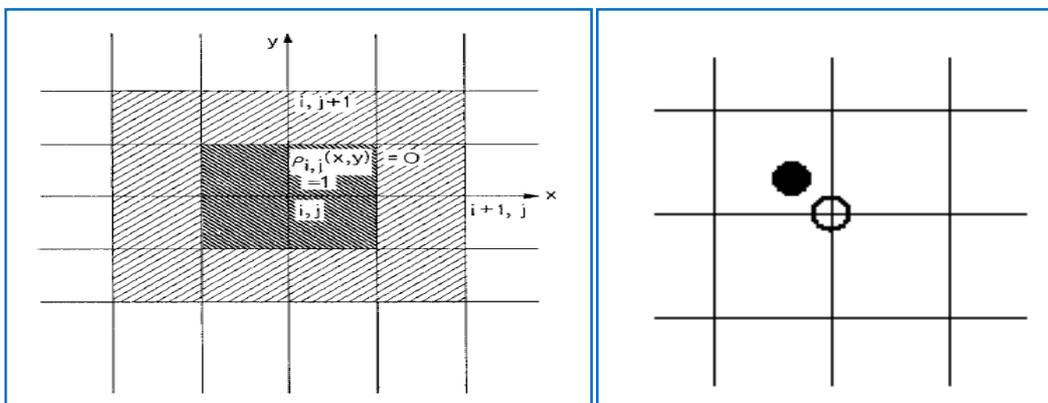


Fig. 5.3 Principe de l'approche NGP [Bir97]

- ❖ L'approche **CIC** (Cloud-In-Cell): Cette approche reste la plus populaire et se traduit par une interpolation du premier ordre. Dans le cas d'un maillage à 1D la charge d'une super-particule est attribuée aux deux points les plus proches de la cellule.

Dans une simulation 2D, cette charge est attribuée aux quatre points les plus proches, et ainsi de suite (voir figure 5.4). Dans ce cas, la fonction d'interpolation s'écrit de la forme [Jac89]:

$$\delta_{i,j} = \int_0^{1-\frac{|x|}{\Delta x}} \quad \begin{matrix} |x| \leq \Delta x \\ \text{ailleurs} \end{matrix} \quad (5.18)$$

La densité des électrons se détermine de la façon suivante :

$$n_{i,j} = \frac{S_{i,j}}{A_{i,j}^2} (x_{i+1} - x)(y_{j+1} - y) \quad (5.19)$$

$$n_{i,j} = \frac{S_{i+1,j}}{A_{i+1,j}^2} (x - x_i)(y_{j+1} - y) \quad (5.20)$$

$$n_{i,j+1} = \frac{S_{i,j+1}}{A_{i,j+1}^2} (x_{i+1} - x)(y_{j+1} - y) \quad (5.21)$$

$$n_{i+1,j+1} = \frac{S_{i+1,j+1}}{A_{i+1,j+1}^2} (x - x_i)(y - y_j) \quad (5.22)$$

Avec $n_{i,j}$ est la densité des électrons au point $(x_i - y_j)$, $S_{i,j}$ le poids statistique de la particule au point $(x_i - y_j)$, $A_{i,j} = \Delta x_i \cdot \Delta y_i$

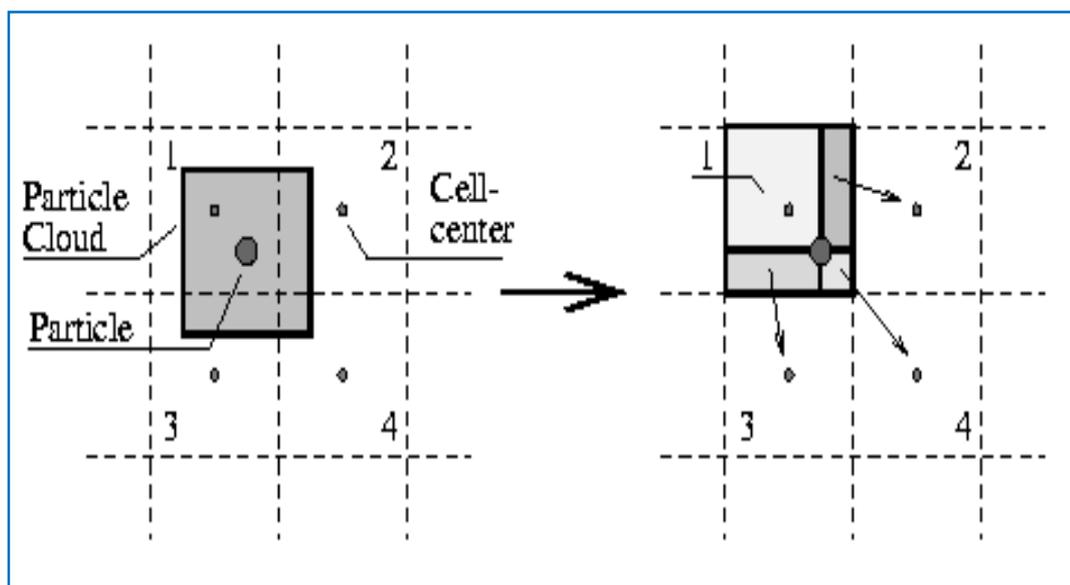


Fig. 5.4 Principe de l'approche CIC [Lem98]

Aussi, dans le contexte des approximations de différences finies, le champ électrique dans les différentes cellules sera calculé de la façon suivante :

$$E_{xi,j} = -\frac{V_{i+1,j}-V_{i-1,j}}{2\Delta x} \quad (5.23)$$

$$E_{yi,j} = -\frac{V_{i,j+1}-V_{i,j-1}}{2\Delta y} \quad (5.24)$$

L'approche CIC permet d'obtenir une force continue à travers les cellules du maillage. Elle réduira aussi l'amplitude des fluctuations dues aux forces inter-particules. Dans notre travail, l'approche CIC a été adoptée pour le maillage de notre MESFET et la répartition des charges à travers le dispositif. Pour plus de détail sur cette approche se référer au [Lau95].

5. Présentation du simulator Monte Carlo

5.1. Description

Les simulations Monte Carlo, qu'elles seront présentés par la suite, sont basées sur le simulateur **Archimedes**. C'est un simulateur Monte Carlo 2D des dispositifs submicroniques. Basé sur un modèle "ensemble Monte Carlo", Ce simulateur nous offre la possibilité de simulé le transport d'un ensemble de particules à la fois (01 million de super-particules), dans de nombreux matériaux semiconducteurs et des dispositifs submicronique (MESFET, MOSFET, Diode). Toutes les particules simulées ont un «**poids statistique**». Aussi, Archimedes offre l'opportunité d'y intégrer, facilement, d'autres structures de dispositifs ou matériaux semiconducteurs.

De plus, Archimedes rend compte des effets quantiques et permet de simuler le comportement des charges en régime d'équilibre, thermodynamique et transitoire. La simulation de la dynamique des particules (résolution de l'équation de Boltzmann) est couplée au potentiel électrostatique à travers l'équation de Poisson. Cette dernière est résolue par la méthode des différences finies. En plus, Ce simulateur offre la possibilité de choisir la physique des différents contacts ohmiques en tenant compte des conditions aux limites. Les effets quantiques sont pris en compte par le biais de la méthode du potentiel effectif. Plus de détail sur ce simulateur, est disponible dans son manuel d'utilisation. Un exemple de simulation d'un MESFET par le simulateur Archimedes est exposé dans la figure 5.5.

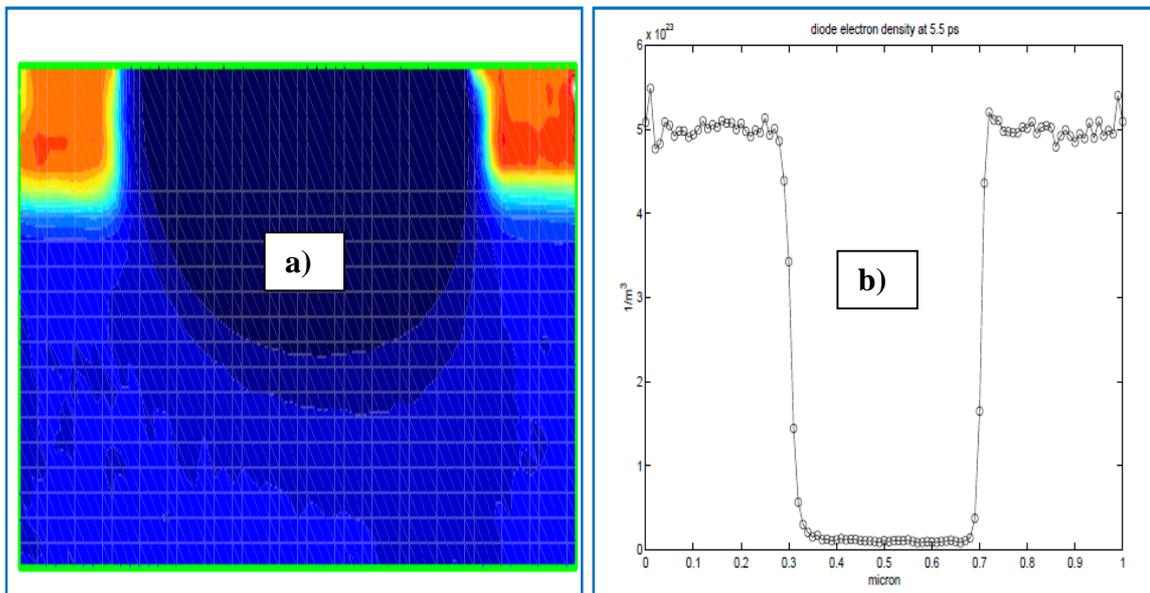


Fig. 5.5 Représentation du :
a. Profile de la densité des électrons dans un MESFET.
b. Profile de la densité des électrons dans une diode.

5.2. Organigramme de simulation

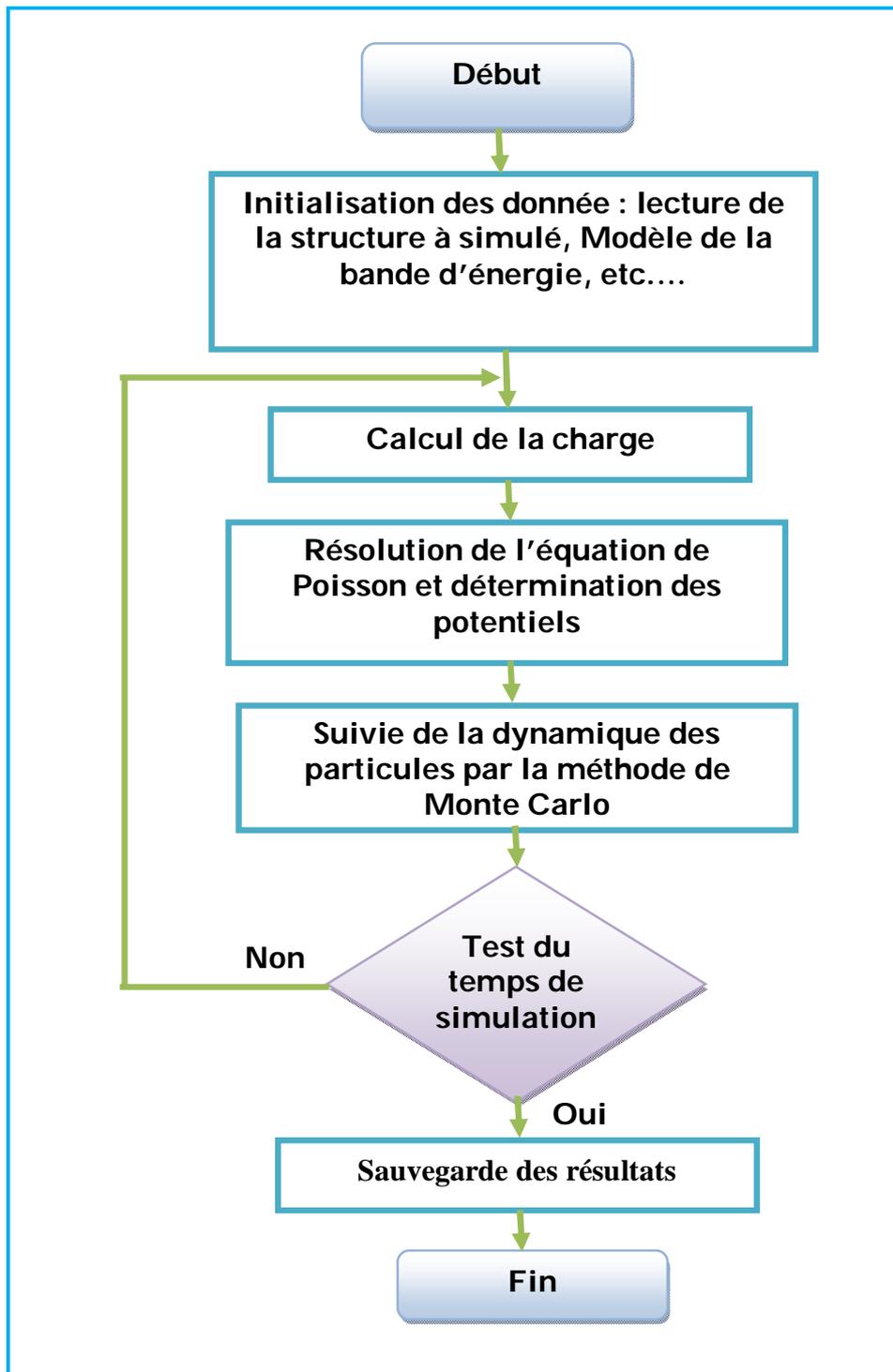


Fig. 5.6 Organigramme montrant les étapes adoptées pour la simulation des dispositifs par le simulateur Archimedes.

Les étapes adoptées pour la simulation d'un dispositif par le simulateur Monte Carlo Archimedes sont regroupées dans l'organigramme de la figure 5.6. Au début de chaque simulation, après la lecture des paramètres nécessaires, tous les électrons (super-particules) seront aléatoirement répartis au niveau du substrat. Cette répartition est effectuée de telle sorte que la densité d'électrons soit égale à la densité d'impuretés ionisées. Dans le cas du MESFET, la formation de la zone de charge d'espace au dessous de la grille, va diminuer le nombre d'électrons simulés. Cependant, la charge attribuée à chaque électron reste la même tout au long de la simulation. Cette charge est calculée au début de la simulation.

6. Applications : Simulation du MESFET submicronique

Les différents résultats de simulations extraites du simulateur Archimedes seront exposés et évalués dans cette partie. Ces résultats sont obtenus sous différentes conditions de température, de polarisation et du dopage. Le suivi instantané des trajectoires des électrons nous a renseigné sur la distribution des électrons à chaque point du maillage considéré. Aussi, en connaissant la fonction de distribution des électrons, des informations telles que la distribution du potentiel électrostatique, la vitesse des électrons et d'autres caractéristiques sont extraites par résolution de l'équation de Poisson (en tout point du dispositif).

La structure du transistor MESFET étudiée dans ce travail, est donnée dans la figure 5.7. C'est un MESFET latéral de type " n^+-n-n^+ ". Le maillage utilisé est un maillage rectangulaire. Le nombre de cellules formant le maillage ainsi que le nombre des super-particules simulées sont définis au préalable. L'attribution de la charge à travers le dispositif est assurée par l'algorithme CIC. Ainsi, pour rendre compte aux effets de bords lors de la résolution de l'équation de Poisson, un choix judicieux pour le maillage et des contacts ohmiques été considéré.

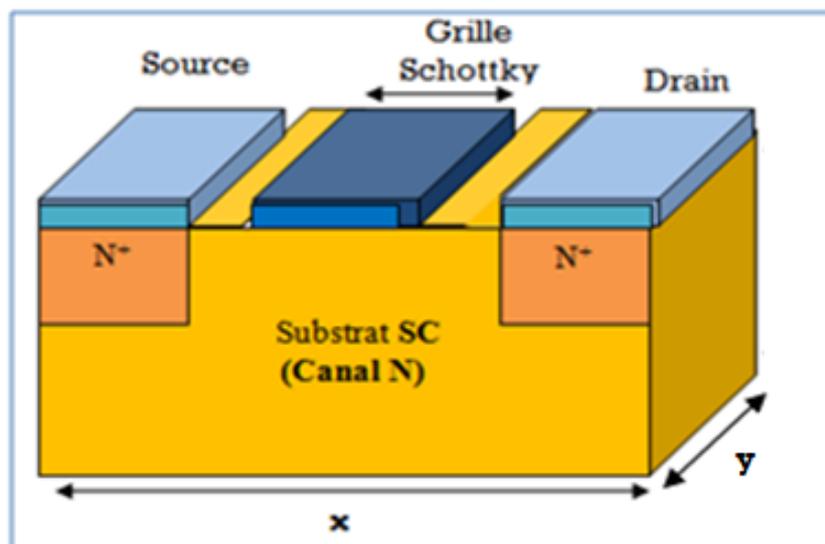


Fig. 5.7 Structure de base d'un MESFET latéral.

6.1. Exemple d'un MESFET à base de matériaux III-V.

Les caractéristiques électriques et physiques des composés III-V ont près beaucoup d'attention ces dernières années. Cette attention est traduite par les nombreux travaux scientifiques disponibles dans la littérature. Parmi ces composés nous citons le **GaSb** et l'**AlInSb**.

Pour le **GaSb** les propriétés de transport exposées dans le chapitre 04, montrent l'aptitude de ce matériau d'être un candidat promoteur pour les applications optoélectroniques et de faible puissance. D'autres travaux comme ceux de **A. W. Dey et al.** [Dey12] et de **M. Mohapatra** [Moh11] rassurent les excellentes propriétés de ce matériau. Pour l'**AlInSb**, une étude récente de ses propriétés de transport électronique a été proposée par **Y. Zhang et al.** [Zha13]. Ces derniers ont prouvé que l'**AlInSb**, utilisé comme une couche tampon dans l'hétéro-structure **AlInSb/InAsSb**, présente une très grande mobilité électronique. Cette mobilité le rend un bon matériau pour les applications à haute vitesse comme le cas des transistors à haute mobilité (HEMT).

Dans ce contexte, des simulations Monte Carlo du transistor MESEFT en GaSb puis à base de $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$ (avec un coefficient stœchiométrique $x = 0.24$) seront présentées. Comme déjà cité ci-dessus, le MESFET simulé est de type "**n⁺-n-n⁺**", d'une longueur de canal égale à "**200 nm**" (voir figure 5.8). Les simulations sont effectuées pour une concentration des donneurs, au niveau du drain et de la source, égale à " **$N_D = 3 \times 10^{21} \text{ at.cm}^{-3}$** ". La grille est prise à une polarisation égale à "**-1.5V**" tandis que la tension entre le drain et la source est fixée à "**1V**". Le nombre d'électrons simulés égale à "**500000**" super-particules.

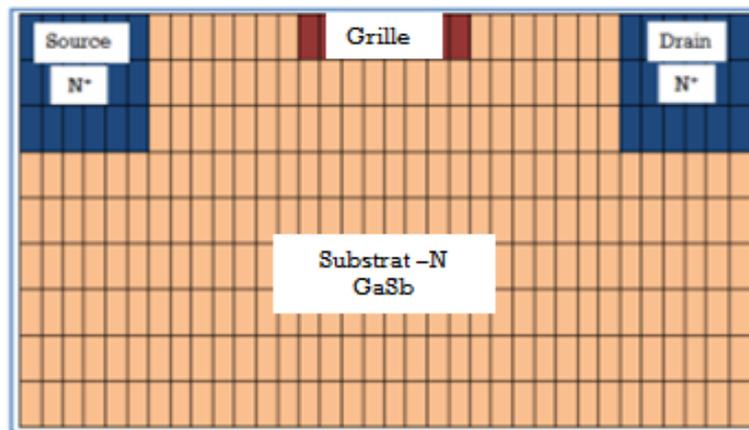


Fig. 5.8 Structure du MESFET latéral simulée.

6.1.1. MESFET en GaSb

Dans les figures ci-après, nous exposons les résultats enregistrés à partir des simulations Monte Carlo du MESFET en GaSb. Sous l'effet de la polarisation une quantité importante des électrons est injectée, de la source vers le drain, à travers le canal submicroniques. Après un certain temps, la densité des électrons atteint sa valeur primitive dans les contacts ohmiques (voir figure 5.9.b). Aussi, l'augmentation de la concentration des électrons dans le canal, conduira à la création d'un profil non-uniforme du champ électrique et du potentiel électrostatique (voir figures 5.10 et 5.11). De plus, sous l'effet du champ électrique, les électrons vont acquérir plus d'énergie où ils seront fortement distribués vers le drain (figure 5.9.a). À partir des figures 5.10 et 5.11, le champ électrique reste plus important au dessous de la grille. Ce champ donne par la suite une augmentation considérable de la vitesse de dérive des électrons (de l'ordre de $2 \cdot 10^7$ cm/s) dans le canal (figure 5.12). Cette vitesse est beaucoup plus importante dans la direction longitudinale (direction du champ électrique).

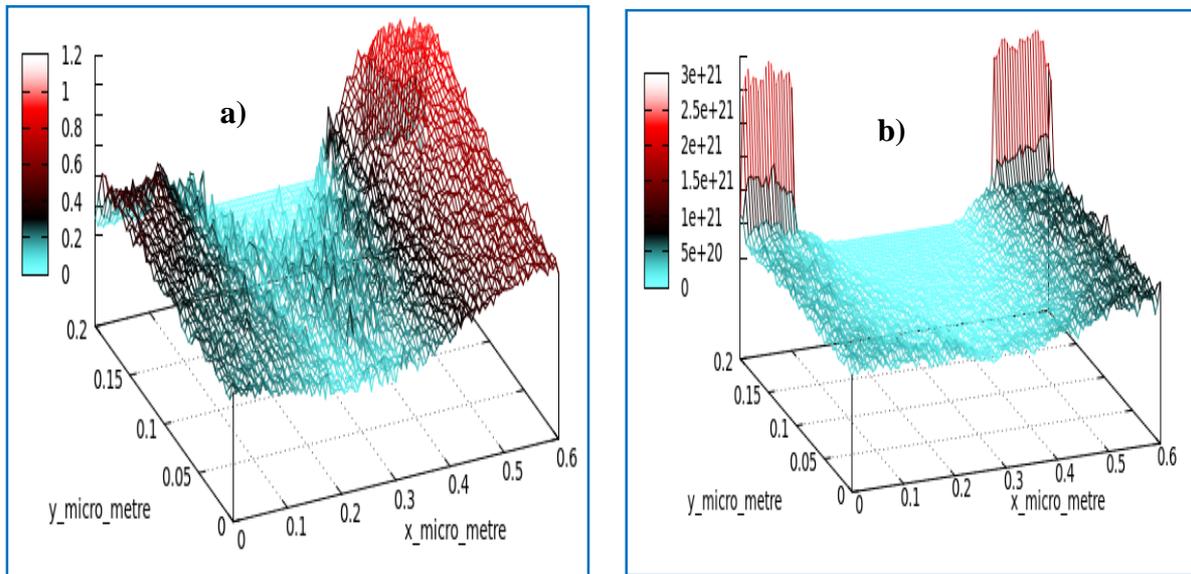


Fig. 5.9 Représentation de :
a) La distribution de l'énergie des électrons.
b) La densité des électrons.

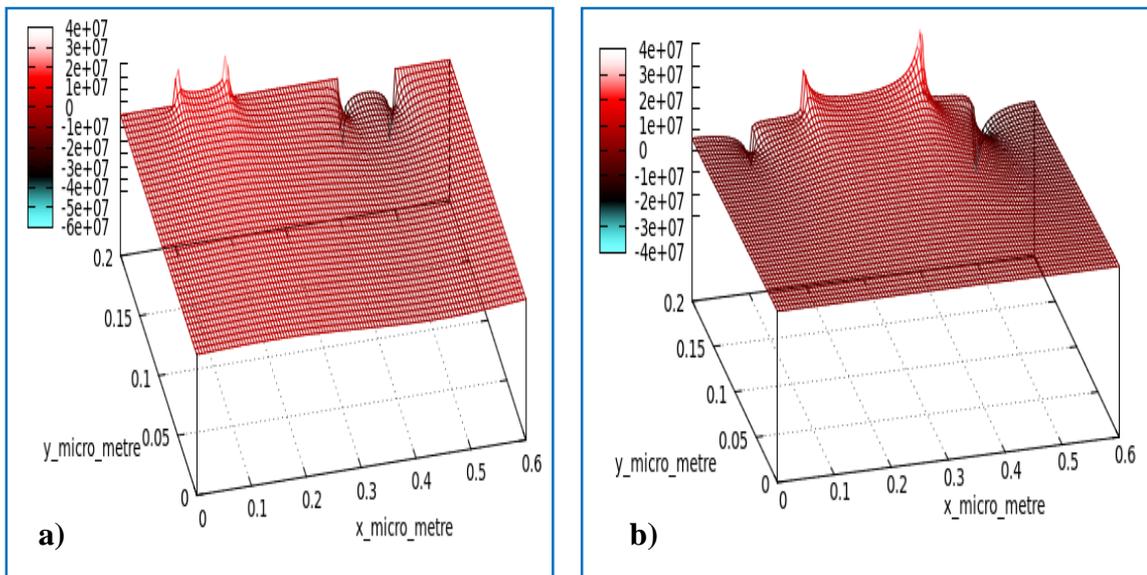


Fig. 5.10 Répartition spatiale du champ électrique dans le GaSb :
a) La composante transversale (direction x).
b) La composante longitudinale (direction y).

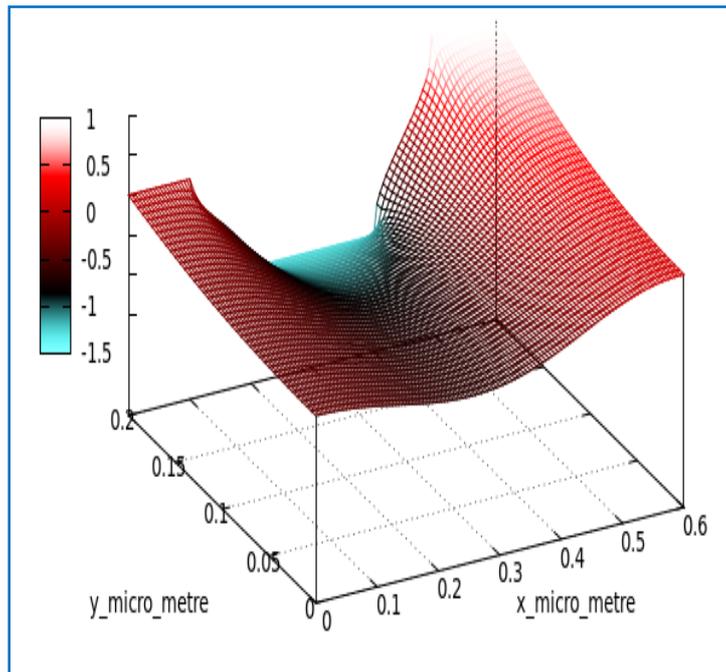


Fig. 5.11 Répartition spatiale du potentiel électrostatique dans le GaSb.

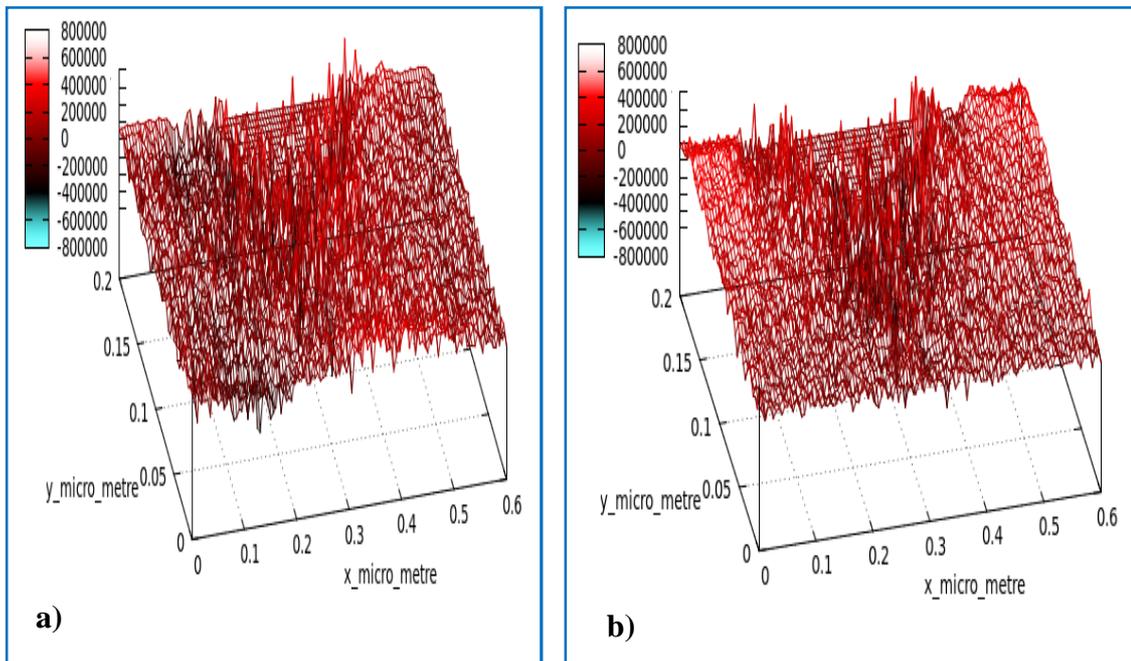


Fig. 5.12 Vitesse des électrons dans le GaSb :
a) La composante transversale (direction x).
b) La composante longitudinale (direction y).

6.1.2. MESFET à base de l' $\text{Al}_{0.23}\text{In}_{0.77}\text{Sb}$

Dans le cas du MESFET à base de l' $\text{Al}_{0.23}\text{In}_{0.77}\text{Sb}$, un élargissement de la zone de charge d'espace (ZCE) est clairement visible au dessous de la grille (figure 5.13.b). Cet élargissement donne naissance à un champ électrique aussi important dans la direction longitudinale que pour la direction transversale. Ce champ atteint sa valeur maximale aux extrémités de la grille. Cette valeur est due à une accumulation des électrons causée par la diminution de leurs vitesses de dérive à aux extrémités de la grille (figure 5.15.b). Cependant, au-dessous de la grille, pratiquement tous les électrons seront repartis dans le canal avec des vitesses très importantes (figure 5.14). En outre, le potentiel électrostatique résultant atteint sa valeur maximale au niveau des contacts ohmiques (figure 5.16).

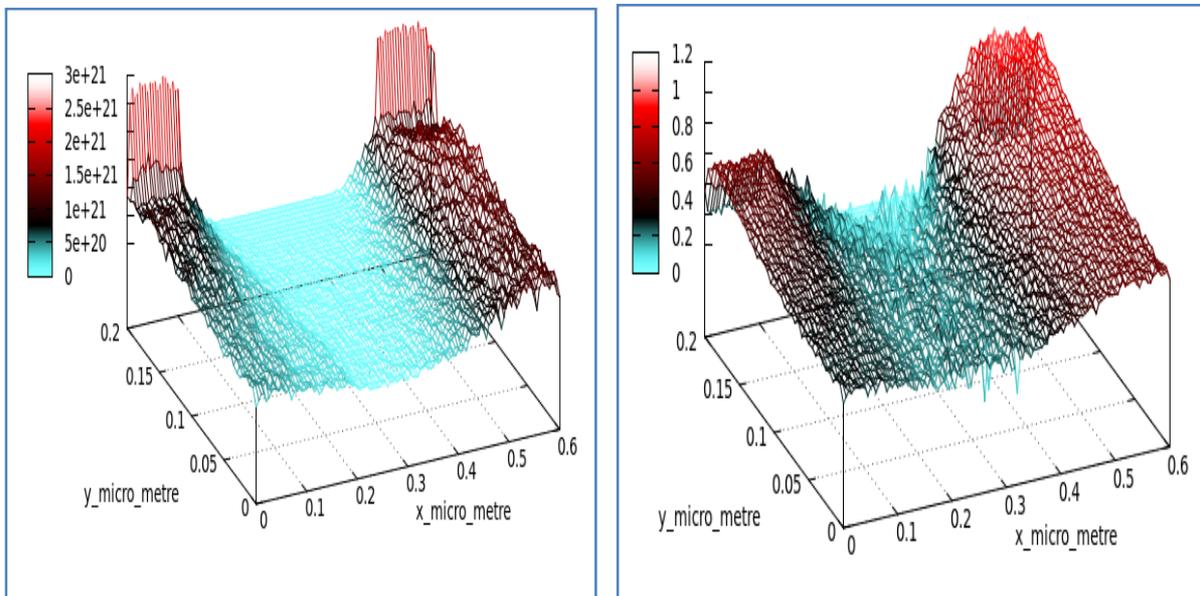


Fig. 5.13 Représentation de :
a) La densité des électrons.
b) La distribution de l'énergie des électrons.

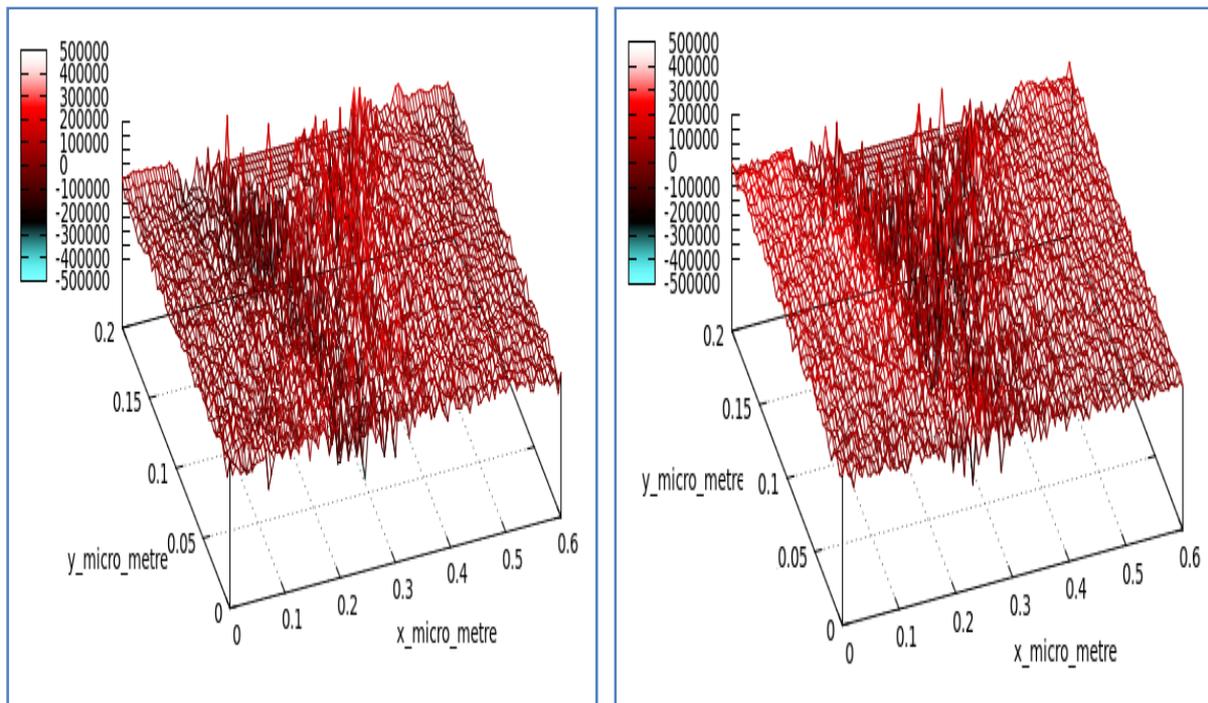


Fig. 5.14 Vitesse des électrons dans l' $\text{Al}_{0.23}\text{In}_{0.77}\text{Sb}$:
a) La composante transversale (direction x).
b) La composante longitudinale (direction y).

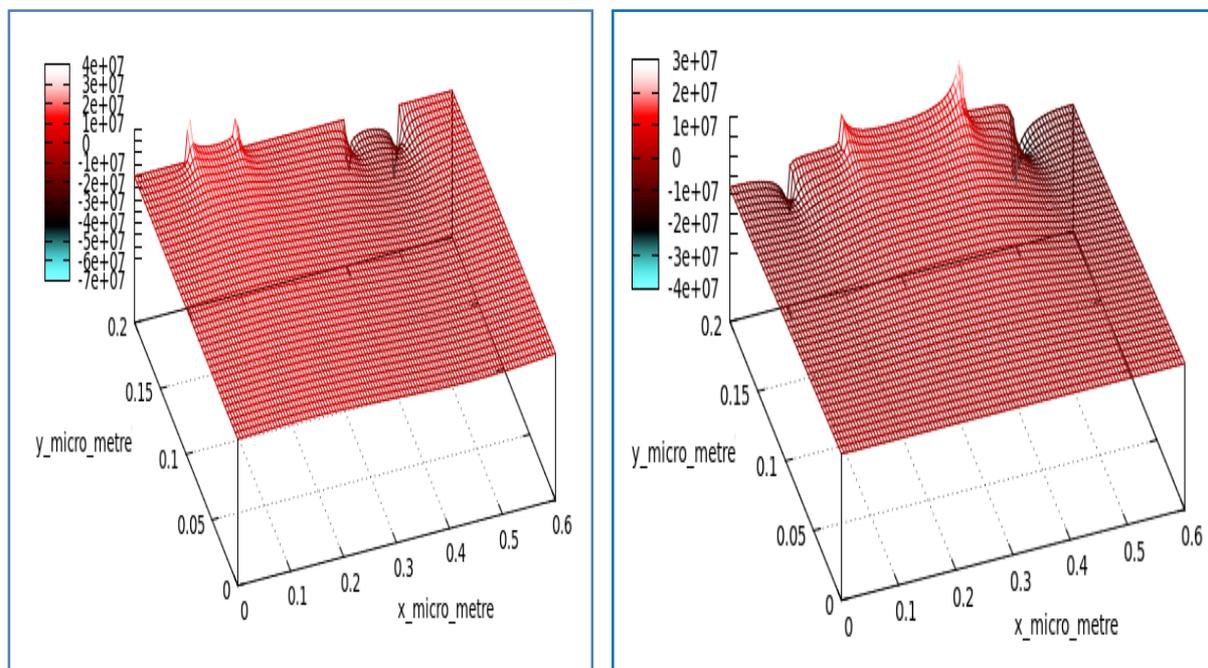


Fig. 5.15 Répartition spatiale du champ électrique dans l' $\text{Al}_{0.23}\text{In}_{0.77}\text{Sb}$:
a) La composante transversale (direction x).
b) La composante longitudinale (direction y).

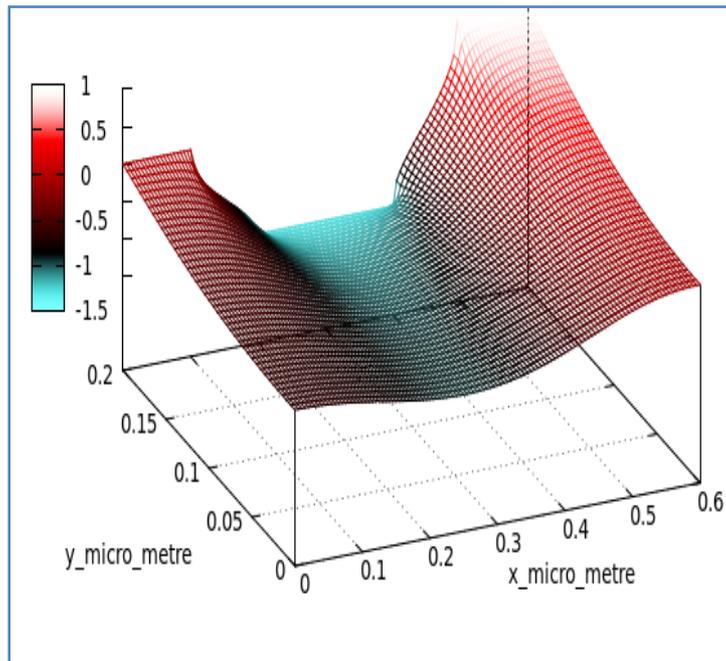


Fig. 5.16 Répartition spatiale du potentiel électrostatique dans l'Al_{0.23}In_{0.77}Sb.

6.2. Simulation du MESFET latéral à base du 4H-SiC

La structure du SiC-MESFET simulé est toujours une structure '**n+-n-n+**' largement répandue dans le domaine industriel (voir figure 5.17). La longueur du canal été de **200nm**. On note, les mêmes conditions de polarisation et de dopage, appliquées aux exemples précédents, ont été choisies. Les résultats exposés dans les figures ci-après sont obtenus après un temps de simulation égale à '**0.75 ps**' et sous une température de '**300K**'. Les figures 5.18.a et 5.18.b montrent, respectivement, la répartition spatiale du potentiel électrostatique et du champ électrique à travers le canal submicronique. Les valeurs enregistrées révèlent un potentiel plus important près du drain. Aussi, la valeur importante du champ électrique conduira au phénomène des électrons chauds donnant par la suite un pic de vitesse important près du drain (figure 5.18.d).

En outre, le nombre important des super-particules considérées dans la simulation, favorise beaucoup plus les interactions avec les impuretés ionisées qu'avec les phonons optiques et acoustiques. La figure 5.18.c représente la répartition de la densité des électrons dans le dispositif qui reste maximale au niveau du drain et de la source. De même, il est clairement visible qu'une région d'appauvrissement (ZCE) est formée sous la grille et que la masse volumique des électrons est majoritairement distribuée dans les contacts ohmiques. La largeur de la ZCE est fortement modulée par la tension appliquée au niveau de la grille. En contre partie, lorsqu'une tension suffisante est appliquée au niveau du drain, une quantité importante des électrons sera excitée depuis la source vers le drain à travers le canal. Aussi, les électrons, fortement accélérés peuvent sortir de l'intérieur du dispositif (par l'intermédiaire des contacts ohmiques) et donc la densité de la charge totale diminue.

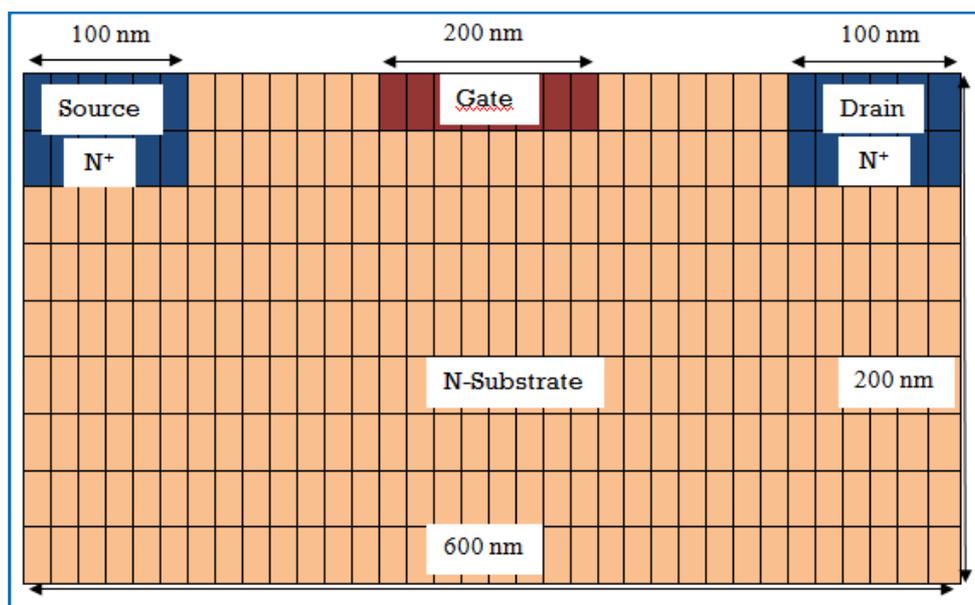


Fig. 5.17 Géométrie du SiC-MEFET simulé.

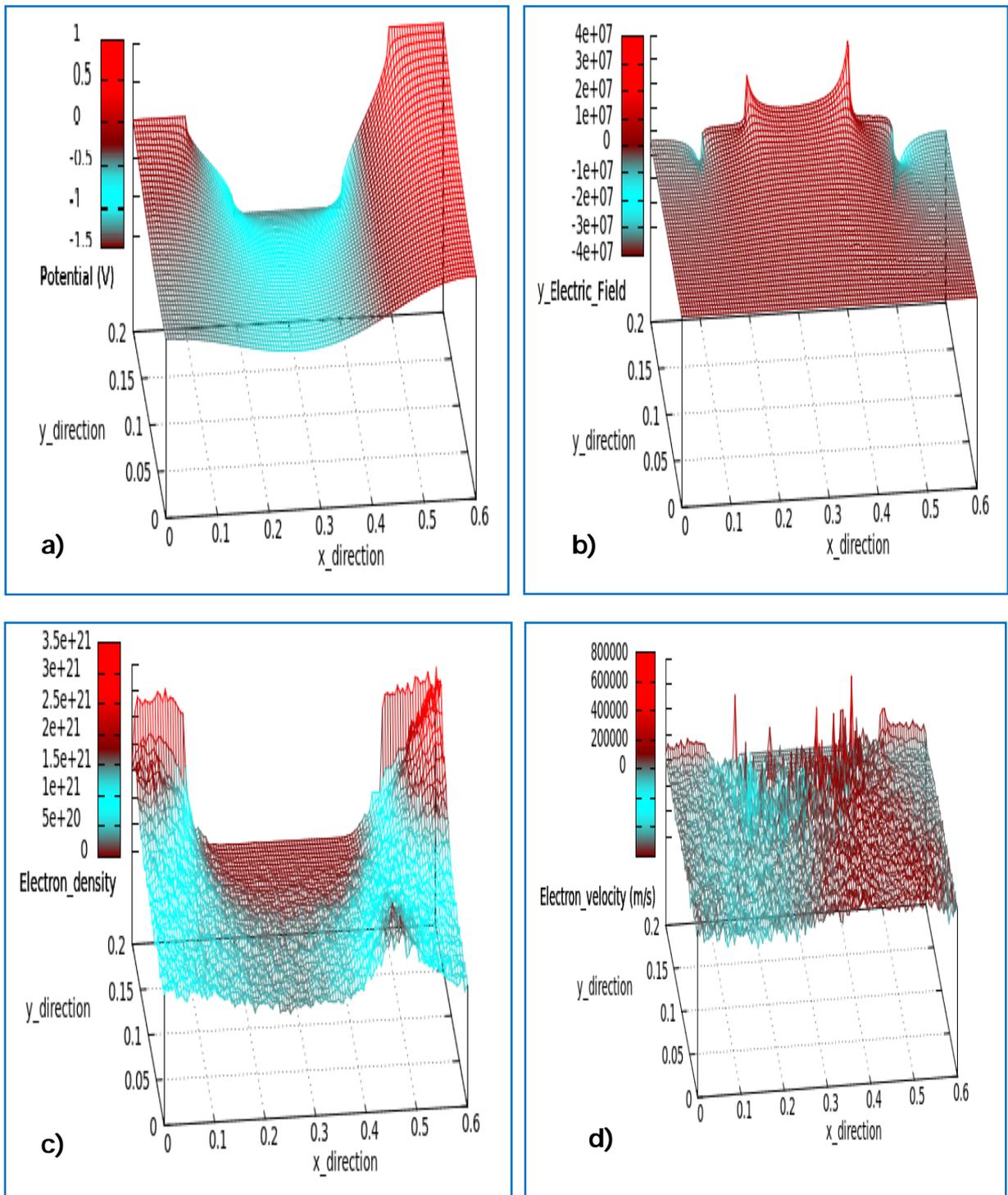


Fig. 5.18 Répartition spatiale, dans le 4H-SiC MESFET, du:

- a) Potentiel électrostatique.
- b) Composante longitudinale du champ électrique.
- c) Densité des électrons.
- d) Vitesse des électrons.

6.2.1. Effet de la température sur les caractéristiques de transport électronique du 4H-SiC-MESFET

L'effet de la température tire une grande importance dans la détermination des performances d'un dispositif semiconducteur (conductivité thermique), ainsi que son aptitude d'opérer sous des températures très élevées. On note que la prise en compte de la température dans la détermination des propriétés de transport électronique (vitesse de dérive, énergie, etc.) dépend fortement du modèle numérique utilisé. Pour le cas du carbure de silicium, l'étude du transport électronique, sous l'effet de température, a été étudié par de nombreux auteurs tels que **R. P. Joshi** [Jos95] et **G. Pennington et al.** [Pen01] qu'ils ont souligné l'importance de la température dans telle étude.

Dans cette partie, l'effet de la température sur les différentes caractéristiques de transport électronique dans le 4H-SiC-MESFET est considéré. Les résultats enregistrés sont obtenus pour des températures allant de **273k** jusqu'au **1073K**. Ces résultats nous ont renseignés sur l'aptitude de ce dispositif à supporter des températures élevées. La figure 5.19 donne l'effet de la température sur la répartition de la densité des électrons à travers le dispositif. Selon cette figure, de plus en plus que la température augmente, la densité des électrons décroît et sera répartie sur une section réduite du dispositif. Par la suite une quantité importante des électrons reste piégée dans les contacts ohmiques.

De même, l'influence de la température, sur la composante longitudinale de la vitesse de dérive, est considérée. On note qu'à des températures élevées, les électrons seront fortement accélérés au delà de la grille et atteignent des vitesses plus élevées auprès des contacts ohmiques. La diminution de la vitesse, au dessous de la grille, est fortement liée à l'agitation thermique qui favorise beaucoup plus les collisions électrons-électrons et électrons-phonons.

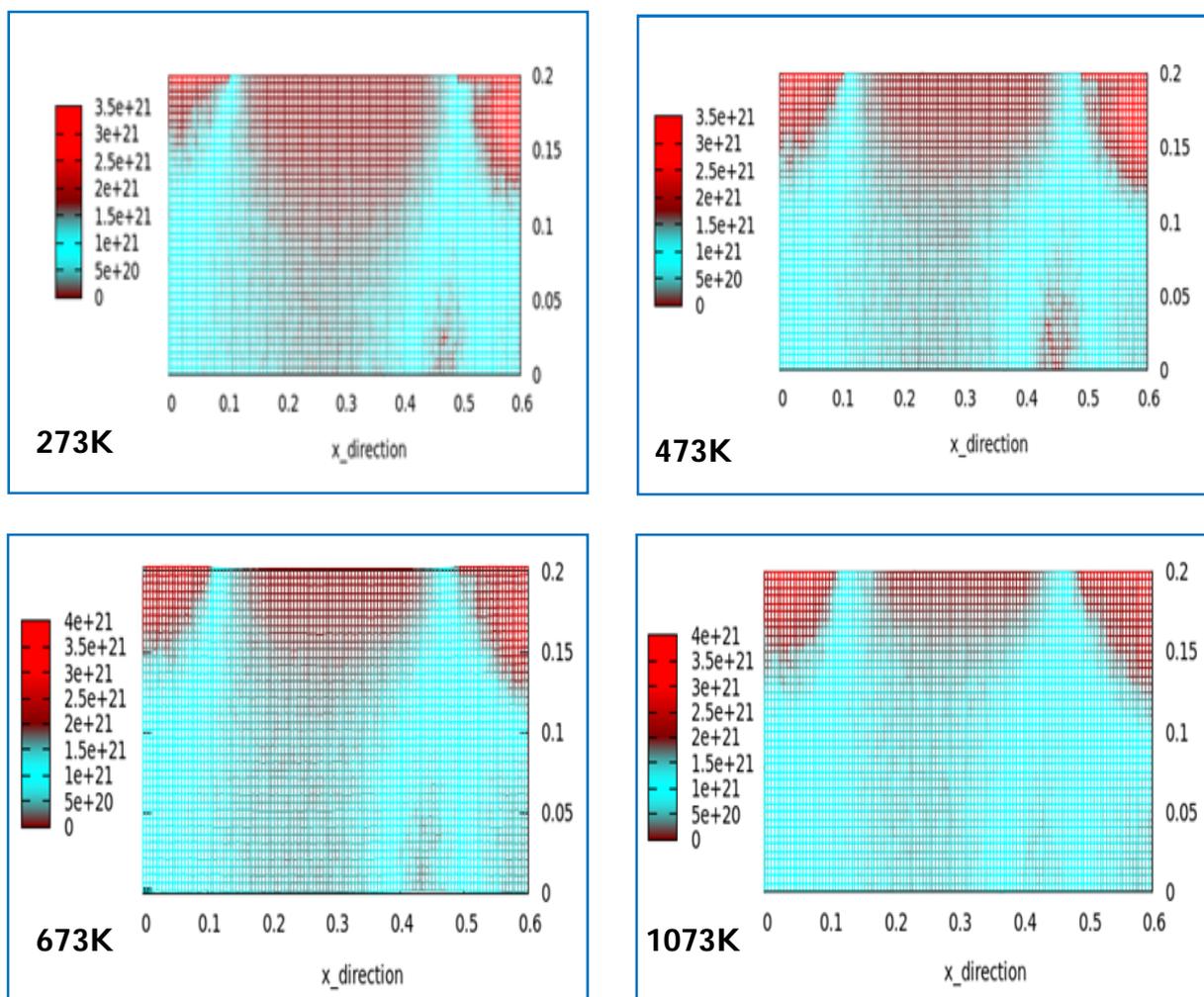


Fig. 5.19 Effet de la température sur la répartition de la densité des électrons dans le 4H-SiC MESFET.

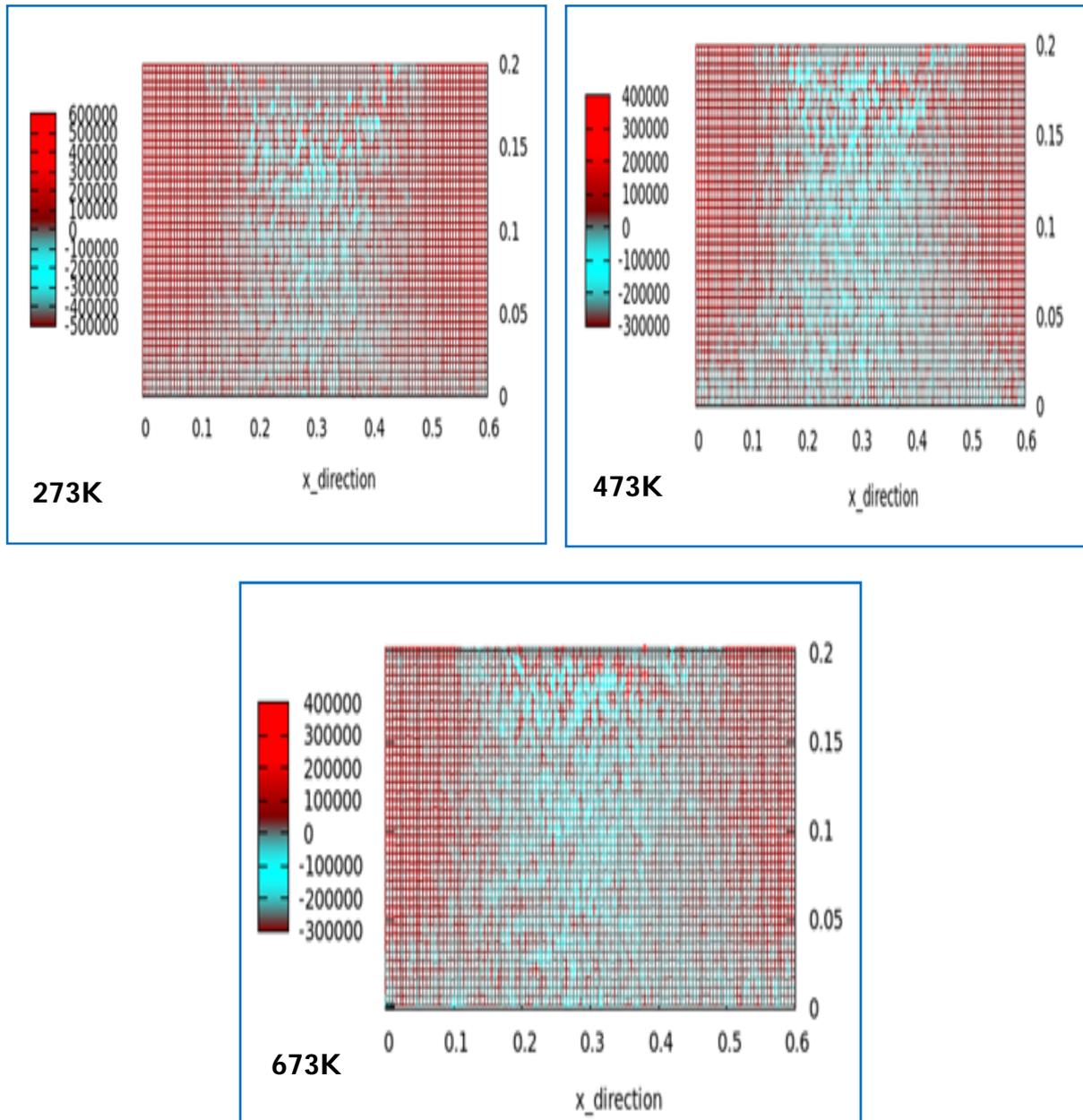


Fig. 5.20 Effet de la température sur la composante longitudinale de la vitesse des électrons dans le 4H-SiC MESFET.

6.2.2. Caractéristique I(V)

L'une des démarches pour la caractérisation d'un transistor MESFET est la détermination de la caractéristique courant-tension. Cette dernière nous renseigne sur les différents régimes de fonctionnement du transistor ainsi que sur l'aptitude du dispositif, en termes de puissance, pour une application bien déterminée. La caractéristique I(V) du 4H-SiC-MESFET, issue des simulations Monte Carlo, est exposée dans la figure 5.21. Cette caractéristique est obtenue à la température ambiante et pour une concentration des dopants donneurs égale à $3 \cdot 10^{21}$ atomes/cm³. À partir de la figure 5.21, nous constatons que le régime de saturation est atteint lorsque la tension drain-source dépasse le **600V**. Ainsi, le fait d'avoir un canal largement miniaturisé, réduira beaucoup le temps de transit des électrons sous la grille et par conséquent leur vitesse diminuera. En outre, de plus en plus que les dispositifs se miniaturisent, leurs fréquences de fonctionnement risque d'avoir une augmentation des petites tensions de claquage [Ara09].

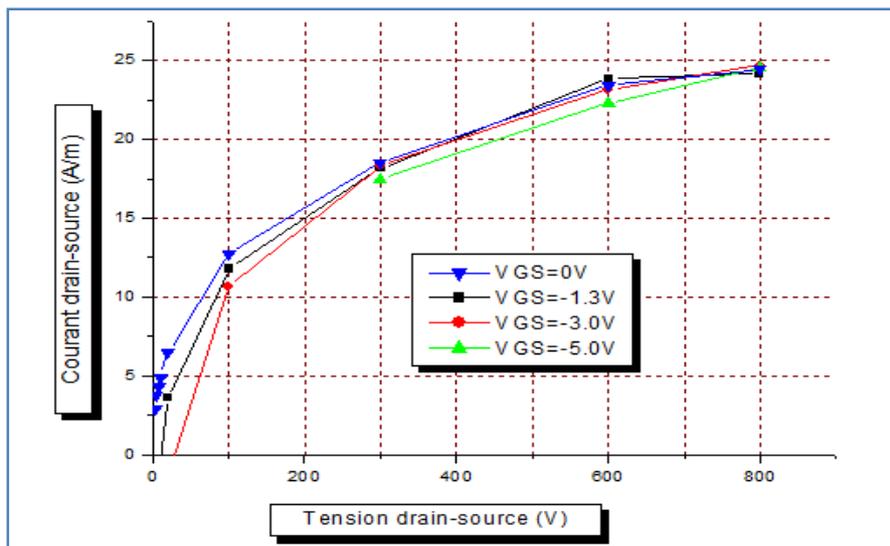


Fig. 5.21 Caractéristique courant-tension pour le 4H-SiC-MESFET.

Références

- [All97] S. T. Allen, R. A. Sadler, T. S. Alcorn, J. W. Palmour, C. H. Carter Jr., "Silicon carbide MESFET's for high-power S-band applications", Proceedings of the IEEE int. Microwave Symposium Digest, Vol. 3, pp. 57-60, (1997).
- [Ani99] A. M. Anile et V. Romano, "Non parabolic band transport in semiconductors: closure of the moment equations", Continuum Mech. Thermodyn., Vol.11, Is.5, pp. 307-325, (1999).
- [Ara09] H. Arabshahi, J. Baedi, H. A. Rahnema, G.R. Ebrahimi, "Potential performance of SiC and GaN based metal semiconductor field effect transistor", Romanian Journal of Physics, Vol. 54, N° 3-4, pp.377-384, (2009).
- [Ave91] B. M. Averick et J. M. Ortega, "Fast solution of nonlinear Poisson-type equations", Applied Numerical Mathematics, Vol.8, pp. 443-455, (1991).
- [Ber04] K. Bertilsson, "Simulation and optimization of SiC Field Effect Transistors", Thèse, University of Stockholm, (2004).
- [Bir97] C. K. Birdsall et D. Fuss, "Clouds-in-Clouds, Clouds-in-Cells Physics for Many-Body Plasma Simulation", Journal of computational physics, Vol. 135, pp.141-148, (1997).
- [Bot97] E.F.F. botta, K. Dekker, Y. Notay, P. M. de Zeeuw, "how fast the Laplace equation was solved in 1995", Applied Numerical Mathematics, Vol. 24(4), pp. 439-455, (1997).
- [Bou91] P. Bourel, "Simulation Monte Carlo bidimensionnelle et étude expérimentale de transistors à effet de champ à hétérojonctions AlInAs/GaInAs adaptés en maille sur InP", Thèse, Université de Lille I, (1991).
- [Buz70] B. L. Buzbee; G. H. Golub; C. W. Nielson, "On Direct Methods for solving Poisson's equations", SIAM Journal on Numerical Analysis, Vol. 7, No. 4., pp. 627-656, (1970).
- [Car06] J. A. Carrillo, I. M. Gamba, A. Majorana, C. W. Shu, "2D semiconductor device simulations by WENO-Boltzmann schemes: Efficiency, boundary conditions and comparison to Monte Carlo methods", ScienceDirect, Vol. 214, Is. 01, pp. 55-80, (2006).
- [Dey12] A. W. Dey, J. Svensson, B. M. Borg, M, Ek, L. E .Wernersson, "Single InAs/GaSb nanowire low-power CMOS inverter", Nano Letters, Vol. 12, N°11, pp. 5593-7, (2012).

- [Gon96] **T. Gonzalez et D. Pardo**, "Physical models of ohmic contact for Monte Carlo device simulation", Solid State Electron, Vol. 39, pp.555 (1996).
- [Hei06] **C. Heitzinger, C. Ringhofer, S. Ahmed, D. Vasileska**, "3D Monte-Carlo Device Simulations Using an Effective Quantum Potential Including Electron-Electron Interactions", 11th international workshop on computational electronic, Wien, (2006).
- [Hoc65] **R.W. Hockney**, "A Fast Direct Solution of Poisson Equation Using Fourier Analysis," JACM, Vol. 12, No.1, pp. 95-113, (1965).
- [Jac89] **C. Jacoboni et P. Lugli**, "The Monte Carlo method for semiconductor device simulation", Springer-Verlag, Wien, (1989).
- [Jac10] **C. Jacoboni**, "Theory of Electron Transport in Semiconductors", Springer-Verlag, (2010).
- [Jos95] **R.P. Joshi**, " Monte Carlo calculations of the temperature- and field-dependent electron transport parameters for 4H-SiC ", Journal of Applied Physics, Vol. 78, pp. 5518, (1995).
- [jun99] **C. Jungemann, S. Keitr, M. Bartels, B. Meinerzhagen**, "Efficient full-band Monte Carlo simulation of silicon devices", IEICE trans. On Electr., E82C(6), PP.870-879, (1999).
- [Kur89] **M. Kuzuhara, T. Itoh, K. Hess**, "Ensemble Monte Carlo simulation of sub-0.1 μ m gate length GaAs MESFETs", Solid-State Electronics, Vol. 32, Is. 12, pp.1857-1861, (1989).
- [Lau95] **S. E. Laux**, "On particle-mesh coupling in Monte Carlo semiconductor device simulation", Simulation of Semiconductor Devices and Processes, Vol. 6, pp.404-407, (1995).
- [Lio92] **J. A. Liroyd**, "Numerical Methods for Monte Carlo device simulation", master of science, MIT, (1992).
- [Lem98] **K. Lemmens**, "An investigation, implementation and comparison of 3 important particle simulation techniques: PP : Particle-Particle, PM : Particle-Mesh and TC : Tree-code" , University of Technology Delft, (1998).
- [Mat00] **K. Matsuzawa, K. Uchida et A. Nishiyama**, "Monte Carlo simulation of sub-0.1 μ m devices with Schottky contact model", IEICE Trans. Elec., Vol. E83-c, N°8, pp. 1212-1217, (2000).

- [Moh11] **M. Mohapatra, A. Mumtaz, A. K. Panda**, "Performance evaluation of GaSb/AlGaAs based high electron mobility transistors", *Advances in Recent Technologies in Communication and Computing (ARTCom 2011)*, pp. 249–252, (2011).
- [Ned89] **K. Nederveen**, "Ensemble Monte Carlo simulation of electron transport in AlGaAs/GaAs heterostructures", Thèse, Eindhoven University of Technology, (1989).
- [Pen01] **G. Pennington, N. Goldsman, S. Scozzie, J. M. McGarrity**, "Investigation of temperature effects on electron transport in SiC using unique full band Monte Carlo simulation", *Semiconductor Device Research Symposium*, pp. 531-534, (2001).
- [Rom00] **V. Romano**, "Non parabolic band transport in semiconductors: closure of the production terms in the moment equations", *Continuum Mech. Thermodyn.*, Vol. 12, Is.1, 31-51, (2000).
- [Sch76] **U. Schumann et R. A. Sweet**, "Direct method for the solution of poisson's equation with Neumann boundary conditions on a staggered grid of arbitrary size", *journal of computational physics*, Vol. 20, pp. 171-182, (1976).
- [Tan06] **J.M. Tang et C. Vuik**, "Deflated iccg method solving the Poisson equation derived from 3-d multi-phase flows", *European Conference on Computational Fluid Dynamics*, (2006).
- [Tom93] **K. Tomizawa**, "Numerical simulation of submicron semiconductor devices", Norwood, MA: Artech House Inc., (1993).
- [Web01] **D. Vasileska**, "Numerical Solution of Poisson's Equation", liens: https://nanohub.org/resources/1542/download/numericalanalysis_ppt.pdf
- [Woo94] **D. L. Woolard, H. Tian, M. A. Littlejohn, K. W. Kim**, "The implementation of physical boundary conditions in the Monte Carlo simulation of electron devices" *IEEE Trans. on Comp. aided design of Integrated Cirt. and Sys.* Vol.13, Is. 10, (1994).
- [Zha13] **Y. Zhang, Y. Zhang, C. Wang, Y. Zeng**, "Transport properties in AlInSb/InAsSb heterostructures", *Journal of applied physics*, Vol. 114, Is. 24, (2013).

L'exploitation de la méthode de Monte Carlo, dans le cadre de la simulation du transport de charges dans les semiconducteurs et les dispositifs électronique, constitua une bonne démarche pour le suivi et la compréhension de la dynamique des charges (électrons). Cette méthode nous offre un outil adéquat pour surmonter, d'une part, la complexité de la résolution analytique des équations de transport (de Boltzmann et de Poisson) et d'autre part, d'évaluer d'une manière précise les phénomènes physiques (interactions) régissant le déplacement des charges. Cependant, l'implémentation de la méthode de Monte Carlo, pour la simulation du transport de charges, diffère d'une application à une autre. Cette différence se trouve au niveau du modèle de la structure de bande adopté, des phénomènes d'interactions considérées ainsi que du type des structures simulées (dans le cas de la simulation des dispositifs). Dans cette thèse, une étude du transport électronique, basée sur la méthode de Monte Carlo, dans les substrats semiconducteurs et le transistor MESFET submicronique, a été proposée. Cette étude a été effectuée suivant deux grandes parties : Partie matériaux et partie dispositif. Dans la partie matériau, un modèle trois vallées (non-paraboliques) de la bande de conduction, a été implémenté pour évaluer les caractéristiques de transport électronique dans le GaSb et dans deux polytypes différents du carbure de silicium : le 3C-SiC et le 4H-SiC. Les résultats présentés dans cette première partie sont jugés motivants en comparaison avec de nombreux travaux disponibles dans la littérature.

Conclusion Générale & Perspectives

Aussi, Ces résultats nous ont renseignés d'une manière fiable, sur la dynamique électronique et le comportement des électrons sous l'effet de forts champs électriques et fortes températures. Pour le cas du GaSb nous avons enregistré un pic de vitesse très accentué égale à $1,1 \times 10^7 \text{cm/s}$ à la température de 77°K , tandis qu'il est égale à $\sim 3 \times 10^7 \text{cm/s}$ à 300°K . De plus, ce pic diminuera, rapidement, au fur et à mesure que la température augmente. En outre, la connaissance de ce pic de vitesse est une particularité dans la détermination du comportement des dispositifs de puissance ou de radiofréquence.

Le transport électronique, en régime stationnaire et non-stationnaire (sub-picosecondes), dans le carbure de silicium a été aussi étudié. Pour ce matériau, la première constatation déduite des caractéristiques enregistrées, est qu'elles sont fortement liées au modèle de la structure de bande utilisé. Aussi, elles s'attachent beaucoup aux paramètres physiques (masses effectives, coefficients de non-parabolicité, etc.) de chacun des polytypes étudiés. En comparaison avec le polytype hexagonale 4H-SiC, un pic de vitesse plus grand a été enregistré pour le polytype cubique 3C-SiC autour d'un champ critique de l'ordre de 400KV/cm . Ce pic, obtenu à un temps moins de **0,5 pico-second**, décroît rapidement sous l'effet de l'augmentation de la température et sous fort champ électrique. A partir des caractéristiques obtenues nous avons aussi constaté que les deux polytypes étudiés, du carbure de silicium, présentent des meilleurs rendements pour les applications de puissance de hautes températures.

Conclusion Générale & Perspectives

Dans la deuxième partie de cette thèse, une étude du transport électronique dans le transistor MESEFT submicronique a été présentée. Avant la présentation des différents résultats extraits, une modélisation physique est effectuée dans le but d'évoquer les équations de transport nécessaires pour de telle étude. Les démarches adoptées pour l'implémentation de ces équations dans la simulation Monte Carlo du MESFET submicronique, sont aussi discutées. Les simulations sont effectuées sous le simulateur Monte Carlo Archimedes. Ce dernier, est un outil puissant pour la résolution parallèle, à deux dimensions, de l'équation de Boltzmann et celle de Poisson. Les résultats obtenus réassurent de plus l'efficacité de cette technique. Comme pour le cas des massifs, l'effet des hautes températures, les forts champs électriques ainsi que le dopage ont été pris en compte durant les simulations. Des caractéristiques encourageantes sont obtenues. Néanmoins restent fortement dépendantes des paramètres physiques du matériau, des conditions de polarisation et de la géométrie du dispositif. En outre, pour plus de précision et d'efficacité, la simulation Monte Carlo des dispositifs submicroniques nécessite une très bonne modélisation des conditions aux limites. Ceci signifie que la géométrie des contacts ohmiques ainsi que la répartition spatiale des charges électriques (le potentiel électrostatique) doivent être définis rigoureusement.

Conclusion Générale & Perspectives

Suite aux résultats encourageants, exposés dans cette thèse, nous ne manquons pas de signaler l'inconvénient majeur, opposant à l'amélioration de la filière du carbure de silicium et la commercialisation des dispositifs à base de ce matériau. Cet inconvénient se réside dans la qualité des substrats disponibles et le prix relativement cher du SiC monocristallin. Néanmoins les efforts de recherche n'ont pas cessés et sont toujours en mesure de surmonter ce problème par l'adaptation de nouveaux procédés technologiques de croissance.

En clôturant cette thèse, il serait toujours évident de proposer quelques perspectives et tracer quelques axes de recherches aux futurs doctorants et les admirateurs de la méthode de Monte Carlo et la modélisation des dispositifs électroniques. En premier lieu, dû au nombre important des polytypes du carbure de silicium, il soit toujours utile d'investir d'autres simulations sur les autres polytypes et d'élargir la bande d'énergie considérée. En deuxième lieu, l'application de la méthode Monte Carlo pour la simulation du transport de charges dans les SiC-MESFETs vertical fortement submicroniques est aussi intéressante. Aussi, en se basant sur les résultats présentés dans cette thèse, une autre perspective aussi intéressante consiste à effectuer une étude comparative, basée sur d'autres modèles comme celui de la dérive diffusion ou Hydrodynamique. Finalement nous espérons que ce modeste travail soit un apport de valeur aux ressources scientifiques de notre université et constituera une référence bibliographique très utile pour les futurs travaux de recherche.

1. Introduction

Pour une bonne description du comportement des électrons, par l'équation de Boltzmann, nous sommes appelés à connaître les probabilités de transition (par unité de temps) d'un état énergétique vers une autre. Donc, la formulation des interactions électroniques dans les dispositifs semiconducteurs constitue un paramètre important pour toutes études semi-classiques du transport électronique. Il existe de nombreux types d'interactions qui peuvent altérer les propriétés électroniques des porteurs de charges (électrons ou trous) au cours de leurs déplacements. Ces interactions sont divisées en deux types :

- ❖ **Interactions Élastiques** : Pour ce type d'interactions le mouvement des électrons reste cohérent, c-à-d que l'énergie des électrons est conservée tandis que leurs moments sont changés.
- ❖ **Interactions Inélastiques** : Elles ont un effet remarquable sur le comportement des électrons où les deux paramètres caractérisant les particules chargées : moment et énergie sont changés.

La longueur moyenne l_e séparant deux interactions élastiques durant une durée égale à τ_e est $l_e = \tau_e \cdot v$ avec v représente la vitesse de groupe des électrons.

Dans le cas où un modèle multi-vallées de la structure de bande est considéré, les interactions peuvent être classées selon les vallées contenant les états de transitions initiaux et finaux:

- ❖ **Les Interactions Inter-vallées** : Si les transitions sont entre des vallées différentes.
- ❖ **Les Interactions Intra-vallées** : Si les transitions sont dans la même vallée.

Ainsi, un autre regroupement des interactions est fait selon leurs sources de génération. On distingue :

- ❖ Les interactions avec les défauts de structure : comme les impuretés (neutres ou ionisées) et les alliages (dans les matériaux ternaires et quaternaires).
- ❖ Les interactions électrons-électrons
- ❖ Les interactions avec les phonons optiques (polaires et non-polaires) et les phonons acoustiques (potentiel de déformation, piézoélectrique).

2. Formulation des probabilités d'interactions

Durant la simulation du transport électronique, chaque interaction j est caractérisée par une densité de probabilité $S_j(\vec{k}, \vec{k}')$ qui ne dépend que des vecteurs d'onde \vec{k} et \vec{k}' ainsi de l'angle de déviation (après interaction).

L'intégration de la densité sur l'espace des \vec{k}' , donne la probabilité par unité de temps tel que [Bel12] :

$$P_j(\vec{k}) = \int S_j(\vec{k}, \vec{k}') \quad (\text{A.1})$$

Autrement :

$$P(K) = \frac{V}{8\pi^3} \cdot 2\pi \int_0^\pi \left[\int_0^\infty S(\vec{K}, \vec{K}') K'^2 \cdot dK' \right] \sin \theta \cdot d\theta \quad (\text{A.2})$$

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

La règle la plus utilisée pour la formulation des probabilités d'interactions est celle de Fermi-Golden. Cette dernière, en considération, prend le terme de conservation d'énergie. Dans ce qui suit, nous donnons les probabilités des principaux types d'interactions considérées dans cette thèse.

2.1. Les interactions avec les phonons

Les interactions électrons-phonons donnent naissance soit à une émission ou une absorption d'un phonon optique ou acoustique. Ces interactions sont :

- ❖ Soit électrostatiques comme le cas des phonons optiques polaires.
- ❖ Soit piézoélectrique (acoustique polaire) dans les composés semiconducteurs
- ❖ Soit le potentiel de déformation due à la variation des limites des bandes d'énergie causée par la déformation du réseau cristallin.

Du point de vue échange d'énergie, les interactions avec les phonons optiques sont de nature inélastique, tandis que les interactions avec les phonons acoustiques modifient légèrement l'énergie des électrons et sont considérés comme élastique à la température ambiante [Jac10].

2.1.1. Phonons acoustiques

On distingue deux modes de vibration des phonons acoustiques: transversal et longitudinal. Le dernier mode est le type d'interaction le plus dominant (avec les électrons) dans les semiconducteurs intrinsèques ou fortement dopés surtout à la température ambiante. Ainsi, les phonons acoustiques ont une énergie faible par rapport à celle des électrons. La variation maximale de l'énergie des électrons, après une l'interaction avec les phonons acoustiques, est directement liée à la vitesse du son dans le matériau considéré ainsi qu'à la vitesse thermique des électrons. Cette variation est exprimée dans l'équation A.3 [Man05]:

$$\Delta E \approx 4 \left(\frac{u_s}{V_{th}} \right) E_e \quad (\text{A.3})$$

Où V_s vitesse du son dans les solide (égale à $13,73 \cdot 10^3 \text{m/s}$ dans le cas du 4H-SiC), V_{th} la vitesse thermique moyenne des électrons.

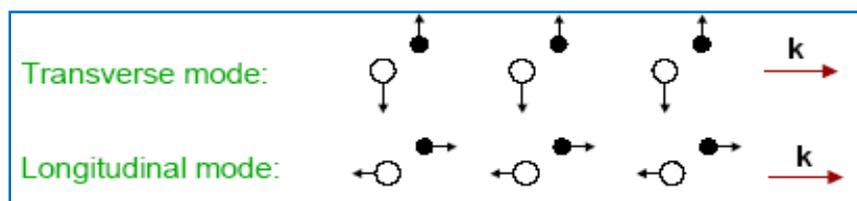


Fig. A.1 Les modes de vibration des phonons acoustiques.

2.1.1.1. Potentiel de déformation

Les vibrations du réseau cristallin, induisent un changement dans la structure de bande et donc un changement point par point du gap. Quand le cristal est déformé. Le résultat de cette déformation est appelée potentiel de déformation ou interaction acoustique non-polaire. Cette interaction reste beaucoup dominante dans les semiconducteurs intrinsèques. Les formules mathématiques du taux d'interaction ainsi que la mobilité sont donnés dans les équations A.4 et A.5 tel que :

$$\frac{1}{\tau_a} = \frac{m_n^{*3/2} k_B T E_{c1}^2 (2 E)^{1/2}}{\pi \hbar^4 c_1} \quad (\text{A.4})$$

$$\mu_a = \frac{q \langle \tau_a \rangle}{m_c^*} = \left(\frac{2 \sqrt{2\pi} q \hbar^4 c_1}{3 m_n^{*3/2} m_c^* k_B^3 E_{c1}^2} \right) T^{-3/2} \quad (\text{A.5})$$

2.1.1.2. Interactions piézoélectriques

Ce type d'interaction, souvent appelée acoustique polaire, est majoritairement présente dans les matériaux piézoélectriques (composés II-VI). Le changement de l'énergie après interaction reste faible. Le taux de ce type d'interaction est inversement proportionnel à la température et il s'exprime comme suit [Man05] :

$$\tau_{pz} = \frac{2^{3/2} \pi \hbar^2 \epsilon_0 \epsilon_s}{m^{*1/2} e^2 K^2 k_B T} E^{1/2} \quad (\text{A.6})$$

L'effet de l'interaction piézoélectrique sur la mobilité des électrons qui lui sont associée est décrit par l'équation A.7 :

$$\mu_{pz} = \frac{16 \sqrt{2 \pi} \hbar^2 \varepsilon_0 \varepsilon_s}{3 m^{*3/2} |e| K^2 (k_B T)^{1/2}} \quad (\text{A.7})$$

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

2.1.2. Les phonons optiques

Ces interactions deviennent prépondérantes dans les hautes températures et les forts champs électriques. Suivant l'ionocité du cristal, deux type de phonons optiques se distinguent : polaires et non polaires. L'interaction d'un électron avec un phonon optique non-polaire est usuellement traitée comme le cas du potentiel de déformation. L'interaction avec les phonons optiques polaires est dominante dans les cristaux ionique ou polaires comme les composés II-VI , VI-VI et III-V. Pour ces derniers, le déplacement des atomes chargés positivement et négativement donne naissance à un dipôle oscillateur. Le mode de vibration de ce dipôle est nommé phonon optique polaire. Aussi, du fait que les phonons optiques ont une énergie moyenne par rapport à celle des électrons ($\hbar\omega \approx k_B T, \text{à } T = 300K$). De même, à 300K, le taux d'interaction ne pourra pas être calculé et le processus est considéré comme inélastique.

Les interactions inter-vallées équivalentes et inter-vallée non équivalentes sont aussi traitées. Elles sont moins importantes pour les électrons attachés au minimum de la bande de conduction (vallée Γ autour de l'axe $\langle 100 \rangle$ ou vallée L autour de $\langle 111 \rangle$).

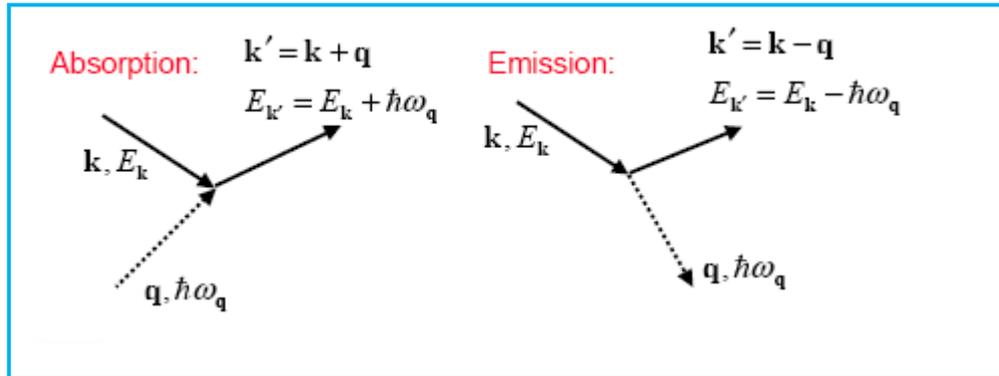


Fig. A.2. Représentation des interactions avec les phonons optiques.

Dans les semiconducteurs multi-vallées, comme le carbure de silicium, d'autres interactions comme les inter-vallées sont envisagés. Ces interactions sont souvent accompagnées par une émission ou une absorption d'un phonon longitudinal (voir figure A.2). Dans ce cas, la diffusion d'un électron est contrôlée par les phonons optiques non-polaires. Le taux de ces interactions est exprimé par :

$$\frac{1}{\tau_{oi}} = \left(\frac{m_{dn}^{*3/2}}{\tau_0} \right) W \theta_D T^{1/2} \left[\langle n_0 + 1 \rangle \left(\varepsilon_0 - \frac{\theta_D}{T} \right)^{1/2} + \langle n_0 \rangle \left(\varepsilon_0 + \frac{\theta_D}{T} \right)^{1/2} \right] \quad (\text{A.8})$$

- θ_D représente la température de Debye.
- $\langle n_0 \rangle = [\exp(\theta_D/T) - 1]^{-1}$ est une fonction approximative de la distribution des phonons.

- W : est une constante qui exprime la puissance relative au couplage électron-phonon, $\varepsilon_0 = \hbar\omega/k_B T$ est l'énergie réduite du phonon.

Cependant, dans les hautes températures, les interactions inter-vallées pourront être le processus dominant. La mobilité associée aux phonons optiques polaires est exprimée dans l'équation A.9 tel que :

$$\mu_{po} = \frac{8qa_0}{3(2\pi m \hbar \omega_l)^{1/2}} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right)^{-1} \left(\frac{m_0}{m^*} \right)^{1/2} \frac{\chi(Z_0)[\exp(Z_0) - 1]}{Z_0^{1/2}} \quad (\text{A.9})$$

ε_∞ : est la constante diélectrique en haute fréquence, $\varepsilon_s = \varepsilon_\infty \left(\frac{\omega_l}{\omega_s} \right)^2$ la

constante diélectrique en basse fréquence.

2.2. Les interactions avec les défauts

2.2.1. Impuretés

Les impuretés peuvent être soit :

- ❖ **Ionisées** : accepteurs/donneurs ionisés, impuretés substitutionnelle, etc. Elles interagissent avec les électrons sous l'effet du champ électrique intense (de Coulomb).
- ❖ **Neutres** : Elles ont un effet réduit sur les propriétés de transport électronique.

En raison de la grande masse des impuretés, ce type d'interaction est considéré comme élastique. L'effet des impuretés devient plus important aux basses températures. De plus, les impuretés sont toujours présentes dans les semiconducteurs même s'ils ne sont pas introduits autant que dopants. Actuellement, suite aux améliorations technologiques enregistrées, l'effet des impuretés a été limité de telle sorte qu'il ne soit présent que pour des températures ne dépassant pas quelques Kelvin.

2.2.1.1. Les impuretés ionisées

Ces impuretés sont un exemple classique des interactions élastiques [Li06], donc le changement de l'énergie des électrons reste négligeable. Plusieurs modèles ont été développés pour rendre compte ces interactions comme celui de **E.M. Conwell**, de **V.F. Weisskopf** ainsi que le modèle de **Brooks** et **C. Herring**. Ce dernier tient en compte les effets de charge d'espace au niveau du potentiel de Coulomb $V(r) = \frac{q}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r}$ créée par chaque impureté ionisée. Donc, il est considéré comme le modèle le plus approprié. Selon ce modèle, le taux d'interaction ainsi que la mobilité des électrons déduits de ce modèle sont donnés dans les équations ci-dessous [Man05]:

$$P_{imp} = \frac{1}{\tau_i} = \frac{e^4 N_i \ln \left[\frac{8 m^* \cdot E \epsilon \epsilon_0 k_B T}{\hbar^2 e^2 n} \right]}{16 \pi (2 m^*)^{1/2} (\epsilon \epsilon_0)^2 E^{3/2}} \quad (\text{A.10})$$

$$\mu_{imp} = \frac{e \langle \tau_i \rangle}{m^*} = \frac{64 \sqrt{\pi} (\epsilon \epsilon_0)^2 (2 k_B T)^{3/2}}{N_i e^3 (m^*)^{1/2} \ln \left[\frac{12 m^* (k_B T)^2 \epsilon \epsilon_0}{\hbar^2 e^2 n} \right]} \quad (\text{A.11})$$

Avec N : représente la densité des impuretés ionisées. n' : La densité des électrons avoisinant l'impureté ionisée.

Les équations (A.10) et (A.11) montrent que le taux d'interaction et la mobilité des électrons sont des fonctions moins sensibles à la température et à la densité n' .

2.2.1.2. Impuretés neutres

L'effet de ces impuretés a été identifié en **1956** par **Erginsoy**. Quand un électron passe à travers un atome neutre, les moments seront transférés le long du processus d'interaction où les électrons sont échangés à l'intérieur [Kun07]. Le taux d'interaction pour ce type d'impuretés est exprimé dans l'équation ci-après :

$$\frac{1}{\tau_{impneutre}} = \frac{80\pi\epsilon\epsilon_0 N_n \hbar^3}{m^{*2} e^2} \quad (\text{A.12})$$

La mobilité associée à cette interaction a pour expression:

$$\mu_{impneutre} = \frac{e \tau_{ni}}{m^*} = \frac{m^* e^3}{80 \pi .\epsilon\epsilon_0 N_n \hbar^3} \quad (\text{A.13})$$

Où N_n : représente la concentration des impuretés neutres.

2.2.2. Les alliages

Le transport électronique dans les alliages désordonnés ou partiellement désordonnés reste difficile à traité. L'une des démarches utilisée consiste à inclure l'effet des interactions alliages dans le calcul.

L'approximation la plus fréquemment adoptée pour décrire les interactions avec les alliages est celle donnée en 1931 par **Nordheim** [Vau12], [Jac10], [Nor31], connue sous le nom «**Approximation du cristal virtuel**». Basé sur cette approximation, **Flinn** [Fli56] développa un modèle mathématique adéquat pour l'analyse de l'effet de ces interactions. **Asch** et **Hall** [Asc63] ont aussi développés une autre théorie pour la modélisation des interactions d'alliages dédiée spécifiquement aux alliages métalliques binaires. Dans le cas des alliages semiconducteurs, le modèle le plus adéquat et celui de proposé par **Harrison** et **Hauser** [Har76]. Ce modèle été fondamentalement basé sur les travaux de **Flinn**, **Asch** et **Hall**. Il été destiné pour les alliages III-V. Le taux d'interaction d'alliages est exprimé par [Bel01]:

$$\tau_{alliage} = \frac{3\pi^3}{8\hbar} V_0 U_{alliage}^2 x(1-x)N(E) \quad (\text{A.14})$$

V_0 : représente le volume de la cellule primitive dans le réseau direct, $U_{alliage}^2$ c'est le potentiel d'alliage aléatoire, x c'est la fraction molaire dans l'alliage, $N(E)$ représente la densité d'état.

De même, le potentiel d'alliage peut être obtenu par différentes méthodes d'interprétations. L'une de ces méthodes est celle évoquée par **Littlejohn et al.** Elle est basée sur le principe de décalage dans la bande de conduction. Aussi, la variation (dans l'espace) de la composition x de l'alliage produira une perturbation, altérant par la suite les transitions entre les états de Bloch.

$$\frac{1}{\tau_\alpha(\epsilon)} = x(1-x) \frac{(2m_a^*)^{3/2} a_0^3}{16\pi\hbar^3} \sum_\beta |\langle V_{\alpha\beta} \rangle|^2 (\epsilon - \epsilon_\beta)^{1/2} \quad (\text{A.15})$$

Références

- [Asc63] **A. E. Asch et G. L. Hall**, "Quantum Theory of the Residual Electrical Resistivity of Disordered Alloys", Phys. Rev. Vol. 132, pp.1047, (1963).
- [Bel01] **E. Bellotti et al.** " Simulation of Carrier Transport in Wide Band Gap Semiconductors " International Journal of High Speed Electronics and Systems, Vol. 11, Is. 2, pp. 525, (2001).
- [Bel09] **Y. Belhadji**, "Simulation du transport électronique dans les composants microélectroniques : Application au carbure de silicium 3C-SiC", Magister, Université Abou bakr Belkaïd-Tlemcen, (2009).
- [Bel12] **Y. Belhadji et B. Bouazza**, "Steady state and transient study of the electron transport in N-type GaSb using three valley Monte Carlo model", IJCSI, Vol. 9, N° 1, pp. 160-164, (2012).
- [Fli56] **P. A. Flinn**, "Electronic Theory of Local Order", Physical Review B, Vol. 104, pp.350-356, (1956).
- [Har76] **J. W. Harrison et J. R. Hauser**, "Alloy scattering in ternary III-V compound", Phys. Rev. B, Vol.13, pp.5347, (1976).
- [Jac10] **C. Jacoboni**, "Theory of Electron Transport in Semiconductors", Springer-Verlag, (2010).
- [Kun07] **J. Kundu, C.K. Sarkar, P.S. Mallick**, "Calculation of electron mobility and effect of dislocation scattering in GaN", Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics, Vol.10, N°1, pp.1-3, (2007).
- [Li06] **S. S. Li**, "Semiconductor Physical Electronics", Springer, (2006).
- [Lit78] **M. A. Littlejohn, J. R. Hauser, T. H. Glisson, D. K. Ferry, J. W. Harrison**, "Alloy scattering and high field transport in ternary and quaternary III-V semiconductors (FET model)", Solid-State Electronics, Vol. 21, pp.107, (1978).
- [Man05] **O. Manasreh**, "Semiconductor heterojunctions and nanostructures", McGraw-Hill Companies, (2005).
- [Nor31] **L. Nordheim**, "Zur Elektronentheorie der Metalle. I", Annalen der Physik, Vol. 9, pp. 607-640, (1931).
- [Vau12] **M. P. Vaughan, F. Murphy-Armando, S. Fahy**, "First-principles investigation of the alloy scattering potential in dilute $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ ", Physical Review B, Vol. 85, pp.1-10, (2012).

Ensemble Monte Carlo analysis of subpicosecond transient electron transport in cubic and hexagonal silicon carbide for high power SiC-MESFET devices

Youcef Belhadji* and Benyounes Bouazza†

*Research Unit of Materials and Renewable Energies, Faculty of Science,
Abou Bekr Belkaid University, PB 119, Tlemcen 13000, Algeria*

**belyou_mel@yahoo.fr*

†y_belhadji@mail.univ-tlemcen.dz

Fateh Moulahcene

*Advanced Electronics Laboratory (LEA), University of Batna,
Avenue Chahid Boukhrouf, Batna 05000, Algeria*

Nordine Massoum

*Research Unit of Materials and Renewable Energies, Faculty of Science,
Abou Bekr Belkaid University, PB 119, Tlemcen 13000, Algeria*

Received 18 January 2015

Revised 23 March 2015

Accepted 25 March 2015

Published 7 May 2015

In a comparative framework, an ensemble Monte Carlo was used to elaborate the electron transport characteristics in two different silicon carbide (SiC) polytypes 3C-SiC and 4H-SiC. The simulation was performed using three-valley band structure model. These valleys are spherical and nonparabolic. The aim of this work is to forward the trajectory of 20,000 electrons under high-field (from 50 kV to 600 kV) and high-temperature (from 200 K to 700 K). We note that this model has already been used in other studies of many Zincblende or Wurtzite semiconductors. The obtained results, compared with results found in many previous studies, show a notable drift velocity overshoot. This last appears in subpicoseconds transient regime and this overshoot is directly attached to the applied electric field and lattice temperature.

Keywords: SiC polytypes; scatterings; Boltzmann equation; electronic transport; ensemble Monte Carlo.

PACS numbers: 81.05.Hd, 71.15.Ap, 63.20.kd, 72.10.Di, 05.10.Ln

*Corresponding author.

1. Introduction

Silicon carbide (SiC) was accidentally discovered in 1890 by Acheson, an assistant to Edison, when he was running an experiment on the synthesis of diamonds.¹ After this discovery, many scientists are oriented to elaborate and to study their properties. The polymorphism is the most excellent and remarkable property of this material. It is the phenomenon of forming different crystal structures by stacking identical layers in different sequences.² There are approximately 200 polytypes for SiC in literature, very few of them are considered to be thermodynamically stable.⁴ The most known and used in electronic applications are cubic (β -SiC) and hexagonal (2H-SiC, 4H-SiC and 6H-SiC) polytypes or α -SiC.⁵ In all structures, every atom is tetrahedrally surrounded by four atoms of the other species.⁶ Also, SiC is only existing in the condensed state of compounds in silicon-carbon system.⁷ Actually, SiC became a promoter candidate for high power, high temperature and high frequency devices like power metal-oxide-semiconductor field-effect transistor (MOSFET) and metal-semiconductor field-effect transistor (MESFET), sensors and Schottky diodes, operating up to the submicron level.⁸ The first SiC Schottky barrier diodes (SBDs) were released as commercial products in 2001.² The use of SiC in new generations of advanced devices is driven by their exceptional physicochemical characteristics and electronic transport properties such as a variety of bandgaps ($1.2 \text{ eV} < E_g < 3.3 \text{ eV}$), high chemical stability, breakdown fields eight to ten times higher than for silicon,⁹ high saturation velocity, low leakage current¹⁰ and exceptional thermal conductivity (much stronger than those of metals).^{3,11} Furthermore, SiC is thermally so stable that doping impurities cannot be diffused at any reasonable temperature.⁹ So, to improve the performance of SiC devices; it is advisable to properly model the physical phenomena in managing the material under different conditions such as high field and high temperature behavior. These phenomena, are already studied and referred in many theoretical and experimental works and they show the effectiveness of SiC-based devices to operate in severe environment.^{3,11} The approach presented in this work, constitutes an attempt that reposes on an ensemble Monte Carlo. It is used to follow the electron motion in nonparabolic spherical band structure. We applied this method for two polytypes: 3C-SiC and 4H-SiC. The simulation was made for high field ranging from 50 kV to 600 kV and high temperature ranging between 200 K and 700 K. Obtained results are compared to large references found in literature.

2. Electronic Transport Calculation Model

The Boltzmann equations give a detailed description and real characterization of charges carrier state modification caused by various physical effects. This equation constitutes a basis for all scientists who wish to study the electronic transport in semiconductor material. There are some methods used to solve it, like drift diffusion method (DDM), hydrodynamic balance equation method (HDM)¹² and Monte Carlo method (MCM).

MCM constitutes a powerful way to solve, numerically, Boltzmann equation within the momentum and energy relaxation. It reproduces, clearly and efficaciously, the most important electronic transport characteristics like energy drift velocity and charge scatterings. The MCM principle is evoked by Fawcett *et al.*¹³ Many models were elaborated for analysis of electron transport in SiC polytypes.^{8,10,11,14,17} The differences between all models reside on the band structure model used in simulation: Full band or just some valleys. Nevertheless, the numerical difficulties involved in MCM is in evaluation of the quantized levels, density of states (DOS) and scattering rates. All these parameters make the utilization of a full band structure model an impossible task.¹⁰ In case of 3C-SiC and 4H-SiC, it always remains very difficult to use a multiband analytical MCM. However, for hexagonal crystal symmetry, the complication is on the complex band structure with a large number of bands and many regions in the Brillouin zone and smaller bands energy separation.¹⁴ Other important factors that define the correctness of results are physical parameters which are sometimes difficult to obtain. In the present work, we adopted the ensemble MCM to simulate, semiclassically, the transient motion of 20,000 electrons. This motion is forwarded through (and between) three nonparabolic spherical valleys Γ , L and X [Eq. (1)]. Γ represents the energy reference valley. L valley has a lower minimum related to X valley.

$$E(k)[1 + \alpha E(K)] = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{m_{\perp}^*} + \frac{k_z^2}{m_{\parallel}^*} \right), \quad (1)$$

where α is the nonparabolicity factor, $\alpha = 0.322 \text{ eV}^{-1}$ and $\alpha = 0.4 \text{ eV}^{-1}$ for 3C-SiC and 4H-SiC, respectively. m_{\perp}^* and m_{\parallel}^* are the transversal and longitudinal effective masses respectively. Thus, the model was previously applied in various studies of electron transport for some semiconductor materials, in a wish to produce an excellent performance.¹⁹⁻²¹ Simulation is made considering the deformation potential under the effect of some elastic and inelastic scatterings. The scatterings taken in to consideration are: Ionized impurities, polar optical scattering, acoustic scattering, inter- and intra-valley phonons scattering and Coulomb scattering. The mathematical formulas of these scattering are evoked in detail in Ref. 16. The doping concentrations in each considered valley is based on the formula below¹¹:

$$n_{\Gamma} = 2 \left(\frac{2\pi \cdot m_{\Gamma}^{\Gamma} kT}{\hbar^2} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{E_F}{kT} \right), \quad (2)$$

$$\frac{n_L}{n_{\Gamma}} = \left(\frac{m_e^L}{m_{\Gamma}^L} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{\Delta E_{\Gamma L}}{kT} \right), \quad (3)$$

$$\frac{n_X}{n_{\Gamma}} = \left(\frac{m_e^X}{m_{\Gamma}^X} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{\Delta E_{\Gamma X}}{kT} \right), \quad (4)$$

where $E_{\Gamma L}$ and $E_{\Gamma X}$ give the separation energies at inter-valley $\Gamma - L$ and $\Gamma - X$, respectively. m_e^Γ , m_e^L and m_e^X are the effective masses in Γ , L and X valleys, respectively.

In general terms, the model is based on the process of drawing lots from the probability laws associated with the electrons undergoing scatterings during their movements within the crystal lattice.⁹ Also, each simulated electron “ p ” (at each time step), has an initial position “ $r_p(t)$ ” in the wave vector plane “ $k_P(t)$ ” and an energy $E(k_p)$. Then, to establish the time distribution, a fictitious scattering based on “self scattering process” is introduced and a free flight (no scattering) with constant period ΔT was performed. This period represents the average time that separates two consecutive scatterings.

Each scattering process is characterized by a probability $\lambda(k)$ and a density of probability $S(k, k')$ [Eq. (5)]. This density is calculated according to the Fermi’s golden rule. It defines, the probability for which an electron will pass from an initial K state to another K' state.

$$\lambda(K) = \frac{V}{8\pi^3} \cdot 2\pi \int_0^\pi \left[\int_0^\infty S(\mathbf{K}, \mathbf{K}') \cdot K'^2 \cdot dK' \right] \sin \beta \cdot d\beta, \quad (5)$$

where β represents the angle of deviation when the wave vector changes its direction.

When a scattering takes place, we put it at $t + \Delta T$ and subsequently we define its nature.¹⁹

$$\begin{cases} k'_p(t + \Delta t), \\ E'_p(t + \Delta t) = E(k'_p(t + \Delta t)) \\ r'_p(t + \Delta t). \end{cases} \quad (6)$$

The scattering will change, accordingly, the electron energy and wave vector. During simulation, the electrons motion in the conduction band follows the applied electric field, lattice temperature and scatterings mechanism. The dependence of the bandgap width as a function of the lattice temperature is expressed in equation^{22,23}:

$$E_g(T) = E_0 - \alpha T^2(T + \beta), \quad (7)$$

where α and β are fitting parameters characteristics of a given material (see Table 1).

3. Results and Discussion

High field and high temperature subpicosecond transient electron transport characteristics of 3C-SiC and 4H-SiC polytypes will be presented in this section. Caetano

Table 1. Fitting parameters for 3C-SiC and 4H-SiC.

Polytype/parameter	α	β
3C-SiC	6.0×10^{-4}	1200
4H-SiC	6.5×10^{-4}	1300

*et al.*⁸ were the first to investigate the ultrafast high field transient electron transport characteristics of 3C-SiC using parabolic and nonparabolic band schemes. Subpicosecond behavior was already studied by Bezzerà *et al.*¹⁵ The obtained results show that electron drift velocities, in both polytypes, exhibit a gentle peak. Using different band structure models, the electron transport in 4H-SiC was also studied by many authors. Nilsson *et al.*¹⁶ used a two-band model with multiple minima to simulate the steady-state behavior. As already described in the previous section, our purpose is to use a three-valley model. This model was recently adopted by Arabshahi²² to elaborate the transport characteristics in both semiconductor materials and devices.

At first, we discuss the evolution of two most important scatterings versus lattice energy in each considered valley, as shown in the Figs. 1 and 2. It is remarkable that optical polar scattering manifests strongly than acoustic scattering in 3C-SiC as in 4H-SiC. Also, because of the low electron effective mass in the Γ valley, these scatterings predominate in this valley and become greater when temperature and electric field increase.

The effect of the strength of applied electric field, on the drift velocity evolution, is shown in Fig. 2. Simulations are performed between 50 kV and 600 kV at ambient temperature. We note a notable electron drift velocity peak that occurs in strong fields. However, under the strong fields, some electron masses are literally propelled towards high energies where they acquire high velocity and it becomes possible to them to transfer towards high valleys. Therefore, because of the value of the transfer probability (which indeed limits, to each step, the number of transferred electrons) a fraction of light electrons remains in valley. They are quickly carried at increasingly high velocity. Then, for an applied field of 600 kV this peak is equal to 3.1×10^7 cm/s for 3C-SiC as what is 2.3×10^7 cm/s for 4H-

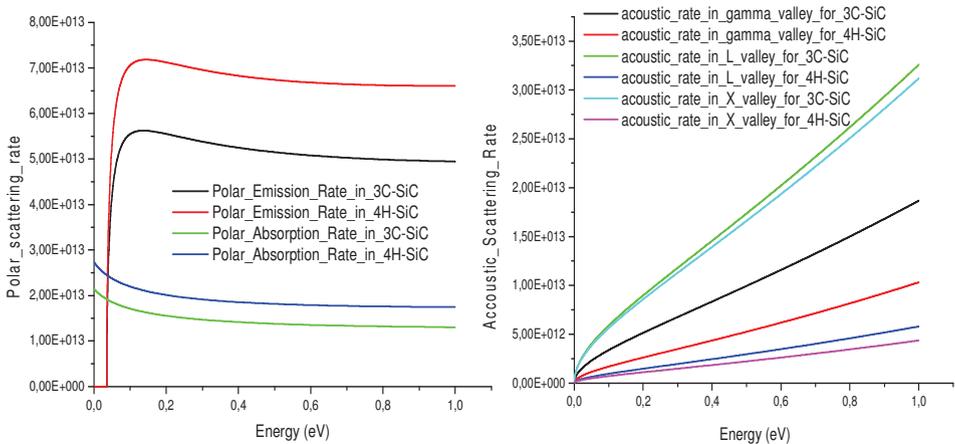


Fig. 1. (Color online) Acoustic and polar scattering rates versus energy.

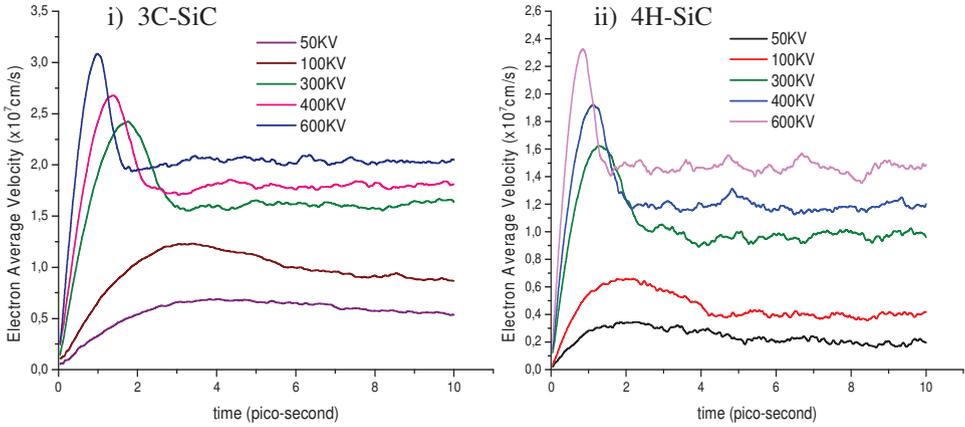


Fig. 2. (Color online) Average velocity at ambient temperature for different values of the applied electrical field.

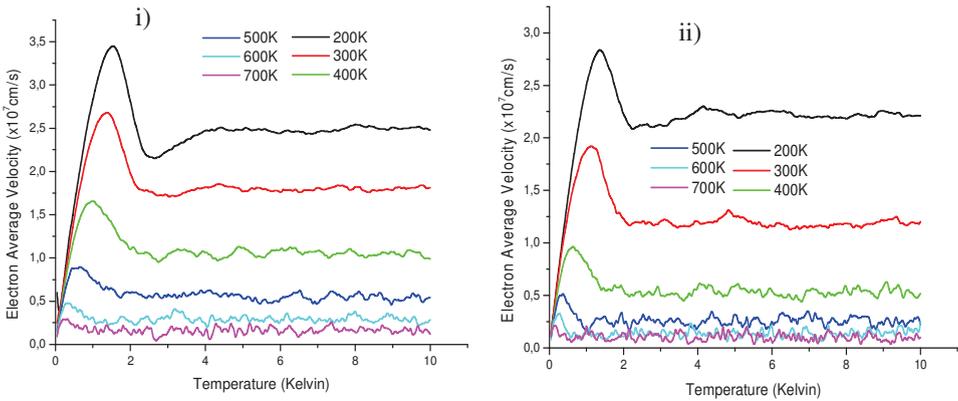


Fig. 3. (Color online) Transient electrons drift velocity versus temperatures.

SiC. Also, this peak appears for less than 0.5 picoseconds and is much greater in 3C-SiC than in 4H-SiC. Figures 3 and 4 display the temperature effect on electron drift velocity. The results are obtained for temperature varying from 200 K (top) to 700 K (bottom) under an applied field of 400 kV. When the temperature increases we note that the peak of the velocity is decreased. This decrease was already explained by Zhang *et al.*¹⁷ and Bezzera *et al.*¹⁵ This fall is effectively due to the effect of acoustic scattering that becomes important as the temperature increases. Thus, when temperature increases, it will induce more vibration in more lattice vibrations, that support thereafter more inter- and intra-valley scatterings. Also, polar optical scattering becomes dominant among all elastic scatterings in both materials. In Fig. 4, we show the evolution of electron drift velocity peak versus temperature (for 3C-SiC), under an applied field of 1 MV.

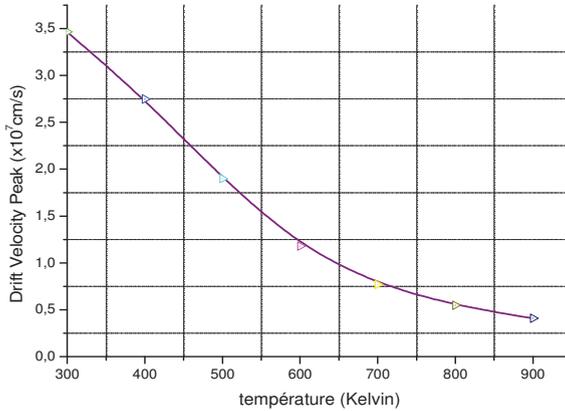


Fig. 4. Drift velocity peak versus temperature.

We note that the peak decreases quickly when temperature increases. More energy relaxation becomes effective as the distribution function and the drift velocity decrease.

4. Summary

The subpicosecond transient electron transport characteristics in two SiC polytypes was evoked in this work. We note that the obtained results are directly attached to the band structure model and physical parameters used in simulation. In the present work, a three-valley model was used to elaborate high field and high temperature behavior. The effect of some scatterings on the transport characteristics was also studied. The maximum electron drift velocity peak was registered at 0.5 ps for both polytypes and is more important in 3C-SiC than in 4H-SiC. This peak decreases when the applied electric field or lattice temperature increases. Then, because of its good electron transport characteristics, 3C-SiC is considered as an excellent candidate for high power MESFET applications.

References

1. A. H. Rashed, *Properties and Characteristics of Silicon Carbide* (Poco Graphite, Inc., 2002).
2. G. C. Trigunayat and G. K. Chadha, *Phys. Status Solidi A* **4**, 942 (1971).
3. L. Tirino, Transport properties of wide bandgap semiconductors, Ph.D. thesis, Georgia institute of technology (2004).
4. V. A. Izhevskiy *et al.*, *Ceramica* **46**, 297 (2000).
5. A. R. Verma and P. Krishna, *Polymorphism and Polytypism in Crystals* (Wiley, New York, 1966).
6. L. Tirino, Crystal lattice dynamics of various silicon-carbide polytypes, in *Proc. SPIE, Intl. Conference on Solid State Crystals*, Vol. 4412 (2001), p. 2000.
7. I. V. Derevyanko and O. I. Polyakov, *Metall. Min. Ind.* **4**, 14 (2012).

8. E. W. S. Caetano *et al.*, *Solid State Commun.* **113**, 539 (2000).
9. M. Vashishath and A. K. Chatterjee, *Maej. Int. J. Sci. Technol.* **2**, 444 (2008).
10. F. Gamiz, J. B. Roldan and J. A. Lopez-Villanueva, *J. Appl. Phys.* **81**, 6857 (1997).
11. E. F. Bezerra *et al.*, *Semicond. Sci. Technol.* **14**, 1007 (1999).
12. X. M. Weng and H. L. Cui, *Phys. Status Solidi B* **201**, 161 (1997).
13. W. Fawcett, A. D. Boardman and S. J. Swain, *J. Phys. Chem. Solids* **31** 1963 (1970).
14. M. Hjelm1 and H.-E. Nilsson, *Phys. Scr.* **T114**, 61 (2004).
15. E. F. Bezerra, E. W. S. Caetano and V. N. Freire, *Brazi. J. Phys.* **29**, 785 (1999).
16. H.-E. Nilsson, U. Sannemo and C. S. Pateresson, *J. Appl. Phys.* **80**, 3365 (1996).
17. Y. Zhang and Y. Zhang, High field and high temperature transport in N-type 3C-SiC, microelectronic institute, Xidian University, unpublished.
18. E. F. Bezzera *et al.*, *Brazi. J. Phys.* **29**, 785 (1999).
19. Y. Belhadji and B. Bouazza, *Int. J. Comput. Sci. Issues* **9**, 160 (2012).
20. C. Sayah *et al.*, *Afrique Sci.* **04**, 186 (2008).
21. N. Massoum *et al.*, *Int. Sch. Sci. Res. Innov.* **6**, 1132 (2012).
22. S. Golafröz and H. Arabshahi, *Int. J. Phy. Sci.* **5**, 690 (2010).
23. K. P. O'Donnell and X. Chen, *Appl. Phys. Lett.* **58**, 2924 (1991).

Steady State and Transient Study of The Electron Transport In N-Type GaSb Using Three Valley Monte Carlo Model

Youcef Belhadji¹, Benyounes Bouazza²

¹Unit of research of materials and renewable energies,
faculty of science, Abou bekr Belkaid University,
PB 119 Tlemcen 13000, Algeria.

²Unit of research of materials and renewable energies,
faculty of science, Abou bekr Belkaid University,
PB 119 Tlemcen 13000, Algeria.

Abstract

In this work, an investigation of the steady state and transient electron transport, at high electric field and high temperature, in n-type GaSb material was presented. We applied a Monte Carlo model considering the three valleys of the conduction band (Γ , L , X), isotropic and non-parabolic centered on the important symmetry point of the first Brillouin zone. This model provides a detailed description of the electronic dynamic and the electrons behavior at high electrical fields and high temperatures in these materials in each considered valleys. The calculation is made for different values of applied electrical field ranging from 50 to 600KV at different values of temperature. The scatterings rates taken into consideration are coulomb scattering acoustical and optical scattering, intra and inter-valleys scattering.

Keywords: Gallium Antimonide, Electron Transport, Band Structure, Monte Carlo Method, Polar Scattering.

1. Introduction

Over the last several years, the III-V binary compounds started showing considerable interest towards the study and use in microelectronic manufacturing [8, 19]. The Gallium Antimonide (GaSb) is one of these materials, with a direct bandgap that can be grown with high purity. The III-V ternaries and quaternaries (AlGaIn) (AsSb) lattice matched to GaSb seem to be the obvious choice and have turned out to be promising candidates for high speed electronic and long wavelength photonic devices [18]. GaSb based structures are promising candidates for a variety of military and civil applications, notably for laser diodes with low threshold voltage, Photo-detectors, high frequency devices, and a promising material for optoelectronic semiconductor devices in the near infrared [4].

Because it's narrow bandgap (0.7eV), the GaSb-based structures are of great interest for application in mechanically stacked tandem solar cell, in thermophotovoltaic [1] and in rechargeable lithium batteries [15]. As the unintentionally doped GaSb is invariably p-type in nature [14]. In our work we choose to study the n-type GaSb substrate. Recent investigations of the electron transport in the n-type GaSb are proposed in literature [4, 5, 16, 14]. In this work we investigate the steady state and transient electron transport properties, at high field and high temperature. It's known that the electron transport at high fields and high temperatures has reached an important stage in the last years and is dominated by the complex conduction-band structure well above the lowest band edge [8]. For the n-type GaSb the transport properties are more complicated due to the contributions from Γ , L and X conduction bands [18]. However, the electronic transport and phonons scattering is always described by models based on the resolution of the Boltzmann transport equation (BTE) who characterizes the modification of the function distribution of particles, caused by various actions, in space and time. The most used models are: the drift diffusion models, Hydro-dynamical models and Monte Carlo Models. This last is computationally intensive in fact that we can simulate the trajectory of a large number of electrons in physical and momentum space. Nowadays the microscopic transport model based on the Monte Carlo method appears to be adequate for studying of electronic transports characteristic in bulk and semiconductor devices [20]. In what follows, we give, in section 2, a detailed description of our MC code which uses analytic descriptions for both the electron bands and the phonon dispersion, and the results of transient and steady-state transport simulations are discussed in the last section.

2. Monte Carlo Model Description

Including the charges transport in semiconductors the Monte Carlo method is a statistical method, as a popular and effective mathematical tool for the study and analysis of the physical phenomena. This method was first applied to the study of transport by Kurosawa in 1966 [10] and is widely used since 1981 [11, 12]. The Monte Carlo method provides an additional advantage in which can be used as a theoretical laboratory in that parameters can be varied at will and their effects on observables assessed [17].

The principle of the method is to follow over time one or more electrons in real space and reciprocal space wave vector k . After the identification of symmetry L valleys which have minimum related lower to X valleys [11], this model has been used by many authors [6,8] and more recently by H. Arabshahi [16] in the studies of the electron transport in GaSb and other materials[17]. Our model is developed considering the deformation potential of each considered valley, the effective masses, the dielectrics constant, the energy gap structures, and the main scattering mechanisms in details [3]. In general terms, the model is based on a process of drawing lots from the laws of probability associated with the electrons undergoing scatterings during their movements within the crystal lattice. The number of electrons simulated is 20000 electrons subjected to a varying field, at different temperature. Mainly, the simulation is done using the following steps [9, 7]: for each simulated electron "p" we associate an initial position "r", and an initial wave vector k , and using the method "individuals-dispersing" or "self-scattering", we introduce a fictitious scattering which aims to establish a time distribution.

$$\vec{K}_p(t), \vec{r}_p(t), \vec{E}_p(t) = \vec{E}(\vec{K}_p) \quad (1)$$

We performing free flight (no scattering) time period Δt constant, and low before the average time between two consecutive scatterings, such as:

$$\begin{cases} \vec{K}_p(t + \Delta t) = \vec{K}_p(t) + \frac{e\vec{E}}{\eta} \\ \vec{E}_p(t + \Delta t) = \vec{E}_p(\vec{K}_p(t + \Delta t)) \\ \vec{r}_p(t + \Delta t) = \int v_p(t) dt \end{cases} \quad (2)$$

During a free flight the electron is subject only to the electric field E , which changes the wave vector k according to the relationship [21]:

$$\frac{\partial \vec{K}}{\partial t} = \frac{q\vec{E}}{\hbar} \quad (3)$$

The integration of this equation, give the time evolution of the wave vector, and the knowledge of the band structure form $\varepsilon(\vec{K})$, permit to deduce the carrier's energy such as:

$$\varepsilon(1 + \alpha_i \varepsilon_i) = \gamma(k) = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m_i^*} \quad (4)$$

α_i denote the non-parabolicity coefficient of the valley "i".

m_i^* is the relative effective masse in bottom of the valley.

The density of state, by volume unity, associated to this model has the following form:

$$N(\varepsilon) = \frac{(2m_i^*)^{\frac{3}{2}} \cdot \sqrt{\varepsilon(1 + \alpha_i \varepsilon)}}{4\pi^2 \hbar^3} (1 + 2 \cdot \alpha_i \varepsilon) \quad (5)$$

The expressions of the energy and the density of state permits the formulation of the scattering probability that directly dependant to the energy. During the simulation, when scattering occurs, we place at time $t + \Delta t$, and we determine subsequently, its nature by lot, and we modify accordingly the energy and electron wave vector. Each process of scattering characterized by a density of probability $S(k, k')$ characterizing the probability, for which an electron will pass from a state of energy K to another state K' [6].

$$\lambda_j(\vec{K}) = \int_{\text{over all possible states } K'} S_j(\vec{K}, \vec{K}') \quad (6)$$

$$\lambda(K) = \frac{V}{8\pi^3} \cdot 2\pi \int_0^\pi \int_0^\infty S(\vec{K}, \vec{K}') K'^2 \cdot dK' \int \sin \beta \cdot d\beta \quad (7)$$

$\frac{V}{8\pi^3}$ denote the density of states in momentum space.

The factor 2π reflects the symmetry of revolution around all possible states. β represent the deviation angle. In Monte Carlo studies, the obtained results are strongly related to many physical parameters characterizing studied materials, which are sometimes badly known.

Therefore, the treatment of different information obtained, their analysis as function of the material parameters entered in the simulator, and compared to available experimental results, permit a real knowledge of physical effects and their consequences that occurs in the material. The basic and band structure parameters of GaSb material used in our simulation are shown in table1.

Table 1: Basic parameters of GaSb material [16, 18, 22]

Parameters	Values
Relative mass for gamma-valley	0.039
Relative mass for the L-valley	0.22
Relative mass for the X-valley	0.52
High-frequency permittivity	14.2
Low-frequency permittivity	15.5
Energies separation between gamma and L valley	0.04
$\Delta_{\Gamma-L}$ [eV]	
Energies separation between gamma and L valley	0.33
$\Delta_{\Gamma-X}$ [eV]	
Crystal density[g/cm ³]	5.613
Sound velocity [cm/s]	6070
Phonon energy (mev)	29

3. Results and Discussions

The Monte Carlo model adopted in this work is used for calculating and retrieval features of electronic transport in the n-type GaSb in the transitional regime. Interestingly, before describing the results and interpret them, establish a function of electric field and the valley occupied a hierarchy between the different scatterings experienced by the user. The results achieved by this model are given in the figures below. In ‘ Γ ’ Valley, if the electron energy is very weak, then the scatterings predominate with a fairly low probability. According to Figure 1, the predominant scatterings for electrons in the valley X and L are those with polar optical phonons, with low wave vector. These scatterings are accompanied by an absorption or emission of a phonon. In this case the electron energy varies by an amount equal to the phonon energy $\hbar\omega$.

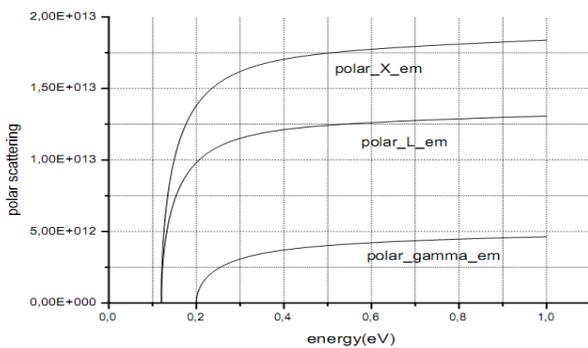


Fig. 1 Polar emission scattering rate

When the electron energy is sufficient, the emission of a phonon is a much more likely that absorption. The beginning of the phonon emission is easily identified in the curve of the valley from 40 mev. Also, the scatterings probabilities are greater in emission than that for absorption, and their value increases significantly when the electron energy increases.

Because of the dispersion relation of phonons is not constant; in this case the scatterings rate remains more complicated to calculate, and they occur when the ions through the crystal vibrate in the same direction.

According to Figure 2, due to the high value of effective mass, these scatterings are important in the X valley and increase more and more as energy increases. For high enough fields, the acoustic scatterings become dominant and subsequently the electron energy will be important. But as soon as the electron acquired energy greater than the energy separation $\Delta_{\Gamma L}$ and $\Delta_{\Gamma X}$ the transfer to the L and X valley become possible.

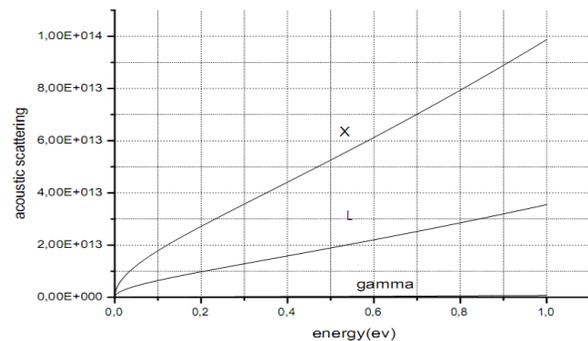


Fig. 2 Acoustic scattering rate .

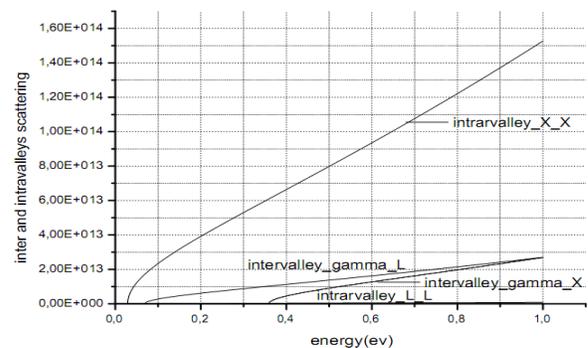


Fig. 3Piezoelectric inter and intra-valley scattering rate

Thus, when energy increases, we can see the beginning of the other type of scattering inter and intra- valley (figure 3). We can say that from energy for which transfers to the L and X valleys are possible, these processes are predominant. Piezoelectric interaction types are resilient and they are important in low field especially after the first transfers to valley level. Its main effect is decrease the value of mobility at low field. For acoustic interactions are the most favored among the elastic scatterings, they are mainly caused by the electron doping effects.

The figure below give the electronic population as a function of time in each considered valley gamma, X and L for an applied electric field of 400KV/cm. This result shows that the inclusion of the satellite valleys in the simulation is very important [16]. When the applied field is significant and exceeds the threshold value, the intervalley scattering becomes important into the satellite valleys L and X. This can be explained by the fact that electrons closed to the valley minimum have small kinetic energies, then more scattered. Thus, due to the combined effect of a lower gamma effective mass (0.039), lower separation energy ($\Delta_{\Gamma-L}$ and $\Delta_{\Gamma-X}$), and the lightly lowers phonon scattering rate within the central valley gamma, the intervalley scattering is substantially larger in GaSb over the range of applied electric fields.

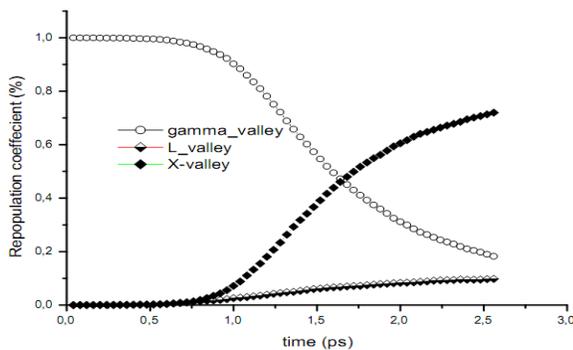


Fig. 4 The electronic population of the valleys depending on the time

The evolution of the electron drifts velocity as a function of field at room temperature was studied (see figure 5). There is a pronounced peak drift velocity located to 25×10^6 cm/s that occurs at a significantly lower electric field [16]. This result is the same obtained by H. Arabshahi [16]. In Central Valley Γ , the electrons have small effective masses ($0.039 m_0$), as soon as one applies a lower energy than the phonon scatterings there are only at the Γ valley.

By increasing the applied field, speed increases and reaches its maximum value near the threshold field (~ 1 KV/cm), at which time the electron energy will be higher than the phonon, we have in this case a transition to the holder's side valleys L and X. When increasing the electric field, the speed decreases because the electrons are heavier side valleys. The interactions involved in this case the interactions are polar optical, intra and intervalley interactions.

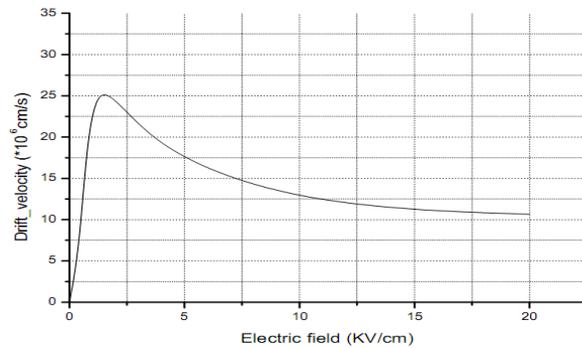


Fig. 5 Electron drifts velocity in GaSb bulk

When the electrons are subjected to fields largely varying in time (non-stationary mode), a phenomenon of overshoot velocity appears. This phenomenon was often studied by many authors, which did not fail to underline the practical interest of this phenomenon, in particular on the level of the submicronic components. Figure 6 give the look of the average electrons velocity. The calculation is made for electric fields ranging from 50 to 600KV/cm. We note a notable maximum velocity for the strong fields. Due to the low effective mass in valley, this maximum is important at high field (9.5×10^7 cm/s for a value of 600KV/cm of the electric field and a donor concentration of $8 \cdot 10^{17}$ cm⁻³). The maximum velocity is situated between 0.5 and 4 ps. More energy relaxation becomes effective as the distribution function and the drift velocity decreases.

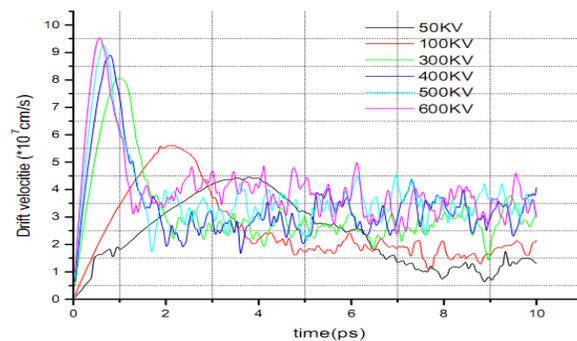


Fig. 6 Electron drifts velocity in GaSb bulk at 300K for different value of the applied electrical field

The temperature effect on the electrons velocity is also studied. The relating curves to drifts velocity at different values of temperature, for an electric field of 400KV/cm are presented.

When the temperature increases the peak of velocity decreased. This last is due to the effect of acoustic scattering that becomes important as temperature increases and to the increase in the lattice vibrations (result of the increase in the temperature) supporting thereafter the transitions inter-valley and intra-valleys in another side. Nevertheless, the electron saturation velocity is significant in the GaSb what explains the increasing interest of this material within the industrial framework. Thereafter, polar optical interactions become dominant among all elastic scatterings.

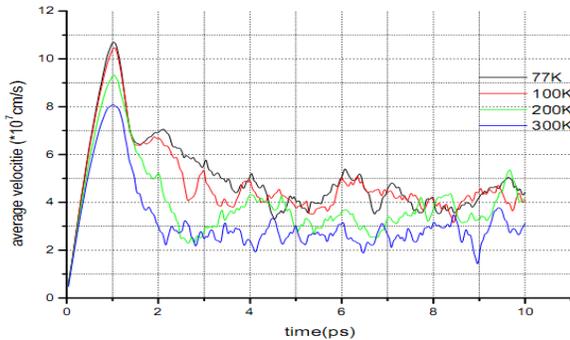


Fig. 7 Electron drifts velocity in GaSb bulk at different values of the temperature for an applied electrical field of 300KV

4. Conclusion

The electron transport in the n-type GaSb was studied. We adapted the Monte Carlo model written in FORTRAN, which is accurate, reliable and sometimes even simpler than the conventional numerical techniques. The transport characteristics and properties of GaSb obtained by this model, are satisfactory compared to other calculations in literature, and inform us about electronic dynamics as well as the behavior electric high fields and high temperatures in this material. The obtained results show that GaSb have a peak velocity little weak compared to other material. Therefore, we note an important overshoot velocity at low temperature ($\sim 11 \cdot 10^7$ cm/s at 77K). The overshoot velocity phenomenon is major, particularly, in the determination of executions in the frequency and power components made from the material studied. However, analysis of results as the drift velocity of electrons demonstrates the remarkable effect of temperature and applied field on the dynamics of holders within the lattice as a result of interaction mechanisms.

References

[1] V.M. Andreev, V.P. Khvostikov, V.D. Romyantsev, S.V. Sorokina, M.Z. Shvarts, V.I. Vasil'ev, GaSb/InGaAsSb-based PV cells for solar and therphotovoltaic

[2] L.N. Nikitina, S.V. Obukhov, V.G. Tyuterev Russian Physics Journal, 52, 747,2009
[3] Y. Belhadji, B. Bouazza, A. Guen-Bouazza, N.E. Chabane Sari, Proceedings ICEEDT'09,2009
[4] B.PÓDÖR, Acta physica polonica A,108, No.5, 2005.
[5] Y. Zheng, P.D. Moran, Z.F. Guan, S.S. Lau, and al., Journal of electronic materials ,32,2A,402, 2002.
[6] A. hamdoune, B. Bouazza, B. Guen-Bouazza, A. Lallam, N.E. Chabane Sari, Afrique sciences,03(2),189, 2007
[7]] B. Bouazza, B. Guen-Bouazza, L. Amer, C. Sayeh, N.E. Chabane Sari, C. Gontrand, Afrique sciences,01 (1),57, 2005.
[8] S. Singhal, A.K. Saxena, S. Dasgupta, Pramana journal of physics,69(4),687,2007
[9] L. Tirino, Transport properties of wide band gap semiconductors, Georgia institute of technology,2004
[10] K. Kurosawa, Journal of the Physical Society of Japan, 21, 424-426, 1966.
[11] R. W. Hockney, J. W. Eastwood, Computer simulation using particles, McGraw-Hill International Book Company, 1981.
[12] M. V. Feschetti, Monte Carlo simulation of electron transport in Si: the first 20 years, IBM Report, RC 20474, Physical Sciences, 1996.
[13] A. Arabshahi, African physical review,2, 131,2008
[14] L.G.O. Messias, E. Marega Jr. Brazilian journal of Physics, 32, 402, 2002
[15] R. Ahmed, F. Aleem, S. Javad Hashemifar, H Rashid, H. Akbarzadeh, Physical Properties of III-Antimnodes a First Principles Study,52,527, 2009
[16] H. Arabshahi, International journal of science and advanced technology, 1, 19-23, 2011
[17] S. Golafroz, H. Arabshahi, International journal of the physical sciences, 5(6),690-695,2010
[18]] P.S. Dutta, H.L. Bhart, Journal of applied physics, 81(9), 5821- 5870, 1997
[19] L.G.O. Messias, E. Marega. Jr., Brazilian journal of physics, 32(2A), 402-404, 2002
[20] A.M. Gerami, H.R. Soleimani, H. Arabshahi, M.R. Khalvati, Advances in Natural and Applied sciences, 3(3), 357-362, 2009
[21]] P. Hesto, "simulation Monte Carlo du transport non stationnaire dans les dispositifs submicroniques : importance du phénomène balistique dans GaAs à 77 K", Theses, Université de Paris Sud, Centre d'Orsay, 1984.
[22] H. Arabshahi, African physical review, 1, 131-135, 2008

ملخص إن نمذجة ومحاكاة الظواهر الفيزيائية التي تتحكم في عمل العناصر الإلكترونية الدقيقة (submicronique)، تعتبر خطوة رئيسية في عملية التنفيذ العملي. أيضا، لا يمكن القيام بمحاكاة هذه الظواهر دون الرجوع إلى نماذج رقمية دقيقة. كذلك فإن التصغير السريع للعناصر يتطلب نماذج فيزيائية قوية مثل نموذج dérive-diffusion أو hydrodynamique ، قصد استخراج تقريبي و دقيق لتأثير الظواهر الفيزيائية المأخوذة بعين الاعتبار. إن طريقة مونتني كارلو (Monte Carlo) هي واحدة من الطرق الأكثر دقة واستجابة في مثل هذا النوع من الدراسات غير أن العائق الأساسي لهذه الطريقة يبقى الموارد الحاسوبية التي تتطلبها عملية المحاكاة. لكن مع تطور التقنيات الرقمية، فإن تقليص وقت المحاكاة صار ممكنا باستعمال نماذج رياضية تتكيف جيدا مع العمليات المراد إنجازها. في هذه الأطروحة، قمنا باستعمال طريقة مونتني كارلو، لتحليل سلوك الترانزستور MEFET المصنوع من كربيد السيلكون وأشبه نواقل أخرى (والموجه لتطبيقات الحرارة العالية والطاقة المرتفعة) هذا من جهة، ومن جهة أخرى وظفنا هذه الطريقة لاستخراج خصائص الحركة الإلكترونية لهذا الترانزستور. أوردنا أيضا شرحا مفصلا للخطوات المتبعة لتنفيذ طريقة مونتني كارلو لمحاكاة الحركة الإلكترونية داخل أشباه النواقل و الترانزستور في نفس الوقت. كذلك ظروف الاستقطاب المختلفة ودرجة الحرارة أخذت بعين الاعتبار خلال هذه الدراسة. بالنسبة للنتائج المتحصل عليها فقد تمت مقارنتها مع عدة أعمال بحثية.

Résumé La modélisation et la simulation des phénomènes physiques, régissant le fonctionnement des dispositifs électroniques fortement submicronique, constitue une étape primordiale dans le processus de réalisation pratique. La simulation ne peut être effectuée sans avoir recours à des modèles numériques adéquats. Ainsi, la miniaturisation rapide des dispositifs exige des modèles physiques puissants, comme celui de la dérive-diffusion ou le modèle hydrodynamique, afin de reproduire quasi-fidèlement l'effet de tous les phénomènes physiques misent en jeu. La méthode de Monte Carlo est l'une des méthodes les plus précises et répondue dans ce genre d'étude, sauf qu'elle nécessite plus de ressources de calcul. Cependant, le temps de calcul, dans la méthode de Monte Carlo, peut être réduit en utilisant des approches bien adaptées. Dans cette thèse, la méthode Monte Carlo a été exploitée pour analyser le comportement du transistor MEFET submicronique en carbure de silicium (et d'autres semiconducteurs) pour les applications de haute température et de forte puissance d'une part et l'extraction des caractéristiques de transport électronique d'autre part. Les démarches d'implémentation de la méthode de Monte Carlo, de la structure simulée ainsi que les différentes conditions de polarisation, de dopage et de la température sont exposées. Les résultats enregistrés ont été valorisés avec de nombreux travaux de recherche.

Abstract The modeling and simulation of physical phenomena, governing the operation of submicron electronic devices, is a primordial step in practical implementation process. The simulation cannot be performed without using adequate numerical models. Thus, the rapid miniaturization of devices scales requires powerful physical models, such as drift-diffusion or hydrodynamic model, to reproduce faithfully the effect of all physical phenomena taken into account. The Monte Carlo method is one of the most accurate and an answered method in this field of study in except that it requires more computing resources. However, the calculation time, in the Monte Carlo method, can be reduced using well-adapted approaches. In this thesis, the Monte Carlo method it implemented to analyze the behavior of submicron silicon carbide (and other semiconductors) based MEFET transistor, for high temperature and high power applications on one hand, and to extract the electron transport characteristics in other hand. The implementation steps, of the Monte Carlo method and the simulated structure under different bias conditions, doping and temperature are exposed. The recorded results were valued with many available research works.