

50 376  
1 979  
162

N° d'ordre : 236

50376  
1979  
162

# THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITÉ DES SCIENCES ET TECHNIQUES DE LILLE

pour obtenir le grade de

**DOCTEUR INGÉNIEUR**

par

Anne KASZYNSKI

89 405  
036 108987

**"ETUDE DES PHENOMENES DE TRANSPORT DANS LES MATERIAUX  
SEMICONDUCTEURS PAR LES METHODES DE MONTE CARLO :  
APPLICATION A L'ARSENIURE DE GALLIUM DE TYPE N"**



Soutenue le 11 juillet 1979 devant la Commission d'Examen

|                      |                  |            |
|----------------------|------------------|------------|
| MEMBRES DU JURY : M. | E. CONSTANT      | Président  |
|                      | R. FAUQUEMBERGUE | Rapporteur |
|                      | G. CONVERT       | Examineur  |
|                      | J.P. NOUGIER     | Examineur  |
|                      | L. RACZY         | Examineur  |
|                      | G. SALMER        | Examineur  |

*A mon Père et à ma Mère*

*à Marc*

*à Christine*

*à Richard*

*et Dominique*

*et Claire*

Ce travail a été effectué au Centre Hyperfréquences et Semiconducteurs de l'Université des Sciences et Techniques de Lille, dirigé par Monsieur le Professeur E. CONSTANT.

Je suis très reconnaissante à Monsieur E. CONSTANT, Professeur à l'Université de Lille I, de m'avoir accueillie dans son laboratoire et je le remercie beaucoup de m'avoir fait bénéficier de ses conseils et de son exemple tout au long de ce travail.

Je remercie vivement Monsieur J.P. NOUGIER, Professeur à l'Université de Montpellier et Monsieur CONVERT, de la Thomson C.S.F. qui me font l'honneur de participer à ce jury et je leur suis très reconnaissante de l'intérêt qu'ils portent à ce travail.

Je suis heureuse que Monsieur L. RACZY, Professeur à l'Université de Lille I, m'honore de sa présence dans le jury. Je lui suis très reconnaissante pour la disponibilité amicale qu'il a toujours témoignée au cours de mon passage au C.H.S.

Je remercie également beaucoup Monsieur G. SALMER, Professeur à l'Université de Lille I, qui a bien voulu accepter de faire partie de mon jury.

Je suis très heureuse que Monsieur R. FAUQUEMBERGUE, Maître Assistant à l'Université de Lille I, fasse partie de ce jury ; je lui suis très reconnaissante de m'avoir suivie au cours de ce travail qui est également le sien, et d'avoir patiemment assumé ma formation.

Je tiens à adresser tous mes remerciements à J. ZIMMERMANN qui m'a beaucoup fait bénéficier de son expérience au cours de multiples échanges et qui a plus particulièrement suivi la mise au point de ce travail, ainsi qu'à Monsieur DEBLOCK qui a largement contribué à la partie expérimentale.

J'aimerais également pouvoir exprimer tout le plaisir que j'ai eu à travailler au C.H.S. et de celà je suis gré à l'ensemble des personnes que j'y ai cotoyé.

Enfin, j'adresse mes plus sincères remerciements à Madame LECHIEN qui a mis tout son talent à la dactylographie de ce manuscrit, ainsi qu'à Mademoiselle HANNON et Madame CNUDDE et à Messieurs PLUQUET et DEHORTER qui ont mis tout leur soin à polycopier ce travail.

## T A B L E D E S M A T I È R E S

|   |       |
|---|-------|
| INTRODUCTION  | P. 1  |
| CHAPITRE I : PRESENTATION DES PHENOMENES DE TRANSPORT<br>DANS L'AsGa ET DE LA MISE EN OEUVRE DES<br>METHODES DE MONTE CARLO | P. 4  |
| CHAPITRE II : CONTRIBUTION A L'ETUDE DE LA DIFFUSION<br>DANS L'AsGa PAR LES METHODES DE MONTE<br>CARLO                      | P. 29 |
| CHAPITRE III : ETUDE EN REGIME NON STATIONNAIRE   | P. 56 |
| CONCLUSION  | P. 81 |
| ANNEXES   | P. 83 |

## INTRODUCTION

La connaissance de la dynamique des porteurs libres dans les matériaux semiconducteurs de type n est nécessaire pour l'amélioration des performances des composants notamment dans le domaine des hyperfréquences. En effet, ce sont les possibilités du matériau qui déterminent la limitation supérieure des possibilités du composant. Ainsi, au niveau du matériau, la recherche des conditions donnant lieu à une amélioration des performances de vitesse et à une diminution des temps de réponse à toute variation du champ électrique, permet de reculer les limitations en fréquence et en puissance des composants hyperfréquences ; de même l'ampleur des phénomènes de diffusion qui se manifestent dans le matériau déterminera la capacité de bruit du composant.

Il est donc intéressant de réaliser une étude complète des possibilités offertes par les matériaux et de déterminer l'influence des conditions extérieures sur les effets qu'ils génèrent, rendant ainsi possible une utilisation rationnelle de ces matériaux au niveau des composants.

La présente étude concerne la dynamique électronique dans l'Arséniure de Gallium de type n. Elle s'adresse plus particulièrement aux phénomènes de diffusion et de vitesse de dérive relatifs aux électrons libres, soumis à un champ constant ou variable au cours du temps.

Le principe de la démarche consiste à simuler le comportement des électrons de la bande de conduction en utilisant les méthodes statistiques de Monte Carlo. Celles-ci s'avèrent tout à fait adaptées à cette étude parce qu'elles sont à la fois souples d'emploi, tout en permettant la prise en compte des caractéristiques physiques et électroniques du matériau considéré. Elles sont effectivement de plus en plus utilisées pour traiter les phénomènes de transport dans les semiconducteurs [2-5, 44].

La présentation de la simulation utilisée fait l'objet du chapitre I. Elle diffère des simulations généralement présentées [2-4], par l'introduction d'une procédure de discrétisation du temps [5] qui sera discutée et qui en augmente les possibilités d'application. Les résultats obtenus relatifs aux caractéristiques de vitesse et d'énergie en fonction du champ permettront de tester cette simulation sur les nombreuses références expérimentales et théoriques existant dans la littérature.

Cet outil est d'abord appliqué, dans le Chapitre II, à l'étude du coefficient de diffusion. Ce paramètre du second ordre, très délicat à déterminer a déjà fait l'objet de nombreuses approches [24-26, 28-29] mais il existe une grande dispersion dans l'ensemble des résultats obtenus. L'objet de cette étude est de lever une partie de ces indéterminations en recherchant les conditions optimales d'étude. Elle présente l'intérêt d'utiliser simultanément les deux définitions du coefficient de diffusion par l'étalement du paquet et par le bruit et permettra de justifier les caractéristiques obtenues par la mise en évidence de certains mécanismes de diffusion.

Des mesures de température de bruit en bande X permettront de confronter les résultats numériques et expérimentaux dans le domaine des champs faibles. Elles donneront en particulier l'occasion de montrer l'influence du dopage sur les coefficients de diffusion et sur les températures de bruit.

L'étude du comportement des porteurs soumis à un champ variable au cours du temps fait l'objet du Chapitre III. La simulation qui a été mise au point est tout à fait adaptée pour une étude complète aussi bien de vitesse, d'énergie que de bruit. Elle permettra en particulier de déterminer les performances de vitesse et de temps de réponse auxquelles il faut s'attendre avec ce matériau.

La possibilité offerte, par la méthode de M. Shur, de donner une formulation semi-analytique des variations d'énergie et de quantité de mouvement à partir de la seule connaissance des caractéristiques stationnaires du matériau, ouvre de larges perspectives d'étude, étant donné le peu de moyens en calculs qu'elle requiert. Cette méthode, qui constitue un prolongement très intéressant des méthodes de Monte Carlo sera présentée, testée, puis appliquée à l'étude de la génération de puissance hyperfréquence dans le matériau.



CHAPITRE I

PRESENTATION DES PHENOMENES DE TRANSPORT  
DANS L'AsGa ET DE LA MISE EN OEUVRE  
DES METHODES DE MONTE CARLO

# TABLE DES MATIÈRES

## INTRODUCTION

|  |      |
|--|------|
| I. PRESENTATION DE LA SIMULATION   | P. 7 |
| I <sub>1</sub> Histoire d'un électron pendant une durée<br>élémentaire $\Delta T$  | P. 7 |
| I <sub>2</sub> Procédure de choix de l'interaction   | P. 8 |
| I <sub>3</sub> Etat de l'électron après interaction  | P.10 |
| I <sub>4</sub> Mise en oeuvre de la méthode de simulation  | P.12 |
| II. DESCRIPTION DES CONDITIONS DE TRANSPORT DANS L'AsGa  | P.13 |
| II <sub>1</sub> Structures de bandes. Modèles 2 vallées -<br>3 vallées   | P.13 |
| II <sub>2</sub> Interactions prépondérantes dans l'AsGa<br>intrinsèque   | P.14 |
| II <sub>2.1</sub> Interaction optique polaire  | P.15 |
| II <sub>2.2</sub> Intervallées équivalentes et non équi-<br>valentes   | P.15 |
| II <sub>3</sub> Interactions intervenant de façon secondaire   | P.17 |
| II <sub>3.1</sub> Interaction acoustique   | P.17 |
| II <sub>3.2</sub> Interaction piezoélectrique  | P.17 |
| II <sub>3.3</sub> Interaction optique non polaire  | P.17 |
| II <sub>4</sub> Ensemble des interactions intervenant respecti-<br>vement avec chacun des 2 modèles dans l'AsGa<br>intrinsèque | P.18 |
| II <sub>5</sub> Interaction avec les impuretés   | P.19 |
| III. REGARD CRITIQUE SUR LA METHODE  | P.20 |
| III <sub>1</sub> Avantages sur la procédure de self scattering   | P.20 |
| III <sub>2</sub> Choix du pas $\Delta T$   | P.20 |
| III <sub>3</sub> Problèmes liés à la statistique   | P.22 |

|   |       |
|---|-------|
| IV. PREMIERS RESULTATS EN REGIME STATIONNAIRE : COMPARAI-<br>SON ENTRE LES DEUX MODELES                   | P. 22 |
| IV <sub>1</sub> Principe de la détermination  | P. 23 |
| IV <sub>2</sub> Commentaire sur l'allure générale de $v(E)$   | P. 24 |
| IV <sub>3</sub> Résultats relatifs à l'AsGa intrinsèque :<br>comparaison entre les modèles 2 et 3 vallées | P. 25 |
| IV <sub>4</sub> Influence du dopage sur $v(E)$  | P. 26 |
| IV <sub>5</sub> Comparaison avec les résultats de la littérature  | P. 27 |
| V. CONCLUSION   | P. 27 |

## INTRODUCTION

Les phénomènes de transport dans les semiconducteurs de type n résultent du comportement des électrons de la bande de conduction. Une approche analytique du problème nécessite généralement la connaissance de la fonction de distribution de l'énergie des électrons, obtenue en résolvant l'équation de Boltzmann. A cause de sa complexité, cette équation aux dérivées partielles n'admet pas de solution analytique sauf dans un nombre limité de cas moyennant des hypothèses simplificatrices. C'est pourquoi, il a été fait appel à d'autres procédés et en particulier aux méthodes de Monte Carlo [1] pour traiter ce problème dans toute sa généralité.

Les méthodes de Monte Carlo font intervenir des expériences avec des nombres aléatoires. La méthode la plus simple, dite probabiliste, repose sur l'observation de nombres aléatoires simulant directement les processus stochastiques étudiés. Dans les problèmes de type déterministe, lorsque la description analytique est trop complexe pour que la résolution soit directe, elle est abandonnée au profit d'une formulation probabiliste qui fait intervenir un processus aléatoire et dont la solution numérique est aussi solution du problème déterministe initial.

Ainsi, pour traiter les phénomènes de transport, la simulation du comportement des électrons de la bande de conduction peut être substituée à la résolution de l'équation de Boltzmann. Cette formulation du problème est d'une grande souplesse car elle peut être mise en oeuvre quelles que soient les conditions imposées et peut en particulier rendre aussi bien compte des phénomènes stationnaires que non stationnaires. Elle permet d'avoir accès directement à des grandeurs importantes en dynamique électronique telles la vitesse et l'énergie des électrons.

Au cours des dernières années, les méthodes de Monte Carlo ont effectivement connu un grand développement notamment dans l'application aux problèmes de dynamique électronique. La simulation qui sera décrite dans le présent chapitre diffère des simulations classiques [2-4] par l'introduction d'une procédure de discrétisation du temps en pas régulier [5] qui permet de s'affranchir de la procédure de "self scattering" [6] usuellement utilisée.

Après avoir fait une présentation de cette simulation dans le cas général, les conditions relatives à son application à l'Arséniure de Gallium seront décrites. Une étude critique de la méthode en montrera les avantages et les limitations. Les résultats relatifs à la vitesse et l'énergie moyennes en régime stationnaire seront ensuite présentés et comparés aux nombreuses références existant dans la littérature, permettant ainsi de tester la simulation qui a été mise au point.

## I. PRESENTATION DE LA SIMULATION

Le comportement au cours du temps des électrons de la bande de conduction résulte à la fois de l'action extérieure du champ électrique appliqué et de l'effet des interactions relatives à la présence du réseau cristallin.

Dans la présente simulation, l'échelle des temps est discrétisée en pas réguliers dont la durée  $\Delta T$  est faible devant le temps moyen qui sépare deux interactions consécutives. La simulation du comportement de chaque électron au cours du temps consiste alors en une succession de traitements élémentaires à chaque pas.

Après avoir décrit précisément en quoi consiste ces traitements élémentaires, une présentation complète de la simulation sera donnée.

### I.1. Histoire d'un électron pendant une durée élémentaire $\Delta T$

L'état d'un électron peut être simplement décrit à chaque instant par son vecteur d'onde et par son énergie. Dans l'espace réciproque, la bande de conduction présente des minima absolus ou relatifs d'énergie appelés "vallées" au voisinage desquels l'énergie est simplement reliée au module du vecteur d'onde. L'ensemble de ces relations permet de définir la structure de bande relative aux différentes vallées considérées dans le semiconducteur.

L'action extérieure du champ et l'effet des interactions peuvent simplement se traduire par une variation  $\Delta \vec{k}$  du vecteur d'onde : sous l'action accé-

l'électron du champ entre des instants  $t$  et  $t + \Delta t$ , le vecteur d'onde devient  $\vec{k}(t + \Delta t) = \vec{k}(t) + \frac{q \vec{E} \Delta t}{\hbar}$ , au cours d'une interaction supposée instantanée, l'électron change d'état et son vecteur d'onde devient  $\vec{k}_{\text{final}}(t) = \vec{k}_{\text{initial}}(t) + \Delta \vec{k}_{\text{interaction}}$ .

Au niveau de la simulation, le traitement de chaque pas  $\Delta T$  commence par une phase dite de vol libre où l'électron n'est soumis qu'à l'action du champ pendant la durée  $\Delta T$ . Au bout de ce temps  $\Delta T$ , la probabilité pour qu'il subisse une interaction est déterminée. Une procédure permet alors de décider si elle a eu effectivement lieu ou non. Après avoir subi éventuellement les effets d'une interaction, l'électron est à nouveau entraîné dans une phase de vol libre pendant une durée  $\Delta T$  pour un nouveau cycle d'évolution.

### 1.2. Procédure de choix de l'interaction

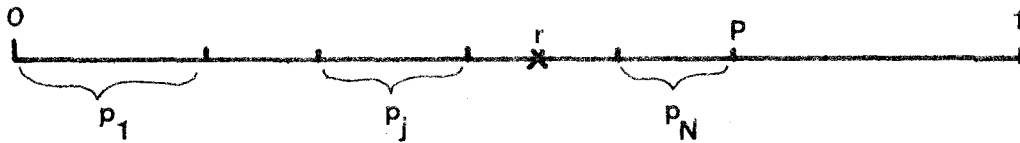
Quand le réseau agit sur le parcours de l'électron ses possibilités d'interactions sont multiples. La densité de probabilité par unité de temps  $s(\vec{k}, \vec{k}')$  pour qu'une interaction donnée  $j$  fasse passer l'électron d'un état  $\vec{k}$  à un état  $\vec{k}'$  est supposée connue pour chacune d'entre elles [7]. L'intégration sur tous les états finaux  $\vec{k}'$  fournit la probabilité  $\lambda_{j,\vec{k}}$  par unité de temps pour qu'un électron dans l'état  $\vec{k}$  subisse l'interaction  $j$ ;  $\lambda_{j,\vec{k}} \Delta T$  est alors la probabilité  $p_j$  pour que l'interaction ait lieu au bout du temps  $\Delta T$ . Si  $N$  est le nombre d'interactions possibles  $P = \sum_{j=1}^N p_j$  est la probabilité totale d'interaction. C'est un nombre qui croît linéairement avec la durée du

---

Les expressions relatives à chaque probabilité d'interaction sont exposées en annexe.

pas  $\Delta T$  . Ce pas  $\Delta T$  est choisi au préalable suffisamment petit pour qu'à chaque instant  $P$  soit inférieur à 1.  $1-P$  représente alors la probabilité pour que l'électron poursuive son parcours sans perturbation provenant du réseau.

D'un point de vue pratique, au niveau de la simulation, chaque interaction  $j$  peut être représentée par un intervalle d'amplitude  $p_j$ . Tous les intervalles  $p_j$  sont rangés dans un ordre donné bout à bout à l'intérieur d'un intervalle d'amplitude 1 (schéma 1). Ils occupent au total une fraction  $P = \sum_{j=1}^N p_j$  de l'intervalle unitaire. L'intervalle restant, d'amplitude  $1-P$ , correspond à la probabilité de non interaction. Un nombre réel est tiré au hasard entre 0 et 1 suivant une distribution uniforme. La probabilité d'appartenir à l'un quelconque de ces intervalles ne dépend que de la largeur de chacun d'entre eux et non de leur ordre puisque la distribution est uniforme. L'intervalle qui contient le réel  $r$ , définit la nature de l'interaction qui aura lieu ou éventuellement l'absence d'interaction. Dans ce dernier cas, l'électron poursuit son parcours sans perturbation.



SCHEMA 1



### I.3. Etat de l'électron après interaction

Une interaction a été choisie. Elle est supposée instantanée et son effet provoque une discontinuité dans l'évolution de l'état de l'électron. Cet effet se manifeste à la fois par un éventuel échange d'énergie et par un brusque changement d'orientation de la vitesse de l'électron. Il se traduit dans l'espace des moments par une variation instantanée du vecteur d'onde en module et en direction.

En effet, dans le cas de l'Arséniure de Gallium, les vallées étant isotropes, le module du vecteur d'onde est relié de façon biunivoque à l'énergie relative de l'électron par rapport au fond de la vallée qu'il occupe, par la relation [8] suivante :

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

où  $m^*$  est la masse effective au fond de la vallée et  $\alpha$  le coefficient de non parabolicité de la vallée. Tout échange éventuel d'énergie au cours de l'interaction se traduit donc au niveau du vecteur d'onde par une variation brutale de son module qui ne dépend que des énergies initiales et finales  $\epsilon$  et  $\epsilon'$ .

C'est un changement d'orientation du vecteur d'onde qui décrit la déviation subie par l'électron. Le vecteur d'onde final  $\vec{k}'$  est repéré par rapport au vecteur d'onde initial par un angle de déviation  $\beta$ . La densité de probabilité  $s(\vec{k}, \vec{k}')$  relative au passage d'un état  $\vec{k}$  à un état  $\vec{k}'$  ne dépend généralement que des modules de  $\vec{k}$  et  $\vec{k}'$ , c'est-à-dire des énergies avant et après interaction  $\epsilon$  et  $\epsilon'$  et de l'angle  $\beta$  entre  $\vec{k}$  et  $\vec{k}'$  (schéma 2). Les valeurs de  $\beta$  et du module de  $\vec{k}'$  étant définies, il existe encore une infinité

d'états possibles et équivalents  $\vec{k}'$  décrivant uniformément un cône d'axe  $\vec{k}$  d'angle  $\beta$ . L'intégration sur tous les états possibles  $\vec{k}'$  s'écrit donc

$$r(\epsilon) = 2\pi \cdot \frac{V}{8\pi^3} \int_0^\pi \int_0^\infty s(\vec{k}, \vec{k}') k'^2 \sin \beta d\beta dk'$$

où  $\frac{V}{8\pi^3}$  est la densité d'état dans l'espace des moments.

Après intégration par rapport à l'énergie, c'est-à-dire par rapport au module  $k'$ , l'expression de la probabilité d'interaction peut se mettre sous la forme :

$$r(\epsilon) = C_\epsilon \int_0^\pi f_\epsilon(\beta) d\beta$$

la fonction normalisée :

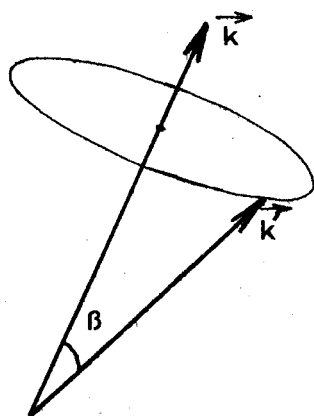
$$g_\epsilon(\beta) = \frac{f_\epsilon(\beta)}{\int_0^\pi f_\epsilon(\beta') d\beta'}$$

définit donc la fonction suivant laquelle l'angle  $\beta$  est distribué. Si  $F(\beta)$  est la fonction de répartition de  $\beta$ , par définition  $dF = g_\epsilon(\beta) d\beta = dr$  où  $r$  est un réel uniformément distribué entre 0 et 1. Donc à tout réel  $r$  tiré au hasard uniformément entre 0 et 1 est associé suivant la relation  $r = \int_0^\beta g_\epsilon(\beta') d\beta'$  un angle  $\beta$  dont la fonction de distribution est  $g_\epsilon(\beta)$ . C'est par cette procédure que sera déterminé l'angle  $\beta$  entre  $\vec{k}$  et  $\vec{k}'$  après interaction. En particulier, dans le cas où  $s(\vec{k}, \vec{k}')$  ne dépend que de l'énergie finale  $\epsilon'$ , tous les états finals sont équiprobables sur une sphère de rayon  $k'$  dans l'espace des moments (schéma 3) et à tout réel  $r$  compris entre 0 et 1 correspond un angle  $\beta$  tel que

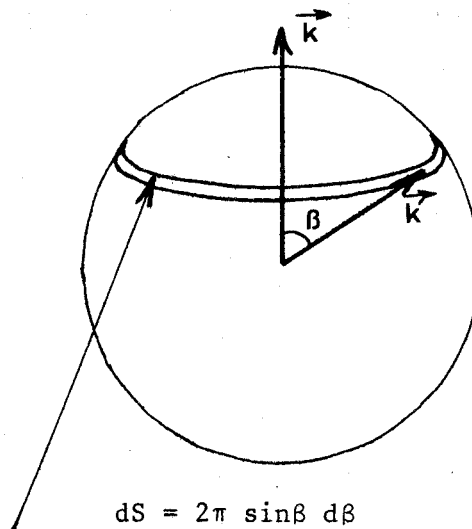
$$r = \frac{1}{2} \int_0^\beta \sin \beta' d\beta' = \frac{1}{2} (1 - \cos \beta)$$

Il arrive, pour certaines interactions, que la détermination de l'angle  $\beta$  en fonction du réel  $r$ , ne soit pas immédiate. Les méthodes utilisées alors font appel à des techniques d'analyse numérique et sont développées en annexe I.

L'effet d'une interaction sur le parcours de l'électron est maintenant entièrement déterminé



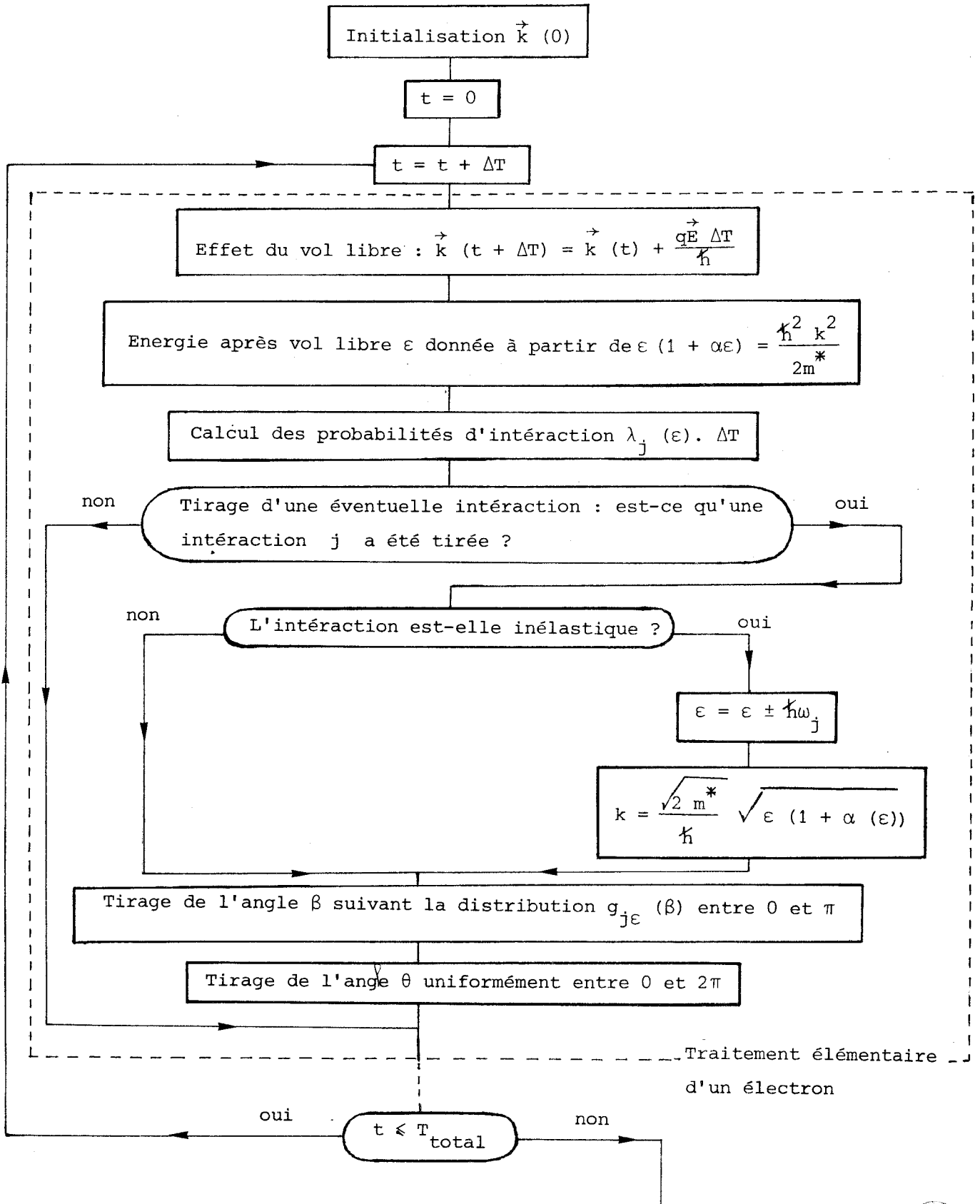
SCHEMA 2



SCHEMA 3

I.4. Mise en oeuvre de la méthode de simulation

Le traitement élémentaire par Monte Carlo qui vient d'être présenté a lieu pour chaque électron à chaque pas  $\Delta T$  (voir organigramme). A l'instant  $t = 0$ , l'état initial  $\vec{k}(0)$  de chaque électron correspond à une énergie tirée au hasard suivant la distribution de Maxwell-Boltzmann. Dans la simulation, le traitement élémentaire peut aussi bien servir à un ensemble de  $n$  électrons que tenir compte d'éventuelles variations du champ électrique au cours du temps. Cette simulation est donc facilement adaptable à une très grande variété de conditions d'étude.



ORGANIGRAMME

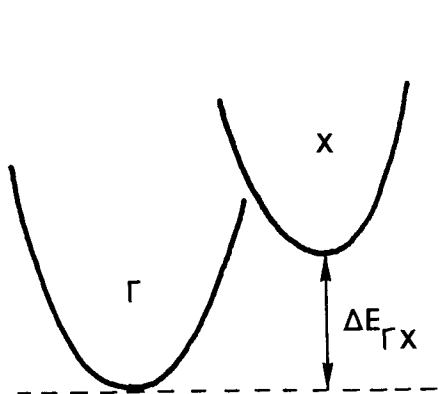


II. DESCRIPTION DES CONDITIONS DE TRANSPORT  
DANS L'ARSENIURE DE GALLIUM

La simulation qui vient d'être décrite nécessite une bonne connaissance des caractéristiques du matériau étudié, en l'occurrence l'AsGa. En particulier, les caractéristiques de la bande de conduction jouent un rôle prépondérant dans l'étude des phénomènes de transport. Les niveaux des minima de vallées indiquent l'énergie à partir de laquelle un électron peut transférer, modifiant ainsi éventuellement ses conditions de transport. De plus, dans une vallée donnée, l'évolution de l'énergie en fonction de son vecteur d'onde  $\vec{k}$  détermine la masse effective de l'électron qui suivant qu'il est "lourd" ou "léger" pourra se déplacer plus ou moins rapidement dans le champ électrique. La structure de bande demande donc à être définie précisément. En ce qui concerne l'Arséniure de gallium, deux modèles [2, 3] ont été proposés dans la littérature et sont présentés ici. Par ailleurs, il est intéressant avant de décrire les résultats obtenus et les interpréter, d'établir en fonction du champ électrique et de la vallée occupée, une hiérarchie entre les différentes interactions subies par le porteur. C'est pourquoi seront passés en revue les différents types de perturbations que l'électron peut subir de la part du réseau cristallin dans l'Arséniure de Gallium.

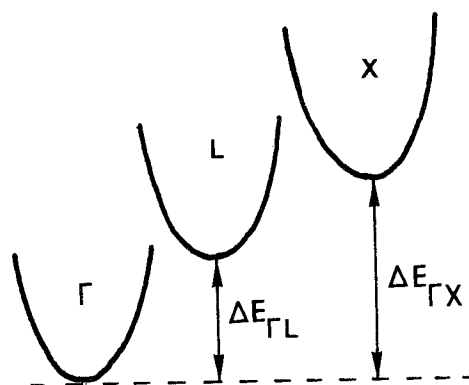
II.1. Structure de bandes : modèles 2 et 3 vallées

Le modèle de structure de bande le plus anciennement utilisé présente une vallée centrale  $\Gamma_c$  en (0,0,0) au minimum absolu de la bande de conduction et 3 vallées latérales à symétrie X correspondant à des minima relatifs dans les directions (1,0,0) (schéma 4) ; le modèle 2 vallées a été initialement utilisé par W. Fawcett [2].



Modèle 2 vallées

SCHEMA 4



Modèle 3 vallées

SCHEMA 5

Tableau des données relatives à la structure de bande  
de l'Arseniure de Gallium

|                                 | Modèle 2 vallées   | Modèle 3 vallées  |
|---------------------------------|--|---|
| masses effectives               | $m_{\Gamma}^* = 0,067 m_0$<br>$m_X^* = 0,35 m_0$                   | $m_{\Gamma}^* = 0,063 m_0$<br>$m_L^* = 0,222 m_0$<br>$m_X^* = 0,58 m_0$   |
| niveaux des vallées             | $E_g = 1,52 \text{ eV}$<br>$\Delta E_{\Gamma X} = 0,36 \text{ eV}$ | $E_g = 1,439 \text{ eV}$<br>$\Delta E_{\Gamma L} = 0,33 \text{ eV}$<br>$\Delta E_{\Gamma X} = 0,522 \text{ eV}$       |
| coefficient de non parabolicité | $\alpha_{\Gamma} = 0,576 \text{ eV}^{-1}$<br>$\alpha_X = 0$        | $\alpha_{\Gamma} = 0,610 \text{ eV}^{-1}$<br>$\alpha_L = 0,461 \text{ eV}^{-1}$<br>$\alpha_X = 0,204 \text{ eV}^{-1}$ |

TABLEAU I



Ce n'est que très récemment que des vallées à symétrie L présentant des minima relatifs inférieurs à ceux des vallées X, ont été mises en évidence expérimentalement [9, 10] dans les directions (1, 1, 1) (schéma 5).

M.A. Littlejohn [3] les fait intervenir dans son modèle 3 vallées.

Cette étude des phénomènes de transport dans l'AsGa a d'abord été menée avec le modèle 2 vallées de W. Fawcett. Mais pour tenir compte des modifications résultant des données expérimentales nouvelles relatives à la bande de conduction, toute l'étude a été reprise avec le modèle 3 vallées. Une comparaison a été faite entre les résultats obtenus avec chacun des deux modèles. L'ensemble des données relatives à chacun des deux modèles de structure de bande de l'Arséniure de Gallium sont rassemblées dans le tableau I.

## II.2. Interactions prépondérantes dans l'AsGa intrinsèque

Parmi toutes les interactions\* pouvant survenir à l'électron au cours de son évolution, certaines, par leurs fréquences et leurs effets marqués ont un impact décisif sur le comportement de l'électron ; ce sont principalement l'interaction optique polaire en vallée centrale en champ faible et les interactions intervallées en champ fort. Leurs probabilités fonction de l'énergie sont représentées sur les fig. 1a, 1b, 1c dans le cas du modèle 3 vallées. Ce sont des interactions inélastiques dont la probabilité d'émission est supérieure à la probabilité d'absorption dès que l'électron possède suffisamment d'énergie pour émettre un phonon. L'électron a ainsi tendance à transmettre au réseau une partie de l'énergie que lui a fourni le champ électrique.

---

\* Tous les calculs relatifs à toutes les interactions sont développés en annexe I

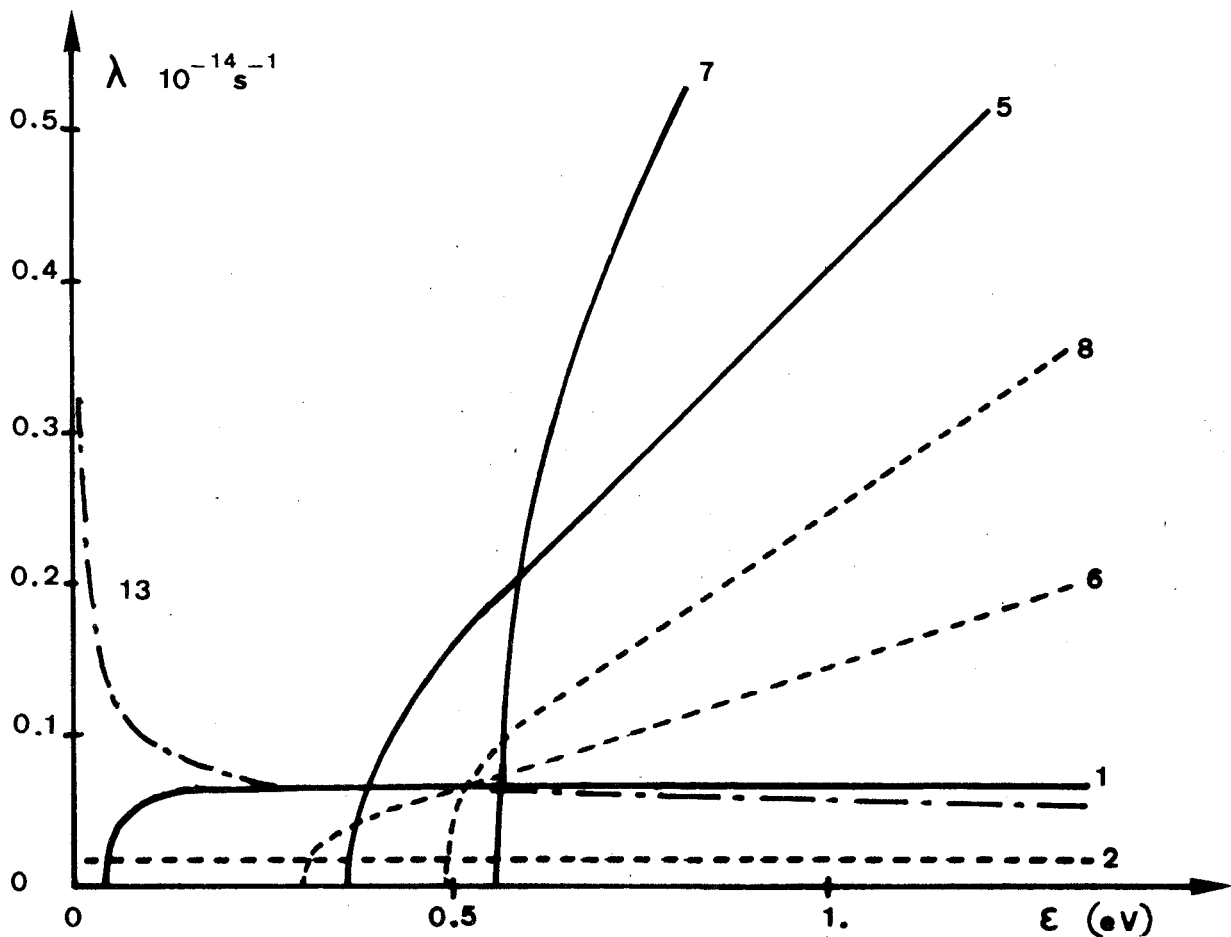


Figure 1.a. : Modèle trois vallées : probabilités d'interactions relatives à la vallée  $\Gamma$

1. Interaction optique polaire émission
2. Interaction optique polaire absorption
5. Interaction intervallée  $\Gamma \rightarrow X$  émission
6. Interaction intervallée  $\Gamma \rightarrow X$  absorption
7. Interaction intervallée  $\Gamma \rightarrow L$  émission
8. Interaction intervallée  $\Gamma \rightarrow L$  absorption
13. Interaction avec les impuretés.



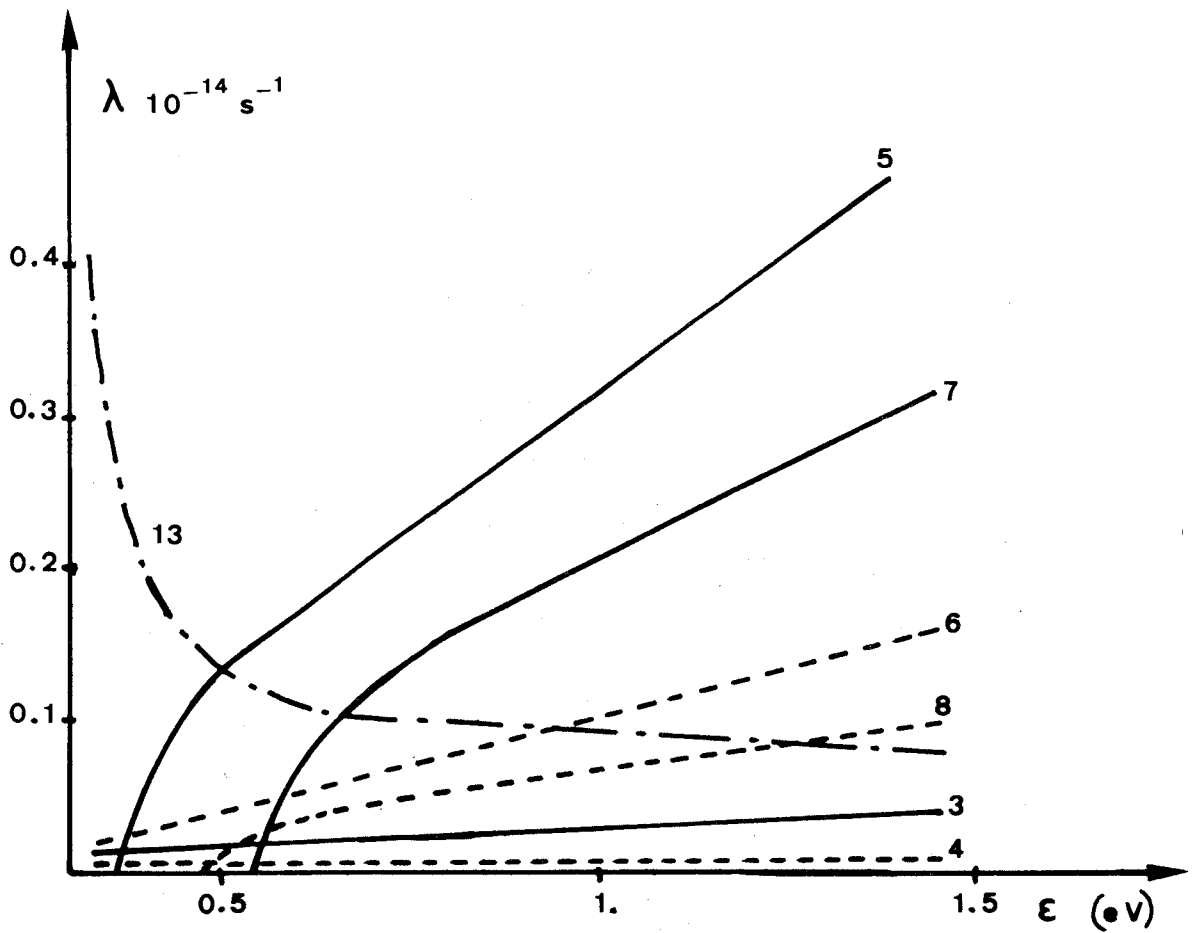


Figure 1.b. : Modèle trois vallées : probabilités d'interactions relatives à la vallées L

- 3. Intéraction intervallée L →  $\Gamma$  émission
- 4. Intéraction intervallée L →  $\Gamma$  absorption
- 5. Intéraction intervallée L → L émission
- 6. Intéraction intervallée L → L absorption
- 7. Intéraction intervallée L → X émission
- 8. Intéraction intervallée L → X absorption
- 13. Intéraction avec les impuretés



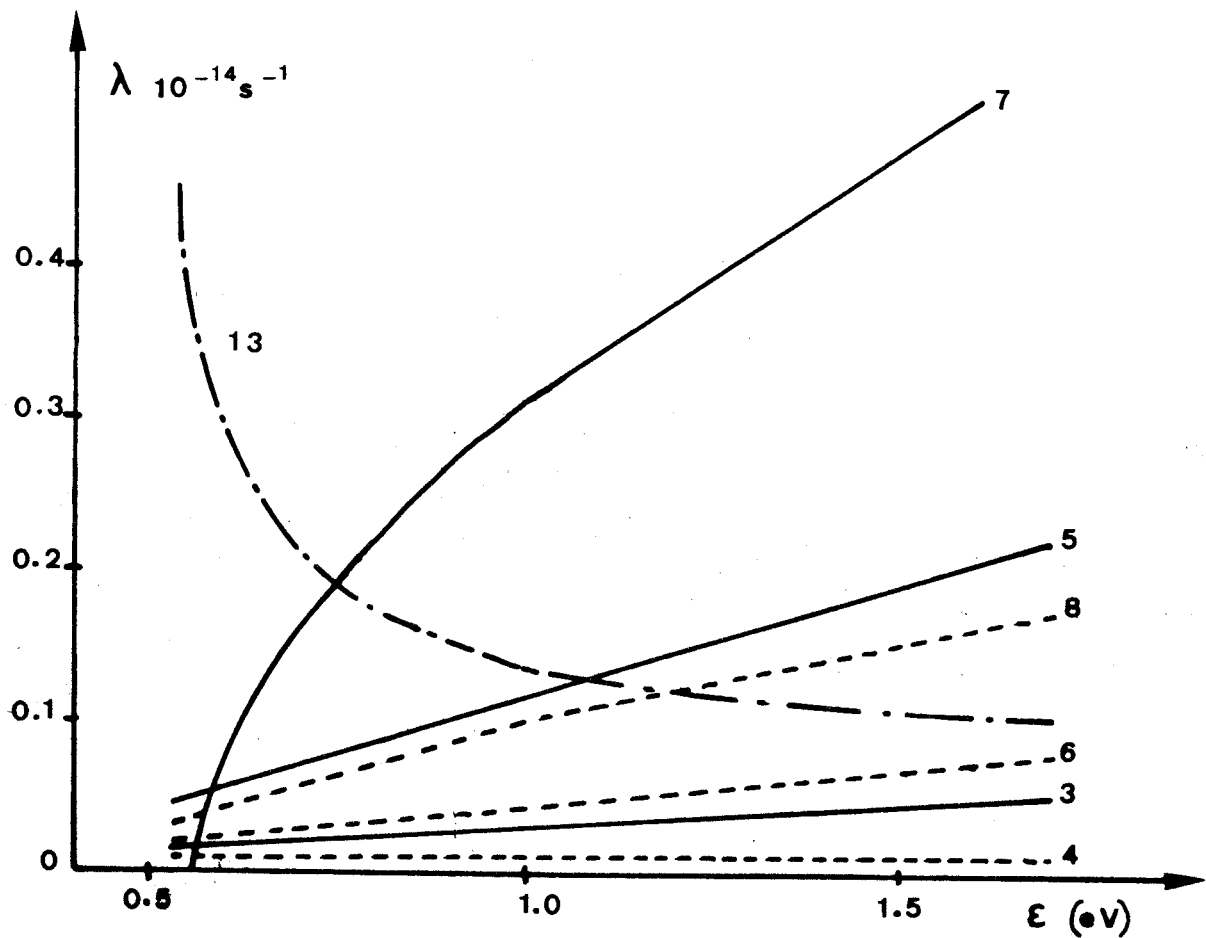


Figure 1.c. : Modèle trois vallées : probabilités d'interactions relatives à la vallée X

- 3. Interaction intervallée X →  $\Gamma$  émission
- 4. Interaction intervallée X →  $\Gamma$  absorption
- 5. Interaction intervallée X → L émission
- 6. Interaction intervallée X → L absorption
- 7. Interaction intervallée X → X émission
- 8. Interaction intervallée X → X absorption
- 13. Interaction avec les impuretés



### II.2.1. Intéraction optique polaire

L'intéraction optique polaire prédomine en vallée centrale en champ faible. Elle est caractérisée par un échange de phonon optique polaire de 0,0354 eV et par une forte anisotropie sur l'ensemble des états finaux probables : les états correspondant à une déviation quasi nulle du vecteur d'onde sont très fortement favorisés. L'électron, entraîné dans la direction du champ pendant la phase de vol libre, ne sera donc que très peu détourné de cette direction sous l'effet de cette intéraction.

La mise en oeuvre de cette intéraction a présenté quelques difficultés au niveau de la détermination de l'angle  $\beta$  de déviation (voir annexe I) Une méthode numérique a été substituée à l'emploi de la méthode de Neumann préconisée par Fawcett [2].

Par sa forte probabilité et malgré ses effets relativement faibles sur la trajectoire de l'électron, l'intéraction optique polaire a un impact déterminant sur la mobilité de l'électron en champ faible.

### II.2.2. Intéactions intervallées équivalentes

et non équivalentes

Comme le montre la structure de bande, ces intéactions sont tout à fait inexistantes dans la vallée centrale en champ faible car l'électron n'a pas suffisamment d'énergie pour transférer dans les vallées supérieures. Mais dès que les conditions sur l'énergie sont satisfaites, les intéactions intervallées jouent de loin le rôle le plus important parmi toutes les intéactions, autant par leur forte probabilité que par leurs conséquences sur le com-

portement de l'électron. En effet, quand un électron transfère vers une autre vallée, aux effets directs de l'interaction elle-même, viennent s'ajouter toutes les discontinuités dues à la non équivalence éventuelle des vallées d'origine et d'arrivée. En particulier, comme l'énergie cinétique de l'électron se mesure à partir du minimum de la vallée qu'il occupe, un transfert vers une vallée non équivalente provoque une importante variation d'énergie cinétique correspondant à la différence de niveau entre les deux vallées.

Les interactions intervallées sont inélastiques ; le phonon moyen échangé au cours d'un transfert est de l'ordre de 0.03 eV. L'une des caractéristiques les plus importantes de ces interactions est l'équi-probabilité de tous les états finals possibles dans l'espace des moments ; autrement dit, après un transfert, l'orientation de la vitesse est tout à fait quelconque dans tout l'espace. A cause de cet effet de "randomisation" les interactions intervallées contribueront dans tous les cas à une diminution de la vitesse moyenne de l'électron.

Il est à remarquer qu'en vallée "haute", les transferts vers les vallées équivalentes sont favorisés par rapport aux autres transferts ; ainsi, un électron ne répondra que lentement à toute action extérieure tendant à lui faire changer de type de vallée.

Par leurs effets, ces interactions sont à l'origine de nombreuses propriétés de l'AsGa.

### II.3. Intéractions intervenant de façon secondaire dans l'AsGa intrinsèque

Ces interactions, la plupart du temps élastiques, n'influencent pas de façon essentielle sur le comportement de l'électron. Elles sont néanmoins introduites pour obtenir une description aussi quantitative que possible de la dynamique électronique.

#### II.3.1. Intéraction acoustique

Cette interaction élastique, presque inexistante en vallée centrale, possède une probabilité assez forte en vallée latérale ; de plus, la distribution de l'angle  $\beta$  de déviation est quasi-uniforme. Mais ses effets sont souvent masqués par ceux de la multitude d'interactions intervallées qui prédominent en vallées latérales.

#### II.3.2. Intéraction piézoélectrique

C'est une interaction dont la probabilité est inversement proportionnelle à la racine carrée de l'énergie  $\epsilon_r$  mais elle n'intervient vraiment que pour des énergies relatives inférieures à 0.03 eV. Même alors, son effet sur le comportement de l'électron est très faible car c'est une interaction élastique qui ne provoque quasiment aucune déviation. Toutefois, l'introduction de cette interaction a permis d'inhiber les instabilités numériques qui se manifestaient en champ faible.

#### II.3.3. Intéraction optique non polaire

Cette interaction n'intervient que dans les vallées de symétrie L du modèle 3 vallées. Ses effets sur l'état de l'électron sont comparables à ceux d'une interaction intervallée équivalente mais sa probabilité est très faible.



### II.5. Intéraction avec les impuretés

Le traitement des interactions avec les impuretés [7, 17] a suscité de nombreuses approches. Le modèle de H. Brooks et C. Herring [11] tient compte des effets de charge d'espace au niveau de l'expression du potentiel  $V(r)$  créé par chaque impureté supposée ionisée. Il a été supposé que pour des concentrations en impuretés inférieures à  $3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , les impuretés sont encore effectivement toutes ionisées et que les interactions électron-électron sont encore très peu probables. Il a été préféré au modèle de E.M. Conwell et V.F. Weisskopf [12] dans lequel ce potentiel est simplement Coulombien.

C'est une interaction élastique dont la probabilité est indépendante de la concentration en impuretés ; celle-ci n'intervient que dans l'expression de la distribution de l'angle  $\beta$  de déviation qui se réduit à une fonction de Dirac  $\delta(\beta)$  pour une concentration en impuretés  $N_D = 0$  ; l'effet de l'interaction est alors nul. Cette distribution tend à être uniforme quand le dopage est élevé, contribuant dans ce cas à diminuer d'autant plus la vitesse moyenne de l'électron.

Cette interaction, dont la probabilité est en  $\epsilon_r^{-1/2}$  par rapport à l'énergie relative, est fortement prépondérante en champ faible ou après les premiers transferts en vallée haute.

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

### III. REGARD CRITIQUE SUR LA METHODE

Les qualités de la méthode se définissent par la rapidité de son exécution et sa souplesse d'emploi dans les diverses applications. La présente méthode diffère dans sa mise en oeuvre des autres méthodes de Monte Carlo qui utilisent en général la procédure de self scattering [6] . Après avoir montré les avantages de la procédure utilisée par rapport à la procédure de self scattering, les problèmes liés au choix du pas  $\Delta T$  seront évoqués.

#### III.1. Avantages sur la procédure de "self-scattering"

Dans la procédure de self-scattering, les durées de vol libre sont distribuées suivant une loi dont l'expression est simplifiée par l'introduction d'une interaction fictive aux effets nuls dite "self-scattering". L'état de l'électron n'est alors connu qu'à des instants répartis de façon irrégulière. La procédure de discrétisation du temps en pas réguliers, permet de s'affranchir de cette procédure statistique de choix des durées de vol libre. Elle offre en particulier l'avantage de réaliser facilement des moyennes instantanées tous les  $\Delta T$  sur un ensemble d'électrons, au cours des études en régime non stationnaire. Sa mise en oeuvre nécessite au préalable un bon choix du pas  $\Delta T$ .

#### III.2. Choix du pas $\Delta T$

Le choix du pas  $\Delta T$  doit satisfaire à un compromis ; si le pas  $\Delta T$  est choisi trop grand, la somme des probabilités d'interactions au bout du temps  $\Delta T$  peut dépasser 1, ce qui signifie qu'il n'a pas été tenu compte d'au moins une interaction qui aurait dû avoir lieu au bout d'une durée inférieure à  $\Delta T$ . Par contre, si la durée  $\Delta T$  de vol libre est trop courte, la probabilité pour que l'électron poursuive son trajet sans avoir subi d'interaction au bout du temps  $\Delta T$  est importante et l'observation de l'électron pendant un temps donné nécessi-



tera de considérer un grand nombre de pas dont la plus grande partie ne donnera lieu à aucune interaction. Néanmoins, il est nécessaire que le pas  $\Delta T$  soit suffisamment petit pour que la distribution des intervalles de temps entre interactions puisse être reproduite de façon suffisamment fidèle.

Pourtant, aussi petit que soit le pas  $\Delta T$ , la situation de "dépassement" qui vient d'être évoquée ne peut être évitée à cause de la valeur très importante de certaines probabilités d'interaction, par unité de temps, par rapport à l'énergie relative quand celle-ci est très faible (voir figure 1). Le problème se pose pour les interactions piézoélectriques et surtout pour les interactions avec les impuretés. Pour tenir compte de toutes les interactions intermédiaires qui interviennent alors, une procédure de découpage du pas  $\Delta T$  a été mise au point. Elle repose sur le principe suivant : si la somme des probabilités d'interaction relative à un pas  $\Delta T$  est supérieure à 1, le pas est divisé par 2 et la somme des probabilités d'interaction recalculée aussi souvent qu'il est nécessaire jusqu'à ce que cette situation de dépassement ait disparu ; la fraction  $x$  du pas  $\Delta T$  ainsi déterminée, qui peut se mettre sous la forme  $x = \frac{1}{2^n}$ , est alors traitée par la méthode de simulation. Pour éviter une perturbation dans la discrétisation du temps en pas  $\Delta T$ , c'est la durée complémentaire  $(1-x) \Delta T$  qui est ensuite considérée et soumise à cette procédure. Ainsi, il est possible de prendre en compte l'ensemble de toutes les interactions et d'affiner la distribution de Poisson des intervalles de temps entre interactions. Cependant cette façon de procéder n'est vraiment intéressante que dans la mesure où le nombre de dépassements n'est pas trop élevé sinon il est préférable de choisir au préalable un pas  $\Delta T$  plus faible.

D'un point de vue pratique, une étude de l'influence du choix de  $\Delta T$  sera effectuée au cours de la présentation des premiers résultats et permettra de décider des valeurs de pas qui conviennent le mieux.

### III.3. Problèmes liés à la statistique

L'approche par les méthodes de Monte Carlo étant d'ordre statistique, les résultats obtenus sont entachés d'une erreur liée à la fois à la représentativité de l'échantillon et au nombre  $n$  d'observations. Cette erreur étant en  $\frac{1}{\sqrt{n}}$  il faudra augmenter le nombre d'observations dans un rapport 4 pour la réduire dans un rapport 2. Le choix du nombre  $n$  d'observations devra donc satisfaire à un compromis entre l'erreur statistique acceptable et le temps "calcul" exigé.

## IV. PREMIERS RESULTATS EN REGIME STATIONNAIRE.

### COMPARAISON ENTRE LES DEUX MODELES

La présentation des premiers résultats en régime stationnaire, c'est-à-dire à champ constant, permettra de tester la présente simulation sur les nombreuses références existant dans la littérature.

Les grandeurs moyennes directement accessibles dans la simulation sont la vitesse de dérive et l'énergie, la répartition des populations dans chaque vallée, les variances de vitesses longitudinales et transverses.

Parmi ces grandeurs, la vitesse de dérive en régime stationnaire est le paramètre qui a été le plus largement traité aussi bien numériquement [2, 3] qu'expérimentalement [13-15]. C'est pourquoi l'accent sera particulièrement mis dans la présente étude, sur la détermination de la vitesse. Une comparaison de l'ensemble de résultats relatifs aux modèles 2 et 3 vallées ainsi qu'une étude de l'influence du dopage sur les caractéristiques  $v(E)$  sera ensuite effectuée.

#### IV.1. Principe de la détermination

Le système étant soumis à l'action extérieure d'un champ continu appliqué à l'instant  $t = 0$ , il est nécessaire pour étudier le régime stationnaire d'attendre un temps de simulation  $\tau$  supérieur à la durée du régime transitoire pour que le système acquière un régime dont les caractéristiques moyennes sont indépendantes du temps. Pour éviter d'étudier durant ce temps  $\tau$  un nombre important d'électrons en vue de leur faire atteindre leur régime stationnaire, il est intéressant de s'appuyer sur le principe de l'ergodisme suivant lequel, en régime stationnaire, l'ensemble des états occupés par un seul électron au cours du temps est représentatif des états qu'occuperait un ensemble d'électrons à un instant donné et qu'en conséquence moyenne sur le temps et moyenne sur un ensemble sont identiques. Ainsi les grandeurs telles que vitesse, énergie, variances de vitesses longitudinales et transverses seront calculées en pratique à partir de moyennes relatives à un seul électron et réalisées sur le temps.

En particulier, la composante  $v_i$  de la vitesse d'un électron suivant la direction est définie à chaque instant par :

$$v_i = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_r}{\partial k_i}$$

Compte tenu de la relation qui lie l'énergie relative de l'électron au module de son vecteur d'onde, l'expression de la vitesse instantanée s'écrit :

$$\vec{v}(t) = \frac{\hbar \vec{k}(t)}{m^* m_0 (1 + 2\alpha \epsilon_r(t))}$$

C'est cette expression qui est calculée à chaque pas puis moyennée sur le temps pour obtenir la vitesse moyenne en régime stationnaire. Mais, avant de procéder à la détermination effective de toutes ces grandeurs, il est nécessaire au préalable de préciser le domaine de choix possible pour le pas  $\Delta T$ . Les figures 2a)

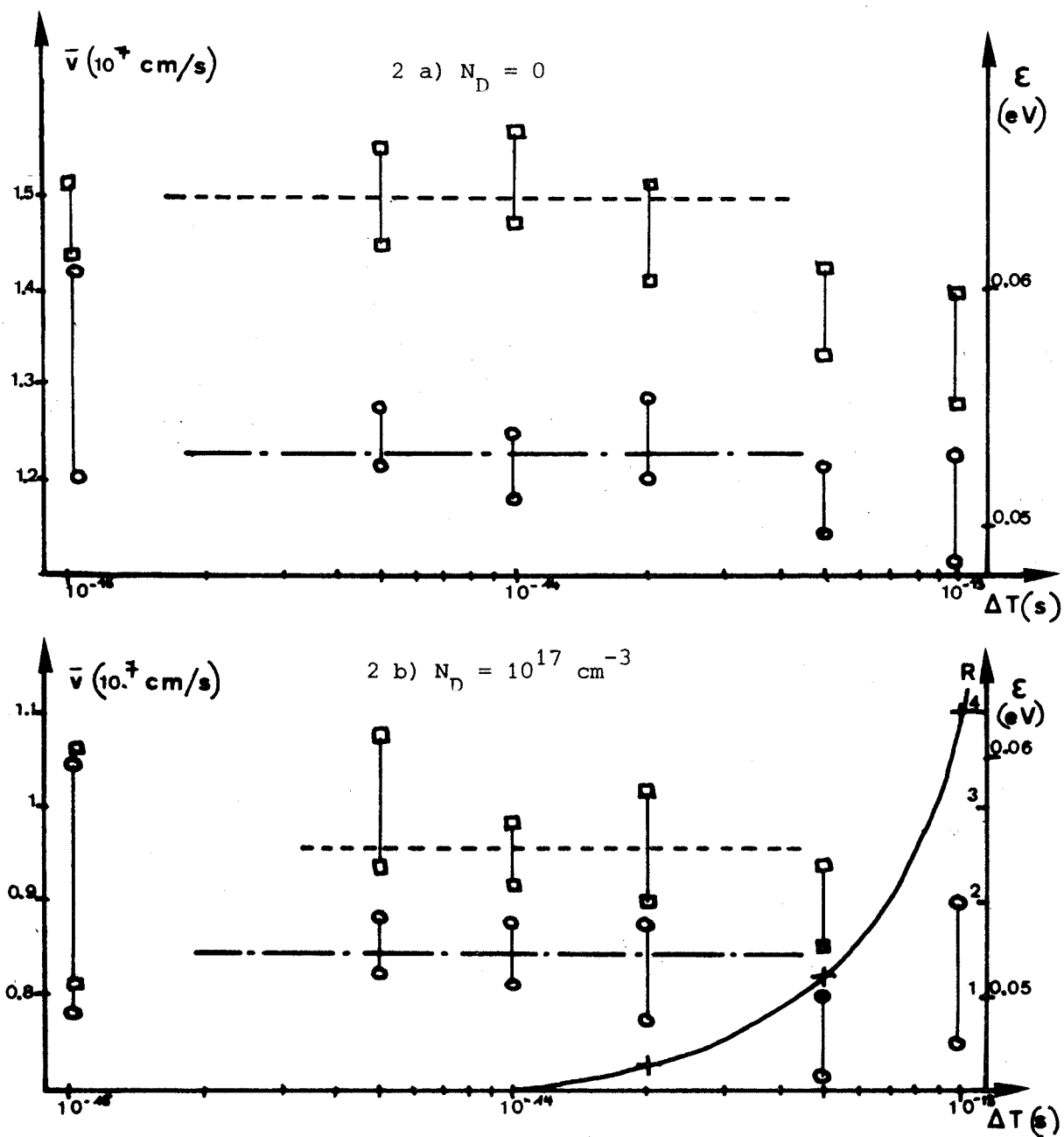


Figure 2. : Influence du pas  $\Delta T$  sur les résultats.  $E = 2 \text{ kV/cm}$

- vitesse
- énergie
- $R = \frac{\sum \text{dépassements}}{\sum \text{pas}}$



et 2b) représentent pour différentes valeurs du pas  $\Delta T$  les résultats de vitesse et d'énergie obtenus à 2 kV/cm respectivement avec et sans impuretés et correspondant tous à un temps de simulation de 500 ps. Il apparaît sur ces courbes, que les résultats sont quasiment indépendants du pas entre  $5 \cdot 10^{-15}$  s et  $2 \cdot 10^{-14}$  s. Quand le pas est très faible, vers  $10^{-15}$  s, la précision théoriquement attendue avec un tel pas est en fait fortement limitée numériquement par l'accumulation des erreurs. De plus, avec un tel pas, les temps calculs sont vite prohibitifs. Quand le pas est très fort, vers  $10^{-13}$  s, il devient nécessaire de faire appel trop souvent à la procédure qui traite les dépassements, auquel cas celle-ci perd de son intérêt. Néanmoins, dans le cas où la concentration en impuretés est importante, les dépassements sont inévitables pour des pas supérieurs à  $5 \cdot 10^{-15}$  s. La figure 2b) montre qu'alors l'emploi de la procédure de dépassement donne des résultats très acceptables. Le pas qui a été choisi dans l'Arséniure de Gallium est de  $10^{-14}$  s pour des champs inférieurs à 30 kV/cm et de  $0.5 \cdot 10^{-14}$  s jusqu'à 100 kV/cm.

#### IV.2. Commentaires sur l'allure générale de $v_d(E)$

En champ faible, l'électron est en vallée centrale. Pendant les phases de vol libre, il est fortement accéléré sous l'effet du champ électrique à cause de la faible valeur de la masse effective. Cette accélération ainsi que la forte anisotropie qui caractérise les interactions optiques polaires alors prédominantes contribuent à ce que la mobilité soit élevée en champ faible.

Quand le champ devient assez élevé, l'électron peut venir peupler les vallées hautes. Sa vitesse moyenne s'en trouve fortement limitée. En effet, en vallée haute, la valeur de la masse effective est forte. De plus, seul l'excès de l'énergie sur le niveau de la vallée intervient en tant qu'énergie ciné-

tique. Ces deux facteurs réduisent considérablement le module de la vitesse, pendant le séjour en vallée haute. D'autre part les interactions intervallées sont prédominantes. A cause de leurs effets de "randomisation", l'ensemble des vitesses après transferts n'apporte qu'une faible contribution à la vitesse moyenne de l'électron.

Une augmentation du champ électrique, en favorisant le peuplement des vallées hautes, multiplie les limitations à la vitesse moyenne qui commence à décroître, en fonction du champ, à partir d'un champ qui est le "champ de seuil". Cette décroissance est très rapide sur quelques kV/cm au dessus du champ de seuil entraînant une mobilité différentielle fortement négative  $\mu_d(E)$ . Le rôle joué par les interactions intervallées sur la vitesse de l'électron, pour ces valeurs de champ voisines du champ de seuil, justifie l'importance des valeurs des potentiels de déformation intervallée qui ne sont connus qu'approximativement, sur la détermination de la mobilité différentielle négative, juste au dessus du champ de seuil. Quand le champ est très fort, l'électron séjourne en vallée haute la plupart du temps ; sa vitesse en fonction du champ diminue lentement vers une vitesse de saturation  $v_{sat}(E)$  dont il est montré [16] qu'elle ne dépend que de la valeur du phonon intervallée équivalente échangé dans les vallées les plus hautes où il séjourne alors constamment.

#### IV.3. Résultats relatifs à l'AsGa intrinsèque :

##### Comparaison entre les modèles 2 et 3 vallées

La figure 3 représente les caractéristiques  $v_d(E)$  obtenues respectivement avec chacun des deux modèles. Elles permettent de définir une mobilité statique dans l'AsGa intrinsèque de  $7500 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ , un champ de seuil de

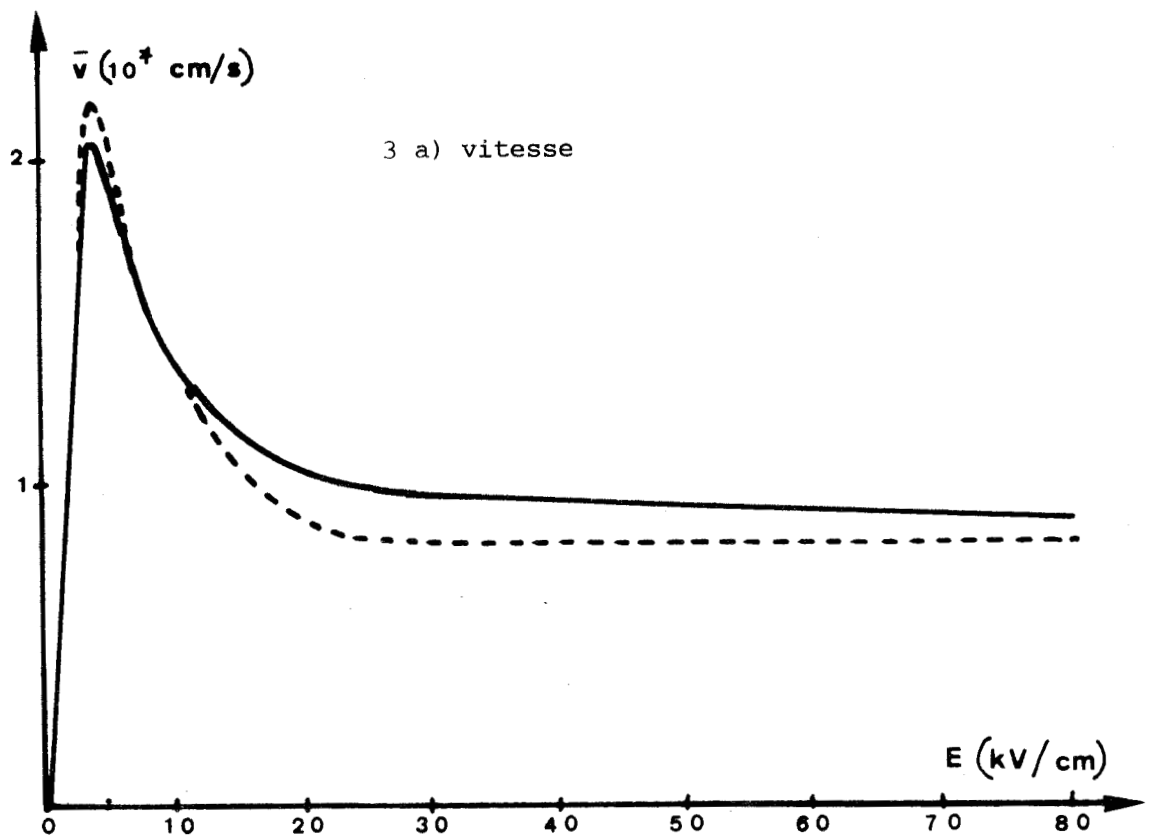
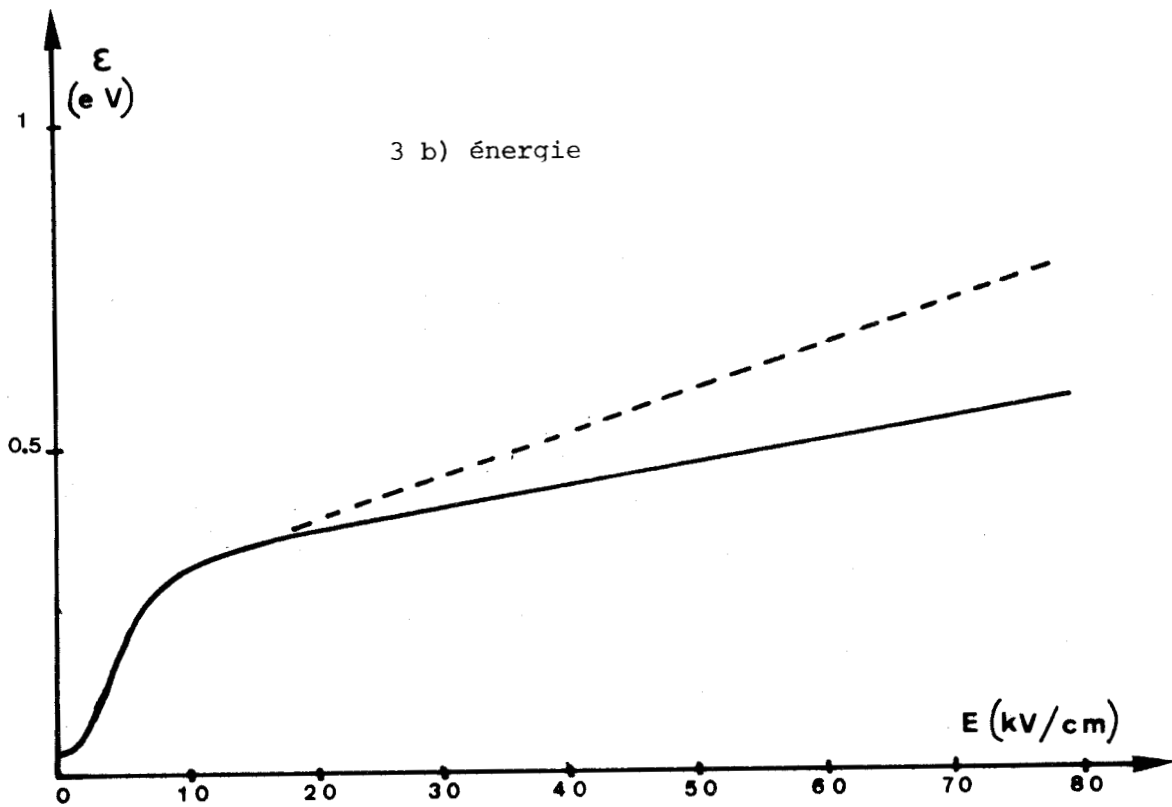


Figure 3 : Comparaison des résultats obtenus respectivement avec les modèles 2 et 3 vallées

- modèle 2 vallées
- modèle 3 vallées



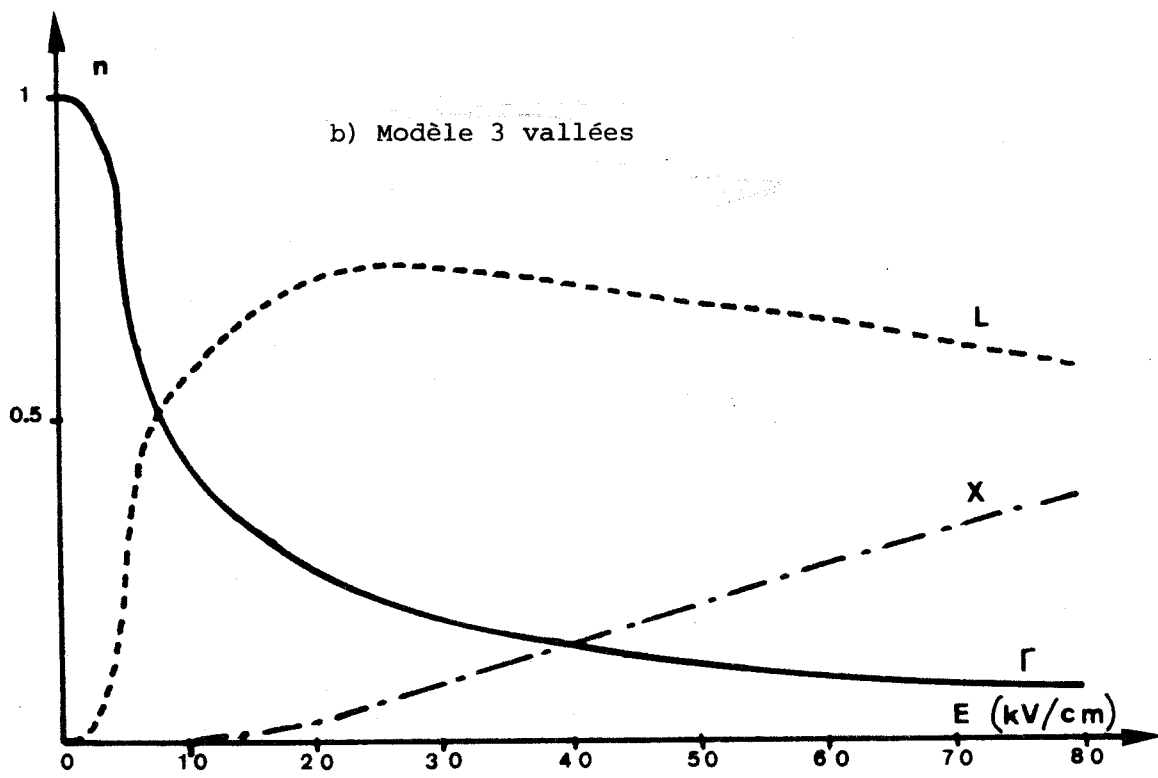
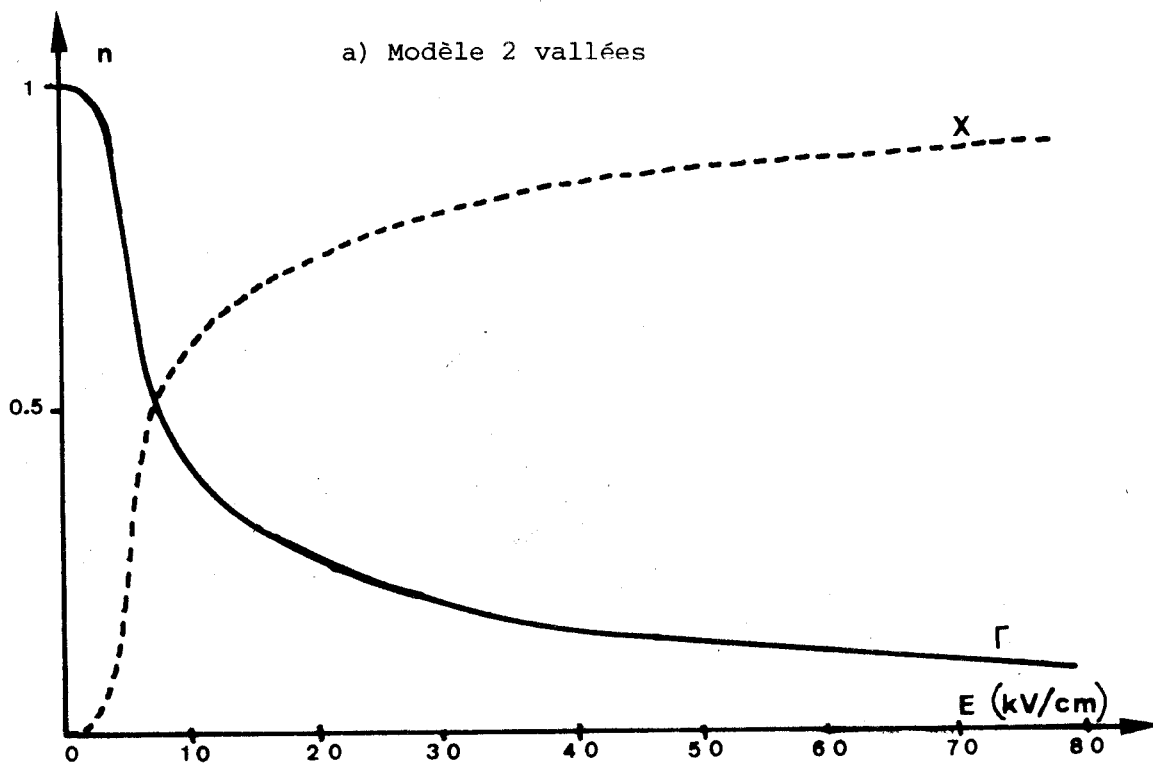


Figure 4 : Populations relatives à chacun des 2 modèles



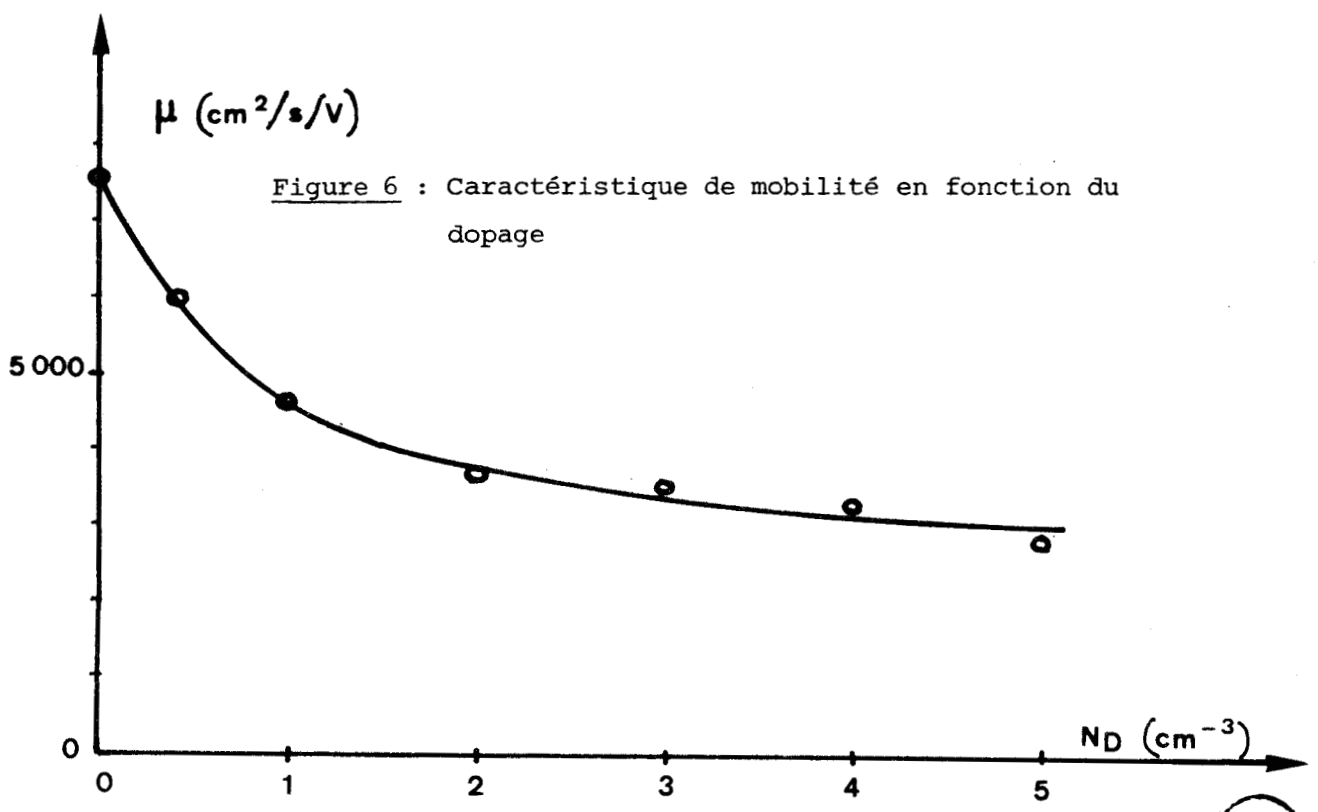
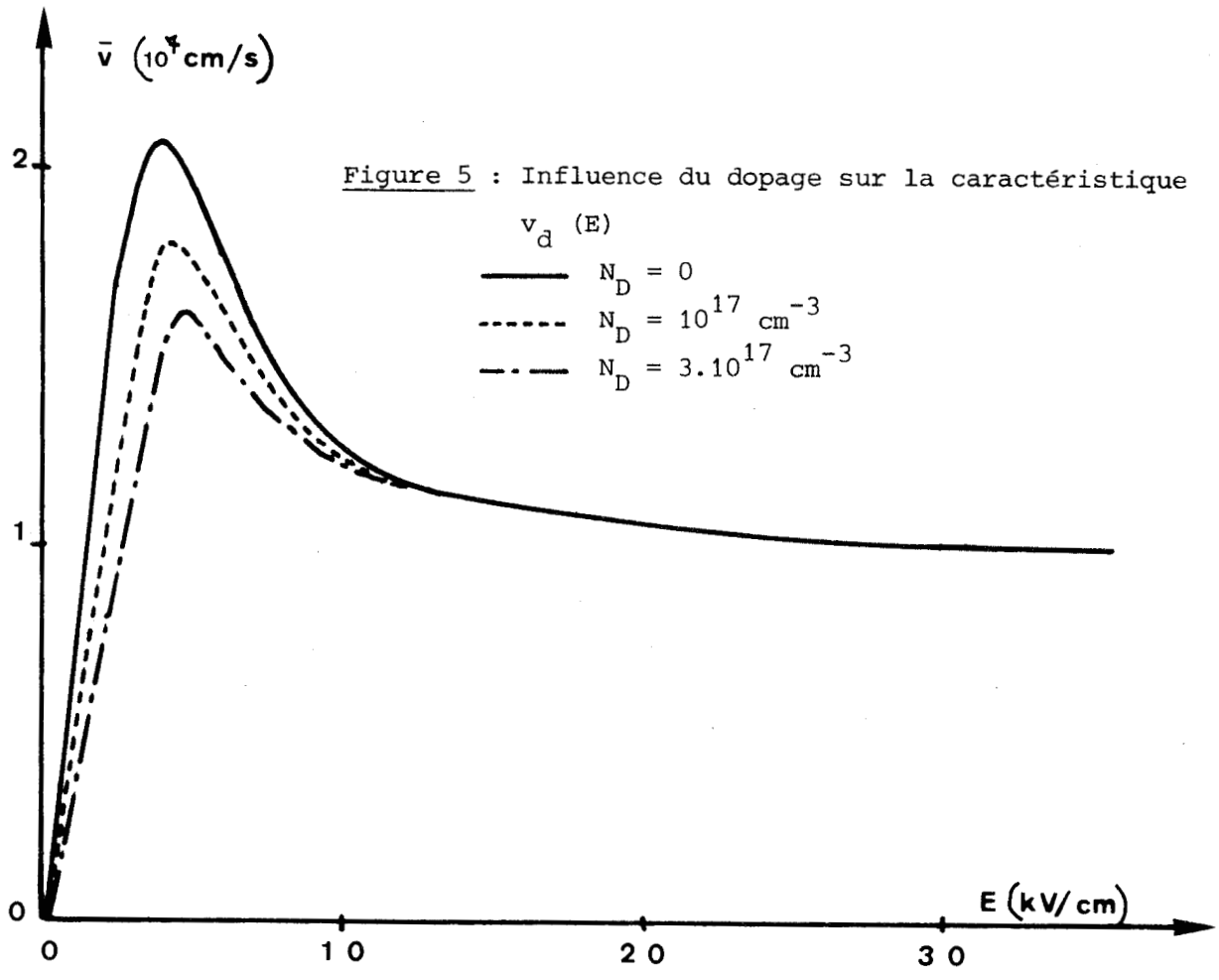


3,5 kV/cm environ ; la légère différence observée sur la valeur de la vitesse pic qui vaut  $2.1 \cdot 10^7$  cm/s provient principalement du fait que dans le modèle 3 vallées, le transfert en vallée haute d'un électron de la vallée centrale nécessite un peu moins d'énergie que dans le modèle 2 vallées.

En champ fort, chaque modèle fait intervenir les types d'interactions intervallées appropriées à sa structure de bande. Les caractéristiques relatives à l'énergie moyenne  $\varepsilon(E)$ , présentées sur la figure 3, dénotent des différences dans les conditions de transport de l'électron pour chacun des 2 modèles. Celles-ci sont également illustrées sur les figures 4a) et 4b) qui représentent les taux d'occupation, en fonction du champ, de chaque vallée par un électron, c'est-à-dire la répartition d'une population d'électrons entre les vallées. Néanmoins, les caractéristiques  $v_d(E)$  présentent peu d'écart en champ fort, la vitesse de saturation très vite atteinte avec le modèle 2 vallées est de l'ordre de  $0.8 \cdot 10^7$  cm/s.

#### IV.4. Influence du dopage sur $v_d(E)$

L'affaiblissement de la vitesse moyenne lié à la présence d'une concentration en impuretés est manifeste en champ faible et autour du champ de seuil. Comme le montre la figure 5, la déformation de la caractéristique  $v_d(E)$  liée à la présence d'impuretés de concentration égale à  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  et  $3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  respectivement, est caractérisée par une diminution de la mobilité en champ faible, par un affaiblissement de la vitesse pic et une légère augmentation du champ de seuil qui est de 4,5 kV/cm à  $3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . La diminution de la mobilité fonction du dopage est représentée sur la figure 6. Quand le champ est supérieur à 10 kV/cm, l'effet des impuretés est négligeable.



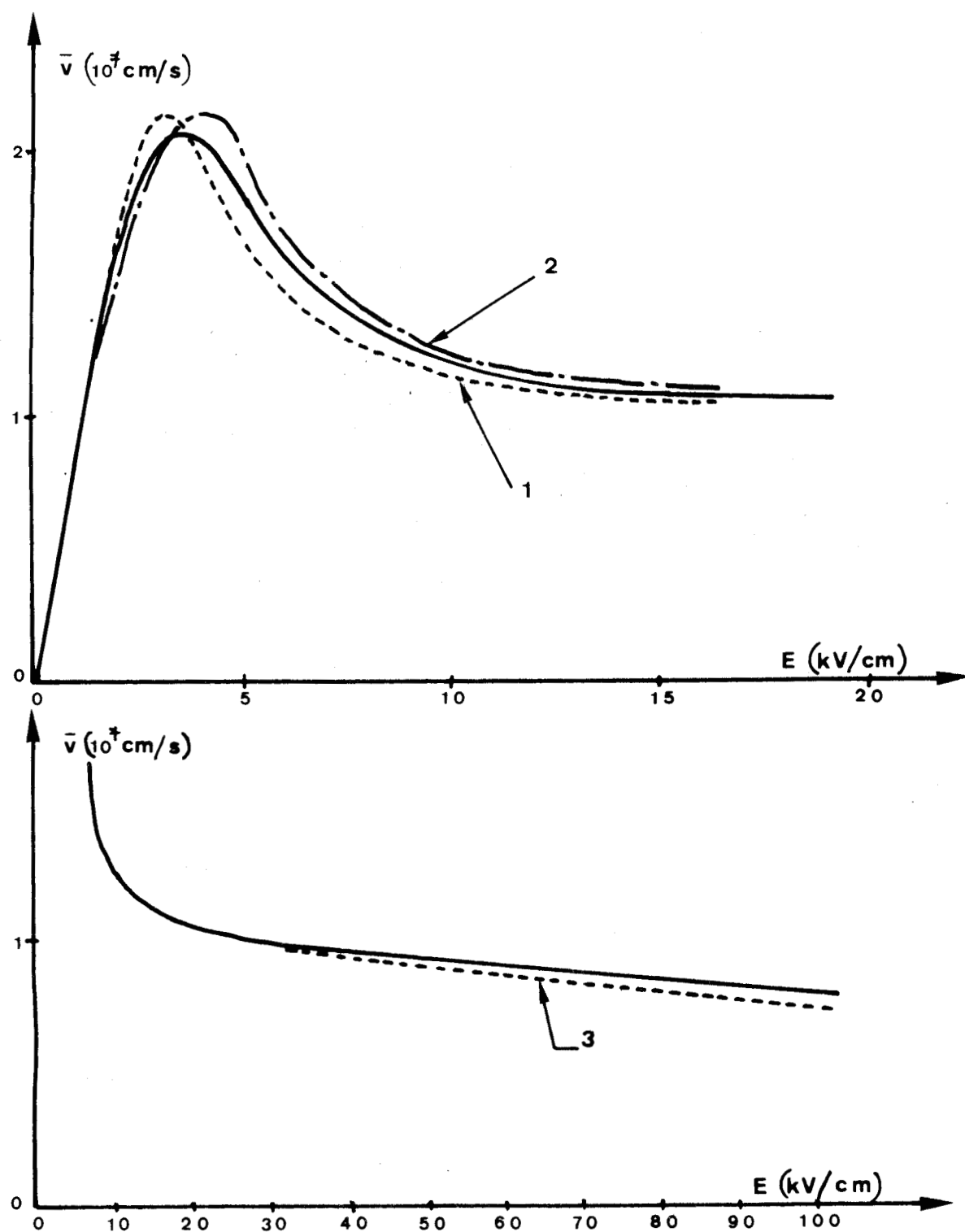


Figure 7 : Comparaison des résultats obtenus avec ceux de la littérature

- résultats Monté Carlo
1. J.G. Ruch , G.S. Kino [13]
  2. N. Braslau, P.S. Hauge [14]
  3. P.A. Houston, A.G.R. Evans [15]



#### IV.5. Comparaison avec les résultats de la littérature

Il existe dans la littérature de nombreuses références aussi bien expérimentales [13-15] que numériques [2, 3] relatives à la caractéristique  $v_d(E)$ . Expérimentalement, cette détermination a fait appel principalement aux techniques de temps de vol [13, 15] et aux techniques microondes [14]. La figure 7 montre que les résultats obtenus par la simulation sont dans la moyenne des résultats expérimentaux aussi bien en champ fort qu'en champ faible. Ils sont également en concordance avec les caractéristiques numériques présentées par M.A. Littlejohn et par W. Fawcett.

#### V. CONCLUSION

La particularité de la méthode de Monte Carlo présentée réside en la discrétisation du temps en pas régulier. Elle diffère en ceci des autres méthodes qui font généralement intervenir la procédure de self-scattering. Néanmoins, les premiers résultats obtenus relatifs à la vitesse de dérive en régime stationnaire, sont en accord avec les résultats expérimentaux déjà parus ainsi qu'avec les résultats numériques publiés avec des modèles 2 vallées ou 3 vallées.

Cette méthode présente en outre le gros avantage d'être d'un emploi facile pour toute détermination de grandeurs instantanées définies sur un ensemble d'électrons. En effet, la discrétisation du temps en pas réguliers permet, à chaque pas, de connaître l'état de chaque électron et de déterminer alors directement le comportement moyen instantané de l'ensemble des électrons ; cette

détermination n'est pas immédiate avec la procédure de self-scattering pour laquelle les durées de vol libre sont distribuées pour chaque électron.

La méthode présentée sera donc souple d'emploi dans ses diverses applications, en particulier dans l'étude du coefficient de diffusion et surtout en régime non stationnaire.

CHAPITRE II

CONTRIBUTION A L'ETUDE DE LA DIFFUSION  
DANS L'ASGA PAR LES METHODES DE MONTE CARLO

# TABLE DES MATIÈRES

|   |       |
|---|-------|
| INTRODUCTION  | P. 30 |
| I. DEFINITIONS ET CONDITIONS D'ETUDE DU COEFFICIENT DE<br>DIFFUSION EN REGIME STATIONNAIRE DANS L'AsGa INTRINSEQUE    | P. 32 |
| I <sub>1</sub> Coefficient de diffusion par étalement d'un paquet   | P. 32 |
| I <sub>2</sub> Coefficient de diffusion bruit   | P. 34 |
| I <sub>3</sub> Equivalence théorique des deux définitions   | P. 36 |
| I <sub>4</sub> Existence d'une équivalence numérique entre D (T)<br>et D (ω) ; conséquence sur les conditions d'étude | P. 38 |
| I <sub>4</sub> Conclusion   | P. 41 |
| II. COEFFICIENT DE DIFFUSION EN REGIME STATIONNAIRE :<br>RESULTATS ET INTERPRETATION                                  | P. 42 |
| II <sub>1</sub> Comparaison des 2 méthodes  | P. 43 |
| II <sub>2</sub> Comparaison entre D <sub>//</sub> (E) et D (E)  | P. 44 |
| II <sub>3</sub> Interprétation : contribution des transferts à<br>la diffusion  | P. 46 |
| II <sub>4</sub> Conclusion  | P. 47 |
| III. EFFET DU DOPAGE SUR LE COEFFICIENT DE DIFFUSION ET<br>ETUDE EXPERIMENTALE  | P. 49 |
| III <sub>1</sub> Effet du dopage sur le coefficient de diffusion  | P. 49 |
| III <sub>2</sub> Relation entre température de bruit et<br>coefficient de diffusion                                   | P. 50 |
| III <sub>3</sub> Description de l'étude expérimentale   | P. 51 |
| III <sub>4</sub> Résultats expérimentaux  | P. 54 |
| III <sub>5</sub> Conclusion   | P. 54 |
| IV. CONCLUSION  | P. 55 |

## INTRODUCTION

Le coefficient de diffusion, qui traduit les fluctuations de grandeurs telles que vitesse ou position autour de leurs valeurs moyennes, est un paramètre dont la connaissance est nécessaire pour la détermination des caractéristiques de fonctionnement, des limitations en fréquence et des propriétés de bruit de composants à électrons chauds tels que diode gunn, FET.

L'ensemble des ouvrages déjà parus sur le coefficient de diffusion montre que ce paramètre du second ordre est difficile à déterminer aussi bien expérimentalement [13] que numériquement [24-29] en particulier en régime d'électrons chauds.

Expérimentalement, il n'existe qu'une seule mesure directe du coefficient de diffusion par J.G. Ruch et G.S. Kino [13] utilisant les techniques de temps de vol ; mais, indirectement des mesures de température de bruit peuvent fournir le coefficient de diffusion  $D(E)$  en champ faible à partir de la relation d'Einstein généralisée [18-19].

Les études théoriques présentent une grande diversité d'approches : certaines font intervenir des contraintes analytiques telles l'équation de Boltzmann [20-21] où les équations de continuité [22-23], d'autres reposent sur une simulation de type Monte Carlo [24-26] ou une modélisation basée sur l'hypothèse d'une "marche au hasard" [27-28]. Parmi toutes ces approches, les méthodes de Monte Carlo semblent les mieux adaptées à cette étude, parce qu'elles sont à la fois plus souples que les approches analytiques et qu'elles permettent une description plus précise de la réalité physique que les méthodes basées sur la marche au hasard. Elles sont effectivement parmi les plus couramment utilisées pour l'étude de la diffusion.



L'ensemble de tous les résultats obtenus, aussi bien numériques qu'expérimentaux, présente une grande dispersion ; en particulier, la position relative des caractéristiques stationnaires  $D_{//}(E)$  et  $D_{\perp}(E)$  l'une par rapport à l'autre est mal déterminée [24, 28, 29].

Ce chapitre contribue à lever une partie de ces indéterminations en précisant d'abord les conditions optimales d'étude des coefficients de diffusion  $D_{//}(E)$  et  $D_{\perp}(E)$  en régime stationnaire avec les méthodes de Monte Carlo ; en particulier, les problèmes propres au régime d'électrons chauds sont traités. L'interprétation des résultats obtenus dans l'Arséniure de Gallium intrinsèque met en lumière l'effet des transferts sur le coefficient de diffusion.

Cette étude est complétée par des déterminations théoriques et des mesures de températures de bruit qui permettent d'obtenir le coefficient de diffusion  $D_{//}(E)$  en champ faible.

I. DEFINITIONS ET CONDITIONS D'ETUDE DU COEFFICIENT DE DIFFUSION  
EN REGIME STATIONNAIRE DANS L'AsGa INTRINSEQUE

La diffusion est liée au phénomène de dérive de chaque électron par rapport à un comportement moyen. Elle peut se traduire soit par la rapidité d'étalement d'un paquet de porteurs en excès, soit par le désordre lié aux fluctuations de vitesse des électrons. Ces deux aspects de la diffusion donnent lieu à deux définitions possibles du coefficient de diffusion, dont l'équivalence est démontrée [30, 32].

I.1. Coefficient de diffusion par étalement d'un paquet

L'un des aspects de la diffusion peut se traduire par la dispersion des positions des électrons d'un paquet entraîné éventuellement par un champ électrique. Cette dispersion, liée à la distribution et aux fluctuations des vitesses des électrons, peut s'évaluer à chaque instant par la variance des distances parcourues par les électrons à partir d'un instant  $t_0$  de référence. Il est alors équivalent d'assigner à tous ces électrons indépendants les uns des autres la même référence de position à l'instant  $t_0$ , c'est-à-dire de considérer un paquet de porteurs de variance nulle dit "Dirac de porteurs" et d'étudier l'étalement de ce paquet au cours du temps (schéma 6). Les coefficients de diffusion parallèle et transverse  $D_{//}(E)$  et  $D_{\perp}(E)$  qui mesurent la rapidité moyenne d'étalement du paquet au cours du temps sont alors définis [28] par :

$$D_{//}(E) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \frac{\text{var } z(t)}{t}$$

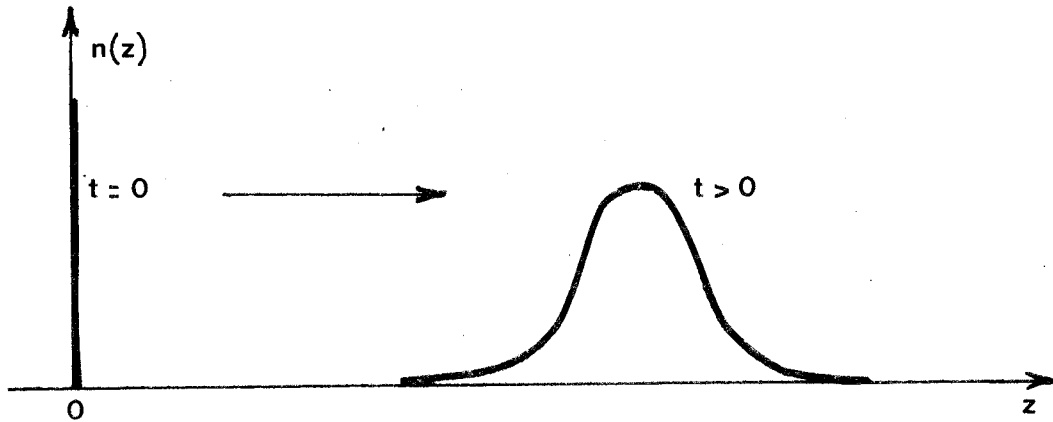
et

$$D_{\perp}(E) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \frac{\text{var } y(t)}{t}$$

où  $\text{var } z$  et  $\text{var } y$  sont les variances des distances parcourues dans des directions respectivement parallèle et perpendiculaire au champ appliqué à partir d'un instant  $t_0$  pour lequel le régime stationnaire est atteint. Les méthodes de Monte Carlo sont tout à fait appropriées à la simulation directe des conditions de détermination du coefficient de diffusion par cette définition : un paquet de  $N$  électrons, préalablement amené en régime stationnaire, est lâché sous forme de Dirac à l'instant  $t_0$ . Grâce à la souplesse de la procédure de discrétisation du temps en pas réguliers  $\Delta T$ , il est possible de suivre l'étalement du paquet en déterminant à chaque instant les variances de position  $\text{var } z(t)$  et  $\text{var } y(t)$  calculées sur l'ensemble des électrons.

Néanmoins, les méthodes de Monte Carlo ne pouvant faire intervenir qu'un nombre limité de processus élémentaires, le temps d'observation  $T$  ne peut être infini et le coefficient de diffusion est alors donné par l'expression approchée  $D(T,E) = \frac{\text{var } z(T)}{2T}$ . Une limite supérieure étant imposée au nombre total  $n$   $N$  de processus élémentaires nécessaires à l'observation de  $N$  électrons pendant  $n$  pas, une augmentation de la durée d'observation entraîne une diminution de la statistique sur le nombre  $N$  d'électrons. La durée  $T$  d'observation est donc limitée par valeur supérieure pour des raisons statistiques. D'autre part, d'après la définition, le coefficient de diffusion  $D(T,E) = \frac{\text{var } z(T)}{2T}$ , tel qu'il est déterminé par Monte Carlo, est quasiment constant pour des temps d'observation suffisamment longs. Cependant, quand le temps  $T$  d'observation est faible, le coefficient de diffusion  $D(T,E)$  varie à priori en fonction de  $T$  [30]. Il sera donc nécessaire de connaître les durées  $T$  à partir desquelles la valeur du coefficient de diffusion est très proche de la valeur limite obtenue avec un temps d'observation infini.

Il convient alors, au préalable, de préciser quelles sont les conditions suffisantes à une détermination correcte du coefficient de diffusion. C'est l'étude de l'aspect fréquentiel de la diffusion qui y contribuera.



SCHEMA 6

### I.2. Coefficient de diffusion bruit

Un autre aspect de la diffusion se traduit par le bruit lié aux fluctuations des vitesses des électrons [31]. Ce bruit de diffusion est alors caractérisé par sa densité spectrale  $S(\omega)$  qui est, d'après le théorème de Wiener Kintchine, la transformée de Fourier de la fonction de corrélation des fluctuations de vitesse  $f(\theta) = \langle (v(t) - \bar{v}(E)) (v(t + \theta) - \bar{v}(E)) \rangle_t$  :

$$S(\omega) = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} f(\theta) e^{-i\omega\theta} d\theta$$

Dans ces expressions  $\bar{v}(E)$  est la valeur stationnaire de la vitesse correspondant au champ  $E$  et le symbole  $\langle \rangle_t$  indique une moyenne sur le temps.

Le coefficient de diffusion "dynamique", obtenu [31] par  $D(\omega) = \frac{S(\omega)}{4}$  peut s'écrire compte tenu de la parité de la fonction de corrélation  $f(\theta)$  :

$$D(\omega) = \int_0^{\infty} f(\theta) \cos \omega \theta \, d\theta$$

Le coefficient de diffusion statique est alors défini par :

$$D = \lim_{\omega \rightarrow 0} D(\omega) = \int_0^{\infty} f(\theta) \, d\theta$$

Il peut s'exprimer simplement à l'aide du temps de corrélation des fluctuations de vitesse :

$$\tau = \int_0^{\infty} \frac{f(\theta)}{f(0)} \, d\theta$$

par  $D = f(0) \cdot \tau = \text{var } v \cdot \tau$  où  $\text{var } v$  est la variance des vitesses ; suivant la direction considérée, cette définition s'écrit :

$$D_{//} (E) = \text{var } v_{//} (E) \cdot \tau_{//} (E)$$

$$\text{ou } D_{\perp} (E) = \text{var } v_{\perp} (E) \cdot \tau_{\perp} (E)$$

La simulation de Monte Carlo, compte tenu du principe de l'ergodisme, permet le calcul de la fonction de corrélation des fluctuations de vitesse  $f(\theta)$  à partir de la trajectoire d'un électron enregistré à chaque pas au cours du temps. La difficulté de la détermination numérique des coefficients  $D(\omega)$  réside en ce qu'ils nécessitent une intégration sur le temps présentant une borne infinie. Cette difficulté est théoriquement contournée grâce à la propriété de la fonction de corrélation  $f(\theta)$  qui est de s'annuler aux temps  $\theta$  longs où les vitesses  $v(t)$  et  $v(t + \theta)$  sont entièrement décorrélées. Ainsi la borne infinie d'intégration peut être remplacée par une borne finie. En pratique, la détermination de cette borne finie qui est fonction du champ électrique appliqué

est très délicate et nécessite en particulier une excellente statistique sur le calcul de la vitesse moyenne  $\bar{v}(E)$  et des valeurs de la fonction de corrélation  $f(\theta)$ .

L'ensemble de ces conditions font des coefficients de diffusion dynamiques  $D(\omega)$  et en particulier du coefficient de diffusion  $D(0)$  des paramètres difficiles à déterminer avec précision.

### I.3. Equivalence théorique des deux définitions [30, 32]

Le phénomène de diffusion vient d'être abordé suivant deux approches de natures différentes, se traduisant par deux définitions possibles du coefficient de diffusion, l'une reposant sur l'observation de l'étalement d'un paquet d'électrons au cours du temps, l'autre sur les propriétés de la densité spectrale du bruit de diffusion. L'objet de ce paragraphe est de montrer qu'il s'agit bien du même coefficient de diffusion qui a été défini à partir de deux aspects de la diffusion.

En effet, la fonction de corrélation  $f(\theta)$  qui peut s'écrire :

$$f(\theta) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T (v(t) - \bar{v}) (v(t+\theta) - \bar{v}) dt$$

peut être considérée pour toute valeur de  $\theta$  comme la limite quand  $T \rightarrow \infty$  d'une fonction  $f_T(\theta)$  qui est la fonction de corrélation de la restriction  $\Delta v_T(t)$  à l'intervalle  $[0, T]$  de la fonction des fluctuations de vitesse. Cette restriction  $\Delta v_T(t)$  admet alors comme transformée de Fourier  $V_T(\omega) = \int_0^T (v(t) - \bar{v}) e^{-i\omega t} dt$

La fonction de corrélation  $f(\theta)$  peut alors s'exprimer sous la forme :

$$f(\theta) = \lim_{T \rightarrow \infty} \int_T(\theta) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \Delta v_T(t) * \Delta v_T(-t)$$

où \* désigne le produit de convolution.

Elle permet de définir la densité spectrale de bruit,  $S(\omega)$ , par l'expression suivante :

$$S(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} |V_T(\omega)|^2$$

expression qui moyennée sur l'ensemble des électrons s'écrit :

$$S(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \overline{\left| \int_0^T (v(t) - \bar{v}) e^{-i\omega t} dt \right|^2} = 2 D(\omega)$$

Le coefficient de diffusion bruit qui a été défini par :

$$D = \lim_{\omega \rightarrow 0} D(\omega)$$

s'écrit alors :

$$D = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \overline{\left| \int_0^T (v(t) - \bar{v}) dt \right|^2}$$

Dans cette expression,  $\overline{\left| \int_0^T (v(t) - \bar{v}) dt \right|^2}$  représente la variance des positions définie à l'instant T sur l'ensemble des électrons et l'équivalence théorique des deux coefficients de diffusion "paquet" et "bruit" est démontrée.

I.4. Recherche d'une équivalence numérique entre  $D_{\text{paquet}}(T)$  et  $D(\omega)$  ; conséquences sur les conditions d'étude

Il vient d'être montré qu'il est théoriquement équivalent de calculer le coefficient de diffusion à partir de l'étalement d'un paquet ou par le bruit. Or en pratique, les conditions relatives à ces définitions ne peuvent jamais être totalement remplies parce qu'elles font intervenir des intégrations sur des temps infinis, rendant très délicates les déterminations numériques du coefficient de diffusion aussi bien par l'étalement d'un paquet que par le bruit. Or il peut être montré [32] qu'en réalisant ces intégrations relatives à la fonction de corrélation  $f(\theta)$  ou aux fluctuations de vitesses  $v(t) - \bar{v}$ , pendant un temps  $T$  très grand devant le temps de corrélation des fluctuations de vitesses, alors l'équivalence numérique entre les deux coefficients de diffusion est vérifiée. Mais, étant données les limitations statistiques imposées par les méthodes de Monte Carlo, il est nécessaire de connaître le temps minimal  $T$  suffisant pour une bonne détermination du coefficient de diffusion. C'est pourquoi, il est intéressant de compléter l'équivalence théorique des deux définitions proposées par une étude comparée entre les déterminations numériques  $D_{\text{paquet}}(T)$  et  $D(\omega)$ . Dans cette étude seront envisagés les cas limites  $T \ll \tau$  et  $T \gg \tau$  avant que ne soit abordé le cas général correspondant aux présentes conditions d'étude.

◦ Cas où  $T \ll \tau$  et  $\omega \gg \frac{1}{\tau}$

Quand le temps d'observation  $T$  est très faible devant le temps de corrélation, les fluctuations de vitesse n'ont pas le temps de changer durant le temps  $T$ . Il en résulte que le coefficient de diffusion  $D_{\text{paquet}}(T)$  approché s'écrit alors :

$$D_{\text{paquet}}(T) = \frac{\text{var } z(T)}{2T} = \frac{\left| \int_0^T (v(t) - \bar{v}) dt \right|^2}{2T} = \text{var } v \cdot \frac{T}{2}$$



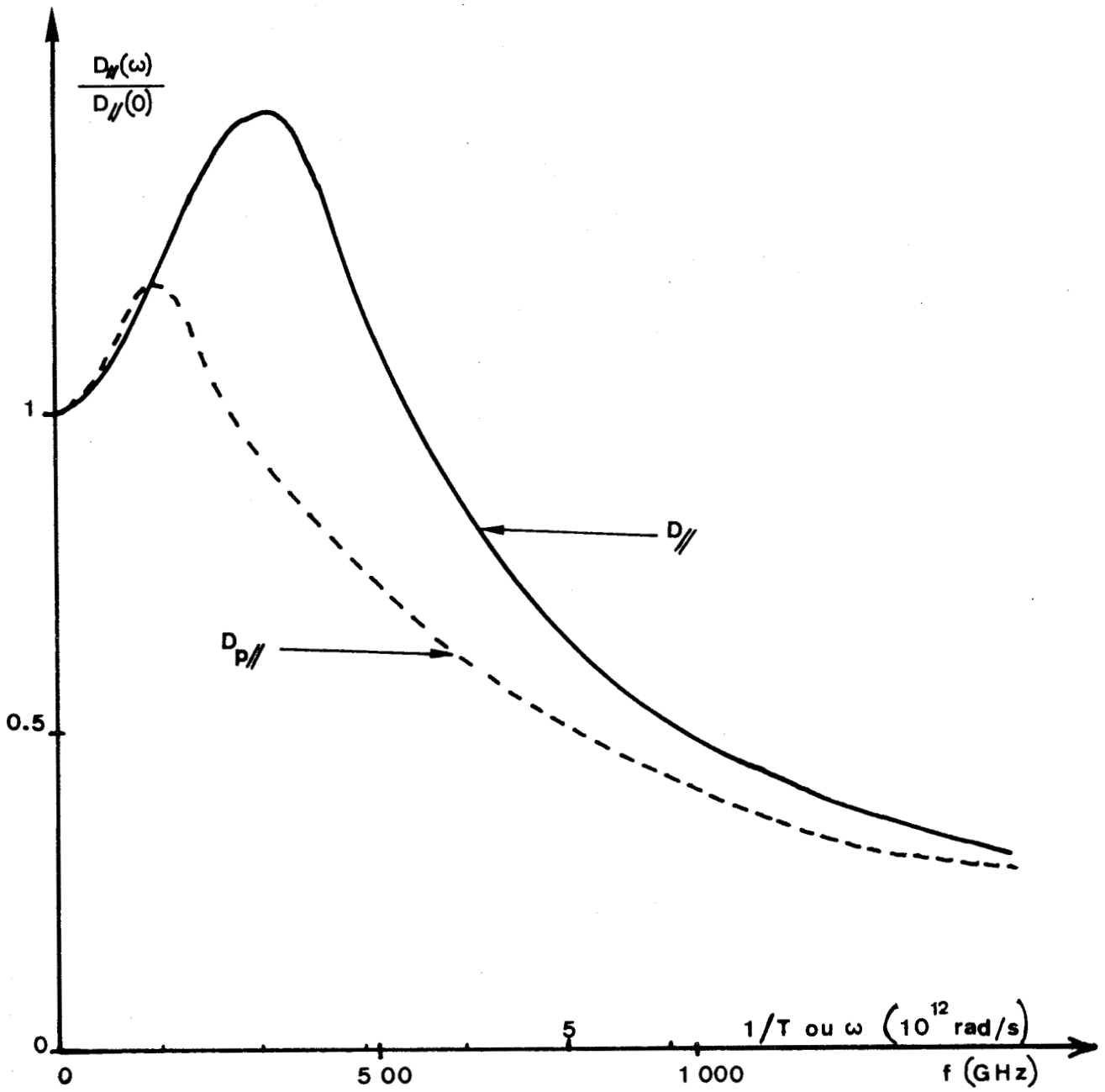


Figure 8 : Comparaison entre  $D_{\parallel}(\omega)$  et  $D_{P\parallel}(\frac{1}{\omega})$   
à  $E = 5$  kV/cm



La croissance aux temps faibles du coefficient de diffusion est donc linéaire ce qui correspond à une croissance parabolique pour la variance de position  $\text{var } z(T)$ .

Alors qu'il est aisé de caractériser le coefficient de diffusion  $D_p(T)$  pour des temps  $T$  d'observation faible, il n'en est pas de même pour le coefficient bruit  $D(\omega)$  aux fréquences élevées ; néanmoins la figure 8 montre que les coefficients  $D(\omega)$  et  $D_p(T)$  où  $T = \frac{1}{\omega}$ , représentés en fonction de la fréquence ont des allures voisines aux fréquences très élevées.

◦ Cas où  $T \gg \tau$  et  $\omega \ll \frac{1}{\tau}$

Dans ces conditions qui tendent vers les conditions limites où coefficient de diffusion paquet et bruit sont équivalents, il faut s'attendre à ce que  $D_p\left(\frac{1}{\omega}\right)$  et  $D(\omega)$  soient très proches. C'est ce qui est effectivement observé sur la figure 8. Par ailleurs, il a été démontré [32] que dans ces conditions  $\text{var } z(T) \approx 2D(o)T$ . Cette relation suggère que la variance de position varie linéairement aux temps longs.

◦ Cas général

Ce cas est illustré sur les figures 9a, 9b et 10a, 10b qui représentent les familles paramétrées par le champ électrique des courbes de variance de position fonction du temps et des courbes normalisées de densité spectrale de bruit  $\frac{D(\omega)}{D(o)}$  respectivement suivant les directions parallèles et perpendiculaires à la direction du champ  $E$ .

Il est à remarquer que dans la direction perpendiculaire, les courbes  $\text{var } y(t)$  et  $D_{\perp}(\omega)$  réalisent directement la jonction entre les deux cas limites

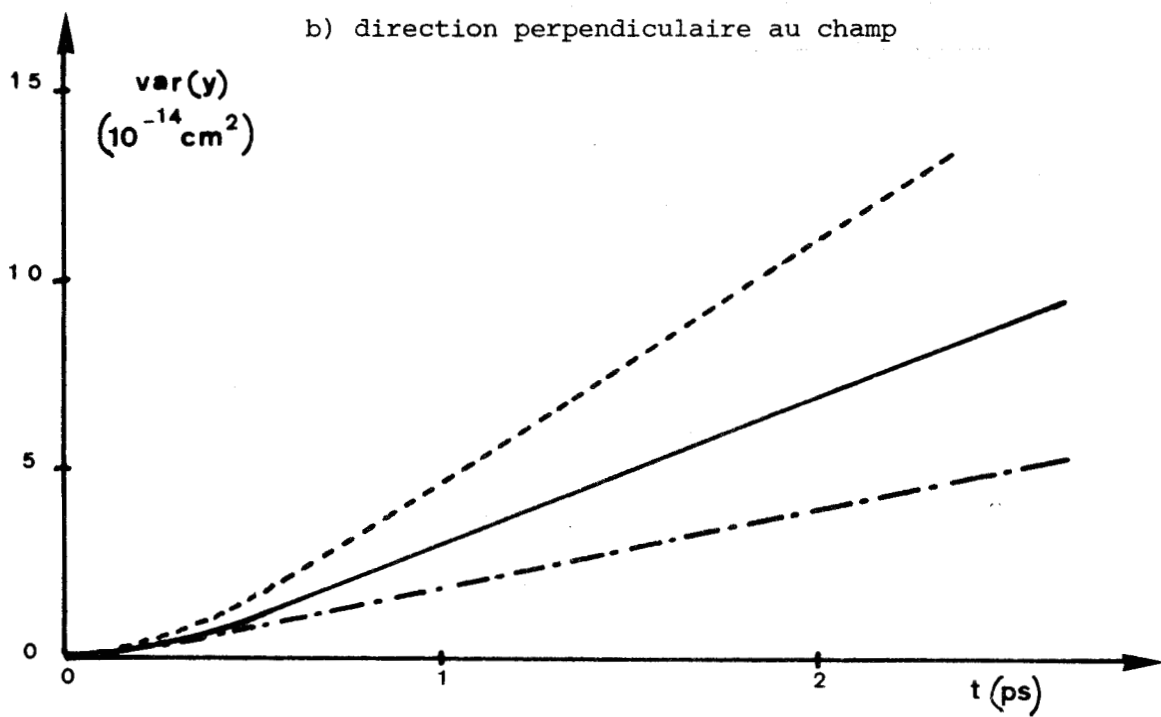
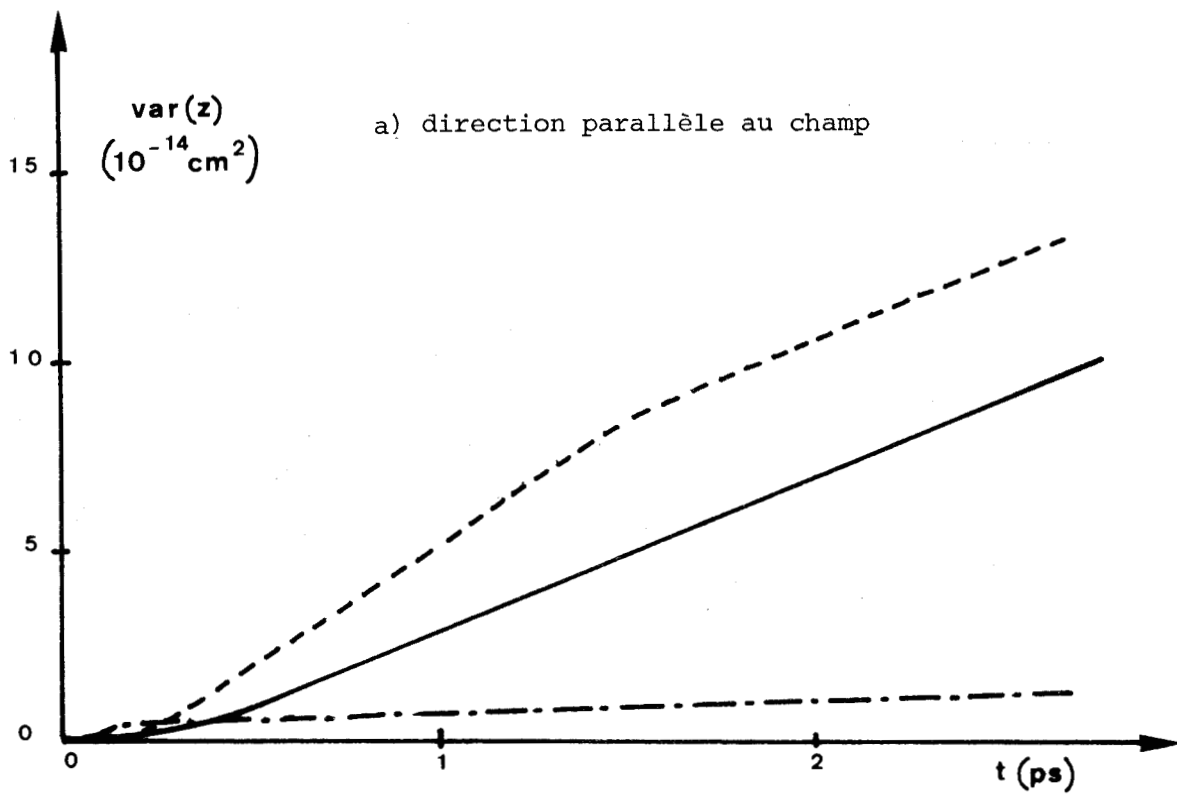


Figure 9 : Evolution des variances de position en fonction du temps

- E = 0 kV/cm
- - - E = 5 kV/cm
- · - · E = 20 kV/cm



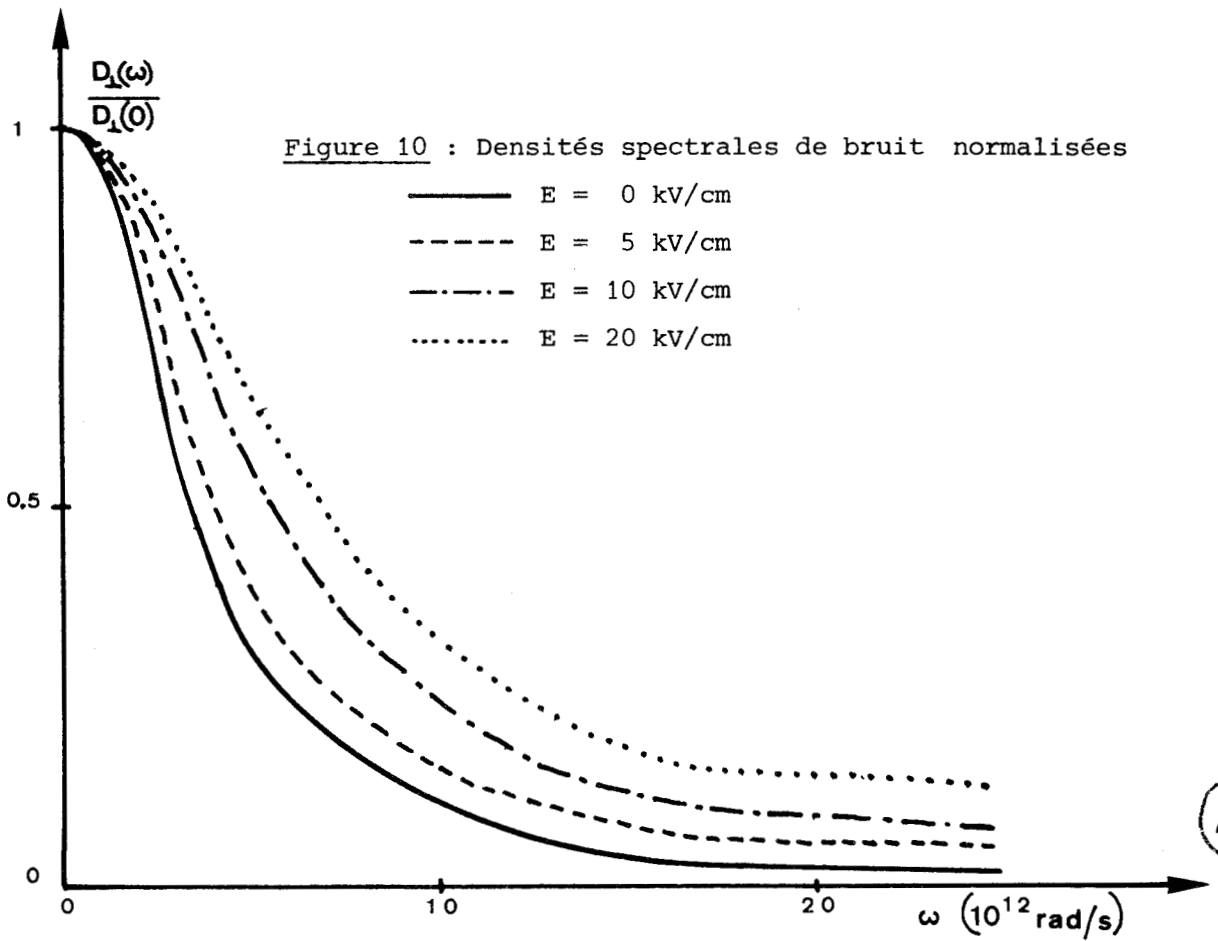
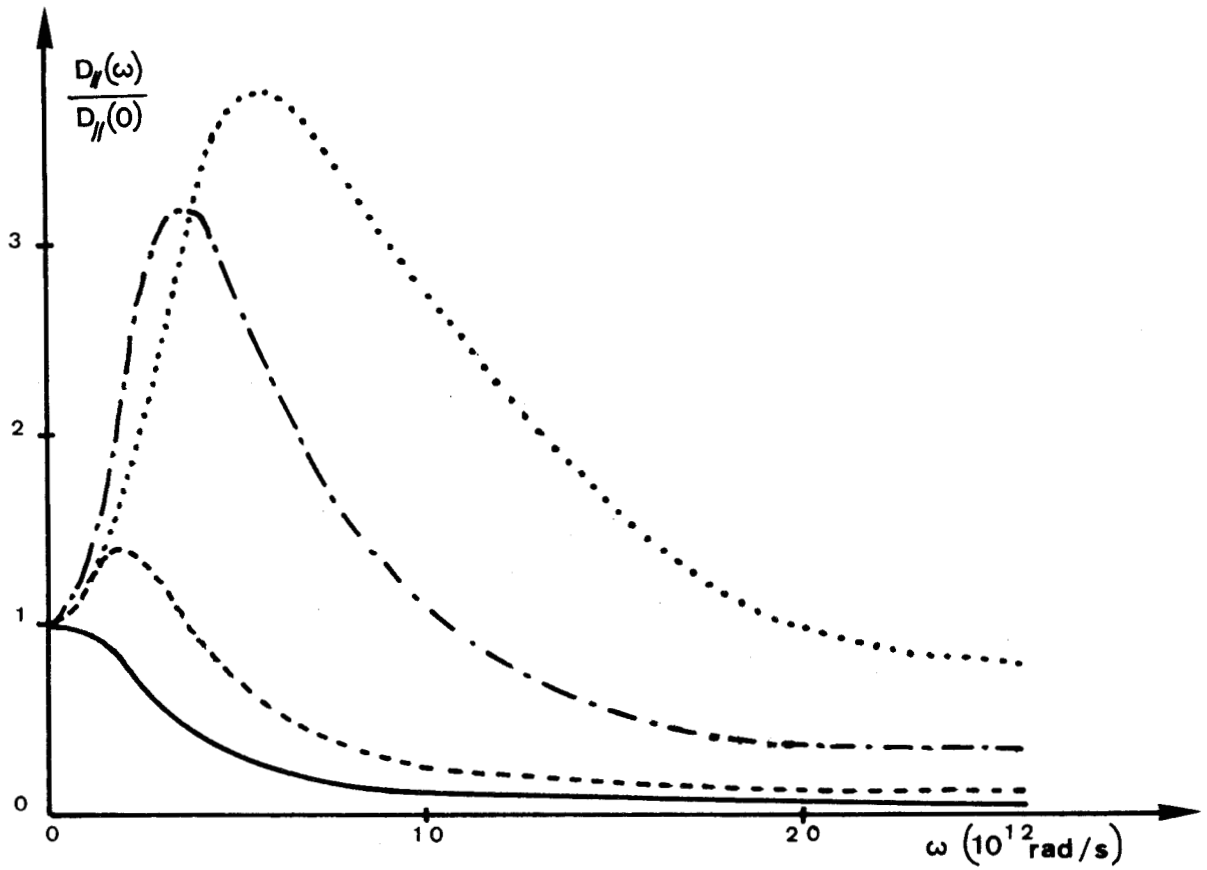


Figure 10 : Densités spectrales de bruit normalisées

- E = 0 kV/cm
- - - E = 5 kV/cm
- · - · E = 10 kV/cm
- · · · E = 20 kV/cm



qui viennent d'être présentés ; les courbes  $D_{\perp}(\omega)$  présentant un large palier à l'origine, il faut s'attendre d'après la correspondance qui a été faite aux faibles fréquences entre  $D(\omega)$  et  $D_p\left(\frac{1}{\omega}\right)$ , à ce que les courbes  $\text{var } y(t)$  correspondantes soient linéaires au bout d'une durée de l'ordre de quelques temps de corrélation. C'est ce qui est effectivement observé sur les figures 9b. Le coefficient  $D_p(T)$  calculé qui est alors pratiquement indépendant du temps d'observation au bout de quelques picosecondes, est très proche de la valeur qui aurait été obtenue au bout d'un temps infini.

La figure 9a montre qu'il en est de même dans la direction parallèle au champ pour des valeurs de champ inférieures au champ de seuil.

Par contre, pour des valeurs de champ supérieures au champ de seuil, les transferts entre vallée centrale et vallées hautes apportent de grosses perturbations sur l'allure des courbes  $\text{var } z(t)$  et  $D_{\parallel}(\omega)$  dans le domaine des valeurs intermédiaires aux deux cas limites étudiés ci-dessus. Comme le montrent les figures 9a et 10a, dans ce domaine des valeurs intermédiaires, le coefficient de diffusion  $D_{\parallel}(\omega)$  présente un maximum et le coefficient  $D_{\parallel}(T)$  dépend fortement du temps d'observation  $T$ . Il s'agit donc de déterminer la durée d'observation minimale au bout de laquelle le coefficient calculé  $D_{\parallel}(T)$  donnera une valeur correcte du coefficient de diffusion théorique.

La relation qui a été établie [30] (Annexe III) entre  $D_p(T)$  et

$D(\omega)$  :

$$D_p(T) = \frac{T}{\pi} \int_0^{\infty} \left( \frac{\sin(\omega T/2)}{\omega T/2} \right)^2 D(\omega) d\omega$$

montre que l'approximation qui est faite en observant un paquet d'électrons pendant une durée  $T$ , revient très approximativement à considérer  $D_p(T)$  comme la va-

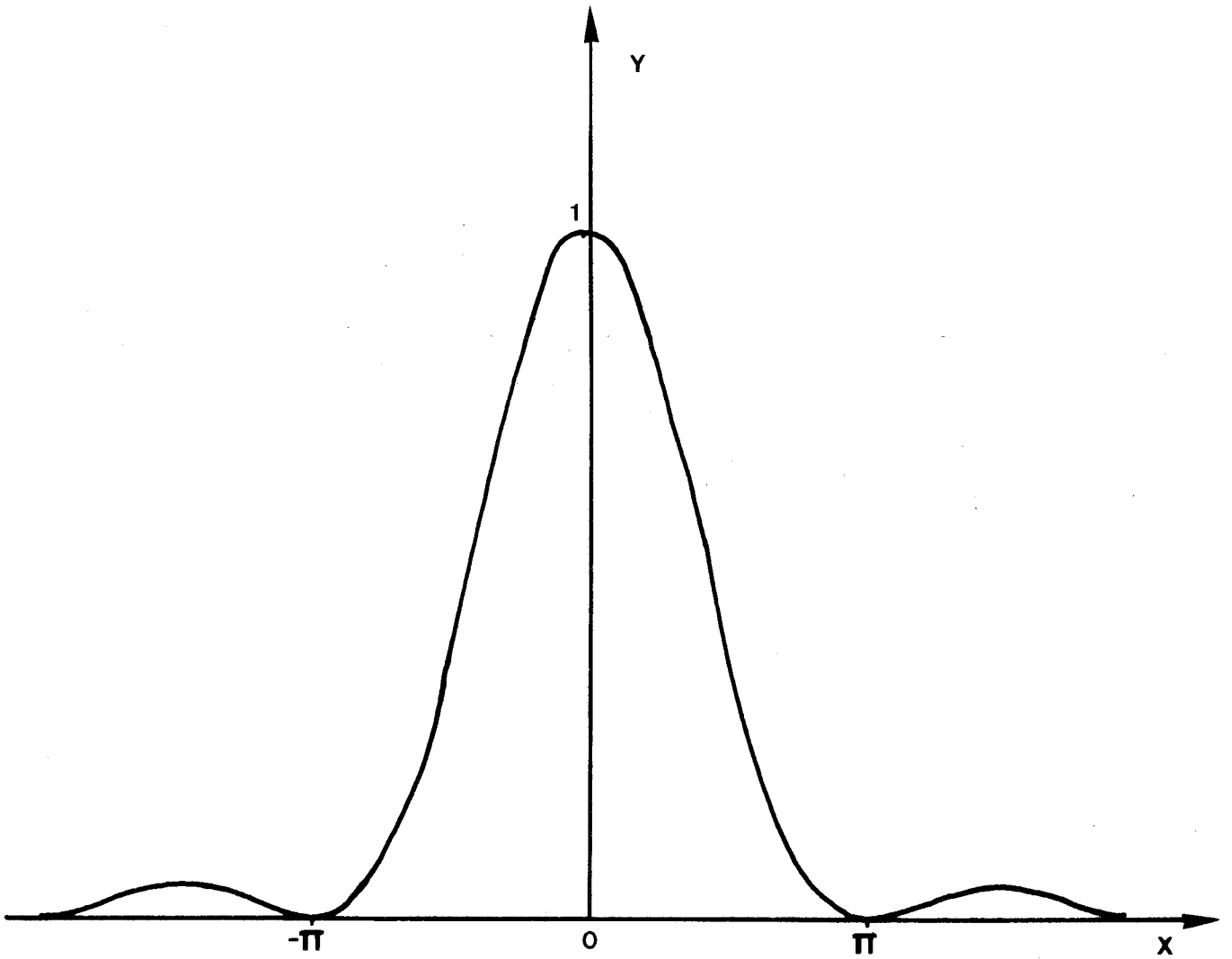


Figure 11 : Courbe représentative de la fonction  $\left(\frac{\sin x}{x}\right)^2$

leur moyenne de  $D(\omega)$  entre 0 et  $\frac{2\pi}{T}$ , étant donné les propriétés de la fonction  $(\frac{\sin x}{x})^2$  représentée sur la figure 11. Or, la figure 10a montre que les courbes  $D_{//}(\omega)$  présentent un maximum important à des fréquences de l'ordre du millier de GHz, pour des valeurs de champ supérieures au champ de seuil. Le coefficient paquet  $D_{//}(T)$  est alors très supérieur à la vraie valeur du coefficient de diffusion, pour des temps d'observation de l'ordre de la picoseconde. C'est ce qui est effectivement observé sur les courbes var  $z(t)$  correspondantes (figure 9a).

Augmenter le temps d'observation  $T$  revient à moyennner  $D(\omega)$  sur un intervalle  $[0, \frac{2\pi}{T}]$  plus faible et donc à obtenir une valeur plus proche de  $D(0)$ . Cette étude permet donc de déterminer le temps d'observation minimal nécessaire à une bonne détermination du coefficient de diffusion paquet.

### I.5. Conclusion

Deux définitions possibles équivalentes du coefficient de diffusion viennent d'être présentées :

$$D_{//} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2t} \overline{\left| \int_0^t (v_{//}(t) - \bar{v}) dt \right|^2} \quad \text{et} \quad D_{//} = \int_0^\infty f_{//}(\theta) d\theta$$

$$D_{\perp} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2t} \overline{\left| \int_0^t (v_{\perp}(t) - \bar{v}) dt \right|^2} \quad \text{et} \quad D_{\perp} = \int_0^\infty f_{\perp}(\theta) d\theta$$

Pour chacune d'entre elles, il est nécessaire de calculer une intégrale sur le temps entre 0 et l'infini, ce qui est impossible numériquement. Néanmoins, dans le cas du coefficient de diffusion bruit cette difficulté peut être réduite grâce à la propriété de la fonction de corrélation  $f(\theta)$  qui devient négligeable au bout d'un certain temps  $t_0$ . La détermination numérique de  $t_0$  étant délicate, c'est en augmentant la statistique qu'il est possible d'améliorer la valeur calculée du coefficient de diffusion bruit. Dans le cas du coefficient de diffusion paquet, l'étude faite dans le paragraphe précédent montre qu'il est possible de déterminer le temps optimal  $T$  d'observation du paquet à partir de la correspondance des propriétés présentées entre la variance de position fonction du temps et la densité spectrale de bruit fonction de la fréquence.

Les conditions optimales d'étude sont maintenant déterminées.

## II. COEFFICIENT DE DIFFUSION EN REGIME STATIONNAIRE.

### RESULTATS ET INTERPRETATION

Les définitions du coefficient de diffusion par étalement d'un paquet et par le bruit, qui ne supposent aucune condition sur le champ, sont applicables notamment en champ fort. Les méthodes de Monte Carlo permettent donc de contourner les difficultés que présente la définition d'un coefficient de diffusion en champ fort, qui tient compte à la fois de la répartition des électrons entre les vallées, et des transferts. En particulier, de nombreux auteurs [28] traduisent l'effet des transferts par un terme supplémentaire de diffusion, caractérisant le bruit de partition entre vallée centrale et vallées latérales.



Dans la présente étude, une fois établie l'équivalence des résultats obtenus avec chacune des deux définitions, la vraie contribution des transferts à la diffusion sera mise en évidence.

### II.1. Comparaison des deux méthodes

Les résultats relatifs au coefficient de diffusion  $D_{//}(E)$  et  $D_{\perp}(E)$ , obtenus suivant chacune des deux définitions sont présentés sur la figure 12 pour des valeurs de champ allant de 0 à 25 kV/cm. Ils résultent pour la diffusion paquet, de l'observation pendant 20 ps d'un paquet de 300 électrons en moyenne, et pour la diffusion bruit du traitement des vitesses prises par un électron pendant 3 nanosecondes.

Ces résultats illustrent l'équivalence numérique des deux définitions et contribuent ainsi à cerner les vrais valeurs du coefficient de diffusion.

En champ faible, grâce au caractère complet du modèle 3 vallées qui tient compte de toutes les interactions, les résultats obtenus ne présentent pas les instabilités numériques rencontrées chez de nombreux auteurs [24-26, 28, 29]. En particulier, quand le champ est nul, la relation d'Einstein  $D = \frac{kT}{q}\mu$  est parfaitement vérifiée.

Autour du champ de seuil, les coefficients de diffusion parallèles et transverses présentent un maximum respectivement de 240 et 325  $\text{cm}^2/\text{s}$ . Ce qui est dans la moyenne des résultats théoriques parus. Les résultats obtenus pour  $D_{//}(E)$  présentent une dispersion à la mesure des difficultés rencontrées pour leur obtention. Par contre, l'accord est bon entre les deux méthodes concernant les coefficients de diffusion transverses.

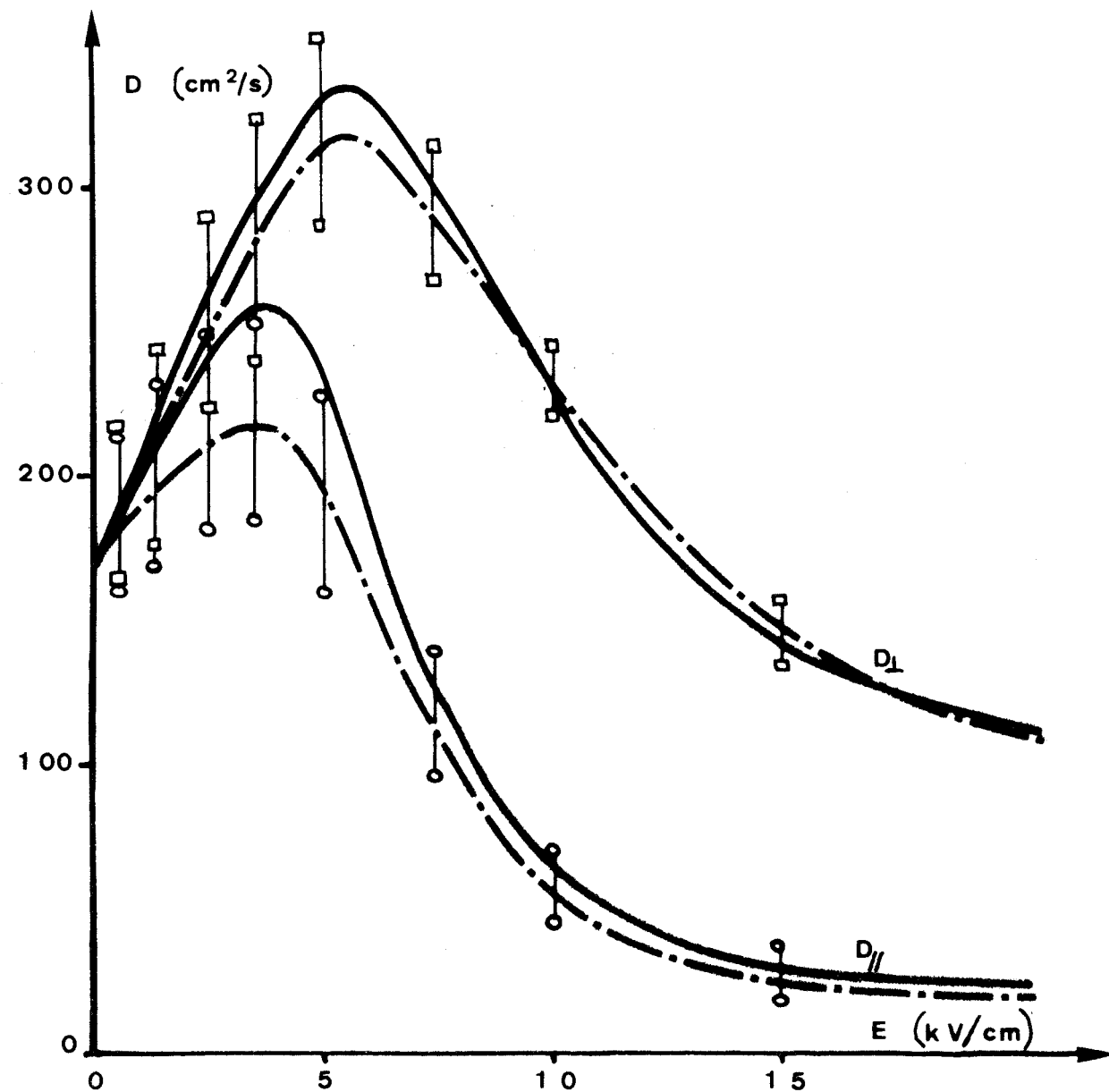


Figure 12 : Coefficients de diffusion  $D_{\parallel}(E)$  et  $D_{\perp}(E)$   
à  $N_D = 0$

———— coefficient de diffusion "bruit"  
-.-.- coefficient de diffusion "paquet"



En champ fort, les électrons sont lourds et tendent à ordonner leur mouvement dans la direction du champ. Les coefficients de diffusion parallèle et transverse décroissent alors en fonction du champ. A 20 kV/cm  $D_{//}$  vaut  $20 \text{ cm}^2/\text{s}$  et  $D_{\perp}$  vaut  $105 \text{ cm}^2/\text{s}$ .

L'accord entre les résultats numériques obtenus respectivement avec chacune des deux méthodes est suffisant pour cerner les caractéristiques de la diffusion en régime stationnaire ; en particulier, les différences entre les courbes parallèles et transverses apparaissent nettement.

### II.2. Comparaison entre $D_{//}(E)$ et $D_{\perp}(E)$

Les positions relatives des courbes  $D_{//}(E)$  et  $D_{\perp}(E)$  l'une par rapport à l'autre, sont mal définies dans la littérature [24-26, 28, 29]. Les résultats qui viennent d'être présentés (figure 12) montrent que pour toute valeur du champ supérieure au champ de seuil, le coefficient de diffusion transverse  $D_{\perp}(E)$  est nettement supérieur au coefficient de diffusion parallèle  $D_{//}(E)$ . C'est l'étude des différentes fonctions intervenant dans la définition des coefficients de diffusion bruit

$$D_{//}(E) = \text{var } v_{//}(E) \cdot \tau_{//}(E)$$

et 
$$D_{\perp}(E) = \text{var } v_{\perp}(E) \cdot \tau_{\perp}(E)$$

qui permettra de rendre compte de ces différences.

La figure 13 qui représente les variances de vitesse  $\text{var } v_{//}(E)$  et  $\text{var } v_{\perp}(E)$  montre qu'à partir du champ de seuil, les fluctuations de vitesses sont plus grandes dans la direction du champ que dans une direction transverse. Comme la variance de vitesse représente la puissance totale de bruit sommée sur

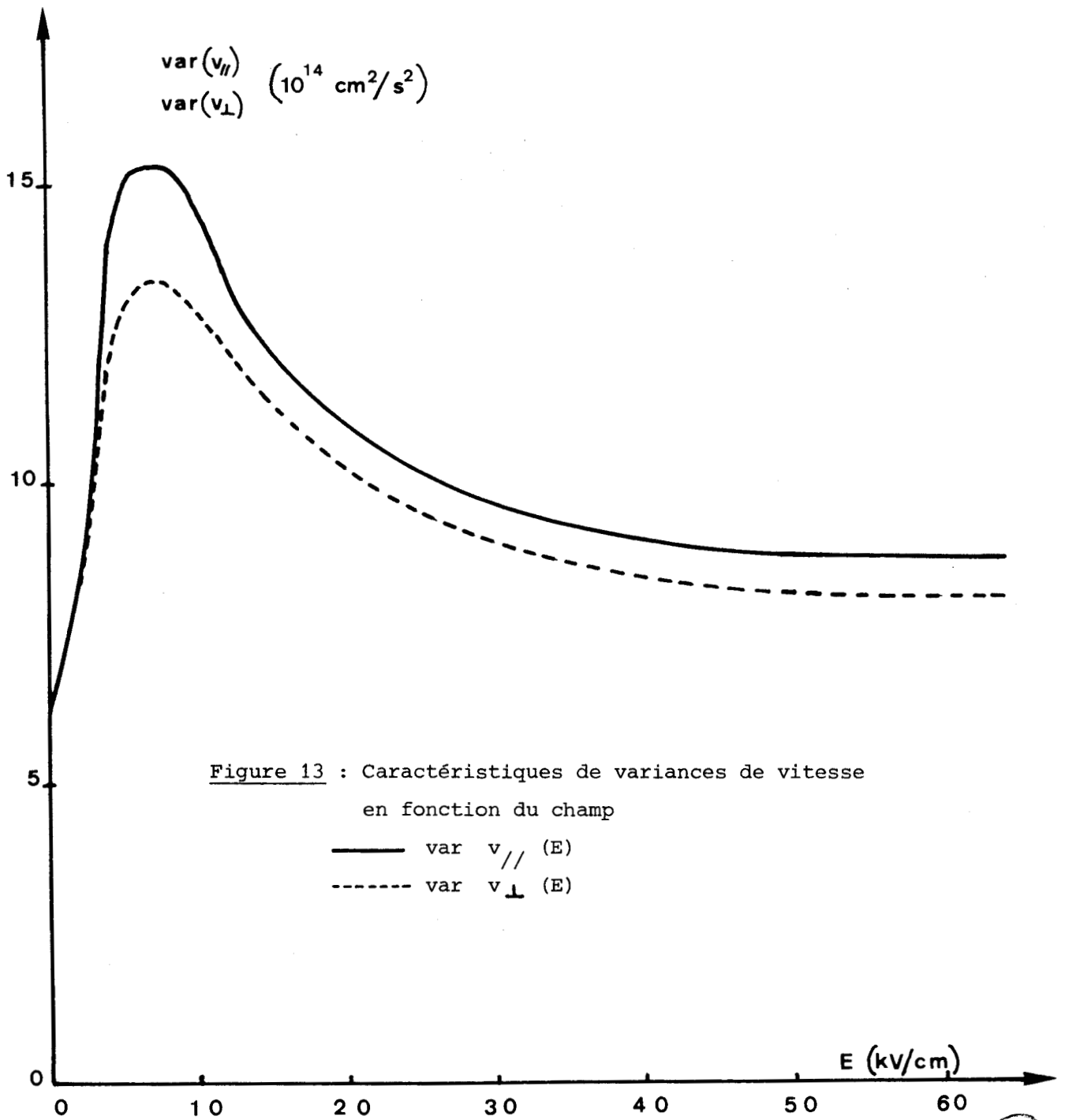


Figure 13 : Caractéristiques de variances de vitesse  
 en fonction du champ

— var  $v_{//}$  (E)  
 - - - var  $v_{\perp}$  (E)



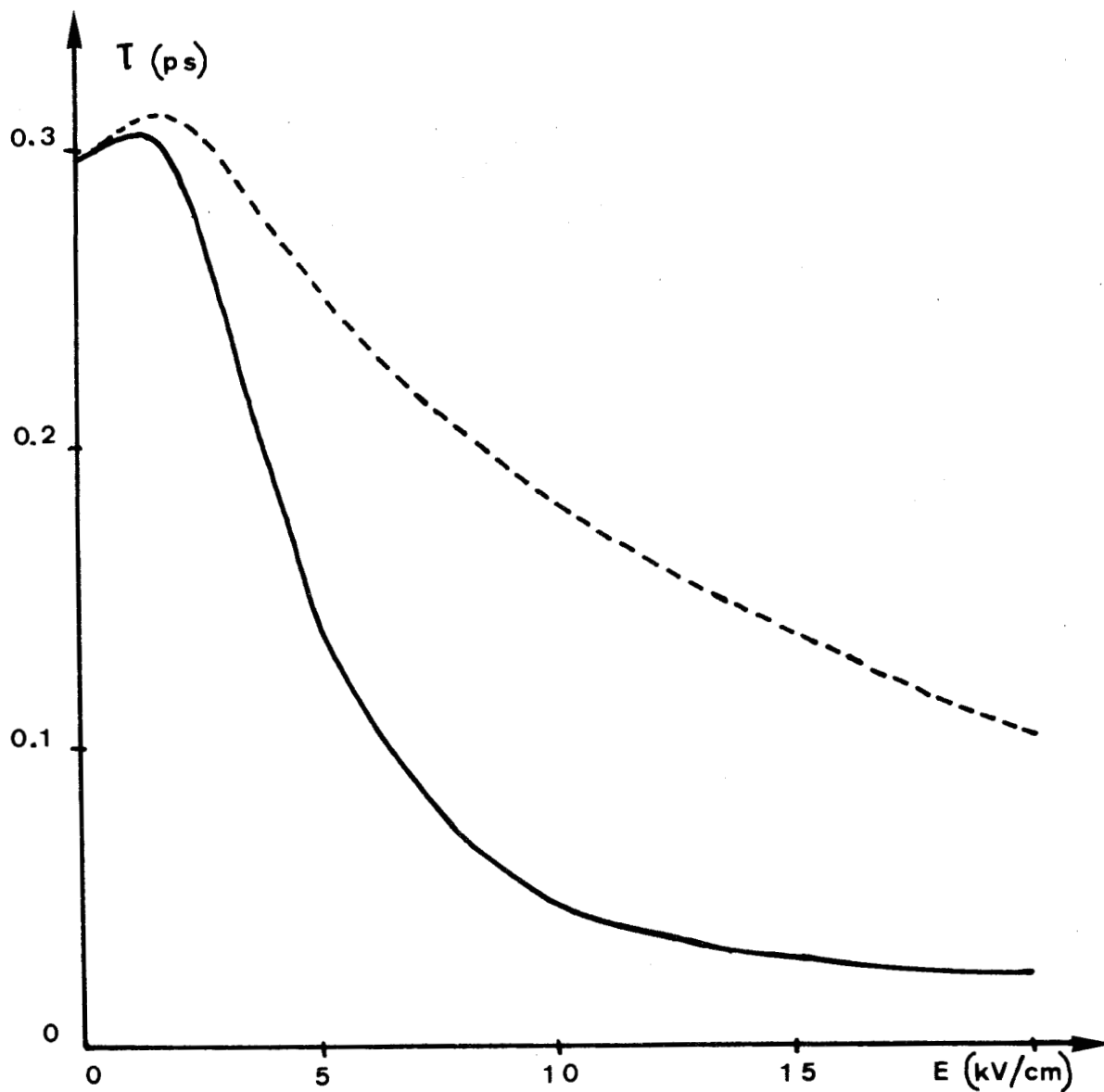


Figure 14 : Caractéristiques des temps de corrélation  
des fluctuations de vitesse en fonction  
du champ

—  $\tau_{//}$  (E)  
- - -  $\tau_{\perp}$  (E)



tout le spectre de fréquence, les différences observées entre  $\text{var } v_{//}(E)$  et  $\text{var } v_{\perp}(E)$  traduiraient bien la présence d'un bruit de partition suivant la direction du champ. Certains auteurs [28] attribuent à ce bruit excédentaire une importante contribution sur le coefficient de diffusion parallèle aboutissant ainsi à des valeurs de  $D_{//}(E)$  nettement supérieures à celles de  $D_{\perp}(E)$ . Mais en réalité l'effet sur  $D_{//}(E)$  des faibles valeurs du temps de corrélation  $\tau_{//}(E)$  comparées à celles de  $\tau_{\perp}(E)$  (figure 14) l'emporte largement sur celui du bruit de partition.

En effet, les figures 15a et 15b qui représentent les fonctions de corrélation normalisées des fluctuations de vitesse  $\phi_{//}(\theta) = \frac{f_{//}(\theta)}{f_{//}(0)}$  et  $\phi_{\perp}(\theta) = \frac{f_{\perp}(\theta)}{f_{\perp}(0)}$  montrent qu'à partir du champ de seuil, les fonctions de corrélation  $\phi_{//}(\theta)$  présentent une partie négative avant de s'annuler -c'est d'ailleurs cette propriété qui est à l'origine des particularités déjà évoquées (chapitre I.I.4) au niveau des densités spectrales correspondantes  $D_{//}(\omega)$  - Par contre, les fonctions de corrélation transverses  $\phi_{\perp}(\theta)$  décroissent vers 0 en restant positives. Comme les temps de corrélations  $\tau_{//}(E)$  et  $\tau_{\perp}(E)$  mesurent respectivement l'aire algébrique limitée par les courbes  $\phi_{//}(\theta)$  et  $\phi_{\perp}(\theta)$ , c'est cette particularité présentée par les fonctions  $\phi_{//}(\theta)$  qui est à l'origine de la brusque diminution du temps de corrélation  $\tau_{//}(E)$  fonction du champ et donc des faibles valeurs prises par  $D_{//}(E)$  comparées à celles de  $D_{\perp}(E)$ .

L'interprétation de ces propriétés permettra de mettre en lumière les mécanismes qui en sont à l'origine.

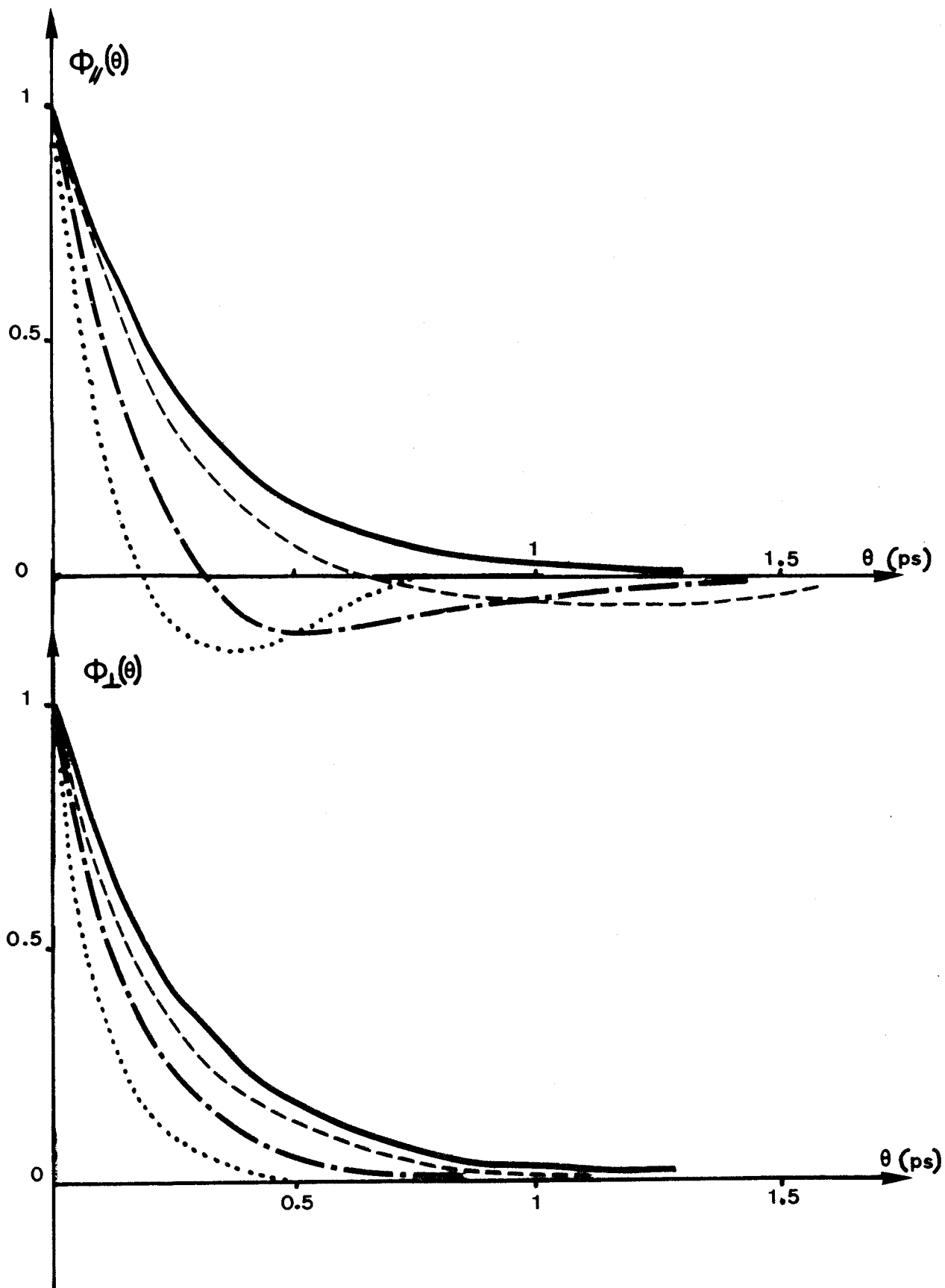


Figure 15 : Fonctions de corrélation des fluctuations de vitesse  $\phi_{//}(\theta)$  et  $\phi_{\perp}(\theta)$  normalisées

- E = 0 kV/cm
- - - - - E = 5 kV/cm
- · - · - E = 10 kV/cm
- E = 20 kV/cm



### II.3. Interprétation : contribution des transferts à la diffusion

La partie négative présentée par les fonctions de corrélation  $\phi_{\parallel}(\theta)$  pour des champs supérieurs au champ de seuil n'est absolument pas une anomalie statistique. Elle trouve son explication dans l'allure même que présentent les courbes des fluctuations de vitesse  $v_{\parallel}(t) - \bar{v}_{\parallel}$  fonction du temps en champ fort.

Le comportement de l'électron en champ fort est illustré sur la figure 16 qui représente l'évolution de  $v_{\parallel}(t) - \bar{v}_{\parallel}$  au cours du temps à 10 kV/cm. L'allure de  $v_{\parallel}(t) - \bar{v}_{\parallel}$  en vallée centrale peut être schématisée par une série de "rampes" dont la pente traduit à la fois l'action accélératrice du champ, renforcée par la faible valeur de la masse effective, et l'anisotropie propre aux interactions optiques polaires alors majoritaires qui favorisent les vitesses dans la direction parallèle au champ. En vallée latérale, comme prévu, l'amplitude des fluctuations de vitesse est faible. La partie négative de la fonction de corrélation est donc surtout due à la présence de ces rampes.

L'origine de ces rampes peut être illustrée sur la figure 17 qui représente les probabilités de transfert des électrons de la vallée centrale en fonction de leur vitesse parallèle. Elle montre que la probabilité de transfert vers les vallées latérales est plus forte pour des électrons à vitesse supérieure à la vitesse moyenne que pour les autres. Les mécanismes responsables de la présence de ces rampes apparaissent maintenant clairement : un électron qui vient de transférer de vallée latérale en vallée centrale a autant de chance d'avoir une vitesse parallèle positive que négative à cause de la "randomisation" caractéristique des interactions intervallées. Quand sa vitesse est positive, l'action du champ se traduit par un accroissement d'énergie et sa probabilité de retourner en vallée latérale est alors très forte. Par contre, quand sa vi-



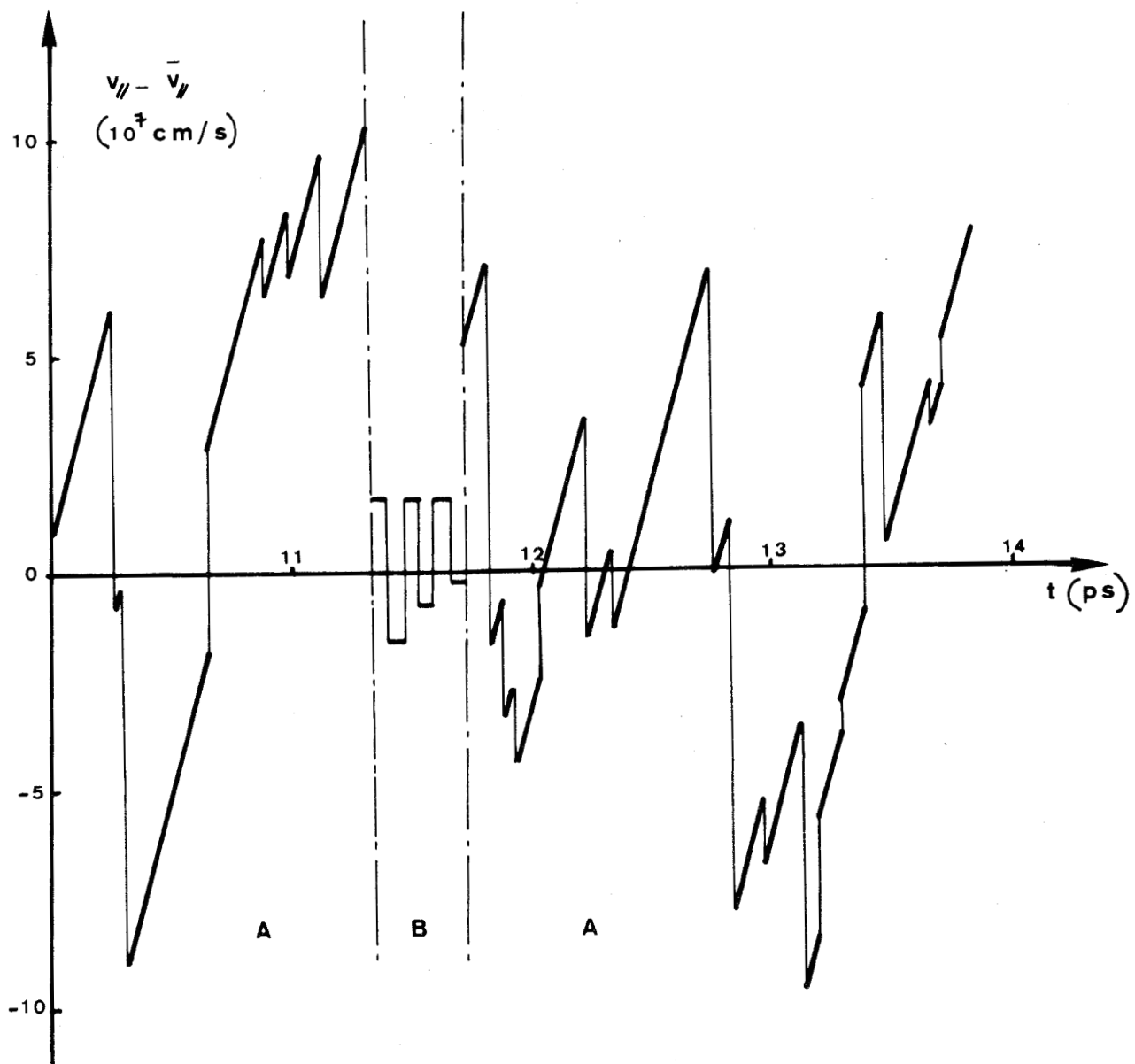


Figure 16 : Histogramme des fluctuations de vitesse  $v_{//} (t) - \bar{v}_{//}$   
 à  $E = 10 \text{ kV/cm}$   
 A) vallée centrale  
 B) vallée latérale



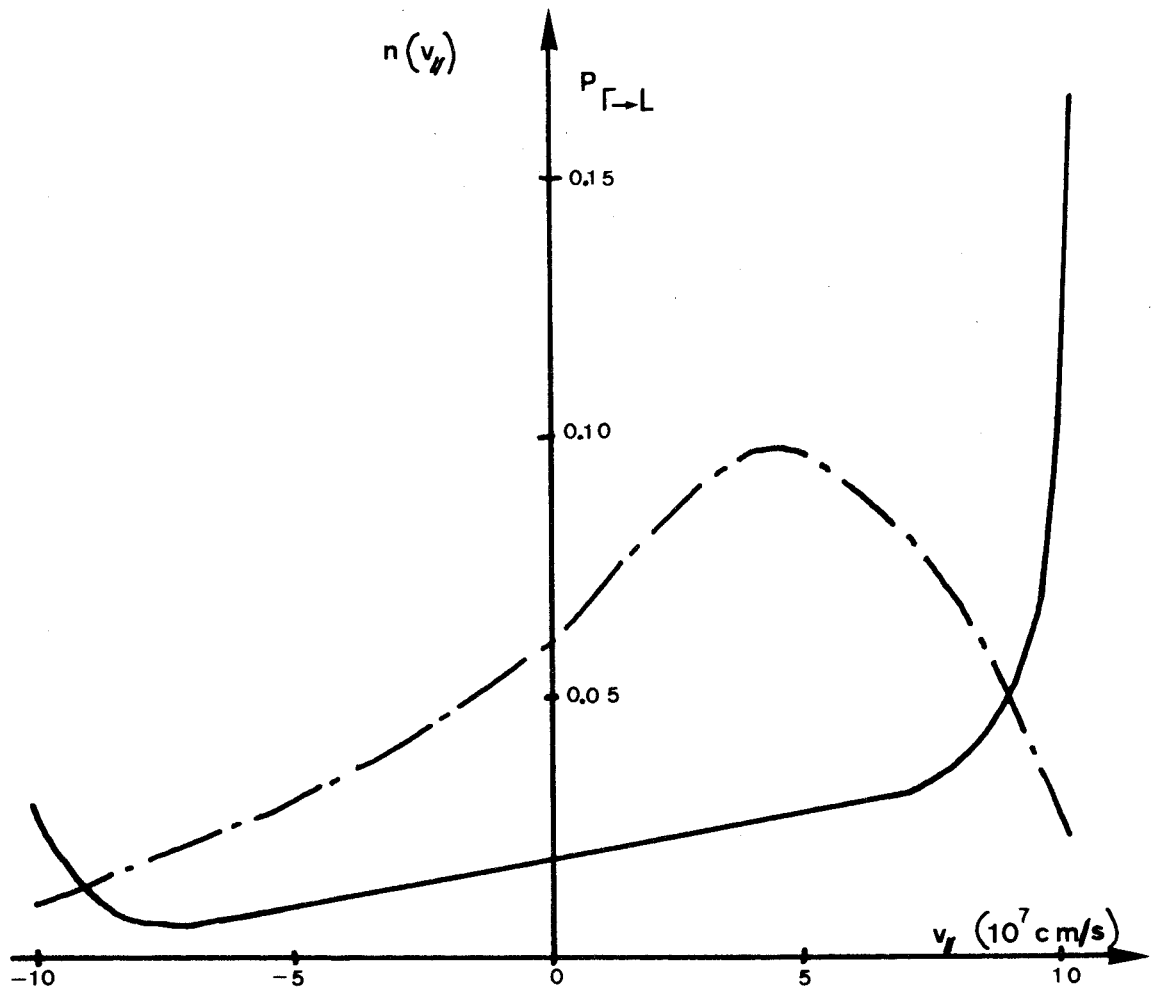


Figure 17 : Comportement des électrons de la  
vallée centrale à  $E = 10$  kV/cm

- probabilité de transfert  $P$  de la vallée  $\Gamma$   
vers la vallée  $L$  en fonction de la vitesse  $v_{//}$
- - - densité de porteurs en fonction de la  
vitesse  $v_{//}$



tesse est négative, l'action du champ entraîne une diminution d'énergie, et la probabilité de retour en vallée latérale devient de plus en plus faible (figure 1b). L'électron reste alors piégé en vallée centrale le temps que sa vitesse parallèle, sous l'action continue du champ, redevienne positive, décrivant ainsi une rampe. Quand son énergie est redevenue suffisante, l'électron peut transférer sauf si l'action "randomisante" d'une interaction acoustique en vallée centrale ne lui fait réitérer le processus.

Cette étude met en évidence le rôle important joué par les transferts dans les mécanismes responsables de la réduction de la diffusion suivant la direction du champ. Leur effet, par ailleurs, n'a pas cette importance dans la direction transverse où l'allure des fluctuations de vitesse  $\Delta v_{\perp}(t)$  pourrait être décrite schématiquement par une suite d'échelons aléatoires. La fonction de corrélation  $\phi_{\perp}(\theta)$  d'un tel signal décroît vers 0 de façon quasi exponentielle, en restant donc toujours positive, justifiant ainsi l'écart existant en champ fort entre  $D_{\parallel}(E)$  et  $D_{\perp}(E)$ .

#### II.4. Conclusion

La particularité de cette étude a consisté à exploiter simultanément les informations résultant de chacune des définitions du coefficient de diffusion par l'étalement du paquet et par le bruit. Elle a permis d'établir les conditions minimales d'obtention du coefficient de diffusion et d'expliquer les divergences des résultats parus où ces conditions n'ont pas toujours été respectées.

Par ailleurs, il a été montré que contrairement à ce qui est prévu par la théorie du bruit de partition, le coefficient de diffusion  $D_{//}(E)$  est inférieur au coefficient de diffusion  $D_{\perp}(E)$ . Ce résultat a été justifié par la mise en évidence en champ fort des mécanismes qui sont responsables de la réduction de la diffusion dans la direction du champ et au cours desquels les transferts jouent un rôle important.

III. EFFET DU DOPAGE SUR LE COEFFICIENT DE DIFFUSION  
ET ETUDE EXPERIMENTALE

Une étude expérimentale relative au coefficient de diffusion permet maintenant de confronter les résultats Monte Carlo aux grandeurs accessibles expérimentalement.

Cette étude s'effectuant sur des échantillons dopés, l'effet du dopage sur les caractéristiques de diffusion fonction du champ est déterminé numériquement.

Les techniques expérimentales existantes reflètent la dualité des définitions du coefficient de diffusion par l'étalement d'un paquet et par le bruit. Par les techniques de temps de vol, l'étalement d'un paquet de porteurs en excès peut être mesuré [13, 37, 38] pour toute valeur de champ. Par les techniques radiométriques, le coefficient de diffusion peut être obtenu indirectement à partir des mesures de températures de bruit [34-36], pour des champs inférieurs au champ de seuil. Le coefficient de diffusion, en tant que paramètre du second ordre est aussi délicat à déterminer expérimentalement que théoriquement.

La présente étude se limite à la mesure des températures de bruit  $T_{//}(E)$  en champ faible.

III.1. Effet du dopage sur le coefficient de diffusion

L'effet du dopage sur le coefficient de diffusion est illustré sur la figure 18a qui représente les caractéristiques  $D_{//}(E)$  et  $D_{\perp}(E)$  définies à partir du bruit à des concentrations d'impuretés  $N_D = 0$  et  $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . Les im-

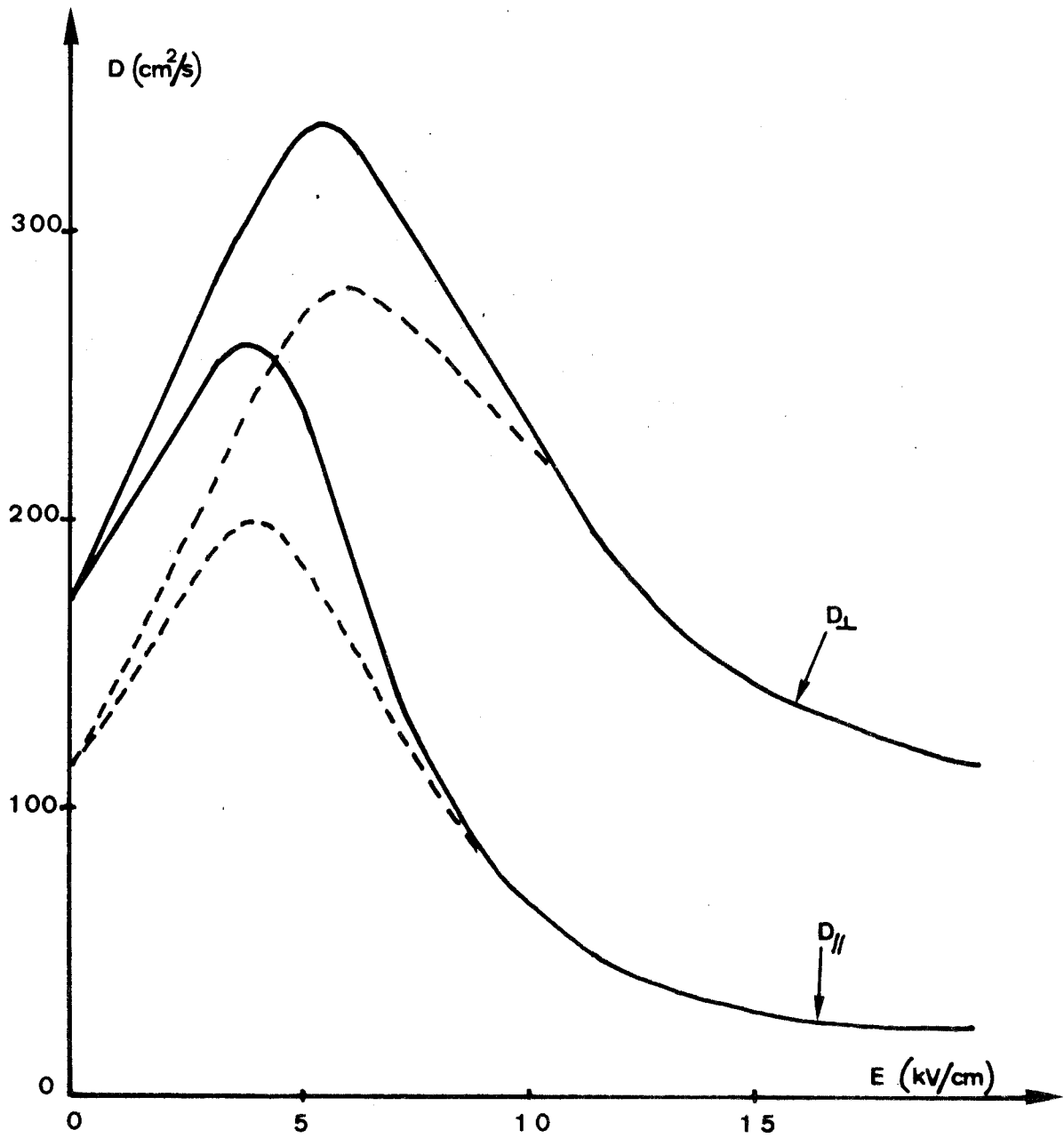


Figure 18.a : Effet du dopage sur les coefficients de diffusion bruit  $D_{\parallel}(E)$  et  $D_{\perp}(E)$

—  $N_D = 0$   
 - - -  $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$

puretés contribuent à réduire la diffusion en particulier en champ faible et autour du champ de seuil. Comme prévu leur effet est nul pour des champs supérieurs à 10 kV/cm.

### III.2. Relation entre température de bruit et coefficient de diffusion

La température de bruit qui est la grandeur accessible expérimentalement au radiomètre est proportionnelle à la puissance de bruit émise par l'échantillon. La température de bruit  $T_{//}(E)$  est directement reliée au coefficient de diffusion  $D_{//}(E)$  par la relation d'Einstein généralisée [18, 39]

$$\frac{D_{//}(E)}{\mu_d(E)} = \frac{k_B T_{//}(E)}{q}$$

où  $\mu_d(E)$  est la mobilité différentielle,  $k_B$  la constante de Boltzmann et  $q$  la charge de l'électron. Cette relation n'a de sens que si la mobilité différentielle  $\mu_d(E)$  est strictement positive limitant ainsi l'étude aux champs faibles.

Les méthodes de Monte Carlo permettent d'avoir accès au coefficient de diffusion et également à la mobilité différentielle qui est déduite de la caractéristique  $v(E)$ . Si cette détermination de la mobilité différentielle est aisée en champ faible où elle est quasi constante et égale à la mobilité statique  $\mu_0$ , elle devient délicate aux environs du champ de seuil où la pente de la vitesse est mal déterminée et tend vers 0 ; la température de bruit devient alors infinie. La caractéristique de température de bruit obtenue à partir des méthodes de Monte Carlo est représentée sur la figure 18b pour des concentrations en impuretés  $N_D = 0$  et  $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . Quand le champ est inférieur à 2 kV/cm, la température de bruit est pratiquement indépendante du dopage qui a pour effet de réduire simultanément le coefficient de diffusion et la mobilité. Le champ

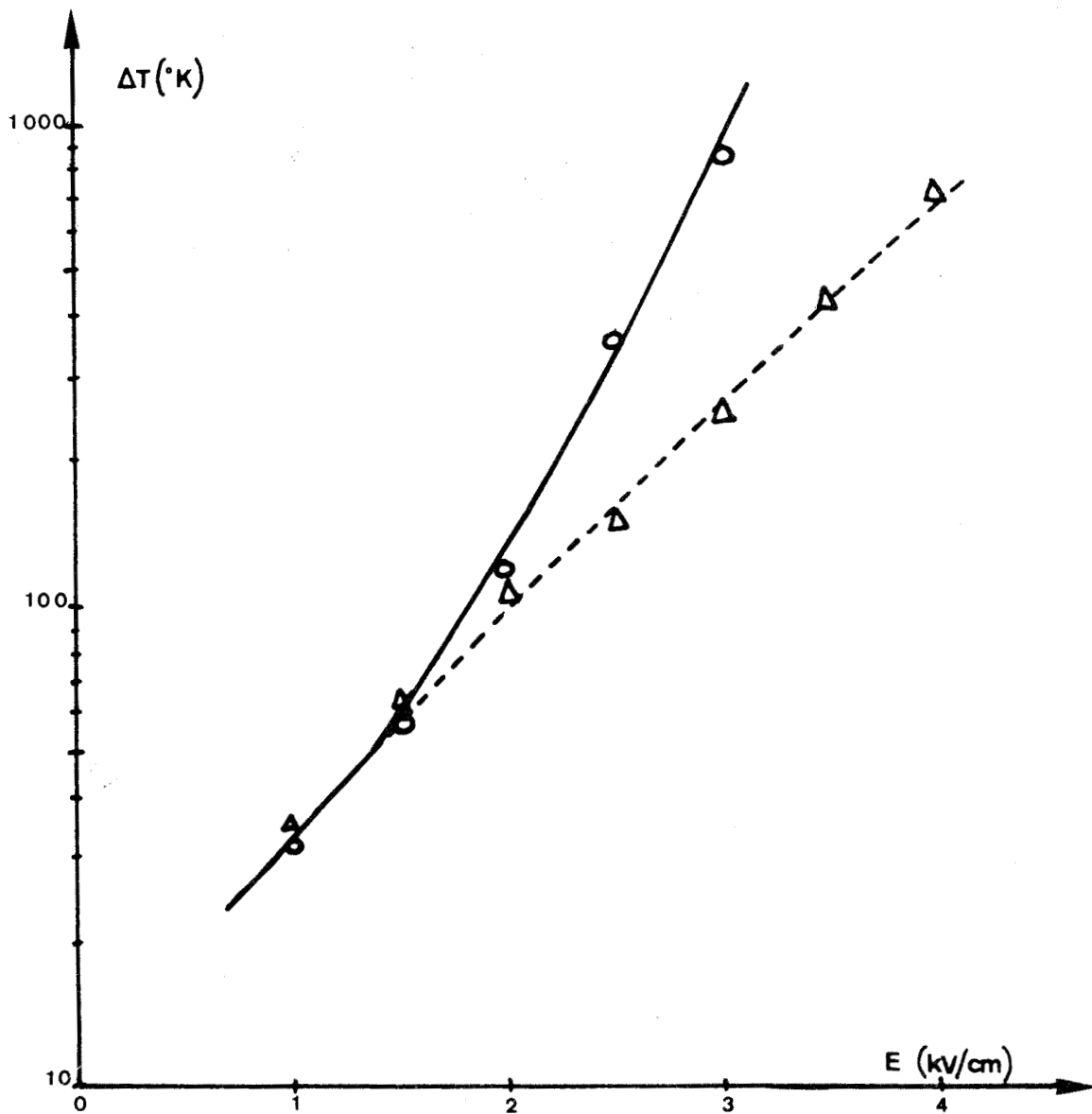


Figure 18.b : Caractéristique théorique de température de bruit  $\Delta T_{//}(E)$  en fonction du champ

—  $N_D = 0$   
 - - -  $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$





de seuil étant une fonction croissante du dopage, la figure 18b montre que vers 3 kV/cm la température de bruit est beaucoup plus forte à  $N_D = 0$  qu'à  $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  à cause de la mobilité différentielle qui est déjà très faible à  $N_D = 0$ , alors qu'elle est encore de l'ordre de la mobilité statique à  $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . La température de bruit est donc très sensible à l'influence du dopage pour des champs de l'ordre de 3 kV/cm.

Nous nous proposons maintenant de comparer les caractéristiques théoriques de température de bruit à celles données par l'expérience.

### III.3. Description de l'étude expérimentale

La détermination de la température de bruit expérimentale est effectuée à l'aide de techniques radiométriques en bande X. Le radiomètre utilisé a déjà été décrit précédemment [34, 40-41] et son synoptique est présenté sur la figure 19. Son principe de fonctionnement (schéma 7a) repose sur la comparaison entre la puissance de bruit à mesurer et la puissance de bruit d'une charge adaptée. Cette comparaison, qui permet de s'affranchir du bruit émis par le récepteur, est réalisée à l'aide d'un modulateur à signal carré périodique dont l'état "passant" définit "l'ouverture" du radiomètre. Le principe de la mesure repose sur la comparaison entre la puissance de bruit générée par l'échantillon et celle qui est émise par une source étalon.

La température de bruit émise par l'échantillon résulte à la fois de la température liée aux fluctuations de vitesse des électrons et de la température liée à l'échauffement du réseau. Pour s'affranchir des perturbations apportées par cette dernière sur la mesure de la température de bruit des électrons, il est alors préférable de polariser l'échantillon en impulsion afin d'éviter que le réseau ne s'échauffe. "L'ouverture" du radiomètre, qui représente le

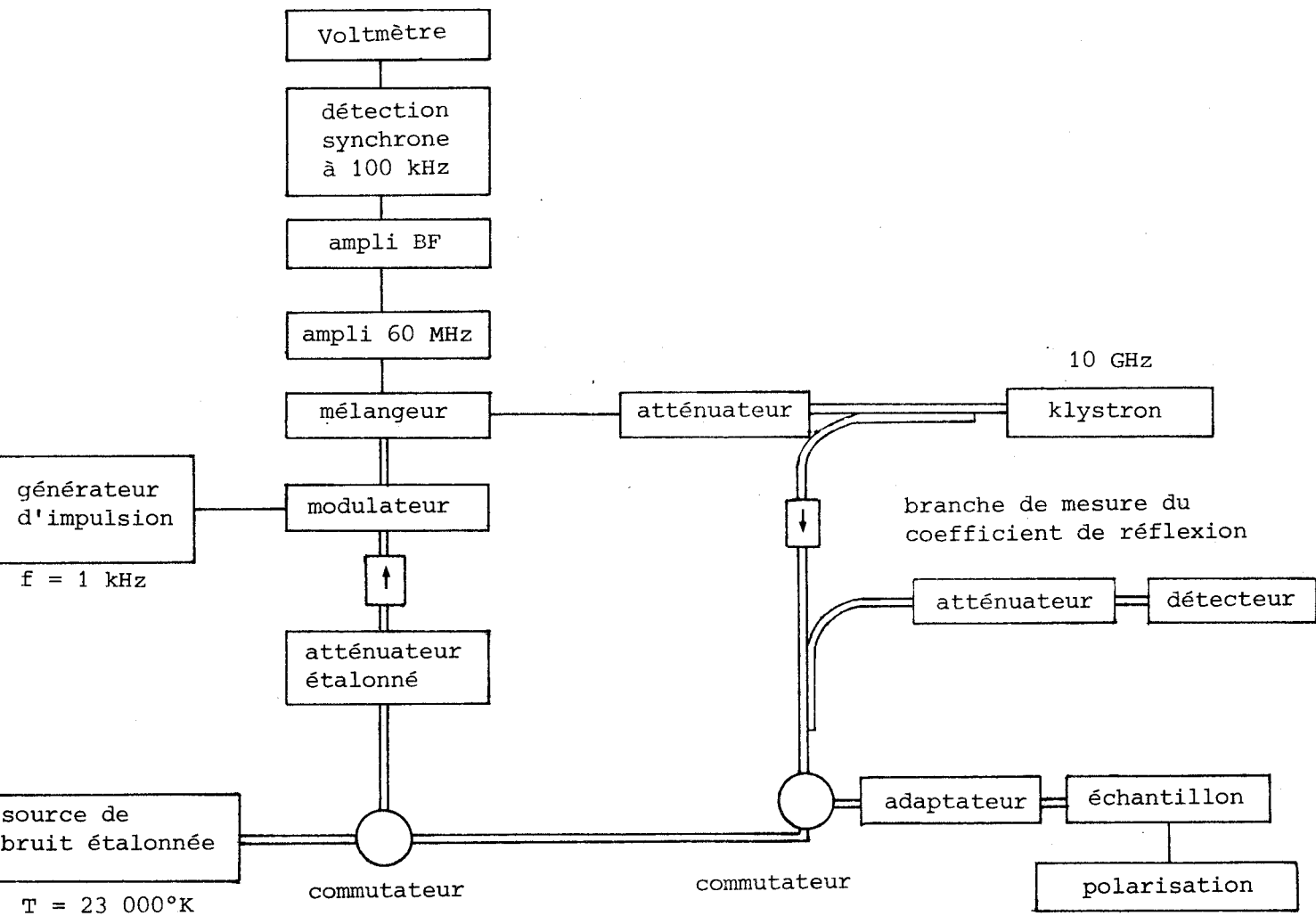
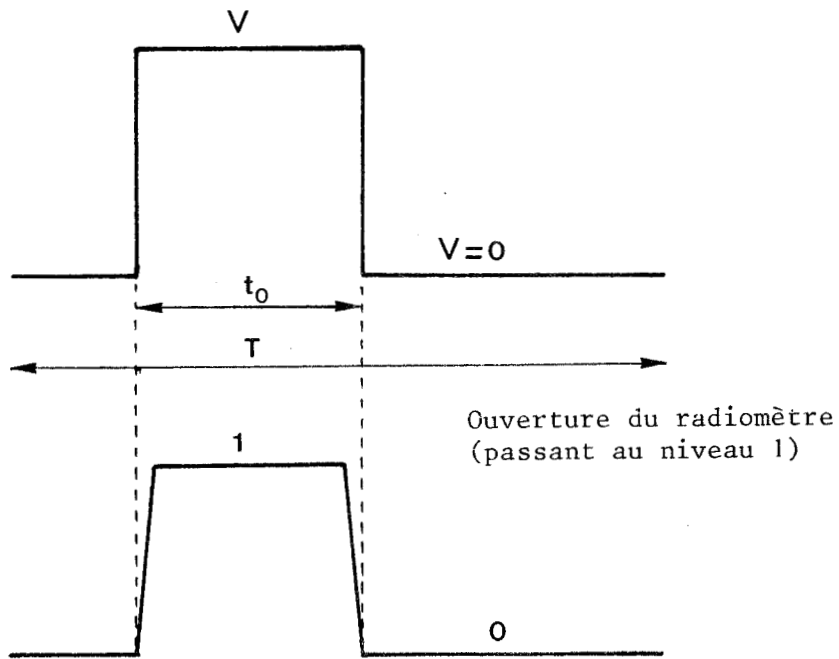
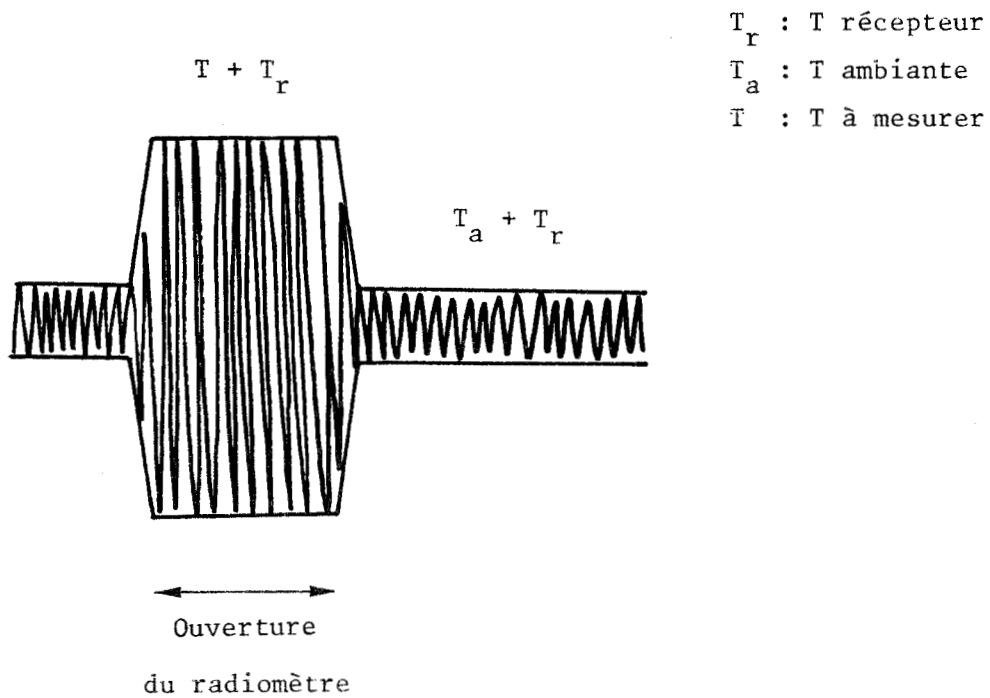


Figure 19 : Synoptique du radiomètre utilisé

Signal de polarisation



SCHEMA 7 b



$T_r$  : T récepteur

$T_a$  : T ambiante

$T$  : T à mesurer

SCHEMA 7 a

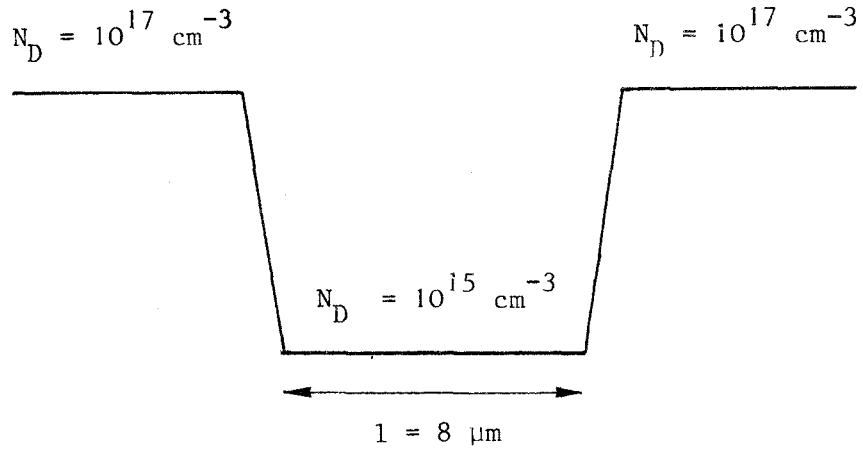


temps d'intégration du bruit, sera alors réglée de façon à ce que la mesure ait lieu pendant la durée  $t_0$  d'application du champ, c'est-à-dire que sa fréquence de répétition ainsi que sa durée d'ouverture au cours de chaque période  $T$  seront celles du signal de polarisation (schéma 7b). Alors que d'un point de vue thermique, il est intéressant de polariser l'échantillon par des impulsions dont le rapport cyclique, défini par  $\delta = \frac{t_0}{T}$ , est faible, d'un point de vue radiométrique, une diminution du rapport cyclique provoque une diminution du signal détecté et apporte des imprécisions sur la mesure. Une étude en fonction du rapport cyclique  $\delta$  sera effectuée sur chacun des échantillons traités.

#### III.4. Résultats expérimentaux

Les résultats présentés sont relatifs aux mesures de températures de bruit effectuées sur une diode Gunn et un Fet sans grille dont les valeurs caractéristiques sont données sur les schémas 8 et 9. Cette étude a été réalisée pour chacun des échantillons en polarisation continue et en impulsion avec des rapports cycliques de  $\delta = 1/2$ ,  $\delta = 1/5$  et  $\delta = 1/10$ . Les figures 20 et 21 qui représentent l'ensemble des valeurs obtenues en fonction de la tension appliquée, montrent que les effets liés à la température du réseau sont peu importants : ils apparaissent un peu sur les résultats relatifs au FET sans grille qui possède une résistance thermique importante et pour lequel à une valeur de champ donnée, les températures de bruit mesurées sont des fonctions croissantes de la durée d'impulsion. Par contre, ils ne sont pas apparents sur les résultats relatifs à la diode Gunn. L'ensemble de tous ces résultats permet de définir pour chacun de ces échantillons une caractéristique moyenne de température de bruit donnée ici en fonction de la tension appliquée.

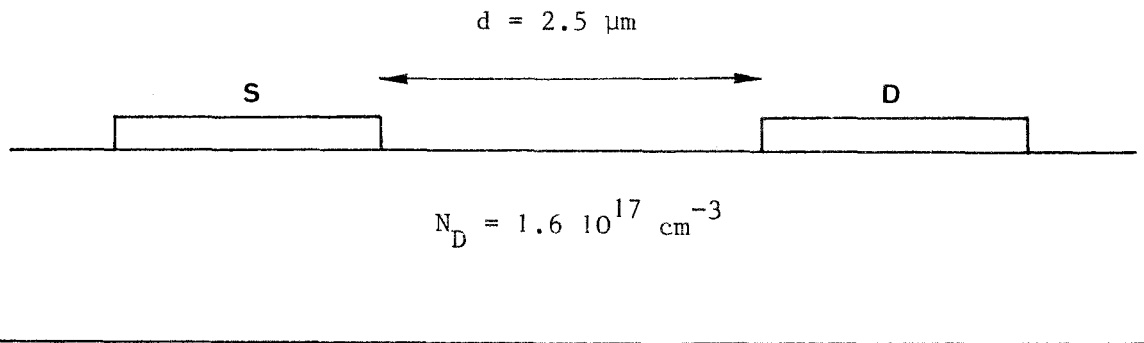
diode Gunn



$R_{th} \approx 80^\circ/\text{W}$

SCHEMA 8

F.E.T. sans grille



$R_{th} \approx 700^\circ/\text{W}$

SCHEMA 9



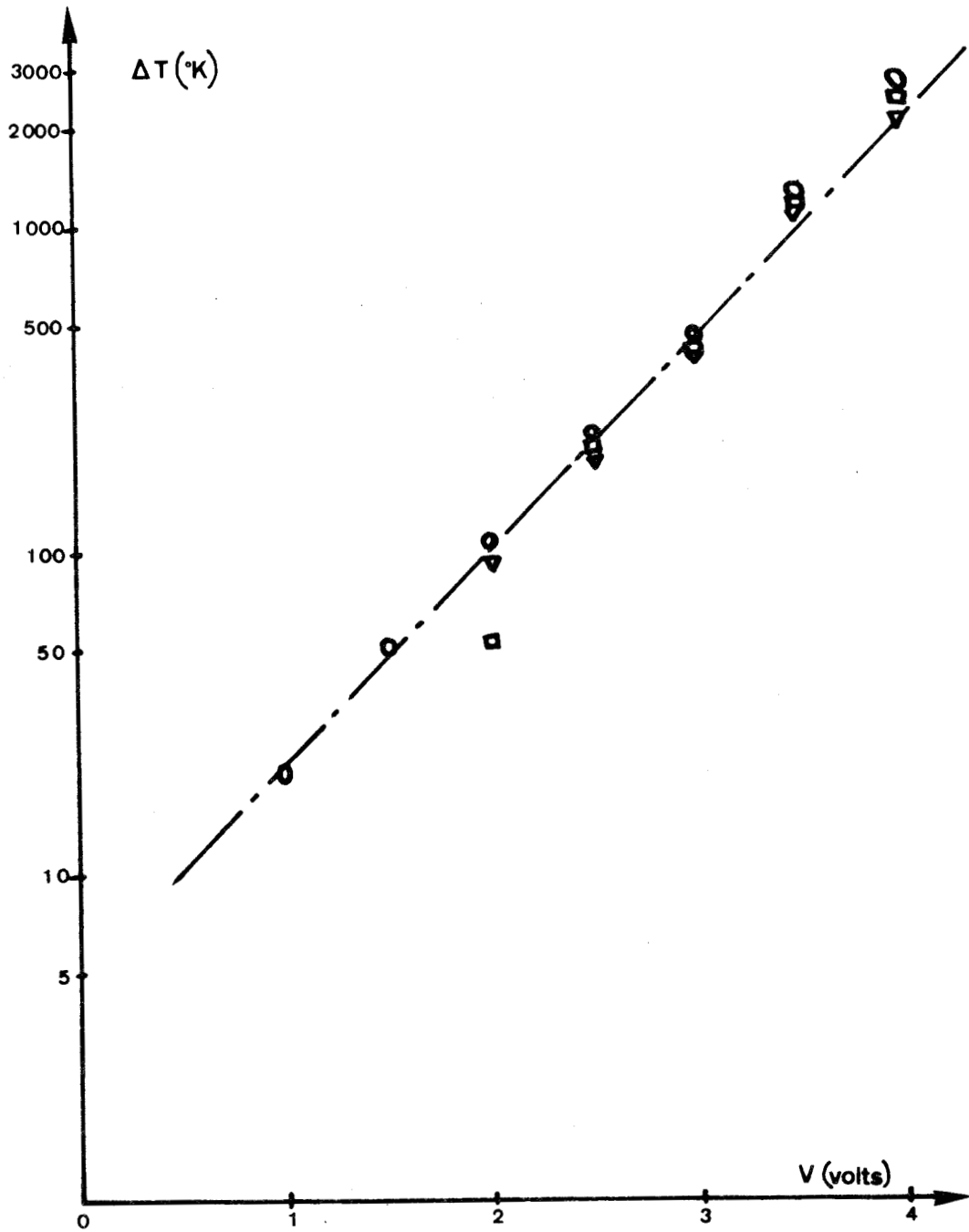


Figure 20 : Températures de bruit expérimentales relatives à la diode Gunn

- $\delta = 1/2$
- ▼  $\delta = 1/5$
- $\delta = 1/10$



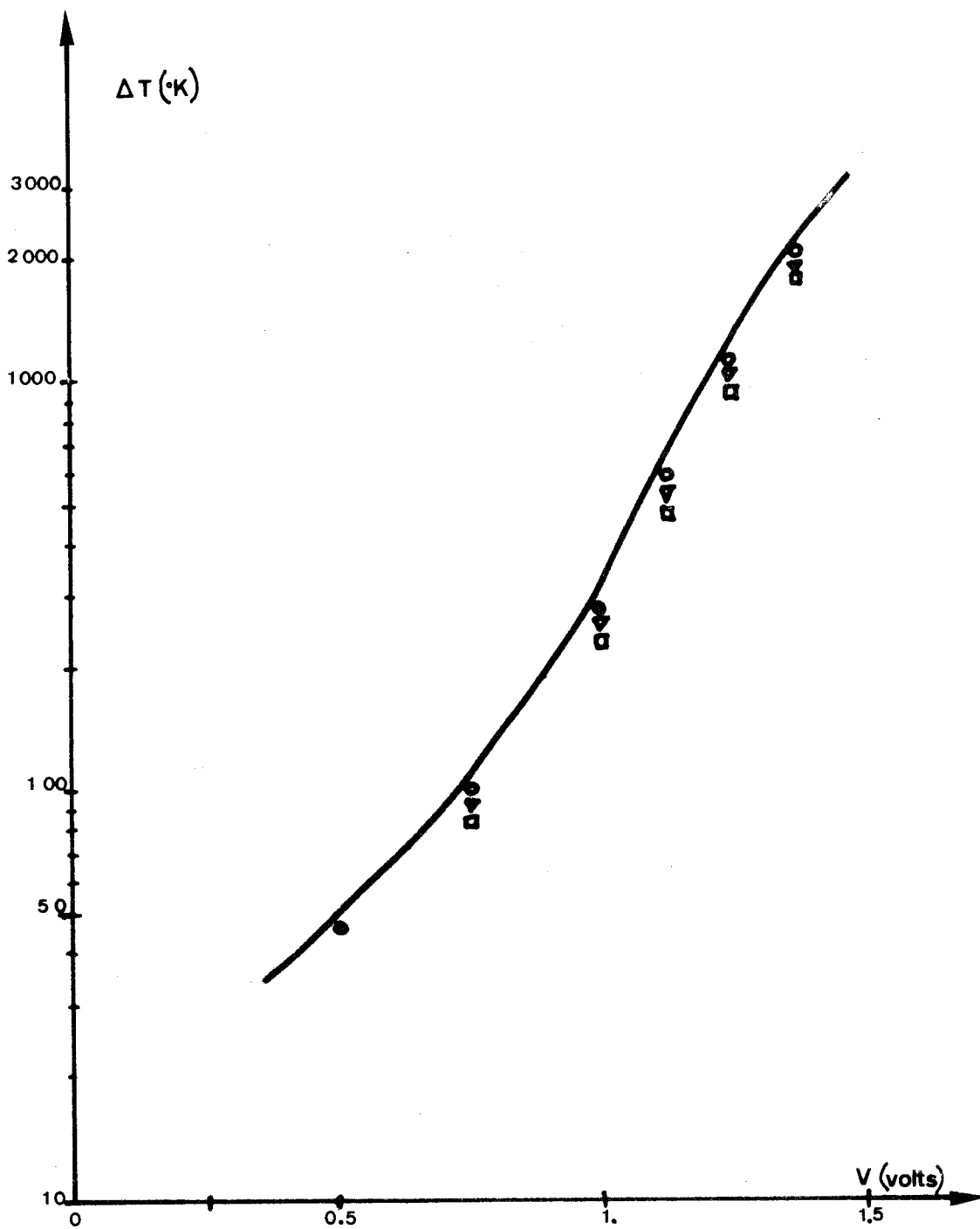


Figure 21 : Températures de bruit expérimentales relatives au FET sans grille

- $\delta = 1$
- $\delta = 1/2$
- ▽  $\delta = 1/5$
- $\delta = 1/10$



Pour pouvoir comparer ces résultats expérimentaux aux résultats théoriques obtenus par les méthodes de Monte Carlo, il est alors nécessaire de représenter ces caractéristiques expérimentales en fonction du champ appliqué. Or, à ce niveau, il existe des indéterminations dues à la fois aux résistances de contact qui "consomment" une partie de la tension appliquée aux bornes de l'échantillon et à la non uniformité du champ dans la zone active. Il sera supposé en première approximation que les résistances de contact créent un diviseur de tension avec la zone active et qu'ainsi la tension appliquée peut être considérée comme proportionnelle au champ moyen présent dans celle-ci. L'incertitude qui est liée au rapport "a" entre tension et champ est arbitrairement levée en faisant passer chaque courbe expérimentale par un point théorique choisi en champ faible où la température de bruit est indépendante du dopage. Les rapports "a" ainsi obtenus valent  $a = 11 \mu\text{m}$  pour la diode Gunn et  $a = 3.5 \mu\text{m}$  pour le FET sans grille et peuvent être comparés respectivement à la longueur active  $l = 8 \mu\text{m}$  de la diode Gunn et à la distance source-drain  $d = 2,5 \mu\text{m}$  du FET sans grille.

La figure 22 illustre la comparaison entre les résultats théoriques qui correspondent à des concentrations en impuretés  $N_D = 0$  et  $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , et les résultats expérimentaux qui correspondent à des concentrations en impuretés  $N_D = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  pour la diode Gunn et  $N_D = 1,6 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  pour le FET sans grille. Elle montre qu'il existe une très bonne concordance entre la caractéristique théorique obtenue en intrinsèque et la caractéristique expérimentale relative à la diode Gunn. Par contre, pour le FET sans grille, alors que l'accord entre résultats théoriques à  $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  et résultats expérimentaux est très bon en champ faible, il n'en est plus de même pour des champs supérieurs à 3 kV/cm où les températures de bruit expérimentales sont nettement supérieures aux valeurs théoriques.



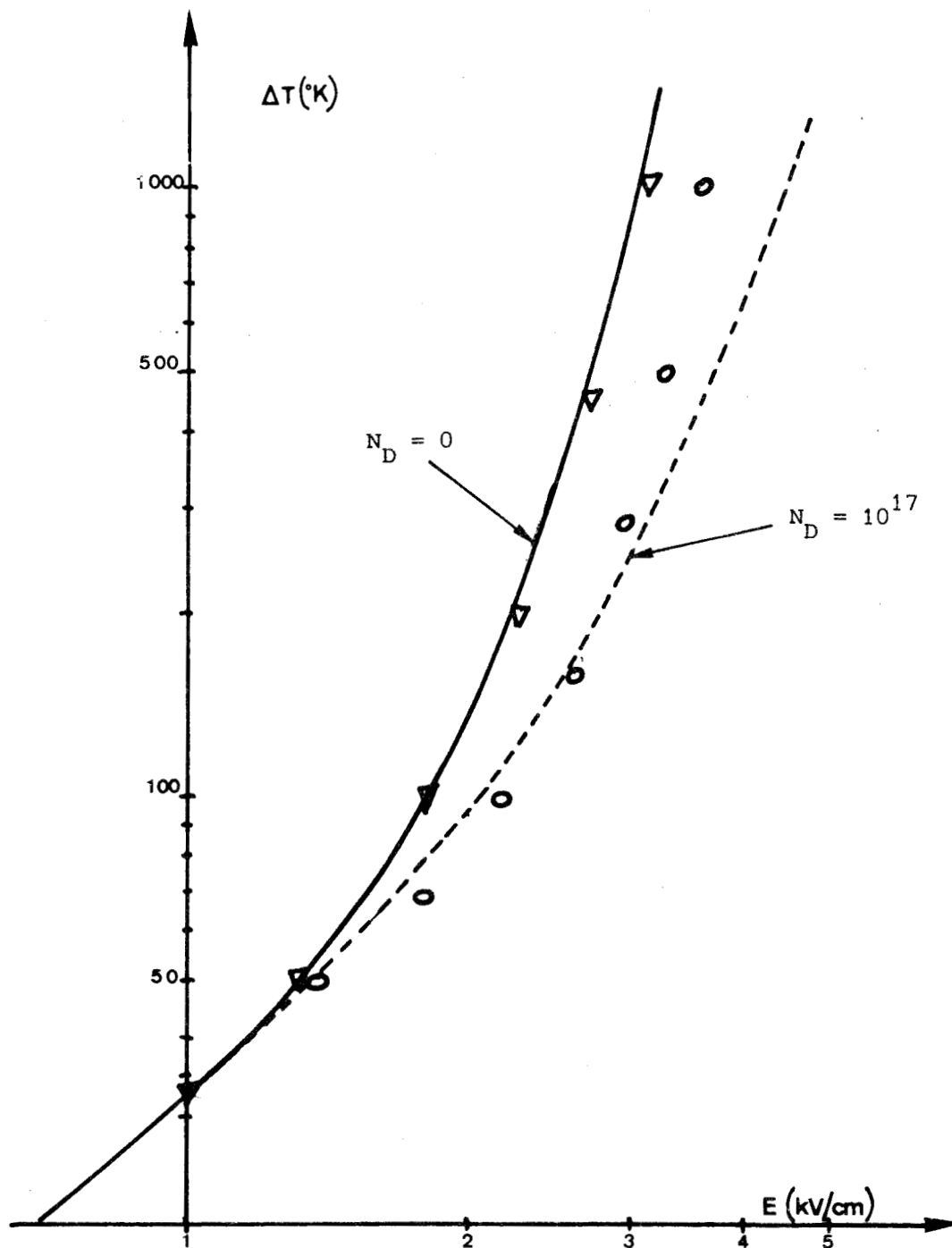


Figure 22 : Comparaison entre température de bruit théoriques et expérimentales

- Résultats Monté Carlo à  $N_D = 0$  et  $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
- ▽ Diode Gunn,  $N_D = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$
- FET sans grille,  $N_D = 1.610^{17} \text{ cm}^{-3}$

Il est intéressant de constater que l'ensemble de ces résultats expérimentaux traduisent pour une valeur de champ donnée supérieure à 2 kV/cm l'importance de l'influence du dopage [42] sur les caractéristiques de température de bruit et confirment, sur ce point, les prévisions théoriques déduites des résultats obtenus par les méthodes de Monte Carlo.

### III.5. Conclusion

Une étude expérimentale du coefficient de diffusion  $D_{//}(E)$  en champ faible a été effectuée à partir de mesures radiométriques de températures de bruit en bande X. Pour rendre possible une comparaison entre résultats théoriques et expérimentaux, la température de bruit a été au préalable déterminée par la relation d'Einstein généralisée, à partir des résultats obtenus par Monte Carlo. Cette étude préalable a été effectuée à des concentrations en impuretés  $N_D = 0$  et  $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  et a permis de mettre en évidence que le coefficient de diffusion ainsi que la température de bruit sont, à champ électrique constant, des fonctions décroissantes du dopage.

Les résultats expérimentaux obtenus qui sont relatifs à des échantillons de dopages très différents présentent un accord satisfaisant avec les résultats théoriques. En particulier, il a été possible de montrer expérimentalement, que la présence d'impuretés diminuait la température de bruit à champ électrique constant, comme le prévoyait l'étude théorique.

#### IV. CONCLUSION

Cette étude du coefficient de diffusion a été menée numériquement par les méthodes de Monte Carlo et expérimentalement par des mesures de température de bruit.

L'étude théorique a permis de lever une partie des indéterminations rencontrées dans la littérature concernant le coefficient de diffusion en régime stationnaire : elle a mis l'accent sur la grande influence des conditions d'étude sur la détermination du coefficient de diffusion, expliquant ainsi une partie de la dispersion des résultats déjà obtenus avec les méthodes de Monte Carlo ; d'autre part, la mise en évidence des mécanismes de diffusion intervenant en champ fort a permis de justifier le fait qu'il y ait moins de diffusion dans la direction du champ que dans une direction transverse, contrairement aux théories relatives au bruit de partition. Les méthodes de Monte Carlo se sont avérées être un outil tout à fait adapté à cette étude théorique de la diffusion, en particulier en champ fort.

L'étude expérimentale de la diffusion est relative à des mesures de température de bruit en champ faible, dans la direction du champ. Elle a permis d'obtenir un accord satisfaisant entre résultats théoriques et expérimentaux et de mettre en évidence, en particulier, le rôle des impuretés dans la diminution de la température de bruit.

CHAPITRE III

ETUDE EN REGIME NON STATIONNAIRE

# TABLE DES MATIÈRES

|  |             |
|--|-------------|
| <i>INTRODUCTION</i>  | <i>P.57</i> |
| <i>I. RESULTATS OBTENUS PAR LES METHODES DE MONTE CARLO</i>  | <i>P.59</i> |
| <i>I<sub>1</sub> Echauffement brutal d'un paquet d'électrons froids<br/>par application d'un échelon de champ fort</i> | <i>P.60</i> |
| <i>I<sub>2</sub> Refroidissement brutal d'un paquet d'électrons<br/>chauds</i>   | <i>P.62</i> |
| <i>I<sub>2.1</sub> Energie</i>   | <i>P.63</i> |
| <i>I<sub>2.2</sub> Vitesse</i>   | <i>P.63</i> |
| <i>I<sub>2.3</sub> Bruit : coefficient de diffusion non<br/>stationnaire</i>   | <i>P.65</i> |
| <i>I<sub>3</sub> Conclusion</i>  | <i>P.68</i> |
| <i>II. APPROCHE SEMI-ANALYTIQUE DE RESULTATS MONTE CARLO</i>   | <i>P.69</i> |
| <i>II<sub>1</sub> Présentation de la formulation de M. Shur</i>  | <i>P.69</i> |
| <i>II<sub>2</sub> Comparaison entre les résultats semi-analytiques<br/>et les résultats Monté Carlo</i>                | <i>P.73</i> |
| <i>II<sub>3</sub> Application de la méthode de M. Shur à l'étude<br/>du régime alternatif</i>                          | <i>P.75</i> |
| <i>II<sub>4</sub> Conclusion</i>   | <i>P.78</i> |
| <i>III. CONCLUSION RELATIVE A L'ETUDE DU REGIME STATION-<br/>NAIRE DANS L'ARSENIURE DE GALLIUM</i>                     | <i>P.79</i> |

## INTRODUCTION

L'étude qui a été menée jusqu'à présent ne concerne que les caractéristiques de transport en régime stationnaire dans l'Arséniure de Gallium. Or, dans l'emploi qui est fait de ce matériau, au niveau des composants utilisés ou en logique ultrarapide, les porteurs sont soumis à des champs qui varient rapidement dans le temps. Il est donc intéressant de connaître leur comportement en régime non stationnaire et en particulier d'étudier les conditions pour lesquelles la vitesse est maximale ainsi que de caractériser les phénomènes de relaxation au sein du matériau.

Dans la simulation qui a été présentée, il n'existe aucune condition relative au champ électrique appliqué. De plus, grâce à la procédure de discrétisation du temps en pas réguliers, l'évolution de grandeurs telles qu'énergie, vitesse, variance de vitesses et de positions d'un paquet d'électrons peut être directement obtenue en réalisant à chaque pas les moyennes de ces grandeurs sur l'ensemble des électrons du paquet. Cette simulation peut donc facilement rendre compte de tout effet non stationnaire dans le matériau.

Son application directe à un niveau plus élaboré, tel celui du composant, est rendue actuellement impossible à cause des temps calcul et de la capacité mémoire requise. Mais, indirectement, il est possible, à partir des résultats en régime stationnaire obtenus par les méthodes de Monte Carlo, de traduire les effets non stationnaires par l'approximation du temps de relaxation. La méthode semi-analytique présentée par M. Shur [43] repose sur cette démarche. Elle offre l'avantage d'être très rapide tout en rendant compte des effets non stationnaires. C'est donc un outil très puissant pour

traiter les composants et il constitue un prolongement très intéressant de la méthode de simulation utilisée ici.

Dans le présent chapitre, l'étude en régime non stationnaire est d'abord traitée par les méthodes de Monte Carlo dans quelques cas simples importants. Elle est suivie d'une présentation de la méthode de M. Shur et de certaines de ses applications.

I. RESULTATS OBTENUS PAR LES METHODES DE MONTE CARLO

Cette étude, par les méthodes de Monte Carlo du régime non stationnaire dans l'Arséniure de Gallium se limite à des cas simples et extrêmes où les électrons sont amenés en majorité à changer leurs conditions de transport en transférant en masse, de leur vallée initiale à une autre vallée de caractéristiques différentes, sous l'action d'une variation importante et brutale du champ extérieur appliqué. Seront considérés alternativement, le cas où des électrons initialement dans la vallée centrale sont amenés à transférer en masse en vallée latérale en réponse à l'application d'un échelon de champ fort et le cas où des électrons initialement chauds voient le champ électrique important auquel ils sont soumis, remplacé instantanément par un champ nul ou inférieur au champ de seuil.

Alors que la réponse à l'application d'un champ fort, qui donne lieu au phénomène important de "survitesse" a déjà été traitée dans la littérature [44-47], les conséquences sur le comportement d'électrons chauds de la suppression du champ fort, n'ont pas encore été étudiées et c'est pourquoi il sera consacré à cette étude une part importante.

L'étude de ces cas limites permettra de mettre en évidence de façon nette les particularités du comportement des électrons en régime non stationnaire dans l'Arséniure de Gallium, celles-ci intervenant souvent de façon plus atténuée lorsque la variation du champ n'est pas instantanée, par exemple en régime alternatif.



I .1. Echauffement brutal d'un paquet d'électrons froids par application d'un échelon de champ fort.

Un paquet d'électrons est initialement en vallée centrale soumis à l'action d'un champ faible ou nul. Si un échelon de champ fort est alors appliqué, les électrons, avant d'atteindre leur nouveau régime stationnaire, vont se trouver de façon transitoire dans la situation particulière d'électrons "légers" soumis à un champ fort. Quel est alors l'impact de cette situation sur le comportement des électrons ?

Les conditions de transport propres à la vallée centrale sont caractérisées par une faible masse effective et par des interactions dont les effets anisotropes favorisent la direction du champ. Dans ces conditions, sous l'effet du champ fort, les électrons sont littéralement propulsés en masse vers les énergies élevées où ils acquièrent de fortes vitesses. Il leur devient alors possible de transférer vers les vallées hautes. Mais à cause de la valeur de la probabilité de transfert qui limite à chaque pas le nombre des électrons transférant effectivement, il reste en vallée centrale une fraction inhabituellement importante d'électrons légers rapidement portés à des vitesses de plus en plus élevées. Ce processus est responsable d'un phénomène de "survitesse" qui apparaît de façon transitoire et pendant lequel la vitesse moyenne du paquet d'électrons peut prendre des valeurs largement supérieures à la vitesse qu'il aurait en régime stationnaire. Cet effet disparaît quand il n'y a plus en vallée centrale d'électrons excédentaires par rapport aux conditions d'équilibre relatives au champ fort appliqué.

La réponse à un échelon de 20 kV/cm d'un paquet de 500 électrons initialement en vallée centrale, en champ nul, est représentée sur la figure 23. La survitesse enregistrée présente une valeur maximale de  $6,4 \cdot 10^7$  cm/s et dure 0.7 ps environ. Il est à noter qu'à l'instant où la vitesse passe par sa valeur

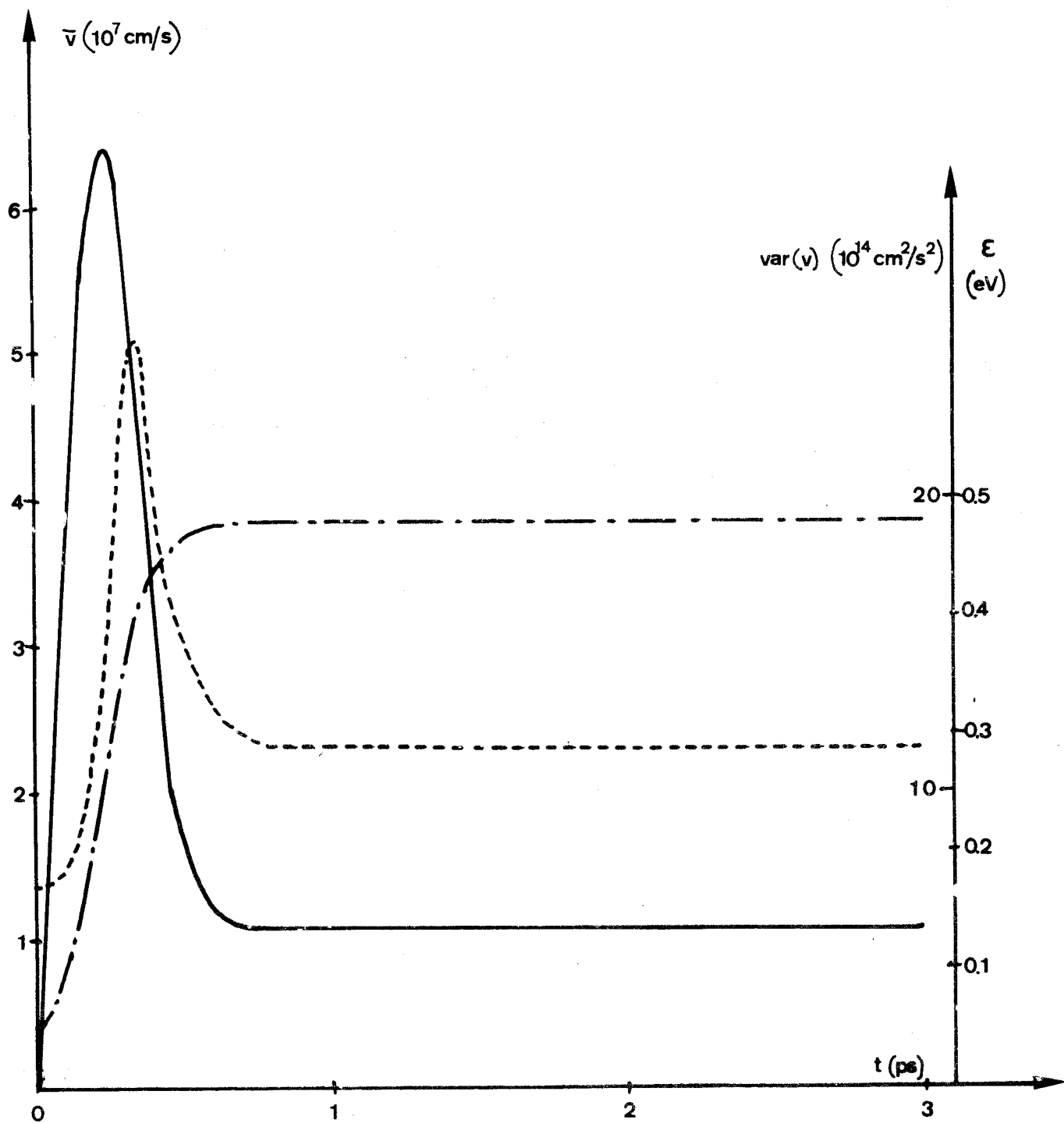


Figure 23 : Réponse à un échelon de 20 kV/cm

- vitesse.  $N_D = 0.500$  électrons
- - - variance de vitesse
- · - · - énergie



maximale, le bruit total représenté par la variance de vitesses est inférieur à la valeur stationnaire à 20 kV/cm. Par contre, il existe un excès de bruit, traduit par une survariance de vitesse [48], intervenant au cours de la décroissance de la vitesse. L'énergie présente un phénomène de relaxation sur toute la durée du régime transitoire. Au bout de 0.7 ps, le régime stationnaire est à nouveau atteint pour chacune de ces grandeurs. Il a été vérifié que les résultats obtenus ne dépendent pratiquement pas des conditions initiales pourvu que le champ soit suffisamment faible pour que tous les électrons soient initialement en vallée centrale. Par contre, l'amplitude et la durée de la survitesse dépendent essentiellement de la valeur du champ fort appliqué. Comme le montre la figure 24 la vitesse maximale est une fonction croissante du champ fort appliqué, qui présente un phénomène de saturation aux champs supérieurs à 50 kV/cm. Elle montre par ailleurs que l'effet des impuretés n'est sensible que pour des champs inférieurs à 60 kV/cm. L'influence du champ sur la durée de la survitesse est illustrée sur la figure 25 qui représente l'évolution de la vitesse en réponse à des échelons de 30 kV/cm et 70 kV/cm et qui montre que la survitesse est d'autant plus élevée mais brève que le champ est fort.

L'amplitude de ce phénomène de survitesse détermine les performances en fréquence et en puissance de composants réalisés à partir du matériau étudié, et conditionné, par sa durée, le temps de transfert des électrons sur une distance donnée ; il est donc intéressant de déterminer les paramètres physiques du matériau qui favorisent cette survitesse et de comparer les possibilités offertes par l'AsGa avec celles d'autres composés binaires III.V tels que l'InAs et l'InP.

L'étude précédente décrivant les mécanismes responsables de ce phénomène montre que les matériaux qui sont susceptibles de présenter de fortes survitesses sont ceux pour lesquels la masse effective est très faible en vallée centrale

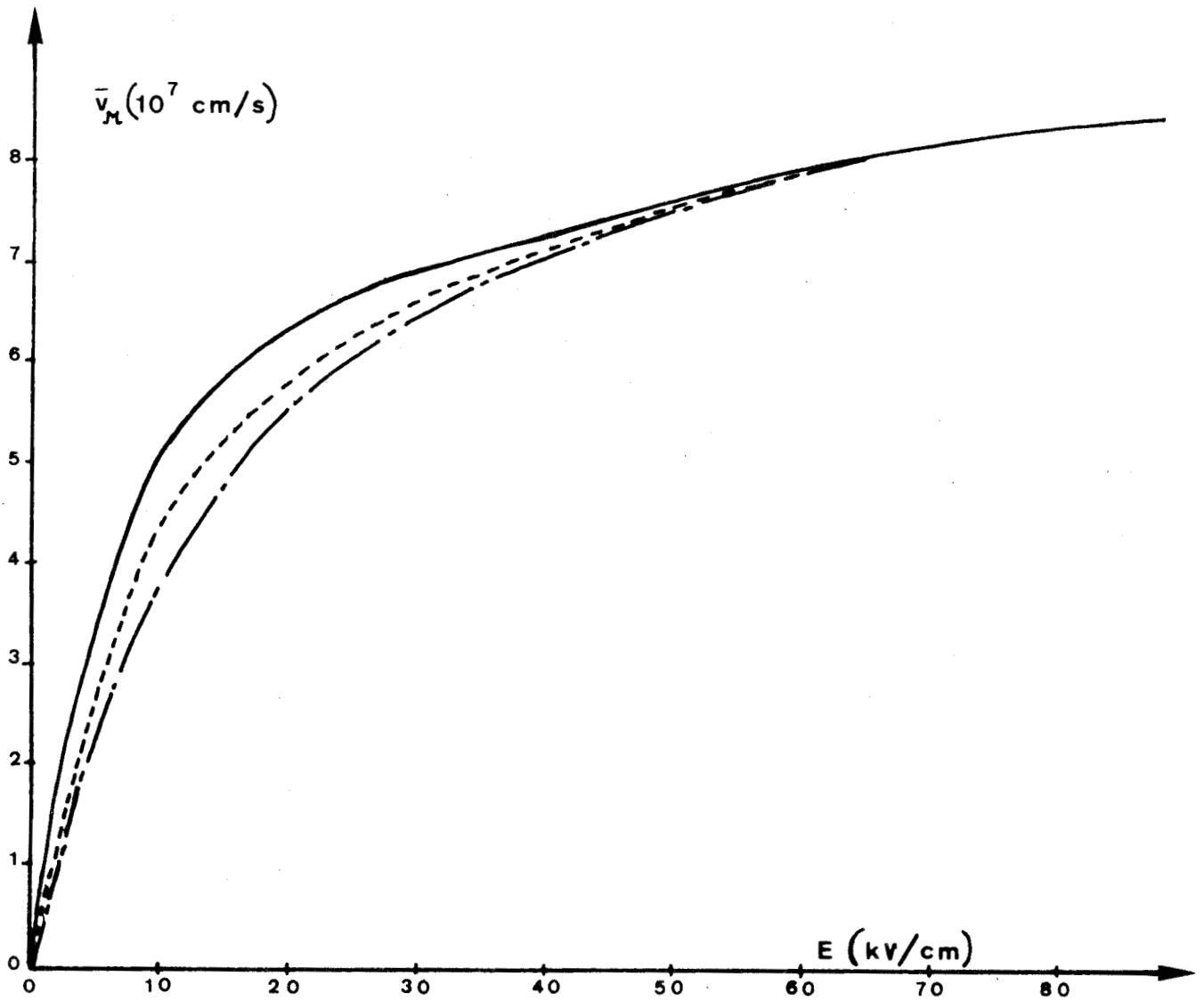


Figure 24 : Caractéristique des valeurs maximales atteintes au cours de la survitesse en fonction du champ. Influence du dopage

- $N_D = 0$
- - -  $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
- · - ·  $N_D = 3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$



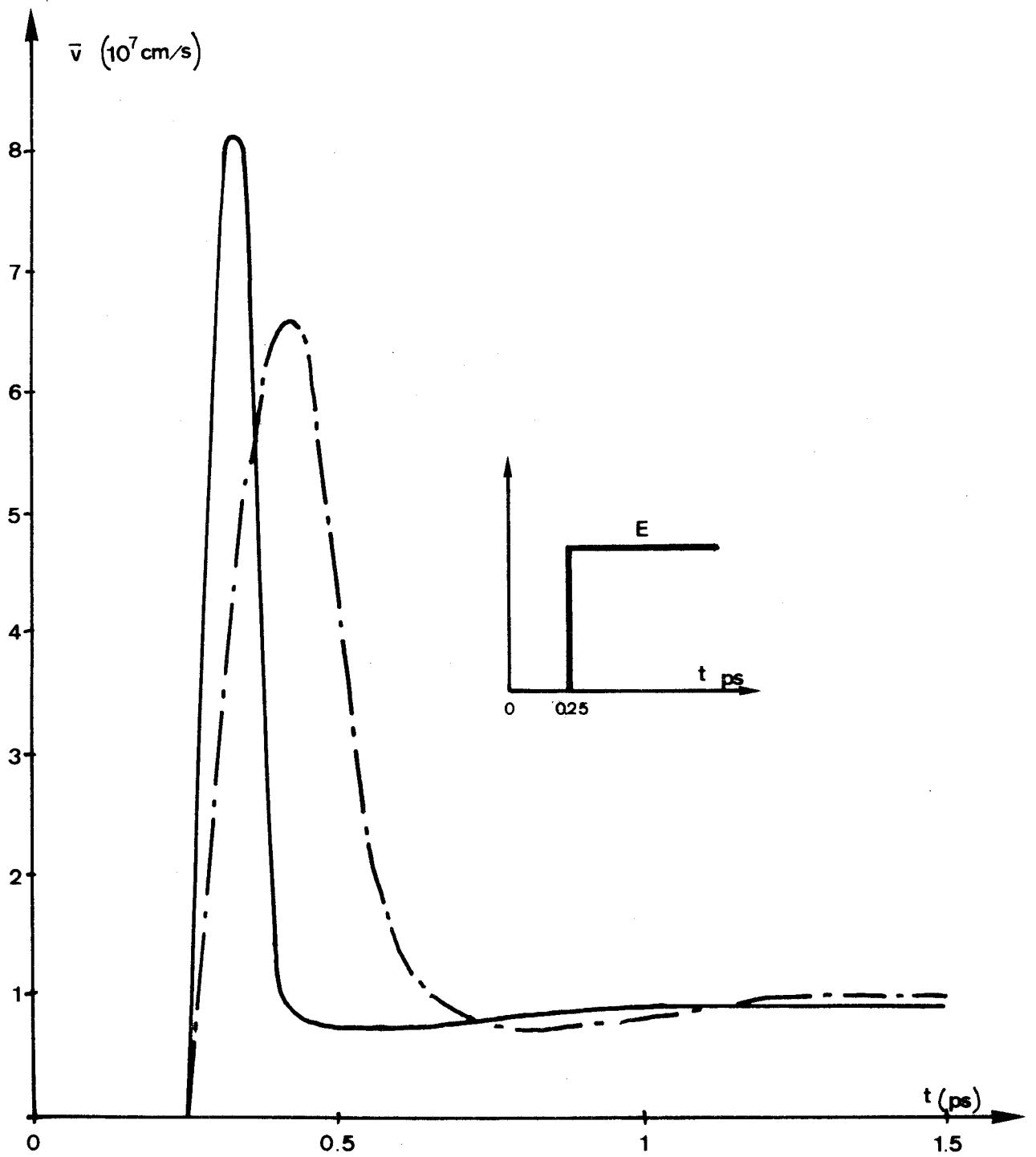


Figure 25 : Effet du champ fort appliqué sur la durée de la survitesse.  $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$

— · — · —  $E = 30$  kV/cm

————  $E = 70$  kV/cm

et l'écart d'énergie entre la vallée centrale et les vallées latérales les plus accessibles, très élevé de façon à laisser aux électrons le temps d'acquiescir de très fortes vitesses avant de transférer. Le tableau III qui donne les valeurs des masses effectives et des écarts d'énergie  $\Delta E_{\Gamma,L}$  pour les composés InAs, GaAs et InP montre ainsi qu'il faut s'attendre à ce que, dans des conditions de champ identiques, les performances de survitesse de l'InAs soient meilleures que celles de l'AsGa et de l'InP. Par contre, en ce qui concerne les performances comparées de l'AsGa et de l'InP, une étude plus approfondie est nécessaire.

|                       | InP <sup>[49]</sup> | AsGa    | InAs <sup>[50]</sup> |
|-----------------------|---------------------|---------|----------------------|
| $m_{\Gamma}^*/m_0$    | 0.08                | 0.063   | 0.022                |
| $\Delta E_{\Gamma,L}$ | 0.61 eV             | 0.33 eV | 0.87 eV              |

TABLEAU III

I.2. Refroidissement d'un paquet d'électrons chauds

Un paquet d'électrons, initialement portés en régime stationnaire par application d'un créneau de champ fort, voit subitement le champ fort instantanément remplacé par un champ nul ou inférieur au champ de seuil. Les électrons vont donc se trouver de façon transitoire dans la situation particulière d'électrons lourds soumis à un champ faible ou nul. Avant d'atteindre les nouvelles conditions d'équilibre relatives au champ faible, tous les électrons seront amenés à quitter en masse les vallées latérales pour venir repeupler intégralement la vallée centrale.

Pour étudier ce régime transitoire, seront considérées l'énergie et la vitesse moyennes des électrons ainsi que le bruit caractérisé à partir des variances de vitesses et de positions.

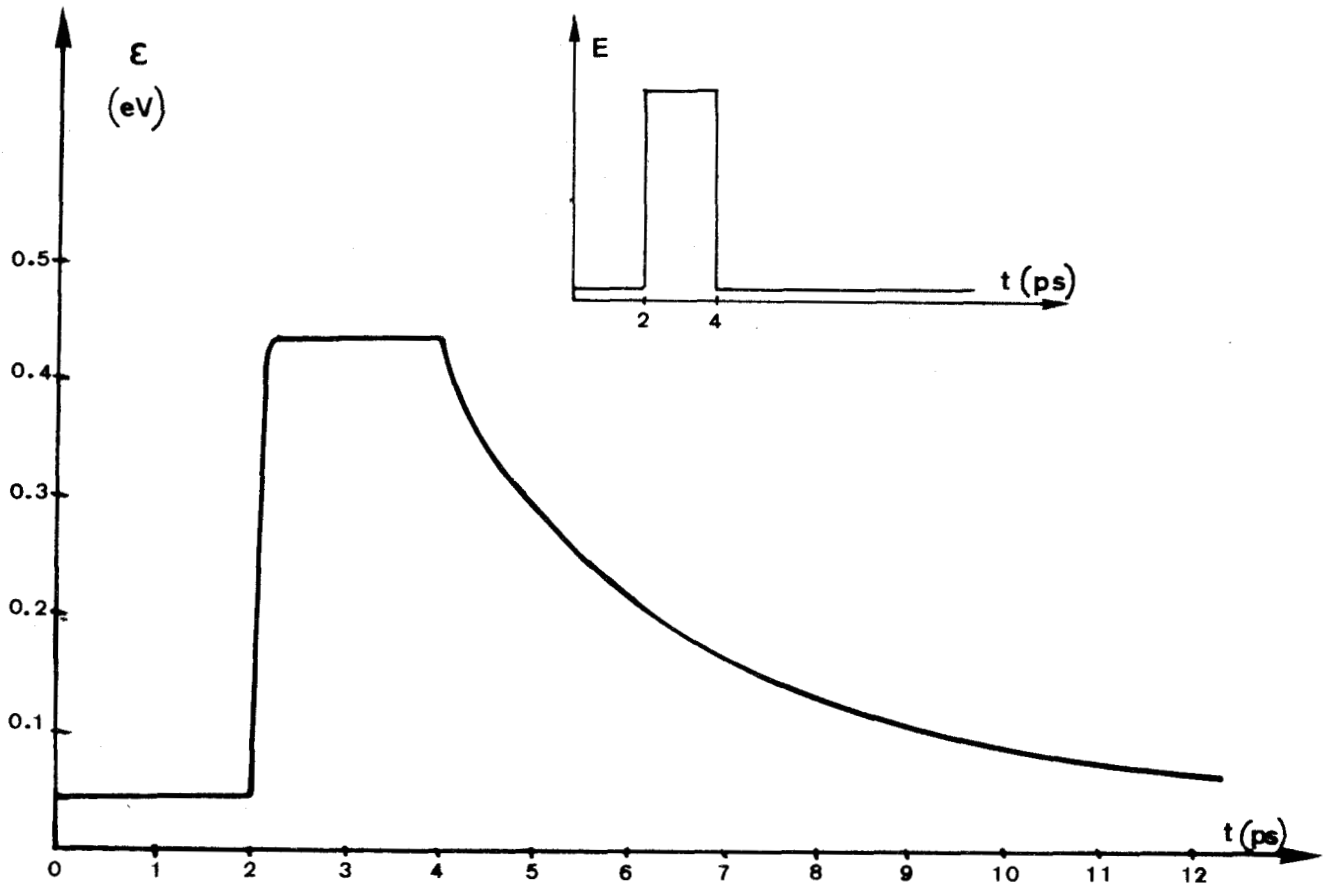


Figure 26 : Transition 40 kV/cm - 2 kV/cm : évolution de l'énergie .  $N_D = 0$

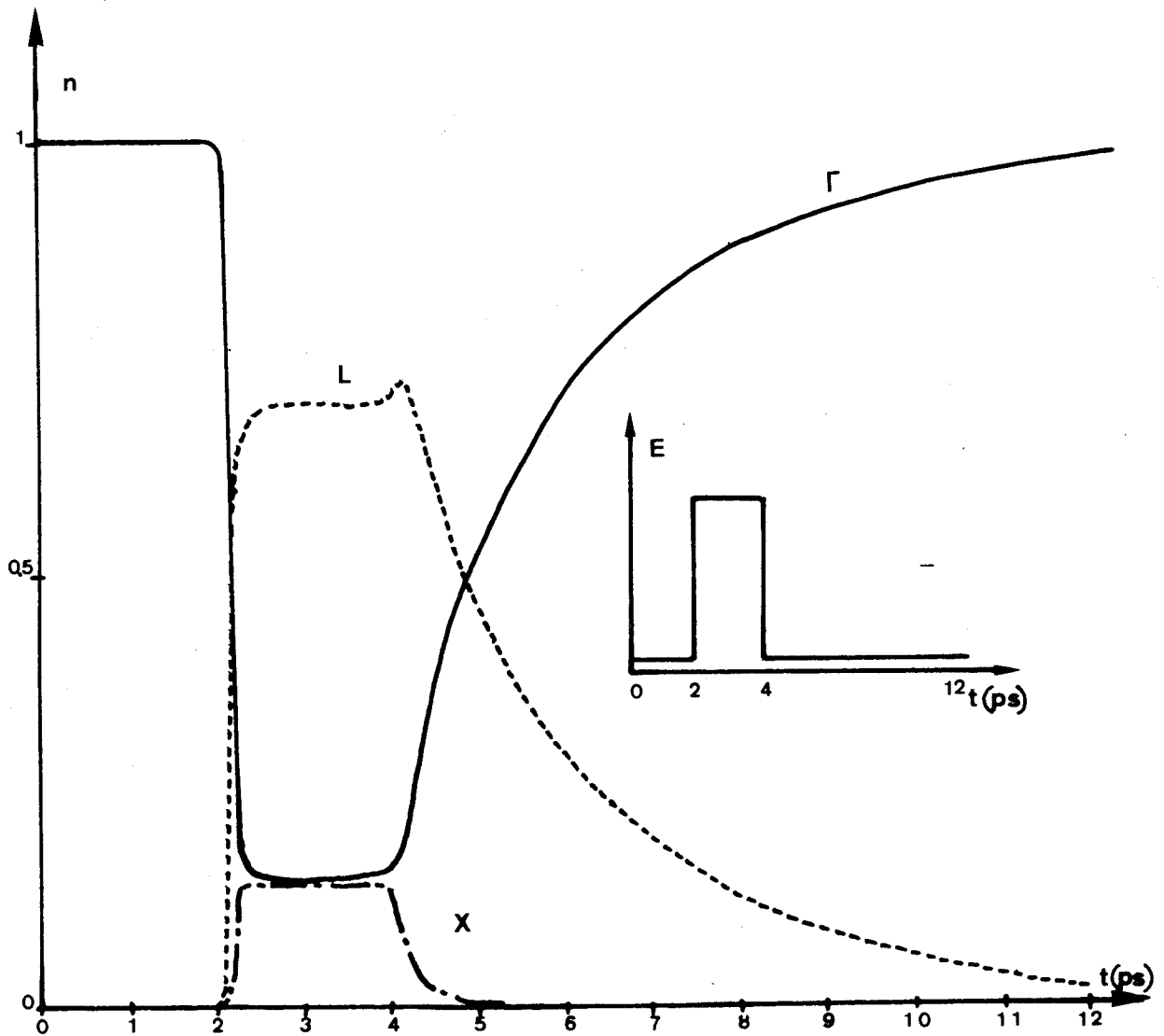


Figure 27 : Transition 40 kV/cm - 2 kV/cm : variation des répartitions de population dans chaque vallée.  $N_D = 0$



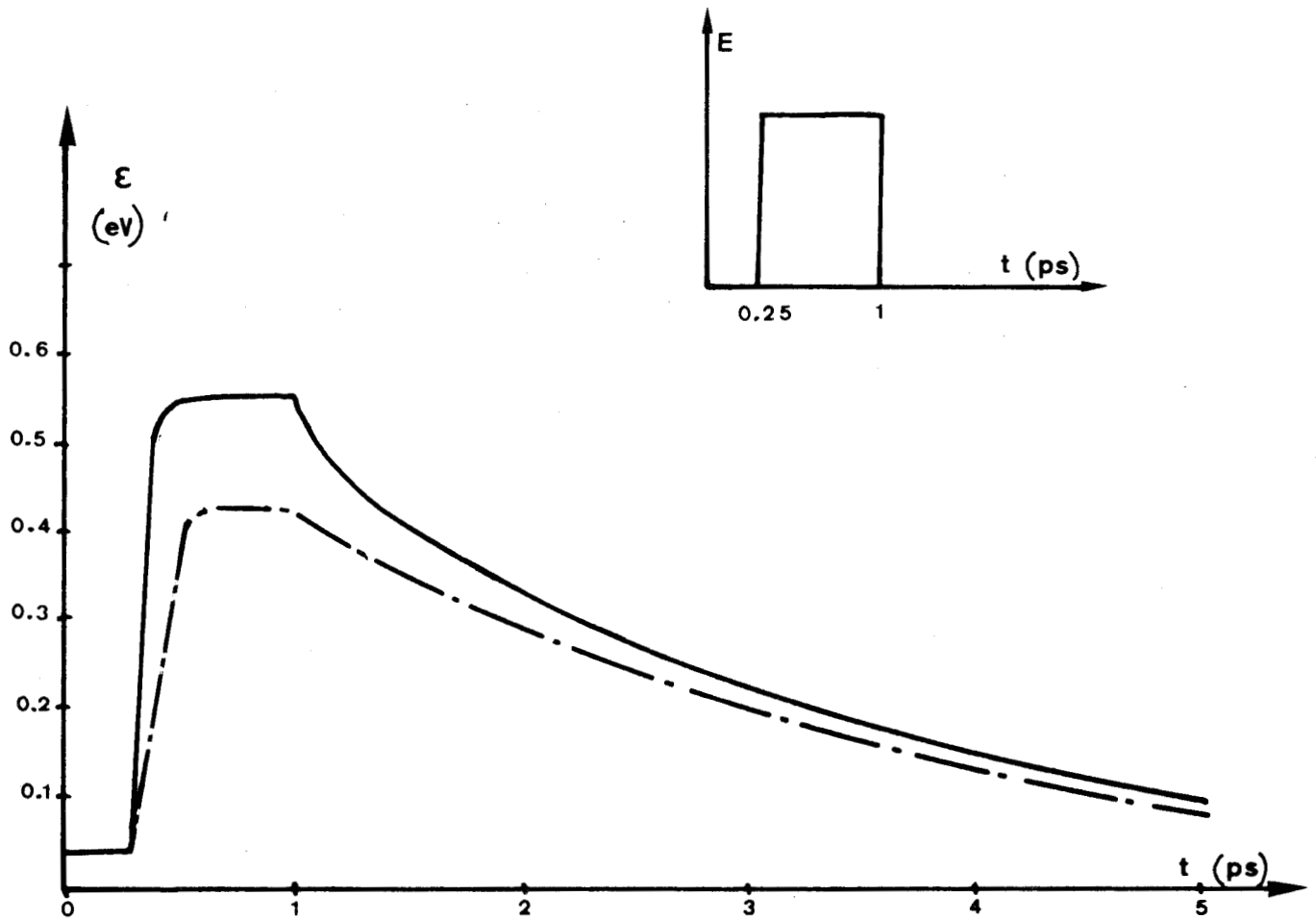


Figure 28 : Influence du champ fort initial sur l'évolution de l'énergie au cours d'une transition du champ fort champ faible.

$$N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$$

- · — transition 30 kV/cm - 0 kV/cm
- transition 70 kV/cm - 0 kV/cm

### I.2.1. Energie

-----

Dès l'instant où le champ faible est appliqué, l'énergie des électrons est subitement excédentaire par rapport aux nouvelles conditions d'équilibre. Les électrons auront donc tendance à transmettre cette énergie au réseau au cours des interactions. Les figures 1b et 1c qui représentent les probabilités d'interaction en vallée latérale montrent que ce sont les transferts vers les vallées équivalentes qui sont alors largement favorisés par rapport aux transferts vers la vallée centrale. De plus, une fois en vallée centrale, et pour des énergies de l'ordre de 0.4 eV, la probabilité de retourner en vallée L reste très forte comme le montre la figure 1a. Ces remarques laissent prévoir un phénomène de relaxation prononcé au cours du régime transitoire. C'est ce qui est effectivement observé sur la figure 26 qui représente les variations d'énergie moyenne dues à une transition de 40 kV/cm à 2 kV/cm, et sur la figure 27 qui représente les taux d'occupation des vallées à chaque instant. Au bout de 6 ps, les électrons n'ont pas encore atteint leur nouveau régime stationnaire. Il est à remarquer, sur la figure 28, que les courbes d'énergie, relatives aux transitions 30 kV/cm - 0 kV/cm et 70 kV/cm - 0 kV/cm respectivement, sont quasiment parallèles ; ce qui signifierait qu'à un instant donné la décroissance de l'énergie moyenne n'est caractérisée que par la valeur de l'énergie à l'instant considéré et en particulier est indépendante du champ fort initial. Ces phénomènes de relaxation sont trop importants pour être négligés au cours des études sur les composants.

### I.2.2. Vitesse

-----

Les électrons initialement lourds, sont amenés à transférer intégralement en vallée centrale. L'électron qui vient de transférer possède alors une énergie cinétique élevée et, compte tenu de la faible valeur de la masse effective en vallée centrale, sa vitesse est élevée en module. Chaque électron sera donc amené de façon transitoire à posséder une vitesse importante en module avant que ne soit atteint

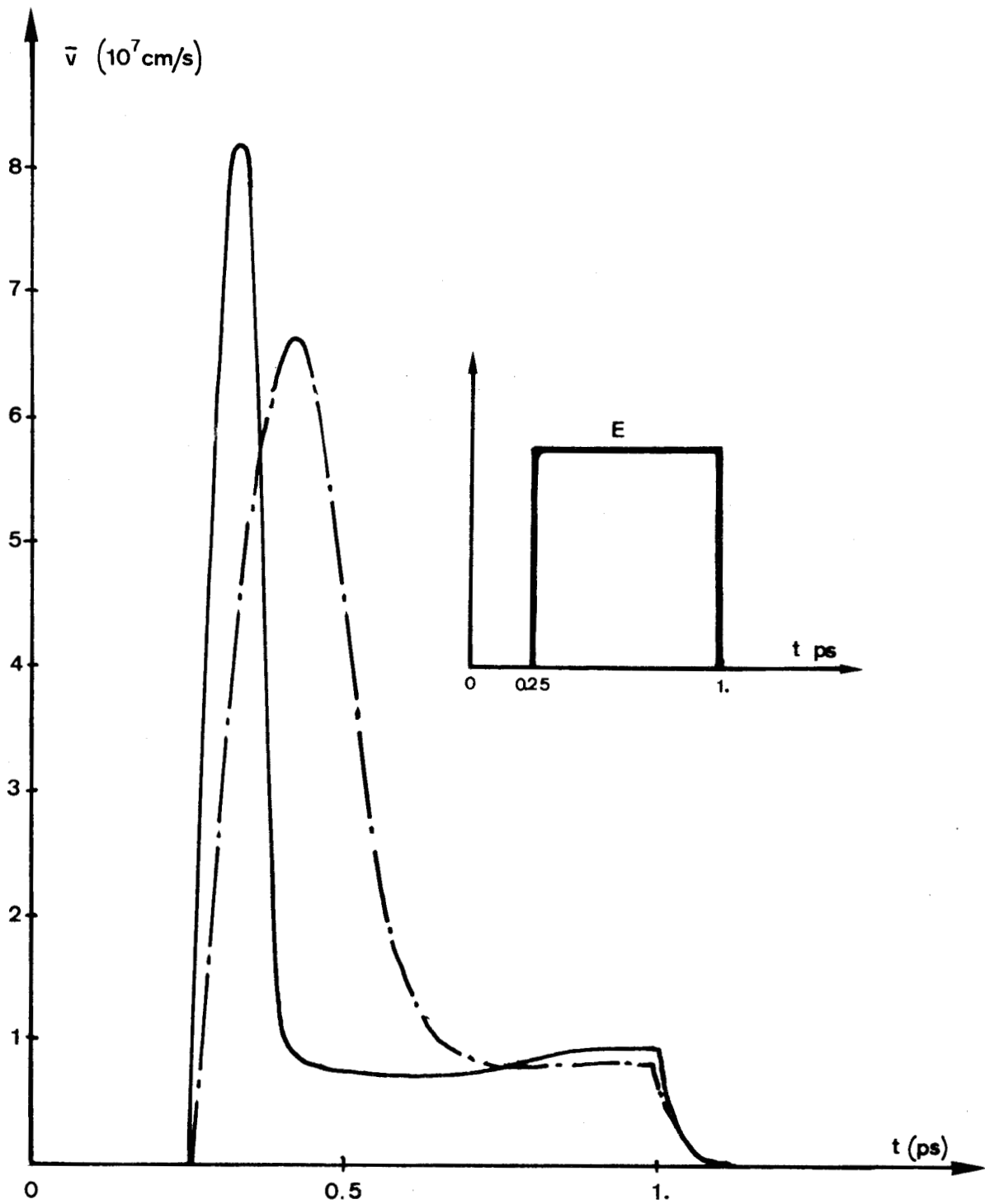


Figure 29 : Evolution de la vitesse au cours d'une transition champ

fort - champ nul.  $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$

— · — · — transition 30 kV/cm - 0 kV/cm

— transition 70 kV/cm - 0 kV/cm



le régime stationnaire relatif au champ nul ou faible. Mais à cause de l'effet de "randomisation" qui caractérise les interactions intervallées, la contribution à la vitesse moyenne des vitesses des électrons qui viennent de transférer est nulle. Ces électrons peuvent alors, soit retourner en vallée latérale tant que leur énergie est encore suffisante, soit libérer leur énergie excédentaire en vallée centrale où ils restent.

Quand le champ est nul, il n'y a aucun sens, ni aucune direction privilégiées et à cause de l'effet de "randomisation" dû aux interactions intervallées qui interviennent autant en vallée latérale qu'à l'arrivée en vallée centrale, la vitesse moyenne des électrons s'annule très rapidement dès que le champ est nul. C'est ce qui est observé sur la figure 29 qui décrit les variations des vitesses, relatives à des crêneaux de champ fort respectivement de 30 kV/cm et de 70 kV/cm.

Par contre, quand le champ est faible, la vitesse relative au nouveau régime stationnaire peut être même supérieure à la vitesse de saturation relative aux conditions initiales en champ fort. Quelle sera alors l'allure de la vitesse moyenne au cours du régime transitoire ?

L'action du champ faible est tout à fait insuffisante pour entraîner les électrons lourds qui sont encore en vallée latérale. La contribution de ces électrons à la vitesse moyenne sera donc toujours quasiment nulle. Seuls, les électrons de la vallée centrale sont à considérer.

Dès l'application du champ faible, les électrons vont commencer à transférer en vallée centrale où, dès leur arrivée, leurs vitesses seront élevées mais "randomisées" à cause de l'effet des transferts. C'est alors que l'action du champ faible revêt une grande importance. En effet, sous l'action du champ, les électrons dont la vitesse est positive vont acquérir de l'énergie, augmentant ainsi leur probabilité, déjà forte, de retourner en vallée latérale. C'est ce qui

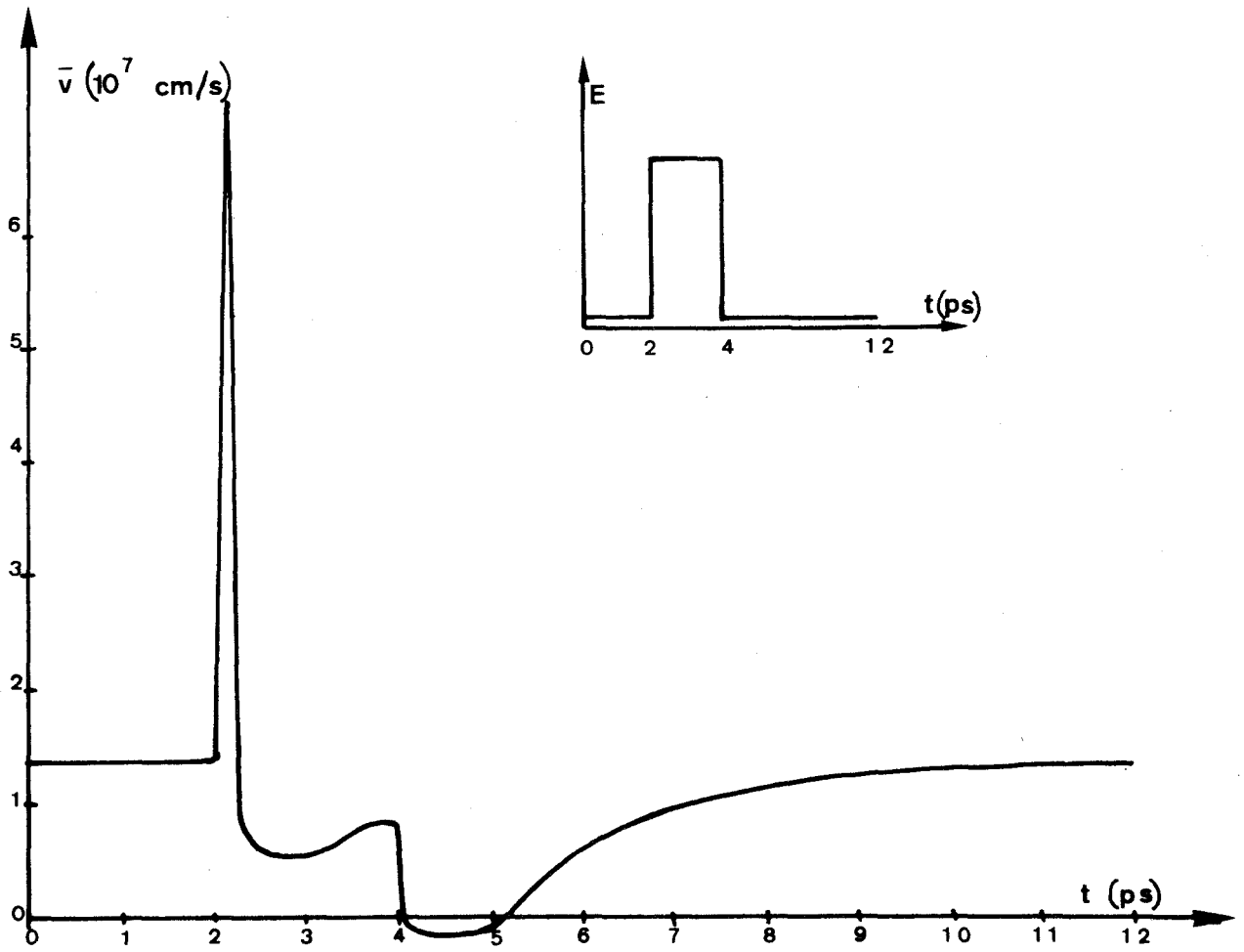


Figure 30 : Transition 40 kV/cm - 2 kV/cm. Vitesse  $\cdot N_D = 0$

arrive effectivement à la plupart d'entre eux. Par contre, les électrons dont la vitesse est négative sont freinés par le champ et à cause de la diminution de leur énergie, il ne leur est plus possible de retourner en vallée latérale. Leurs vitesses, initialement fortement négatives, ne sont freinées que progressivement, apportant une contribution négative à la vitesse moyenne [60].

La figure 30 qui décrit l'allure de la vitesse au cours du régime transitoire relatif à la transition 40 kV/cm-2 kV/cm montre que la vitesse moyenne des électrons est effectivement négative dès l'application du champ faible. Cet effet, assez inattendu de prime abord, trouve tout à fait sa justification par l'interprétation qui vient d'en être faite. Il dure plus d'une picoseconde avant que la vitesse ne redevienne positive et tende vers sa valeur stationnaire à 2 kV/cm.

Etant données les fortes dispersions de vitesses qui ont été observées, il est intéressant d'étudier le bruit accompagnant ces phénomènes.

### I.2.3. Bruit : coefficient de diffusion non stationnaire

Une approche simple et directe pour caractériser le bruit en régime non stationnaire est d'étudier l'évolution en fonction du temps des variances de vitesses qui représentent à chaque instant le bruit total sommé sur tout le spectre de fréquence.

Dans le cas du régime transitoire provoqué par la transition d'un champ fort à un champ faible ou nul, l'étude précédente montre qu'il existe une grande dispersion dans les vitesses dès la suppression du champ fort, laissant prévoir de fortes valeurs de variances de vitesses, de façon égale dans toutes les directions. C'est ce qui est effectivement observé sur la figure 31

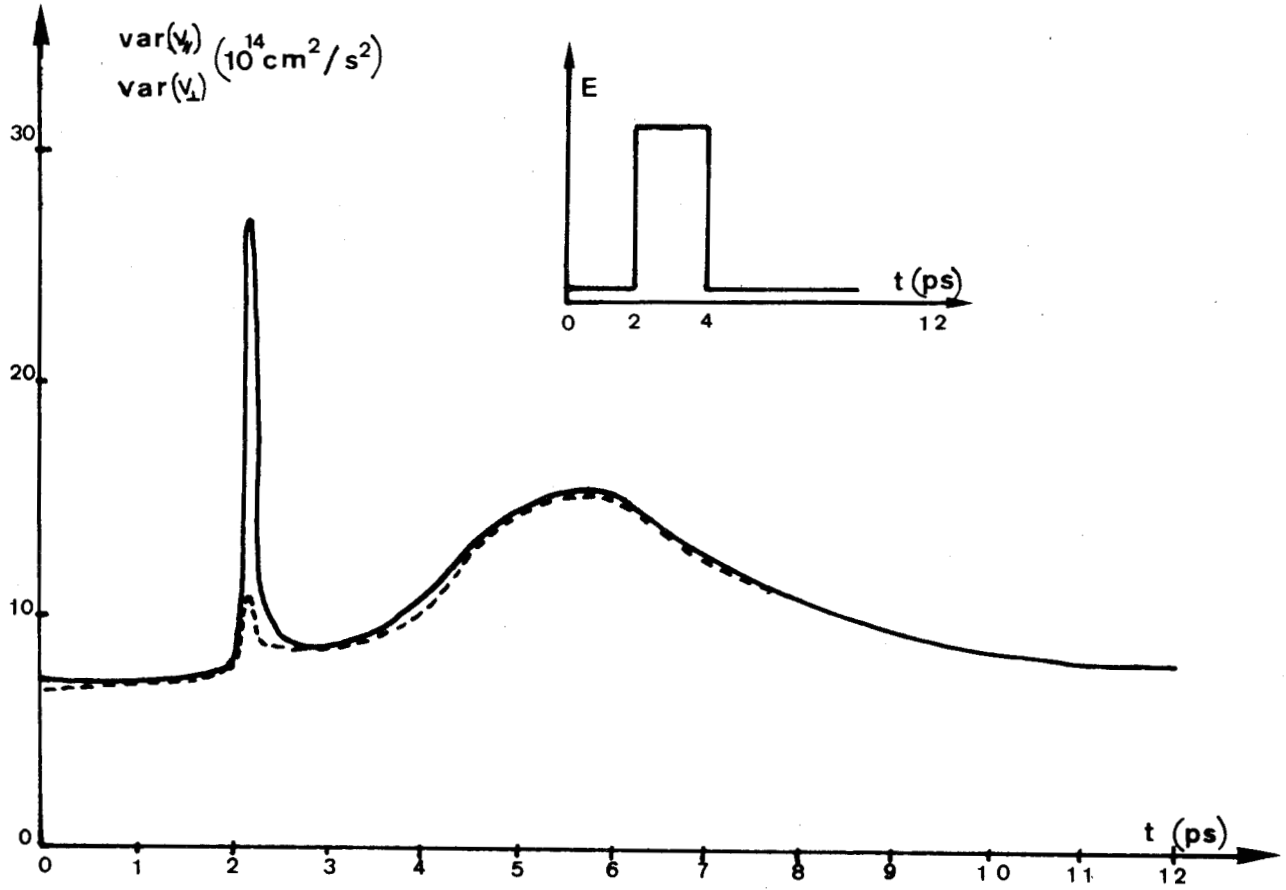


Figure 31 : Transitions 2 kV/cm - 40 kV/cm - 2 kV/cm

Variance de vitesse

— var  $v_{//}$   
 - - - var  $v_{\perp}$

qui montre qu'à la suite d'une transition de 40 kV/cm à 2 kV/cm, les variances de vitesse  $\text{var } v_{\parallel}$  et  $\text{var } v_{\perp}$  sont égales et nettement supérieures à la valeur stationnaire à 2 kV/cm ; ce phénomène a été également observé à la suite des transitions d'un champ fort à un champ nul. Les transitions de champ fort à champ faible ou nul s'accompagnent donc d'un excès de bruit qui en l'occurrence dure plus de 2 ps.

Néanmoins, il est à remarquer que la variance de vitesse ne correspond qu'à un bruit potentiel car elle représente le bruit maximum généré dans tout le spectre de fréquence. Pour obtenir le bruit effectif, il faudrait être en mesure de définir un coefficient de diffusion en régime non stationnaire.

Une définition de ce coefficient de diffusion à partir du bruit nécessiterait, par analogie avec le régime stationnaire, la connaissance d'une fonction  $\tau(t)$  modulant la variance de vitesse de telle façon que le coefficient de diffusion bruit non stationnaire puisse s'écrire à chaque instant :

$$D_{\text{bruit}}(t) = \text{var } v(t) \cdot \tau(t)$$

Mais la détermination de cette fonction  $\tau(t)$  ne semble pas immédiate.

Par contre, il semblerait plus aisé de définir ce coefficient de diffusion par la rapidité d'étalement d'un paquet d'électrons au cours du temps. Cette observation qui ne suppose à priori aucune condition sur le champ appliqué, pourrait donner lieu à une généralisation au cas non stationnaire de la définition du coefficient de diffusion par étalement paquet qui s'écrirait alors :

$$D_r(t) = \frac{1}{2} \cdot \frac{d}{dt} (\text{var } z(t)) \quad (1)$$



Il peut être intéressant de comparer cette expression au coefficient de diffusion  $D'$  non stationnaire, tel qu'il est défini à partir du courant de diffusion [51] et qui vérifie la relation :

$$\frac{\partial c(z', t)}{\partial t} = D' \frac{\partial^2 c(z', t)}{\partial z'^2} \quad (2)$$

Dans cette expression,  $c(z', t)$  représente la fonction de distribution des électrons suivant la direction  $Oz$  et  $z' = z - \bar{z}$ .

Il est alors possible d'écrire [31] :

$$\begin{aligned} \frac{d \text{ var } z(t)}{dt} &= \frac{d}{dt} \left( \int z'^2 \cdot c(z', t) dz' \right) \\ &= \int z'^2 \frac{\partial c(z', t)}{\partial t} dz' = D' \int z'^2 \frac{\partial^2 c(z', t)}{\partial z'^2} dz' \end{aligned}$$

une intégration par partie donne :

$$\frac{d \text{ var } z(t)}{dt} = 2 D' \int c(z', t) dz' = 2 D'$$

La définition généralisée à partir de l'étalement d'un paquet est donc tout à fait compatible avec celle qui est usuellement donnée à partir du courant de diffusion. C'est cette définition qui sera utilisée pour caractériser le bruit relatif à la transition champ fort - champ faible qui présente déjà un bruit potentiel très élevé.

La figure 32 qui représente l'évolution des variances de position  $\text{var } z(t)$  et  $\text{var } y(t)$  suite à une transition de 40 kV/cm à 2 kV/cm, montre que la pente de ces courbes passe par un maximum avant que ne soit atteint le régime stationnaire, ce qui correspond, comme le montre approximativement la figure 33 à des coefficients de diffusion non stationnaires près de deux fois supérieurs aux valeurs stationnaires à 2 kV/cm.

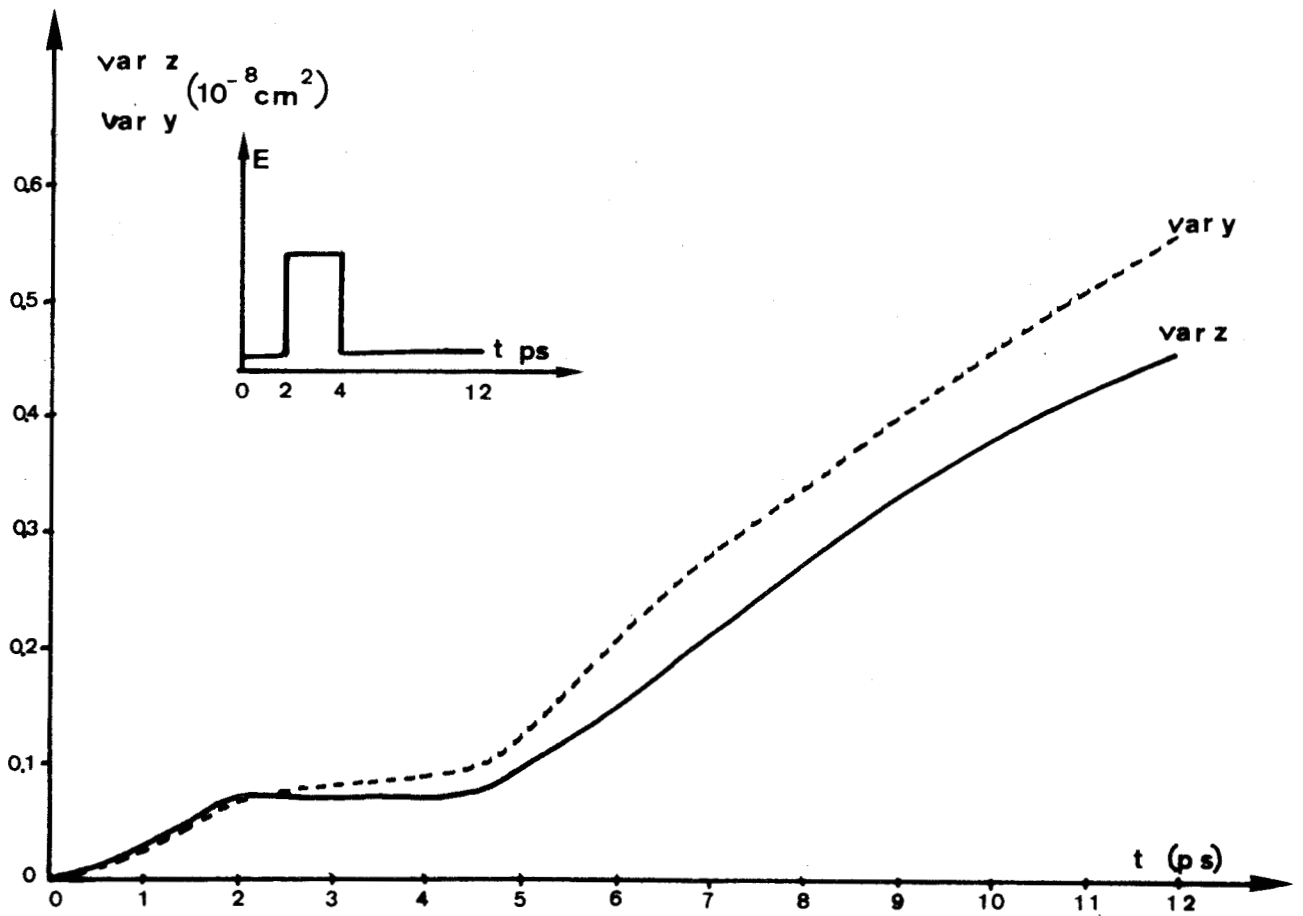


Figure 32 : Transitions 2 kV/cm - 40 kV/cm - 2 kV/cm

Variance de position

- parallèlement au champ:  $\text{var } z (t)$
- - - - - perpendiculairement au champ:  $\text{var } y (t)$

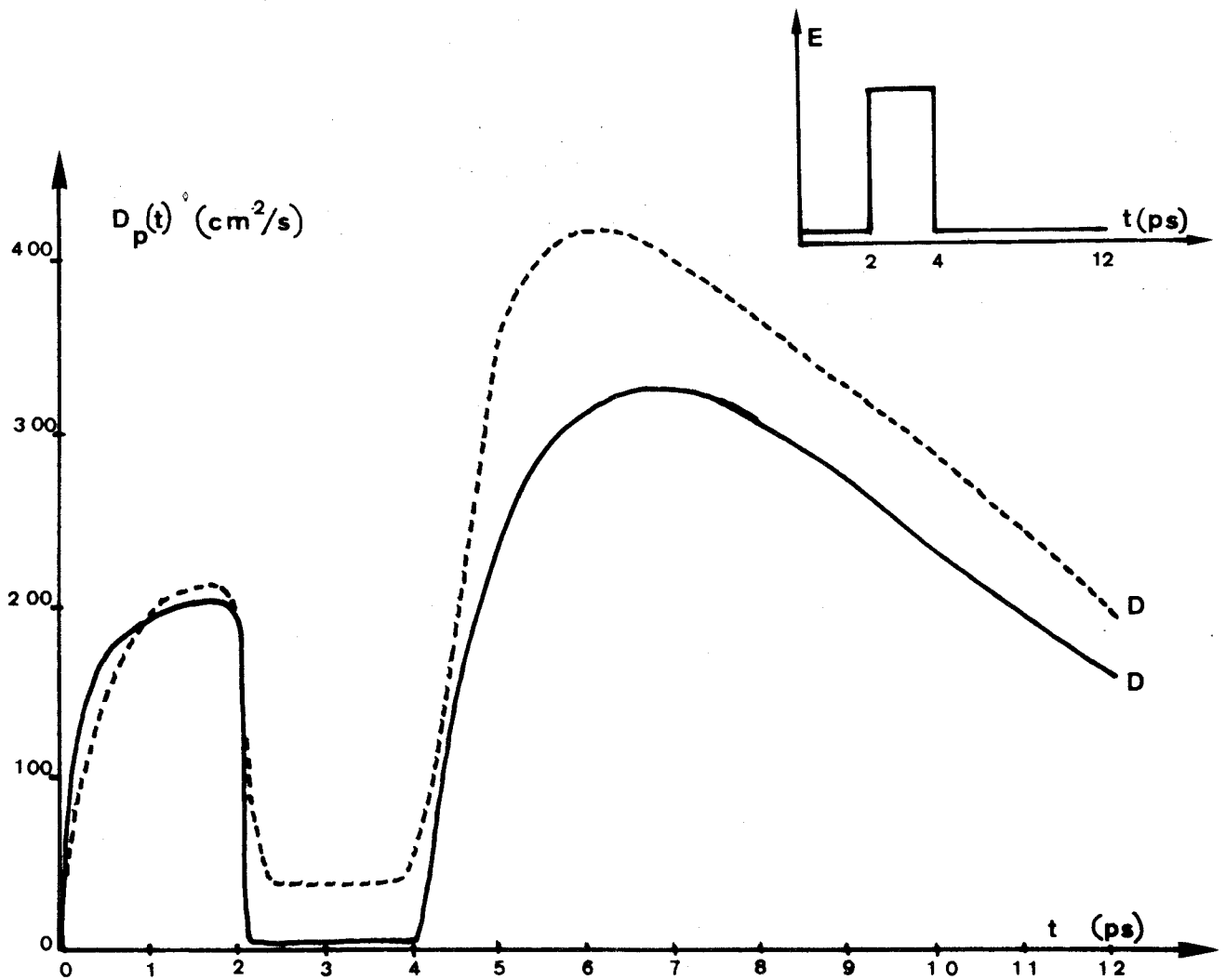


Figure 33 : Transitions 2 kV/cm - 40 kV/cm - 2 kV/cm  
 Coefficient de diffusion non stationnaire

—  $D_{//}(t)$   
 - - -  $D_{\perp}(t)$

Le refroidissement brutal d'électrons chauds s'accompagne donc d'une très forte diffusion aussi bien parallèlement que perpendiculairement au champ.

### I.3. Conclusion

Les méthodes de Monte Carlo ont permis par la simple observation d'un paquet d'électrons au cours du temps, de mettre en évidence les caractéristiques les plus importantes des propriétés de l'Arséniure de Gallium en régime non stationnaire.

Parmi ces caractéristiques, la plus connue et la plus importante est relative à l'effet de survitesse [44] apparaissant lors de l'application d'un échelon de champ fort, au cours de laquelle la vitesse peut être largement supérieure à la valeur stationnaire. Cet effet laisse prévoir des applications intéressantes en hyperfréquence ou en logique ultrarapide.

Par contre, le régime transitoire lié à la suppression du champ fort était encore jusqu'à présent mal connu. Une étude approfondie des effets apparaissant suite à des transitions instantanées de champ fort à champ faible, a permis de mettre en évidence des phénomènes nouveaux et surprenants de vitesse négative, accompagnés d'un phénomène de diffusion excédentaire. En outre, l'énergie présente un effet de relaxation important.

Cette étude montre que les temps de réponse de l'Arséniure de Gallium à une excitation extérieure, sont trop élevés pour qu'il n'en soit pas tenu compte dans toute étude en régime non stationnaire ou dans toute étude des composants.

## II. APPROCHE SEMI-ANALYTIQUE DES RESULTATS MONTE-CARLO

Les méthodes de Monte Carlo offrent l'avantage d'étudier l'évolution au cours du temps de toutes les grandeurs intéressantes, quelles que soient les variations du champ appliqué. Néanmoins, c'est une simulation qui demande beaucoup de temps calcul et d'espace mémoire. Il serait alors intéressant, compte tenu de tous les résultats déjà obtenus aussi bien en régime stationnaire que non-stationnaire par la simulation, d'en déduire une formulation semi-analytique qui puisse rendre compte des effets non stationnaires provoqués par toute variation du champ appliqué [52]. La formulation proposée par M. Shur [43] qui repose entièrement sur des résultats obtenus en régime stationnaire par Monte Carlo, permet d'obtenir très rapidement sur calculatrice l'évolution en première approximation de l'énergie et de la vitesse en régime non stationnaire. Elle constitue donc un outil très intéressant mais qui demande au préalable à être testé.

Ainsi, après avoir présenté la méthode de Shur, les premiers résultats obtenus avec cette méthode seront comparés aux résultats relatifs à la simulation, dans les conditions précédemment étudiées. Il en sera ensuite donné une application très intéressante relative au régime alternatif.

### II.1. Présentation de la formulation de M. Shur

Le modèle proposé par M. Shur utilise comme point de départ la formulation classique des principes de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement à partir de l'approximation des temps de relaxation. Cette formulation repose sur les équations suivantes :

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = e E v - \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\tau_\varepsilon(\varepsilon)} \quad (1)$$

$$\text{et } \frac{d(m^*(\varepsilon) \cdot v)}{dt} = e E - \frac{m^*(\varepsilon) \cdot v}{\tau_p(\varepsilon)} \quad (2)$$

Dans ces équations,  $\varepsilon_0$  est l'énergie thermique,  $\tau_\varepsilon(\varepsilon)$  et  $\tau_p(\varepsilon)$  sont les temps de relaxation d'énergie et de quantité de mouvement.

L'originalité de la méthode de M. Shur consiste à traduire la masse effective  $m^*(\varepsilon)$  et les temps de relaxation  $\tau_\varepsilon(\varepsilon)$  et  $\tau_p(\varepsilon)$  à partir d'expressions semi-analytiques des caractéristiques obtenues par les méthodes de Monte Carlo en régime stationnaire. Elle offre l'avantage contrairement aux méthodes traditionnelles de ne nécessiter aucune hypothèse simplificatrice concernant la fonction de distribution de l'énergie ou les processus d'interaction. Dans le cas particulier du régime stationnaire, les variations d'énergie et de quantité de mouvement sont nulles, ainsi :

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = 0 \quad (3) \quad \text{et} \quad \frac{d(m^*(\varepsilon) \cdot v)}{dt} = 0 \quad (4)$$

La relation entre énergie et champ en régime stationnaire étant bi-univoque, toutes les caractéristiques généralement traduites en fonction du champ peuvent être données en fonction de l'énergie. Les temps de relaxation  $\tau_\varepsilon(\varepsilon)$  et  $\tau_p(\varepsilon)$  peuvent alors s'écrire, compte tenu des relations (3) et (4)

$$\tau_\varepsilon(\varepsilon) = \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{e E_s(\varepsilon) \cdot v_s(\varepsilon)} \quad \text{et} \quad \tau_p(\varepsilon) = \frac{m^*(\varepsilon) \cdot v_s(\varepsilon)}{e \cdot E_s(\varepsilon)}$$

où 
$$m^*(\varepsilon) = \sum_i m_i^* \cdot p_i(\varepsilon)$$

Dans ces expressions, la vitesse stationnaire  $v_s^*(\varepsilon)$ , le champ  $E_s(\varepsilon)$  et la masse effective  $m^*(\varepsilon)$ , qui est la somme pondérée des masses effectives dans chaque type de vallée, sont formulées analytiquement à partir des résultats obtenus par Monte Carlo en régime stationnaire. Les évolutions de  $\tau_\varepsilon(\varepsilon)$  et  $\tau_p(\varepsilon)$  sont représentées en fonction de l'énergie sur les fig. 34 a et 34 b.

\* La vitesse  $v_s$  ainsi notée par souci d'uniformisation des notations n'est autre que la vitesse stationnaire  $v_d$ .

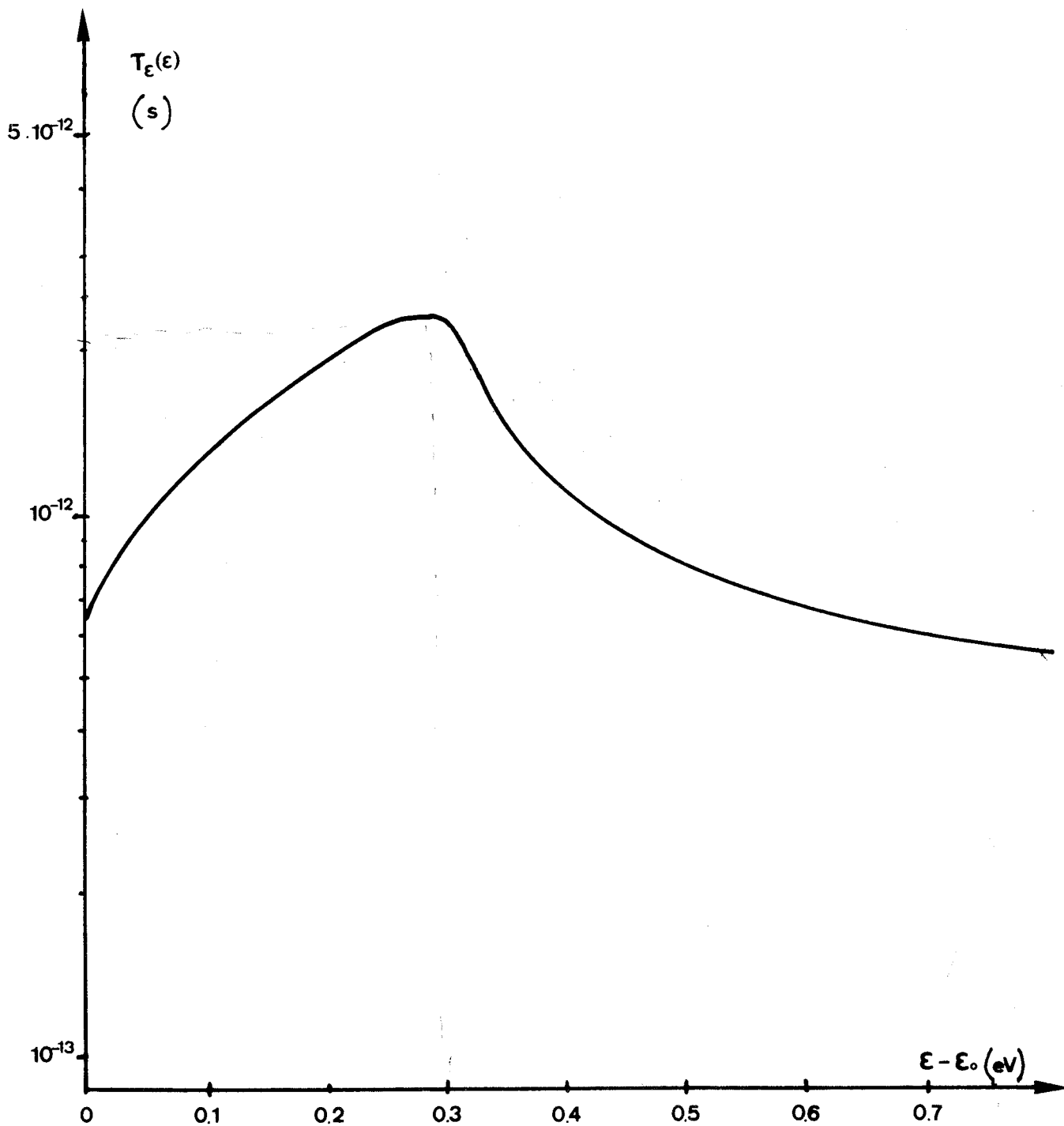


Figure 34 a) : Variation du temps de relaxation de l'énergie  $\tau_\epsilon(\epsilon)$  en fonction de l'énergie



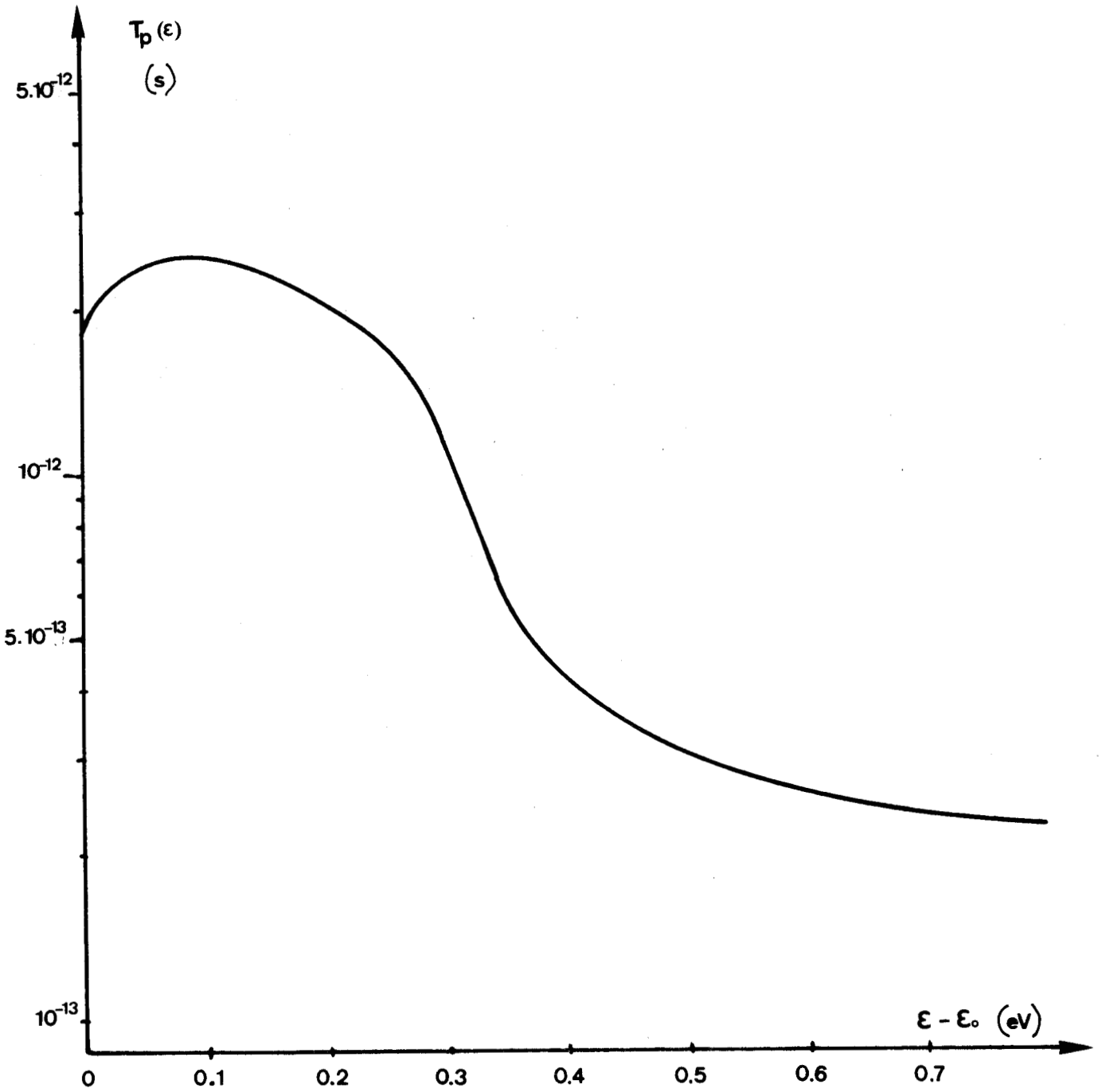


Figure 34 b) : Variation du temps de relaxation de la quantité de mouvement  $\tau_p(\epsilon)$  en fonction de l'énergie





Après avoir reporté les expressions de  $\tau_\varepsilon(\varepsilon)$  et  $\tau_p(\varepsilon)$  dans les équations (1) et (2), celles-ci s'écrivent simplement :

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = e ( E \cdot v - E_s(\varepsilon) \cdot v_s(\varepsilon) ) \quad (5)$$

$$\text{et } \frac{d(m^*(\varepsilon) \cdot v)}{dt} = e \left( E - \frac{v \cdot E_s(\varepsilon)}{v_s(\varepsilon)} \right) \quad (6)$$

Ainsi, les phénomènes de relaxation de l'énergie et de la quantité de mouvement ne dépendent à chaque instant que de l'écart entre les grandeurs instantanées et les grandeurs stationnaires relatives à l'énergie où se trouve le système.

Ces relations montrent simplement qu'en première approximation, la réponse d'un matériau à une excitation extérieure peut être directement déduite de ses caractéristiques stationnaires de vitesse et d'énergie qui interviennent par les quantités  $E_s(\varepsilon) \cdot v_s(\varepsilon)$  et  $E_s(\varepsilon)/v_s(\varepsilon)$ . Etant donné que l'énergie est une fonction croissante du champ, une augmentation ou une diminution de l'énergie  $\varepsilon$  peut être représentée au niveau de la caractéristique  $v(E)$  par le déplacement sur cette caractéristique d'un point de coordonnées  $E_s(\varepsilon)$  et  $v_s(\varepsilon)$ .

Ainsi, la relation de conservation des moments montre le lien étroit qui existe entre la survitesse à l'application d'un échelon de champ fort et la mobilité statique en champ faible  $\mu_s$ . En effet, la vitesse étant maximale pour une valeur d'énergie encore faible, le rapport  $\frac{v_s(\varepsilon)}{E_s(\varepsilon)}$  est pratiquement égal à la mobilité statique  $\mu_s$ . La relation (6) montre alors que plus cette mobilité statique est forte, plus les variations instantanées de quantité de mouvement sont élevées.

De même, la relation de conservation de l'énergie montre qu'il existe un lien étroit entre le phénomène de relaxation d'énergie observé lors du passage d'un champ fort à un champ nul et l'allure de la caractéristique  $v_s(E)$  en champ fort. En effet, la décroissance d'énergie, qui est proportionnelle à  $E_s(\epsilon) \cdot v_s(\epsilon)$  se traduit sur la caractéristique  $v_s(E)$  par un déplacement du point de coordonnées  $E_s(\epsilon)$  et  $v_s(\epsilon)$ , du champ fort initial au champ nul ; la durée totale de la relaxation dépendra à la fois de la perte d'énergie par unité de temps  $E_n(\epsilon) \cdot v_s(\epsilon)$  et de la pente  $\frac{d\epsilon}{dE}$  sur la caractéristique  $\epsilon(E)$  ; cette durée sera d'autant plus longue que la quantité  $E_s(\epsilon) \cdot v_s(\epsilon)$  sera faible et qu'elle correspondra à une pente  $\frac{d\epsilon}{dE}$  élevée. Ainsi, une faible valeur de vitesse de saturation, atteinte pour de faibles valeurs de champ, favorisera de longues durées de relaxation.

Il résulte de cette analyse qu'il est possible de prédire les performances relatives de l'InAs, de l'AsGa et de l'InP à partir d'une comparaison de leurs caractéristiques statiques  $v(E)$  et  $\epsilon(E)$ . Le tableau IV présente pour ces composés, les valeurs de mobilité, de champ de seuil, de vitesse de saturation, ainsi que de la pente moyenne  $\frac{\Delta\epsilon}{\Delta E}$  prise en champ fort sur la caractéristique  $\epsilon(E)$  qui est alors quasi linéaire (figure 3b ).

Ainsi, étant données les valeurs respectives des mobilités statiques de ces composés, il faut s'attendre à ce que les survitesses présentées par l'AsGa soient plus élevées que celles de l'InP mais plus faibles que celles de l'InAs. Par contre, compte tenu des valeurs respectives de leur champ de seuil ainsi que de la pente moyenne  $\frac{\Delta\epsilon}{\Delta E}$  les durées de relaxation présentées par l'AsGa seront supérieures à celles de l'InP mais inférieures à celles de l'InAs. Il est intéressant de remarquer que comme les propriétés de ces matériaux sont telles qu'à une mobilité statique élevée correspond en général un champ de seuil faible ainsi qu'une pente  $\frac{\Delta\epsilon}{\Delta E}$  élevée, à une survitesse élevée correspondra une durée de relaxation longue.

La formulation de M. Shur permet donc de caractériser facilement et rapidement le comportement du matériau en régime non stationnaire à partir de simples données statiques telles que mobilité, champ seuil, vitesse de saturation et caractéristique d'énergie  $\epsilon(E)$ .

| $N_D = 0$                                       | InP       | AsGa      | InAs      |
|---|-----------|-----------|-----------|
| $\mu_0$<br>cm <sup>2</sup> /V/s                 | 4000      | 7600      | 23000     |
| $E_{\text{seuil}}$<br>kV/cm                     | 9.5       | 4         | 2.2       |
| $v_{\text{sat}}$<br>cm/s                        | $0.910^7$ | $0.910^7$ | $0.610^7$ |
| $\frac{\Delta\epsilon}{\Delta E}$ meV.cm/<br>kV | 2.1       | 2.8       | 3.9       |

TABEAU IV [53-54]

II.2. Comparaison entre les résultats semi-analytiques et les résultats Monte-Carlo

La formulation de Shur permet simplement d'obtenir l'évolution de l'énergie et de la vitesse en fonction du temps par un traitement numérique direct des équations de base ; en effet, il est possible, après discrétisation du temps en pas  $\Delta t$ , de calculer de proche en proche les valeurs d'énergie et de vitesse à un instant  $i\Delta t$  connaissant les valeurs à l'instant  $(i-1)\Delta t$  à partir des équations (5) et (6) qui se mettent alors sous la forme [55] :

$$\epsilon_i = \epsilon_{i-1} + e \cdot \Delta t ( E_i \cdot v_i - E_s(\epsilon_i) \cdot v_s(\epsilon_i) ) \quad (7)$$

et

$$m_i^* v_i = m_{i-1}^* v_{i-1} + e \cdot \Delta t \left( E_i - \frac{v_{i-1} \cdot E_s(\epsilon_i)}{v_s(\epsilon_i)} \right) \quad (8)$$

Au niveau pratique, la valeur du pas  $\Delta t$  est de  $0.510^{-3}$  ps et étant données les faibles variations des grandeurs stationnaires au cours d'un pas,  $E_s(\epsilon_{i-1})$  et  $v_s(\epsilon_{i-1})$  sont substituées à  $E_s(\epsilon_i)$  et  $v_s(\epsilon_i)$  dans les équations (7) et (8). Ainsi, l'évolution de l'énergie et de la vitesse au cours du régime transitoire peut être simplement obtenue à l'aide d'une calculatrice, quelles que soient les variations du champ électrique.

Cette méthode semi-analytique, qui traduit en première approximation les effets non stationnaires qui seraient obtenus par la simulation, demande à être testée sur des résultats obtenus directement par les méthodes de Monte-Carlo.

Une comparaison entre les résultats obtenus respectivement par la méthode semi-analytique de M. Shur et par les méthodes de Monte-Carlo peut être faite dans les cas simples et extrêmes précédemment étudiés des transitions champ faible-champ fort et champ fort-champ nul ou faible\*

La figure 35 a et la figure 35 b, qui représentent la survitesse ainsi que le phénomène de relaxation d'énergie provoqués par l'application de créneaux de champ fort respectivement de 30 kV/cm et 70 kV/cm, montrent qu'il existe, dans ce cas, un très bon accord entre les deux méthodes. Il en est de même sur la figure 36 qui montre l'évolution de la vitesse au cours du régime transitoire relatif à la transition 40 kV/cm - 2 kV/cm, bien que la méthode de M. Shur ne puisse pas tout à fait rendre compte des phénomènes de vitesse négative mis en évidence par la simulation.

---

\* Cette étude par la méthode de M. Shur a été réalisée par B. CARNEZ et A. CAPPY.

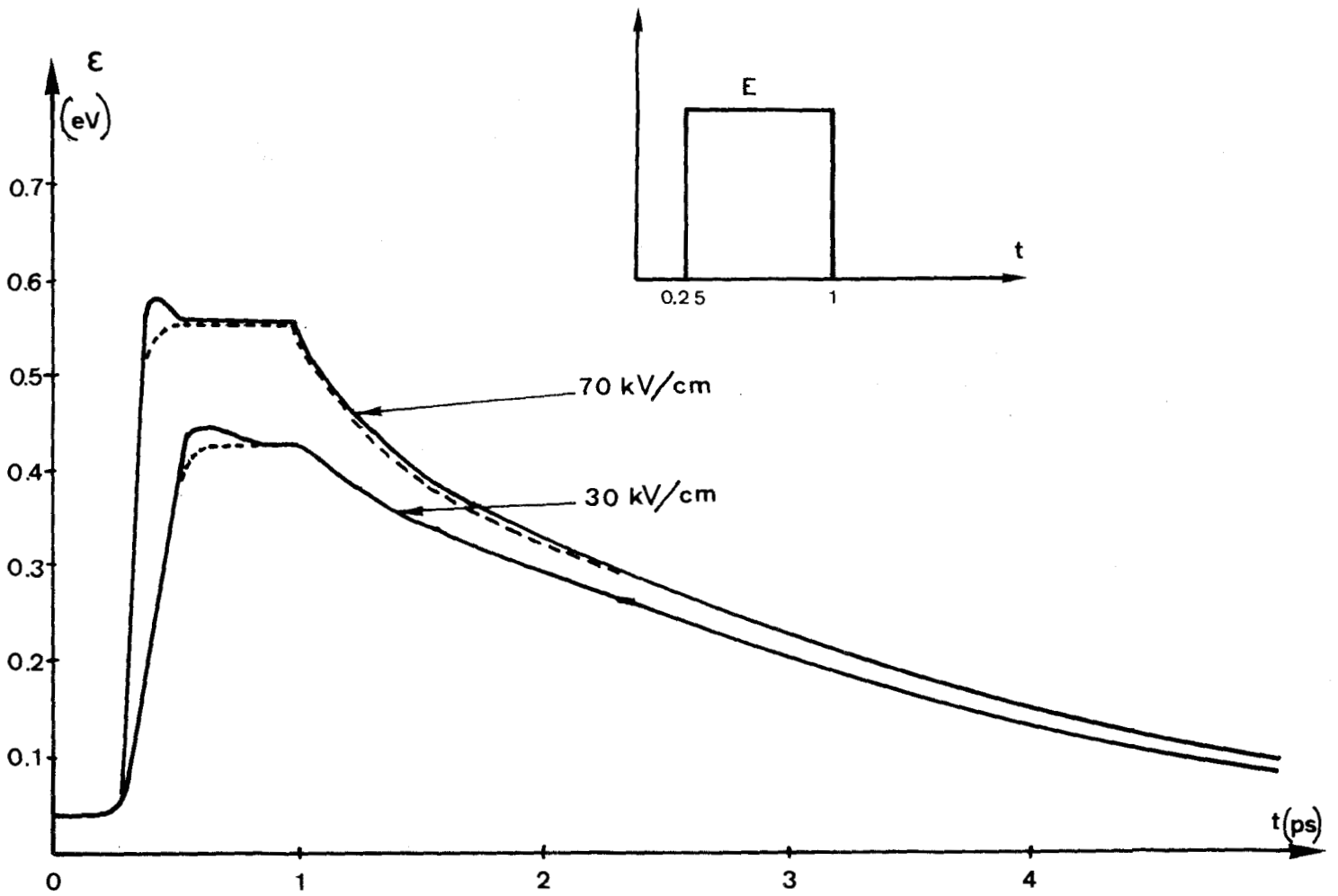


Figure 35 a): Comparaison entre les caractéristiques d'énergie  
obtenues par chacune des deux méthodes -  $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ .  
Transitions 30 kV/cm - 0 kV/cm et 70 kV/cm - 0 kV/cm.  
M. Shur  
Monte Carlo



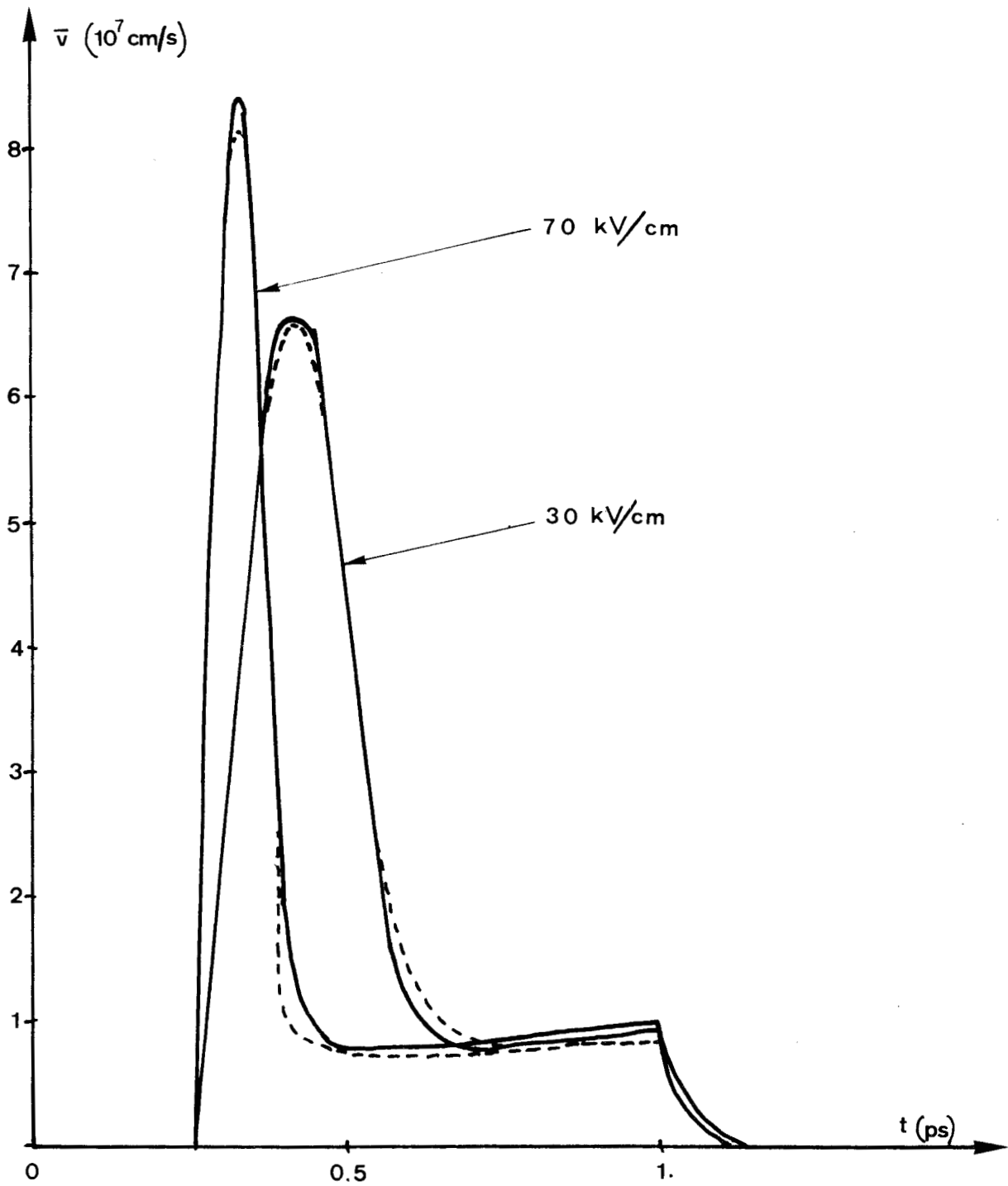


Figure 35 b) : Comparaison entre les caractéristiques de vitesse obtenues par chacune des deux méthodes.  $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . Transitions 30 kV/cm - 0 kV/cm et 70 kV/cm - 0 kV/cm.

M. Shur  
Monte Carlo



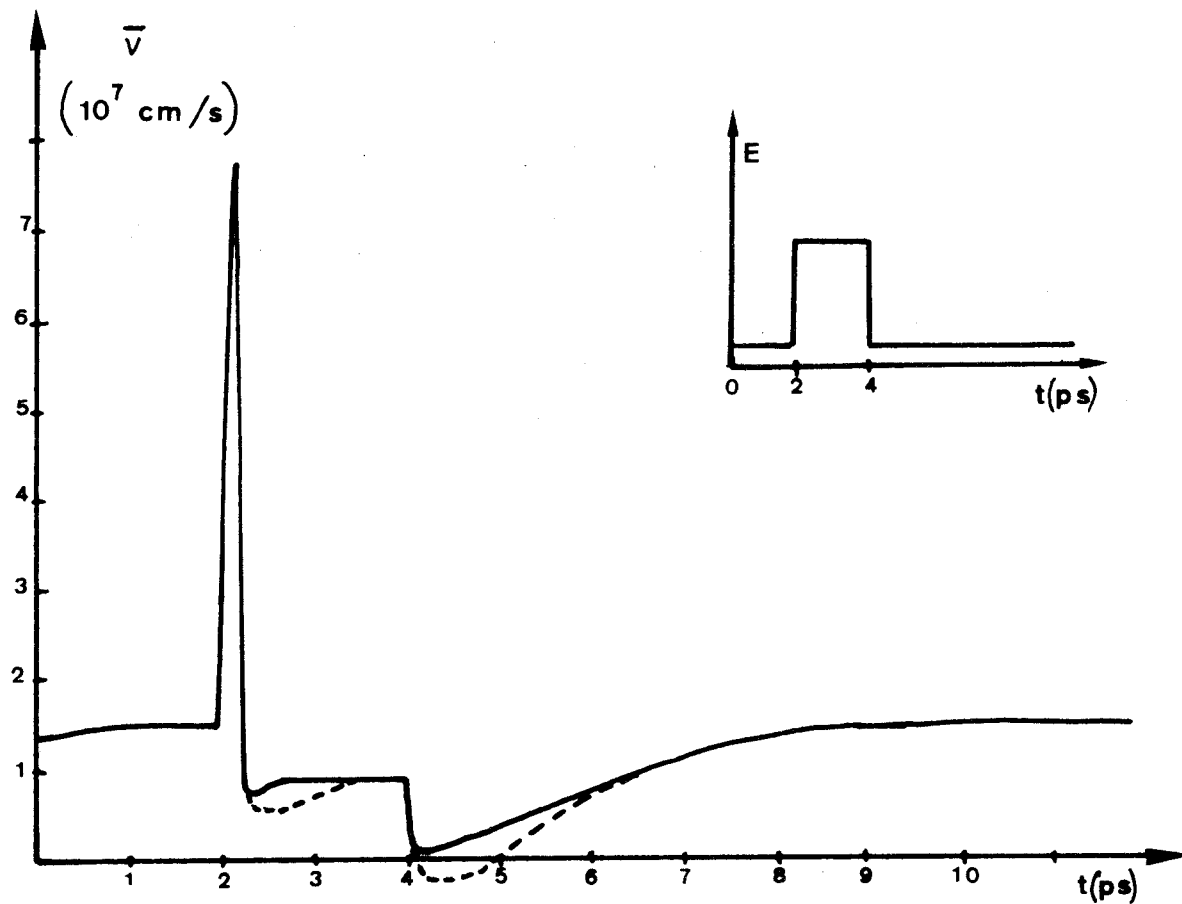


Figure 36 : Comparaison entre les vitesses obtenues par chacune  
des deux méthodes au cours des transitions 2 kV/cm -  
40 kV/cm - 2 kV/cm

— M. Shur  
- - - - - Monté Carlo

Dans l'ensemble de ces cas extrêmes qui permettent de caractériser le comportement en régime non stationnaire d'un matériau, l'approche semi-analytique de M. Shur constitue une très bonne approximation des résultats obtenus par les méthodes de Monte Carlo. Etant donné que les temps calculs qu'elle requiert sont infiniment plus faibles que ceux qui sont nécessaires à la simulation dans les mêmes conditions, cette méthode semi-analytique permet des études plus élaborées que ce qui pouvait être réalisable par les méthodes de Monte Carlo.

L'étude des effets non stationnaires en régime alternatif en est un exemple.

### II.3. Application de la méthode de M. Shur à l'étude du régime alternatif.

Cette étude du régime alternatif dans l'Arséniure de Gallium est plus particulièrement axée sur les possibilités de génération de puissance hyperfréquence dans le matériau [56-57].

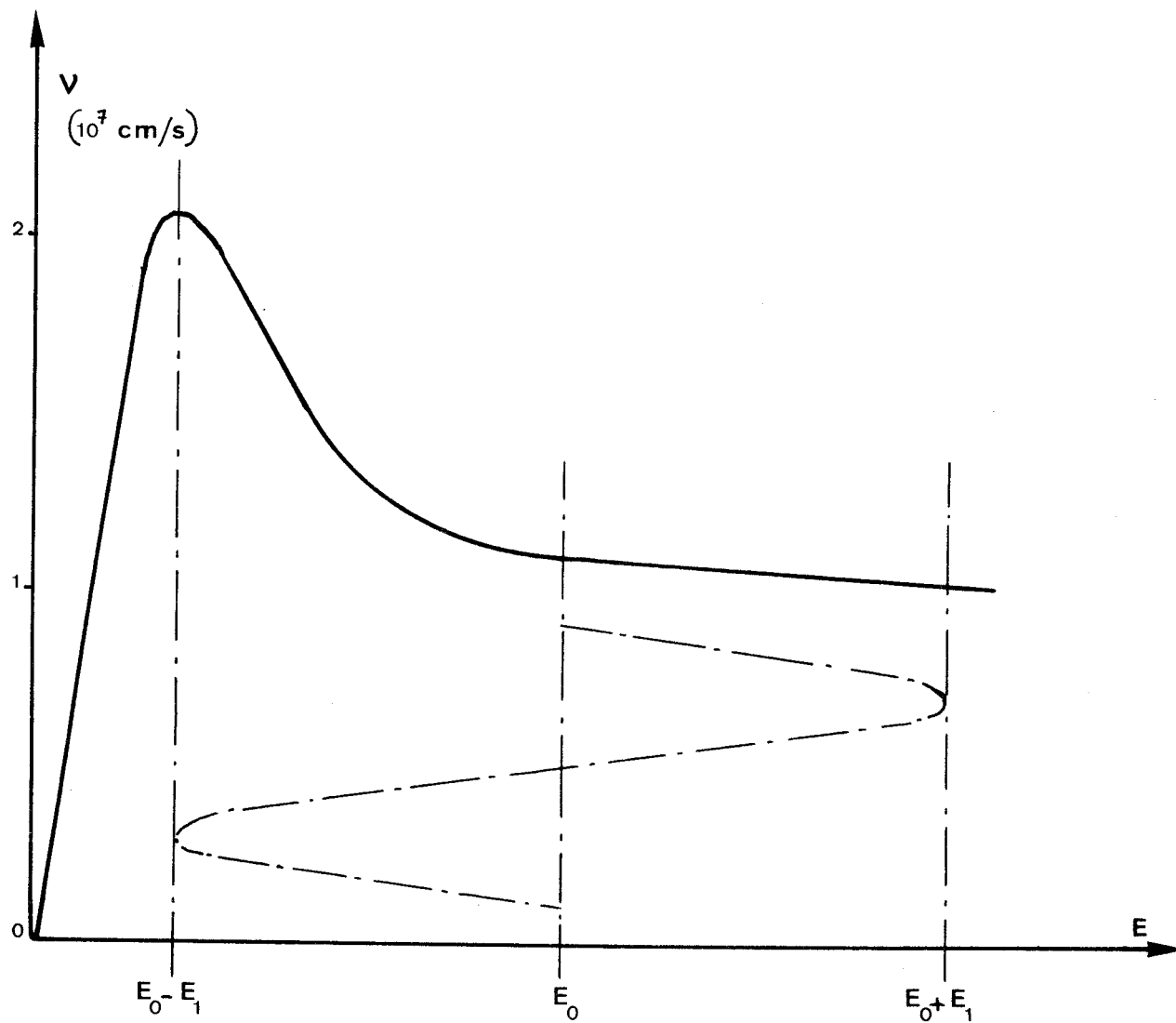
Le champ appliqué qui est de la forme :

$$E = E_0 + E_1 \sin (2\pi ft)$$

présente une composante continue  $E_0$  et une composante alternative  $E_1$  à la fréquence  $f$ .

La puissance absorbée par un ensemble d'électrons de vitesse moyenne instantanée  $v(t)$  peut alors se décomposer en une puissance  $P_0 = eE_0 \int_0^T v(t) dt$  due au champ continu et en une puissance  $P_1 = eE_1 \int_0^T v(t) \sin (2\pi ft) dt$  due au champ alternatif. Alors que la puissance  $P_0$  qui est toujours positive est effectivement absorbée par les électrons, il apparaît qu'à cause de la possibilité d'une mobilité différentielle "dynamique" négative, la puissance  $P_1$  peut être négative sous certaines conditions relatives aux champs  $E_0$  et  $E_1$  et à la fré-





SCHEMA 10



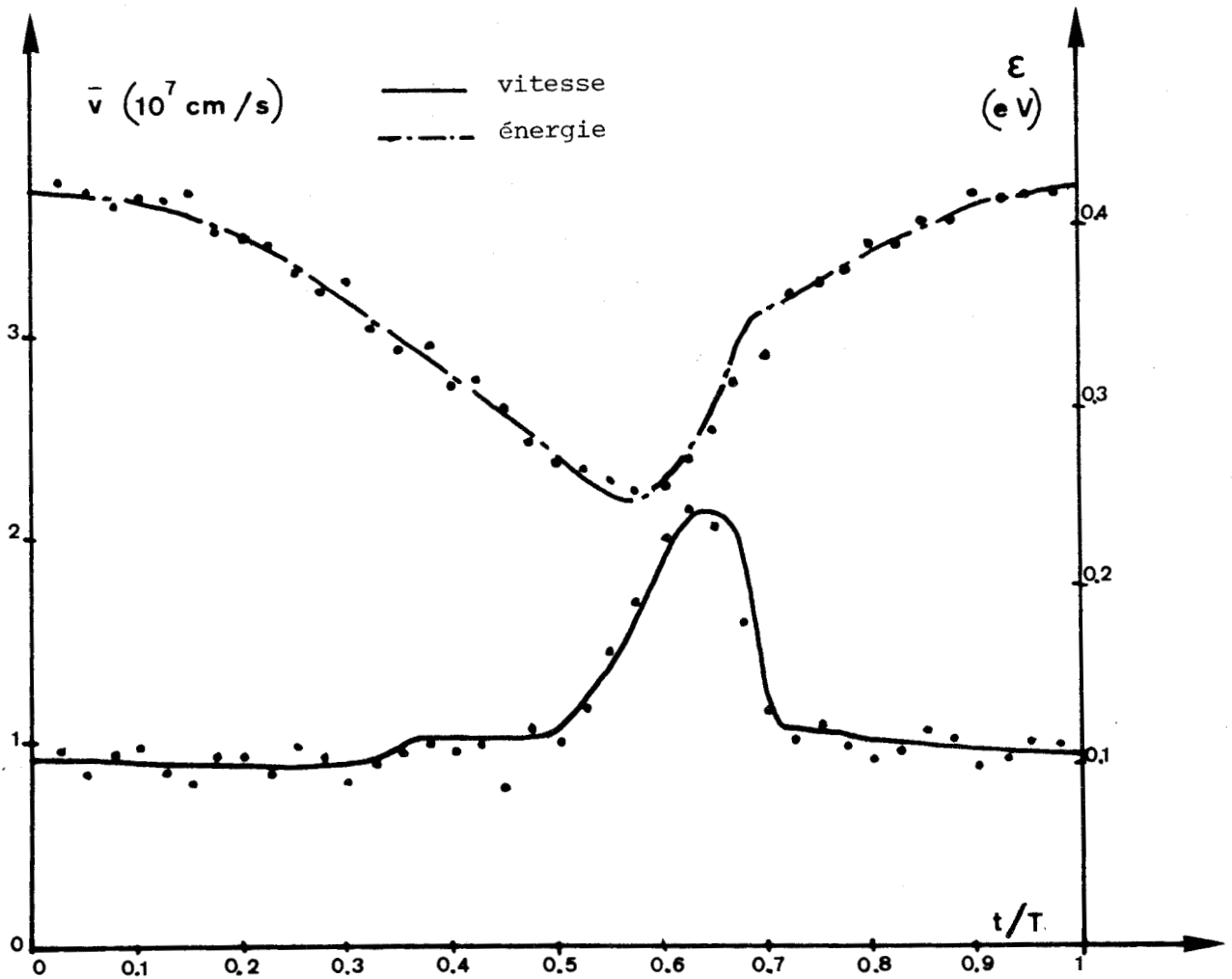


Figure 37 : Comparaison entre résultats obtenus par chacune des deux méthodes en régime alternatif.

$E_0 = 20 \text{ kV/cm}$   $E_1 = 15 \text{ kV/cm}$   $f = 100 \text{ GHz}$

— M. Shur  
 ..... Monté Carlo



| Méthode de M. Shur | Méthode de Monté Carlo avec des jeux statistiques différents |       |       |
|--------------------|--|-------|-------|
| 7,9 %              | 9,4 %  | 8,4 % | 9,6 % |

TABLEAU V : Taux de conversion obtenus avec la méthode de M. Shur et avec les méthodes de Monté Carlo. Avec :

$$E_0 = 20 \text{ kV/cm}$$

$$E_1 = 15 \text{ kV/cm}$$

$$F = 100 \text{ GHz}$$



quence  $f$  ; auquel cas, les électrons fournissent de la puissance alternative dont l'importance peut être évaluée par le taux de conversion

$$\eta = \frac{-P_1}{P_0}$$

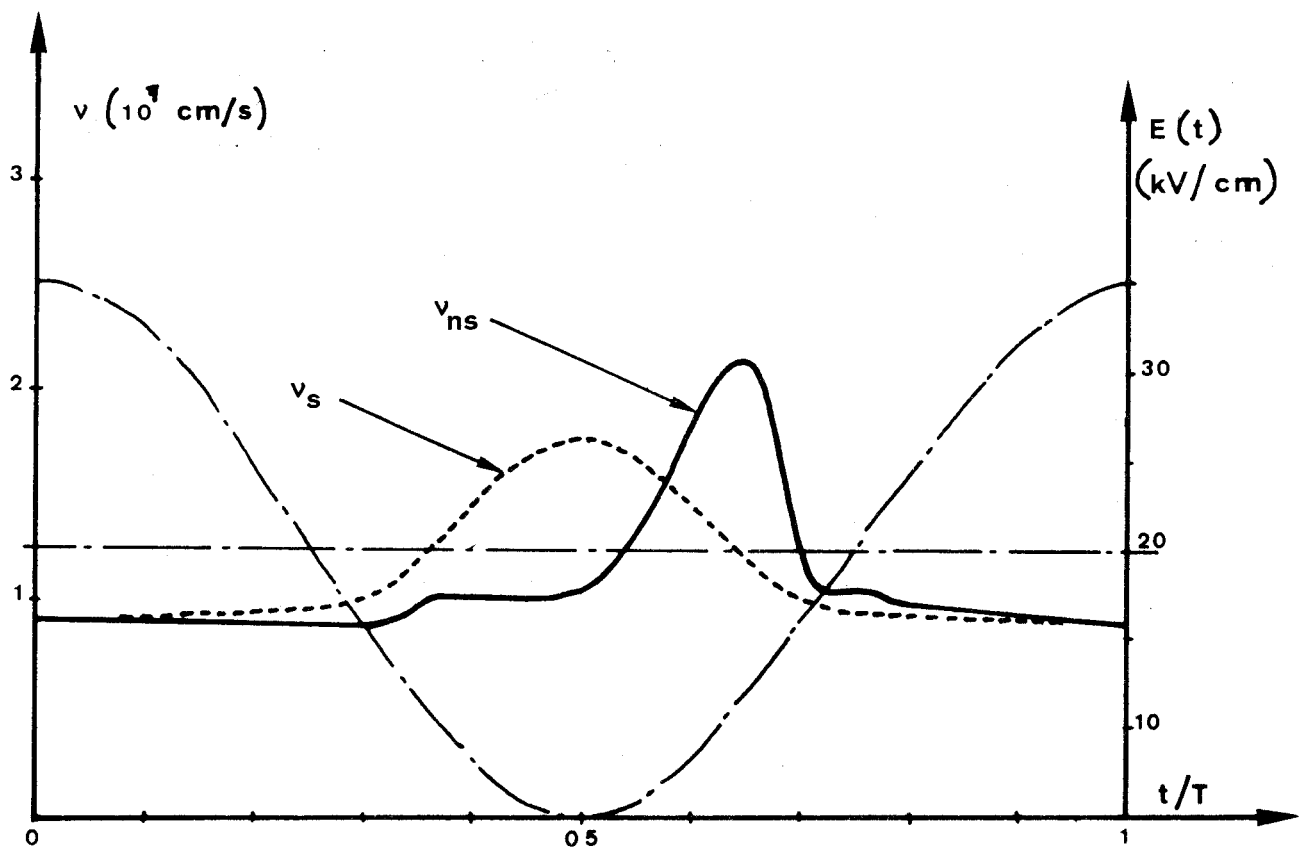
Quelles sont alors les conditions relatives à  $E_0$ ,  $E_1$  et  $f$  pour lesquelles ce taux est maximal ?

Cette étude peut être facilement réalisée avec les méthodes de Monte Carlo par l'observation d'un paquet d'électrons soumis à un régime alternatif. Mais elle nécessite de gros moyens qui limitent considérablement les temps d'observation. Il est alors très intéressant de faire appel aux méthodes de M. Shur après en avoir, au préalable, testé les résultats dans leur application au régime alternatif\*.

Les remarques relatives à l'importance de la mobilité différentielle négative pour générer de la puissance alternative, montrent qu'il est préférable de choisir un champ  $E_0$  fort et un champ  $E_1$  tels que  $E_0 - E_1$  soit de l'ordre du champ de seuil afin que toute la zone de mobilité différentielle négative soit balayée par le champ variable  $E$  (schéma 10). La figure 37 qui représente les variations de vitesse et d'énergie obtenues avec une composante continue  $E_0 = 20$  kV/cm et alternative  $E_1 = 15$  kV/cm à 100 GHz montre qu'il existe un bon accord entre les résultats obtenus avec chacune des deux méthodes. Il en est de même pour les taux de conversion [57] qui sont représentés sur le tableau V et qui sont de l'ordre de 9 %. Les méthodes de M. Shur sont donc bien adaptées à cette étude et seront utilisées pour poursuivre cette investigation.

---

\* L'étude du régime alternatif par les méthodes de M. Shur a été effectuée par P.A. ROLLAND



**Figure 38** : Effets de relaxation relatifs à la vitesse en régime alternatif. Résultats semi-analytiques.

$$E_0 = 20 \text{ kV/cm} \quad E_1 = 15 \text{ kV/cm} \quad f = 100 \text{ GHz}$$

- Champ appliqué  $E$
- ..... Vitesse stationnaire  $v_s(E)$
- Vitesse non stationnaire  $v_{ns}$



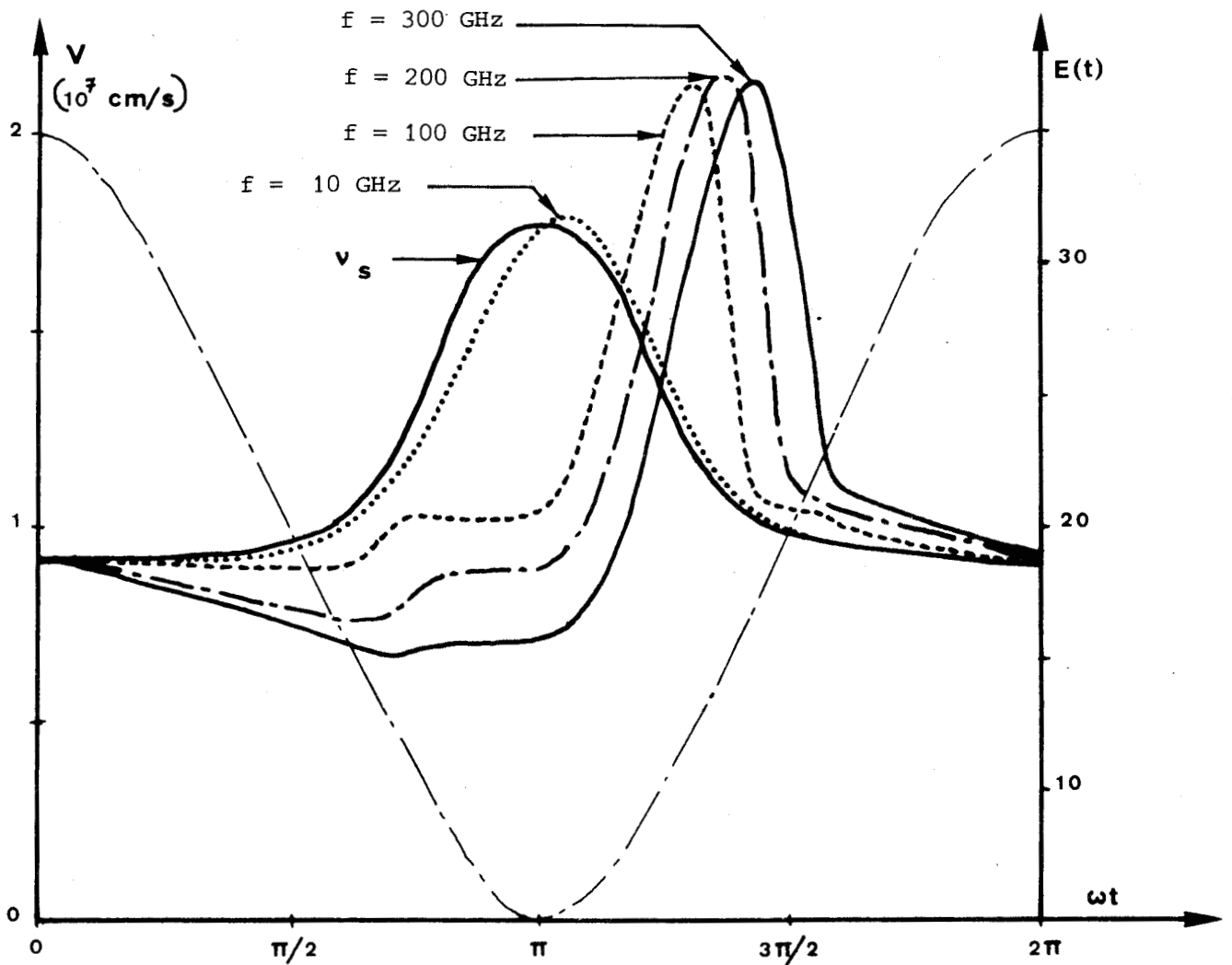


Figure 39 : Influence de la fréquence sur l'allure de la vitesse non stationnaire en régime alternatif. Résultats semi-analytiques  $E_0 = 20$  kV/cm ;  $E_1 = 15$  kV/cm



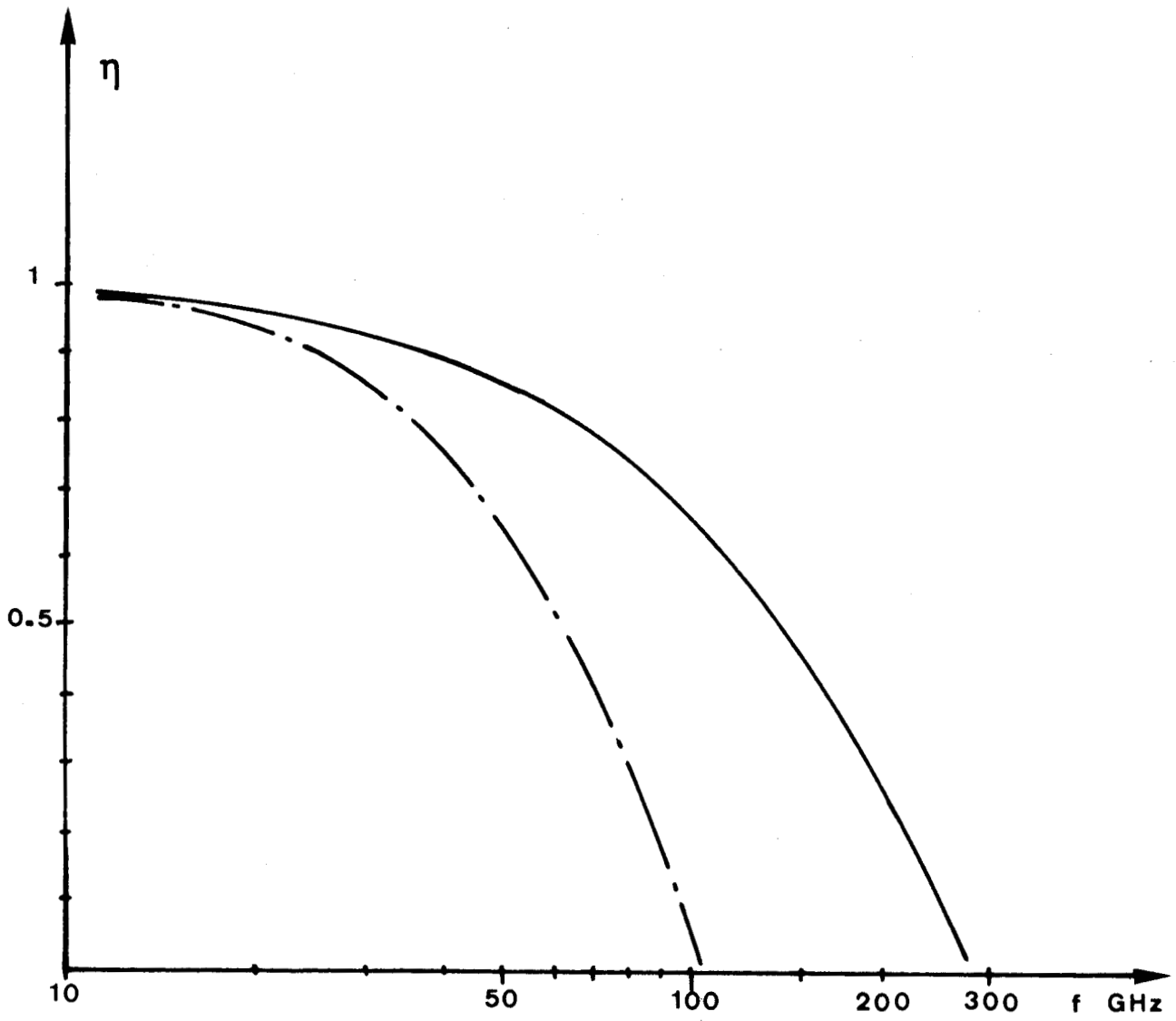


Figure 40 : Variation du taux de conversion en fonction de la fréquence

- · - - -  $E_0 = 12$  kV/cm       $E_1 = 7$  kV/cm  
 ————  $E_0 = 20$  kV/cm       $E_1 = 15$  kV/cm



L'expression du taux de conversion  $\eta$  montre que celui-ci est maximal quand un maximum de vitesse correspond à un minimum de champ. Cette condition est parfaitement réalisée avec la vitesse  $v_s(E(t))$  qui serait obtenue en l'absence d'effets de relaxation. La figure 38 qui représente sur une période, dans les conditions précédentes, les variations du champ  $E(t)$ , de la vitesse  $v_s(E(t))$  et de la vitesse non stationnaire  $v_{ns}(t)$  montre que celle-ci présente un déphasage par rapport à  $v_s(E(t))$  et un effet de survitesse. L'influence de la fréquence sur cette survitesse est illustrée sur la figure 39 qui représente au cours d'une période les allures respectives de  $v_s(E(t))$  et des vitesses  $v_{ns}(t)$  pour des fréquences de 10 GHz, 100 GHz, 200 GHz et 300 GHz, et des champs  $E_0 = 20$  kV/cm et  $E_1 = 15$  kV/cm. Elle fait apparaître qu'à 10 GHz les effets de relaxation interviennent peu. Par contre, pour des fréquences plus élevées, le temps de réponse du matériau introduit un déphasage dont les effets néfastes sur la valeur du taux de conversion peuvent être atténués par le phénomène de survitesse, tout au moins tant que la fréquence n'est pas trop élevée. Il faut donc s'attendre à ce que pour des champs  $E_0$  et  $E_1$  donnés, le taux de conversion diminue avec la fréquence. Et étant donné le rôle favorable joué par la survitesse, il faut s'attendre à ce que le taux de conversion soit d'autant meilleur que les valeurs des champs  $E_0$  et  $E_1$  sont importantes. C'est effectivement ce qui est observé sur la figure 40 qui traduit les variations du taux de conversion en fonction de la fréquence pour deux couples de valeurs  $E_0$  et  $E_1$ . La fréquence pour laquelle le taux de conversion s'annule peut alors, grâce aux effets de survitesse, passer de 100 GHz à 300 GHz.

Cette étude met en évidence le rôle important joué par les effets non stationnaires sur la génération de puissance hyperfréquence. Elle a été traitée par la méthode de M. Shur qui présente l'avantage, sur les méthodes de Monte Carlo, d'être très rapide tout en traduisant correctement les effets non stationnaires. Ainsi, elle constitue un outil très performant pour poursuivre cette étude de la génération de puissance hyperfréquence au niveau plus com-



plexe du composant.

#### *II.4. Conclusion*

Les méthodes de Monte Carlo ont permis de donner naissance à une méthode semi-analytique, proposée par M. Shur, pour traduire en régime non stationnaire les effets de relaxation de vitesse et d'énergie. Il a été montré sur des cas simples que la méthode de M. Shur constitue une très bonne approximation des résultats obtenus par les méthodes de Monte Carlo. Cet outil performant et rapide a été appliqué à l'étude des possibilités de génération de puissance hyperfréquence et a permis d'étudier l'impact des effets de relaxation sur la valeur du taux de conversion.

III. CONCLUSION RELATIVE A L'ETUDE DU REGIME NON STATIONNAIRE DANS  
L'ARSENIURE DE GALLIUM.

Les traits caractéristiques du comportement de l'Arséniure de Gallium en régime non stationnaire sont certainement le phénomène de survitesse au cours duquel la vitesse peut être très largement supérieure à sa valeur en régime stationnaire ainsi que les durées importantes des phénomènes de relaxation.

La simulation par les méthodes de Monte Carlo présente l'avantage de pouvoir réaliser facilement une étude complète du régime non stationnaire concernant l'énergie, la vitesse mais également le bruit généré par le matériau. Elle permet en outre de mettre en évidence les mécanismes de transport qui sont responsables des phénomènes transitoires observés, révélant ainsi à quels paramètres caractéristiques de l'Arséniure de Gallium et à quelles particularités de la structure de bande ils sont dûs. Ainsi, il est apparu nettement que la survitesse est favorisée à la fois par une faible valeur de la masse effective en vallée centrale et par un écart important de niveau entre la vallée centrale et les vallées latérales les plus accessibles.

Avec la formulation de M. Shur, il apparait que les propriétés du matériau en régime non stationnaire sont entièrement déterminées par l'allure des caractéristiques statiques  $v_d(E)$  et  $\varepsilon(E)$ . Cette simple remarque permet à partir des équations de M. Shur de comprendre le lien étroit existant entre la mobilité statique et la survitesse ainsi que l'impact des caractéristiques  $v_s(E)$  et  $\varepsilon(E)$  sur les phénomènes de relaxation. La méthode de M. Shur, qui permet de calculer très rapidement les variations de vitesse et d'énergie relatives à n'importe quelles variations de champ, ouvre des perspectives nouvelles d'étude du régime non stationnaire à un niveau plus pratique que ce que

permettent les méthodes de Monte Carlo, pouvant même déboucher sur une étude du composant.

## CONCLUSION

Une étude complète de matériau a été effectuée sur l'Arséniure de Gallium. Elle a porté sur les caractéristiques de vitesse, d'énergie et de coefficient de diffusion aussi bien en régime stationnaire que non stationnaire.

Elle a été réalisée à partir d'une simulation utilisant les méthodes de Monte Carlo, qui a été aménagée de façon à simplifier l'étude de la diffusion et du régime non stationnaire.

L'application de cette simulation à la diffusion a mis en évidence certaines particularités relatives aux conditions d'étude, ainsi que les mécanismes de diffusion intervenant en régime d'électrons chauds. Des mesures radiométriques de températures de bruit ont permis de confronter les résultats numériques et expérimentaux en champ faible, pour différentes concentrations en impuretés.

Cette simulation est également tout à fait adaptée à l'étude du régime non stationnaire. Elle rend compte, en effet, de tous les phénomènes de relaxation quelles que soient les variations du champ appliqué. De plus, elle rend possible la mise en oeuvre d'une méthode semi-analytique, formulée par M. Shur, qui permet une détermination extrêmement rapide de l'évolution en régime transitoire de la vitesse et de l'énergie.

La simulation des phénomènes de transport par les méthodes de Monte Carlo, constitue donc une étape essentielle vers la connaissance des propriétés des matériaux. Sa souplesse d'emploi en fait un outil adaptable à une grande diversité d'applications, dont la présente étude n'est qu'un point de départ.

En effet, son utilisation a été envisagée [5-58] pour l'étude simplifiée de composants tels que la diode Gunn, en tenant compte de la réaction de charge d'espace, ainsi que des phénomènes apparaissant au voisinage d'une surface semi-conductrice ou d'un interface métal-semiconducteur [5]. Indirectement, grâce à la formulation de M. Shur, elle rend possible l'étude de composants plus complexes tels que les FET [52, 55].

D'autres perspectives d'application apparaissent avec la généralisation de cette méthode à d'autres matériaux de structure de bande comparable. Elle permet de traiter des composés binaires de type III-V tels que l'InAs, l'InP et plus généralement des composés ternaires et quaternaires qui peuvent être considérés comme des pseudobinaires [59].

Toute l'étude qui peut être faite sur l'Arséniure de Gallium est alors transposable à n'importe lequel de ces composés. Il sera alors intéressant de faire des études comparatives [54] des propriétés présentées par ces matériaux afin de choisir celui qui sera le plus approprié à l'application envisagée au niveau du composant, avant même toute réalisation technologique.

## ANNEXE I

### CALCUL DES PROBABILITÉS D'INTÉRACTION ET DÉTERMINATION DE L'ANGLE $\beta$ DE DÉVIATION APRÈS INTÉRACTION

La démarche de calcul qui va suivre est commune à tous les types d'interactions considérés ; la probabilité  $\lambda(k)$  par unité de temps qu'un électron qui se trouve dans l'état  $\vec{k}$  subisse l'interaction, se calcule en intégrant sur tous les états finals  $\vec{k}'$ , la densité de probabilité  $s(\vec{k}, \vec{k}')$  de passage de l'état  $\vec{k}$  à un état  $\vec{k}'$  au cours de l'interaction ; si  $\beta$  est l'angle entre  $\vec{k}$  et  $\vec{k}'$ , cette probabilité s'écrit :

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

où  $\frac{V}{8\pi^3}$  désigne la densité d'état dans l'espace des moments et le facteur  $2\pi$  traduit la symétrie de révolution autour de  $\vec{k}$  de l'ensemble des états possibles  $\vec{k}'$ . Dans un premier temps, l'intégration se fait par rapport au module  $k'$  ; grâce aux relations [2] entre vecteur d'onde et énergie,  $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \varepsilon(1+\alpha\varepsilon)$  et  $\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} = \varepsilon'(1+\alpha\varepsilon')$ , il est possible de tout exprimer en fonction des énergies  $\varepsilon$  et  $\varepsilon'$  ; dans un stade intermédiaire, après intégration sur l'énergie la probabilité  $\lambda(\varepsilon)$  peut se mettre sous la forme :

$$\lambda(\varepsilon) = C_\varepsilon \int_0^\pi f_\varepsilon(\beta') d\beta'$$

laissant apparaître, exprimée à un facteur multiplicatif près, la fonction de distribution de l'angle  $\beta$  de déviation. L'intégration, menée à son terme, donne la probabilité d'interaction cherchée.

Il s'agit ensuite de résoudre, en fonction du paramètre  $r$  tiré au hasard entre 0 et 1, l'équation  $\int_0^\beta f_\epsilon(\beta') d\beta' = r \int_0^\pi f_\epsilon(\beta') d\beta'$  pour obtenir un angle de déviation  $\beta$  suivant la distribution  $f_\epsilon(\beta)$ .

I. INTERACTION OPTIQUE POLAIRE

L'interaction optique polaire [2, 7] est inélastique : elle est accompagnée d'une émission ou absorption de phonon  $\hbar\omega_0$ . Les seules énergies possibles après interaction sont donc  $\epsilon \pm \hbar\omega_0$ . Le passage d'un état  $\vec{k}$  à un état  $\vec{k}'$  au cours de cette interaction est décrit par la fonction densité de probabilité :

$$\delta(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot B_0(\vec{k}, \vec{k}') \cdot \begin{cases} N_0 \cdot \delta(\epsilon(k') - (\epsilon(k) + \hbar\omega)) \\ (N_0 + 1) \delta(\epsilon(k') - (\epsilon(k) - \hbar\omega)) \end{cases}$$

où

$$B_0(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi e^2 \hbar\omega_0}{4\pi\epsilon_0 |\vec{k} - \vec{k}'|^2} \cdot \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \cdot G(k, k')$$

avec

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

et 
$$N_0 = \frac{1}{e \left( \frac{\hbar\omega_0}{kT} \right) - 1}$$

Dans ces expressions  $\epsilon_s$  et  $\epsilon_\infty$  sont les permittivités diélectriques relatives, T la température du réseau, k la constante de Boltzmann,  $\hbar$  la constante de Planck et e la charge de l'électron.

1) Calcul de la probabilité d'interaction

L'intégration sur tous les états  $\vec{k}$ 's'écrit :

$$d(k) = \frac{V}{8\pi^3} \cdot 2\pi \int_0^\pi \int_0^\infty \delta(\vec{k}, \vec{k}') k'^2 \sin \beta d\beta dk'$$

Le changement de variable  $\epsilon'(1 + \alpha\epsilon') = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*}$  puis l'intégration immédiate sur  $\epsilon'$  compte tenu des propriétés de la fonction de Dirac donnent, après avoir posé  $\gamma(\epsilon) = \epsilon(1 + \alpha\epsilon)$  et  $\gamma(\epsilon') = \epsilon'(1 + \alpha\epsilon')$

$$d(\epsilon) = \frac{e^2 m^{*1/2} \omega_c}{\hbar \sqrt{2} 4\pi \epsilon_0} \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \frac{\sqrt{\gamma(\epsilon')}}{1 + 2\alpha\epsilon} \quad (1)$$

$$\times \int_0^\pi \frac{(\sqrt{1 + 2\alpha\epsilon} \sqrt{1 + 2\alpha\epsilon'} + \alpha\sqrt{\epsilon\epsilon'} \cos \beta)^2}{\gamma(\epsilon) + \gamma(\epsilon') - 2 \cos \beta \sqrt{\gamma(\epsilon) \gamma(\epsilon')}} \cdot \sin \beta d\beta \times \begin{cases} N_0 \\ N_0 + 1 \end{cases}$$

qui après intégration sur l'angle  $\beta$  donne :

$$d(\epsilon) = \frac{e^2 m^{*1/2} \omega_c}{\sqrt{2} \hbar 4\pi \epsilon_0} \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \frac{1 + 2\alpha\epsilon'}{\sqrt{\gamma(\epsilon)}} \cdot F(\epsilon, \epsilon') \cdot \begin{cases} N_0 \\ N_0 + 1 \end{cases}$$

où 
$$F(\epsilon, \epsilon') = \frac{1}{C} \left( A \ln \left| \frac{\gamma^{1/2}(\epsilon) + \gamma^{1/2}(\epsilon')}{\gamma^{1/2}(\epsilon) - \gamma^{1/2}(\epsilon')} \right| + B \right)$$



avec  $A = [2(1+\alpha\epsilon)(1+\alpha\epsilon') + \alpha(\gamma(\epsilon) + \gamma(\epsilon'))]^2$

$$B = -2\alpha \sqrt{\gamma(\epsilon)\gamma(\epsilon')} [4(1+\alpha\epsilon)(1+\alpha\epsilon') + \alpha(\gamma(\epsilon) + \gamma(\epsilon'))]$$

et  $C = 4(1+\alpha\epsilon)(1+\alpha\epsilon')(1+2\alpha\epsilon)(1+2\alpha\epsilon')$

2) Détermination de l'angle  $\beta$

L'équation (1) fait apparaître la fonction  $f_\epsilon(\beta)$  de distribution de l'angle  $\beta$  qui peut s'écrire :

$$f_\epsilon(\beta) = \frac{(\sqrt{1+\alpha\epsilon}\sqrt{1+\alpha\epsilon'} + \alpha\sqrt{\epsilon\epsilon'}\cos\beta)^2}{\gamma(\epsilon) + \gamma(\epsilon') - 2\cos\beta\sqrt{\gamma(\epsilon)\gamma(\epsilon')}} \cdot \sin\beta$$

Soit  $r$  un nombre réel tiré au hasard entre 0 et 1, il s'agit de déterminer l'angle  $\beta$  vérifiant :

$$r \int_0^\pi f_\epsilon(\beta') d\beta' = \int_0^\beta f_\epsilon(\beta') d\beta' \quad (2)$$

l'équation (2) après intégration se met sous la forme :

$$A_2 \cos^2\beta + A_1 \cos\beta + A_0 + A' \ln \left| \frac{\gamma(\epsilon) + \gamma(\epsilon')}{2\sqrt{\gamma(\epsilon)\gamma(\epsilon')}} - \cos\beta \right| - rK = 0$$

où les constantes  $A_0, A_1, A_2, A'$  et  $K$  sont définies à partir de :  $A, B,$

$$C' = \frac{4(1+\alpha\epsilon)(1+\alpha\epsilon')\gamma(\epsilon)^{1/2}\gamma(\epsilon')^{1/2}}{\epsilon\epsilon'}, \quad C'' = \frac{\alpha^2(\epsilon\epsilon')^2}{4\gamma(\epsilon)^{1/2}\gamma(\epsilon')^{1/2}}$$

par  $A_0 = \frac{B}{2C'} - C'', \quad A_1 = \frac{-B}{2C'}, \quad A_2 = C'', \quad A' = \frac{-A}{2C'},$

$$K = \frac{1}{C'} \left( B + A \ln \left| \frac{\gamma(\epsilon)^{1/2} + \gamma(\epsilon')^{1/2}}{\gamma(\epsilon)^{1/2} - \gamma(\epsilon')^{1/2}} \right| \right)$$

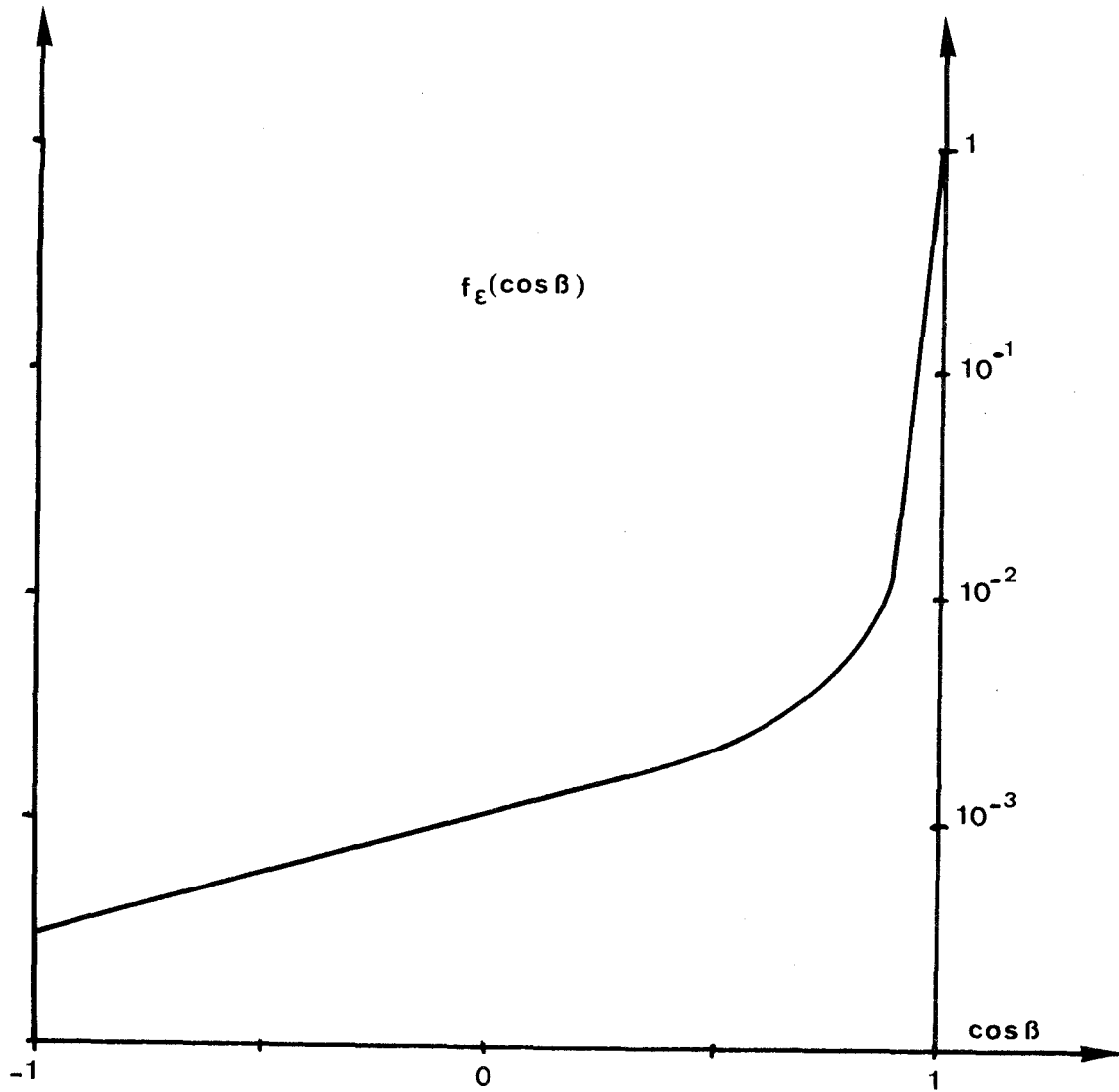


Figure A1



C'est une équation insoluble analytiquement en  $\beta$ . Pour contourner cette difficulté, W. Fawcett [2] préconise la méthode de Neumann appliquée à la fonction de distribution en  $\cos\beta$  :

$$f_{\epsilon}(\cos\beta) = \frac{(\sqrt{1+\alpha\epsilon} \sqrt{1+\alpha\epsilon'} + \alpha\sqrt{\epsilon\epsilon'} \cos\beta)^2}{\gamma(\epsilon) + \gamma(\epsilon') - 2\cos\beta \sqrt{\gamma(\epsilon)\gamma(\epsilon')}}^2$$

Dans cette méthode, deux nombres aléatoires sont tirés au hasard, l'un  $r_1$  entre -1 et 1 représentant le  $\cos\beta$  et l'autre  $r_2$  entre 0 et le maximum de  $f_{\epsilon}(\cos\beta)$  c'est-à-dire  $f_{\epsilon}(1)$ . Si  $r_2$  est inférieur à  $f_{\epsilon}(r_1)$  alors  $r_1$  est retenu comme valeur de  $\cos\beta$  ; sinon un autre couple de valeurs  $r_1$  et  $r_2$  est tiré au hasard. Cette procédure permet bien d'obtenir des valeurs en  $\cos\beta$  qui obéissent à la distribution  $f_{\epsilon}(\cos\beta)$  mais dans le cas présent, elle présente un inconvénient majeur : la figure A.1 qui représente la fonction  $f_{\epsilon}(\cos\beta)$  montre clairement que l'aire "sous la courbe" est très faible devant l'aire sous la droite  $y = f(1)$  entre -1 et +1. Ce qui signifie que la probabilité pour qu'un couple de valeurs  $(r_1, r_2)$  représentent les coordonnées d'un point sous la courbe, est très faible. La méthode de Neumann qui nécessiterait alors un trop grand nombre de tirages est donc mal appropriée au cas présent ; elle est remplacée par une résolution numérique directe de l'équation (2) qui consiste à chercher le zéro de la fonction au premier membre. C'est une fonction monotone en  $\cos\beta$  qui, comme l'indique l'allure de  $f_{\epsilon}(\cos\beta)$ , s'annule généralement pour des valeurs très voisines de 1. La méthode des tangentes initialisée à  $\cos\beta_0 = 1$  permet très rapidement d'obtenir la solution de l'équation (2).

II. INTERACTIONS INTERVALLEES EQUIVALENTES ET NON EQUIVALENTES [2, 7]

C'est au cours de ces interactions, qu'ont lieu les transferts entre vallées équivalentes ou non équivalentes. Elles sont accompagnées d'une émission ou absorption de phonon dont la valeur dépend du type de l'interaction considérée. Un transfert ne peut avoir lieu que si l'énergie après interaction est supérieure à l'énergie du fond de la vallée d'accueil, ces énergies étant repérées par rapport au minimum absolu de la bande de conduction. L'expression générale de la densité de probabilité de passage de l'état  $\vec{k}$  à un état  $\vec{k}'$ , en transférant de la vallée  $i$  à une vallée  $j$  équivalente ou non, s'écrit :

$$s_{ij}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot B_{ij}(\vec{k}, \vec{k}')$$

$$\times \begin{cases} N_{ij} \delta(\epsilon_j(\vec{k}') - \epsilon_i(\vec{k}) + \Delta_j - \Delta_i - \hbar\omega_{ij}) \\ (N_{ij} + 1) \delta(\epsilon_j(\vec{k}') - \epsilon_i(\vec{k}) + \Delta_j - \Delta_i + \hbar\omega_{ij}) \end{cases}$$

où

$$B_{ij}(\vec{k}, \vec{k}') = Z_j \frac{\hbar \Xi_{ij}^2}{2\rho\omega_{ij}V} \cdot G_{ij}(\vec{k}, \vec{k}')$$

avec

$$G_{ij}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{(1 + \alpha_i \epsilon_i(\vec{k})) \cdot (1 + \alpha_j \epsilon_j(\vec{k}'))}{(1 + 2\alpha_i \epsilon_i(\vec{k})) \cdot (1 + 2\alpha_j \epsilon_j(\vec{k}'))}$$

et où

$$N_{ij} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_{ij}}{kT}} - 1}$$

Dans ces expressions,  $\hbar\omega_{ij}$  représente l'énergie du phonon échangé,  $\Delta_i$  et  $\Delta_j$  sont les énergies relatives aux fonds des vallées  $i$  et  $j$ ,  $\epsilon_i$  et  $\epsilon_j$  sont les énergies relatives dans chaque vallée,  $\alpha_i$  et  $\alpha_j$  les coefficients de non parabolicité,  $Z_j$  le nombre de vallées d'accueil (c'est-à-dire le nombre total  $N_j$  de vallées  $j$  dans le cas d'interactions non équivalentes ou bien  $N_j - 1$  si la vallée de départ est aussi une vallée  $j$ ) et  $\Xi_{ij}$  le potentiel de déformation

intervallée entre la vallée  $i$  et la vallée  $j$ .  $\rho$  désigne la masse volumique du matériau.

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

$$\lambda_{ij}(\varepsilon) = \frac{Z_j}{\sqrt{2}} \frac{m_j^{*3/2}}{\pi \rho \omega_{ij} \hbar^3} \frac{\mathbb{E}_{ij}^2}{\hbar^3} \cdot \gamma_j(\varepsilon') \cdot (1 + 2\alpha_j \varepsilon') F_{ij}(\varepsilon, \varepsilon') \left\{ \begin{array}{l} N_{ij} \\ N_{ij} + 1 \end{array} \right.$$

où

$$F_{ij}(\varepsilon, \varepsilon') = G_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$$

et

$$\varepsilon'_j = \begin{cases} \varepsilon_i - \Delta_j + \Delta_i + \hbar \omega_{ij} \\ \varepsilon_i - \Delta_j + \Delta_i - \hbar \omega_{ij} \end{cases}$$

Il est à remarquer que comme  $s(\vec{k}, \vec{k}')$  ne dépend pas de l'angle  $\beta$  de déviation, sur la sphère représentatrice de l'énergie finale, tous les états  $\vec{k}'$  finals sont équiprobables. L'angle  $\beta$  est alors obtenu en tirant au hasard un réel  $r$  entre 0 et 1 tel que :  $r = \int_0^\beta \frac{\sin \beta d\beta}{2}$  soit  $\cos \beta = 1 - 2r$ .

### III. INTERACTION ACOUSTIQUE [2, 7]

C'est une interaction élastique pour laquelle la densité de probabilité relative au passage d'un état  $\vec{k}$  à un état  $\vec{k}'$  au cours de l'interaction s'écrit :

$$s(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} B_a(\vec{k}, \vec{k}') N_a \delta(\varepsilon(\mathbf{k}') - \varepsilon(\mathbf{k}))$$

où

$$B_a(\vec{k}, \vec{k}') = 2 \frac{\hbar \mathbb{E}_a^2}{2\rho \Delta V} \cdot |\vec{k} - \vec{k}'|, G(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$$

L'expression de  $G(k, k')$  a déjà été donnée (voir interaction optique polaire)

et

$$N_a = \frac{1}{e^{\frac{\hbar \Delta \cdot (\vec{k} - \vec{k}')}{\hbar \Delta}} - 1} \approx \frac{k_B T}{|\vec{k} - \vec{k}'| \hbar \Delta}$$

Dans ces expressions,  $\mathbb{F}_a$  désigne le potentiel de déformation acoustique,  $s$  la vitesse du son et  $\rho$  la masse volumique du matériau.

L'intégration sur l'énergie donne :

$$d_a(\epsilon) = \frac{k_B T \mathbb{F}_a^2 m^{*3/2}}{\rho s^2 \hbar^4 \pi \sqrt{2}} \gamma^{1/2}(\epsilon) \int_0^\pi (1 + \alpha \epsilon + \alpha \epsilon \cos \beta)^2 \sin \beta d\beta \quad (1)$$

qui devient après intégration complète :

$$d_a(\epsilon) = \frac{(2 m^*)^{3/2} k_B T \mathbb{F}_a^2 \gamma^{1/2}(\epsilon)}{2 \pi \rho s^2 \hbar^4} \cdot \frac{[(1 + \alpha \epsilon)^2 + \frac{1}{3} (\alpha \epsilon)^2]}{1 + 2 \alpha \epsilon}$$

L'expression (1) fait apparaître la fonction de distribution de l'angle  $\beta$ .

Après tirage au hasard d'un réel  $r$  compris entre 0 et 1 l'angle  $\beta$  s'obtient en résolvant l'équation :

$$r \cdot \int_0^\pi (1 + \alpha \epsilon + \alpha \epsilon \cos \beta')^2 \sin \beta' d\beta' = \int_0^\beta (1 + \alpha \epsilon + \alpha \epsilon \cos \beta')^2 \sin \beta' d\beta'$$

dont la solution s'écrit :

$$\cos \beta = \frac{((1 + 2 \alpha \epsilon) \cdot (1 - r) + r)^{1/3} - 1}{\alpha \epsilon} - 1$$

la plupart du temps  $\alpha \epsilon$  est petit devant 1 ; cette distribution est alors quasi-uniforme.

IV. INTERACTION PIEZOELECTRIQUE

C'est une interaction [7] élastique dont la densité de probabilité relative au passage d'un état  $\vec{k}$  à un état  $\vec{k}'$  s'écrit :

$$\Delta(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{e^2 k_B T P^2 G(k, k')}{4 \pi^2 \hbar \epsilon_c \epsilon_s |\vec{k} - \vec{k}'|^2} \delta(\epsilon - \epsilon')$$

L'expression de  $G(k, k')$  a déjà été donnée ultérieurement (interaction optique polaire).

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

$$P^2 = \frac{1}{35} h_{14}^2 \epsilon_c \epsilon_s \left( \frac{12}{c_p} + \frac{16}{c_t} \right) \quad \text{où} \quad c_t = \frac{3c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44}}{5}$$

$$\text{et} \quad c_t = \frac{c_{11} - c_{12} + 3c_{44}}{5}$$

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

$$\lambda(\epsilon) = \frac{e^2 k_B T P^2 (m^*)^{1/2}}{4 \sqrt{2} \pi \hbar^2 \epsilon_c \epsilon_s (1 + 2\alpha\epsilon) \gamma(\epsilon)^{1/2}} \int_0^\pi \frac{(1 + \alpha\epsilon + \alpha\epsilon \cos \beta)^2 \sin \beta d\beta}{1 - \cos \beta} \quad (1)$$

C'est une intégrale qui diverge à cause de sa borne inférieure. Cette représentation de la loi de probabilité sur l'angle  $\beta$  est donc impropre au voisinage de  $\beta = 0$ . Comme c'est une interaction élastique, quand l'angle de déviation  $\beta$  est nul, l'interaction n'a aucun effet sur le parcours de l'électron. Pour contourner cette difficulté purement liée aux limites du modèle mathématique, la borne inférieure est ramenée à une valeur "a" suffisamment petite pour que la perturbation apportée par cette approximation soit inopérante ; en

l'occurrence,  $a = 0.01$  radians. L'expression de la probabilité d'interaction s'écrit alors, après intégration :

$$A(\varepsilon) = \frac{e^2 k_B T \rho^2 (m^*)^{1/2}}{4 \sqrt{2} \pi \hbar^2 \varepsilon_0 \varepsilon_s \gamma(\varepsilon)^{1/2}} \times \frac{I}{1+2\alpha\varepsilon}$$

où

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

L'équation (1) met en évidence la fonction de distribution de l'angle  $\beta$ . Après avoir tiré un réel  $r$  compris entre 0 et 1, l'angle  $\beta$  de déviation est obtenu en résolvant l'équation :

$$r = \frac{1}{I} \int_a^\beta \frac{(1 + \alpha\varepsilon + \alpha\varepsilon \cos \beta')^2}{1 - \cos \beta'} \sin \beta' d\beta'$$

qui peut s'écrire :

$$\frac{\alpha^2 \varepsilon^2}{2} \left[ (1 - \cos \beta)^2 - (1 - \cos \alpha)^2 \right] - 2\alpha\varepsilon (1 + 2\alpha\varepsilon) \left[ (1 - \cos \beta) - (1 - \cos \alpha) \right] + (1 + 2\alpha\varepsilon)^2 \ln\left(\frac{1 - \cos \beta}{1 - \cos \alpha}\right) - r I = 0$$

C'est une équation qui n'admet pas de solution analytique simple. Elle est résolue numériquement par une méthode de dichotomie initialisée à la valeur la plus probable  $\beta = a$ .

## V. INTERACTION OPTIQUE NON POLAIRE [7]

Cette interaction n'a lieu que dans les vallées de symétrie L. C'est une interaction inélastique au cours de laquelle un phonon optique est échangé. La probabilité de transition d'un état  $\vec{k}$  à un état  $\vec{k}'$  a la même expression que pour l'interaction intervallée équivalente à ceci près que le



nombre de vallées  $Z_j$  est remplacé par 1, que le phonon échangé est un phonon optique et que le potentiel de déformation intervallées est remplacé par un potentiel de déformation optique.

Le traitement de cette interaction est donc similaire à celui des interactions intervallées.

### VI. INTERACTION AVEC LES IMPURETES IONISEES

Le modèle choisi [7, 17] ne tient compte que d'interactions avec les impuretés totalement ionisées. La densité de probabilité relative au passage d'un état  $\vec{k}$  à un état  $\vec{k}'$  au cours de cette interaction élastique s'écrit :

$$\lambda(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{32 \pi^3 e^4 N_D}{(4 \pi \epsilon_c \epsilon_s)^2 \hbar V} \cdot \frac{G(k, k')}{(i \vec{k} - \vec{k}') + \Theta^2)^2} \cdot \delta(E(k') - E(k))$$

Dans cette expression,  $N_D$  est la concentration en impuretés  $\Theta$  est l'inverse de la "distance d'écran", elle est reliée à la concentration en impuretés par :

$$\Theta^2 = \frac{N_D e^2}{\epsilon_c \epsilon_s k_B T}$$

L'expression de  $G(k, k')$  a déjà été donnée ultérieurement (interaction optique polaire).

Après intégration sur l'énergie, la probabilité d'interaction s'écrit :

$$\lambda(E) = \frac{e^4 N_D m^*{}^{3/2} \gamma(E)^{1/2}}{\sqrt{2} \pi (\epsilon_c \epsilon_s)^2 \hbar^4} \int_0^\pi \frac{(1 + 2E + 2E \cos \beta)^2}{(2k^2(1 - \cos \beta) + \Theta^2)^2} \cdot \sin \beta \, d\beta \quad (1)$$

qui devient après intégration complète :

$$\lambda(\epsilon) = \frac{\sqrt{2} \cdot \pi \cdot N_D \cdot e^4 \cdot \epsilon^{-3/2}}{(4\pi \epsilon_0 \epsilon_s)^2 \cdot m^{*1/2}} \cdot \frac{(1+2\alpha\epsilon)}{(1+\alpha\epsilon)^{3/2}} \cdot \Gamma$$

avec

$$\Gamma = \frac{[1 + 2c_R^2 (\theta/2k)^2]^2}{4(\theta/2k)^2 [1 + (\theta/2k)^2]} + c_R^2 [1 + 2c_R^2 (\theta/2k)^2] \ln \left[ \frac{(\theta/2k)^2}{1 + (\theta/2k)^2} \right] + c_R^4$$

où

$$c_R = \left( \frac{\alpha\epsilon}{1 + 2\alpha\epsilon} \right)^{1/2}$$

Il a été vérifié que dans l'expression de  $\Gamma$ , les 2ème et 3ème termes sont négligeables devant le 1er terme. La probabilité d'interaction s'écrit donc sous la forme simplifiée :

$$\lambda(\epsilon) = \frac{e^2 \cdot m^{*1/2} \cdot k_R \cdot \Gamma}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_s \cdot \hbar^2 \cdot \sqrt{2}} \cdot \frac{1 + 2\alpha\epsilon}{\gamma(\epsilon)^{1/2}}$$

L'équation (1) fait apparaître la fonction de distribution de l'angle  $\beta$  de déviation. L'approximation précédente peut s'appliquer pour le calcul de l'angle  $\beta$  de déviation et après avoir tiré au hasard un réel  $r$  entre 0 et 1, l'angle  $\beta$  correspondant s'en déduit, après calcul, par la relation :

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

ANNEXE II

VALEURS DES PARAMÈTRES UTILISÉS DANS LA SIMULATION  
RELATIVES RESPECTIVEMENT AUX MODÈLES 2 ET 3 VALLÉES

I. MODELE 2 VALLEES PROPOSE PAR W. FAWCETT [2]

paramètres relatifs au matériau

|                |                           |   |       |
|----------------|---------------------------|---|-------|
| densité        | 5.37 g/cm <sup>3</sup>    | permittivité diélectrique $\epsilon_{\infty}$ | 10.82 |
| phonon LO      | 0.0354 eV                 | permittivité diélectrique $\epsilon_s$        | 12.53 |
| vitesse du son | 5.22 10 <sup>5</sup> cm/s |   |       |

paramètres relatifs à la structure de bande

|                                       | $\Gamma(0,0,0)$        | X (1,0,0)             |
|---------------------------------------|------------------------|-----------------------|
| masse effective $m^*/m_0$             | 0.067                  | 0.35                  |
| coefficient de non parabolicité       | 0.576 eV <sup>-1</sup> | 0                     |
| gap par rapport à la bande de valence | 1.52 eV                | 1.88 eV               |
| potentiel de déformation acoustique   | 7 eV                   | 7 eV                  |
| potentiel de déformation intervallée  |                        |                       |
| $\Gamma$                              | 0                      | 10 <sup>9</sup> eV/cm |
| X                                     | 10 <sup>9</sup> eV/cm  | 10 <sup>9</sup> eV/cm |
| phonon intervallée                    |                        |                       |
| $\Gamma$                              | -                      | 0.0299 eV             |
| X                                     | 0.0299 eV              | 0.0299 eV             |
| nombre de vallées équivalentes        | 1                      | 3                     |

II. MODELE 3 VALLEES PROPOSE PAR A. LITTLEJOHN [3]

paramètres relatifs au matériau

|                           |                        |   |                           |
|---------------------------|------------------------|---|---------------------------|
| densité                   | 5.36 g/cm <sup>3</sup> | vitesse du son                                | 5.24 10 <sup>5</sup> cm/s |
| constante piézoélectrique | 0.052                  | permittivité diélectrique $\epsilon_{\infty}$ | 10.92                     |
| phonon LO                 | 0.03536 eV             | permittivité diélectrique $\epsilon_s$        | 12.90                     |

paramètres relatifs à la structure de bande

|                                       | $\Gamma(0,0,0)$        | L(1,1,1)                | X(1,0,0)                |
|---------------------------------------|------------------------|-------------------------|-------------------------|
| masse effective $m^*/m_0$             | 0.063                  | 0.222                   | 0.58                    |
| coefficient de non parabolicité       | 0.610 eV <sup>-1</sup> | 0.461 eV <sup>-1</sup>  | 0.204 eV <sup>-1</sup>  |
| gap par rapport à la bande de valence | 1.439 eV               | 1.769 eV                | 1.961 eV                |
| potentiel de déformation acoustique   | 7 eV                   | 9.2 eV                  | 9.27 eV                 |
| potentiel de déformation optique      | 0                      | 3.10 <sup>8</sup> eV/cm | 0                       |
| phonon optique                        | 0                      | 0.0343 eV               | 0                       |
| potentiel de déformation intervallée  |                        |                         |                         |
| $\Gamma$                              | 0                      | 10 <sup>9</sup> eV/cm   | 10 <sup>9</sup> eV/cm   |
| L                                     | 10 <sup>9</sup> eV/cm  | 10 <sup>9</sup> eV/cm   | 5.10 <sup>8</sup> eV/cm |
| X                                     | 10 <sup>9</sup> eV/cm  | 5.10 <sup>8</sup> eV/cm | 7.10 <sup>8</sup> eV/cm |
| phonon intervallée                    |                        |                         |                         |
| $\Gamma$                              | 0                      | 0.0278 eV               | 0.0299 eV               |
| L                                     | 0.0278 eV              | 0.0290 eV               | 0.0293 eV               |
| X                                     | 0.0299 eV              | 0.0293 eV               | 0.0299 eV               |
| nombre de vallées équivalentes        | 1                      | 4                       | 3                       |

### ANNEXE III

#### RELATION ENTRE LES COEFFICIENTS $D_{\text{PAQUET}}(T)$ ET $D(\omega)$

L'équivalence entre les coefficients de diffusion par étalement d'un paquet d'électrons et par le bruit a été démontrée. Or, les méthodes de Monte Carlo, qui ne peuvent faire intervenir qu'un nombre limité de processus élémentaires, ne permettent pas de satisfaire aux conditions limites relatives à ces définitions, en particulier l'évolution d'un paquet d'électrons au cours du temps, ne peut être observée que pendant une durée limitée  $T$  donnant lieu à la détermination d'un coefficient de diffusion approché  $D_p(T) = \frac{1}{2T} \text{var } z(T)$  dont la valeur dépend à priori du temps d'observation  $T$ . Quelle est alors la relation qui existe entre  $D_p(T)$  et  $D(\omega)$  ?

L'expression de  $D_p(T)$  peut, compte tenu de la définition de la variance de position, se mettre sous la forme :

$$D_p(T) = \frac{1}{2T} \overline{\left| \int_0^T (v(t) - \bar{v}) dt \right|^2} \quad (1)$$

où la moyenne est effectuée sur l'ensemble des électrons du paquet.

Cette moyenne sur l'ensemble peut d'après le principe de l'ergodisme être remplacée par une moyenne sur le temps effectuée à partir des vitesses instantanées prises par un seul électron.

L'expression (1) devient alors :

$$D_p(T) = \frac{1}{2T} \left\langle \left| \int_{t-T}^t (v(t') - \bar{v}) dt' \right|^2 \right\rangle_t = \frac{1}{2T} \left\langle |g(t)|^2 \right\rangle_t \quad (2)$$

où  $\langle \quad \rangle_+$  désigne une moyenne sur le temps  $t$  et  $g(t) = \int_{t-T}^t (v(t') - \bar{v}) dt'$

Il est alors possible de mettre  $g(t)$  sous la forme  $g(t) = \Delta v(t) * h(t)$  où

$\Delta v(t) = v(t) - \bar{v}$  et où  $h(t)$  est la fonction créneau entre 0 et T c'est-à-dire :

$$h(t) = 1 \quad \text{si } t \in [0, T]$$

$$\text{et } h(t) = 0 \quad \text{si } t \notin [0, T]$$

En effet

$$\begin{aligned} g(t) &= \int_{t-T}^t \Delta v(t') dt' = \int_{t-T}^t \Delta v(t') h(t-t') dt' \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Delta v(t') h(t-t') dt' = \Delta v(t) * h(t) \end{aligned}$$

L'observation du paquet d'électrons pendant un temps d'observation T correspond donc au passage de la fonction des fluctuations de vitesse  $\Delta v(t)$  par un filtre intégrateur entre 0 et T dont la fonction de transfert est donnée par :

$$H(\omega) = TF [h(t)] = T e^{-j \frac{\omega T}{2}} \cdot \frac{\sin(\omega T/2)}{\omega T/2}$$

L'égalité de Parseval, généralisée aux fonctions de carré non sommable et appliquée à la fonction  $g(t)$  s'écrit :

$$\lim_{t_0 \rightarrow \infty} \frac{1}{t_0} \int_0^{t_0} |g_{t_0}(t)|^2 dt = \lim_{t_0 \rightarrow \infty} \frac{1}{t_0} \int_{-\infty}^{+\infty} |G_{t_0}(\omega)|^2 \frac{d\omega}{2\pi} \quad (3)$$

où  $g_{t_0}(t)$  est la restriction de la fonction  $g(t)$  à l'intervalle  $[0, t_0]$  et

$$G_{t_0}(\omega) = TF [g_{t_0}(t)].$$

Les propriétés des filtres [33] permettent alors d'exprimer la fonction  $G_{t_0}(\omega)$  par la relation :

$$|G_{t_0}(\omega)|^2 = |H(\omega)|^2 |V_{t_0}(\omega)|^2$$

où  $V_{t_0}(\omega) = \text{TF} [\Delta v_{t_0}(t)]$ ,  $\Delta v_{t_0}(t)$  étant la restriction du signal d'entrée  $\Delta v(t)$  à l'intervalle  $[0, t_0]$ .

La relation (3) s'écrit alors :

$$\langle |g(t)|^2 \rangle_t = \lim_{t_0 \rightarrow \infty} \frac{1}{t_0} \int_{-\infty}^{+\infty} T^2 \left( \frac{\sin(\omega T/2)}{\omega T/2} \right)^2 |V_{t_0}(\omega)|^2 \frac{d\omega}{2\pi} \quad (4)$$

Or, par définition (voir Chap. II.1.3) la densité spectrale de bruit vérifie la relation :

$$S(\omega) = \lim_{t_0 \rightarrow \infty} \frac{1}{t_0} |V_{t_0}(\omega)|^2 = 2 D(\omega) \quad (5)$$

La relation (4) peut donc s'écrire compte tenu des relations (2) et (5) :

$$2T D_r(T) = 2T^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{\sin(\omega T/2)}{\omega T/2} \right)^2 D(\omega) df$$



soit

$$D_r(T) = 2T \int_0^{\infty} \left( \frac{\sin(\omega T/2)}{\omega T/2} \right)^2 D(\omega) df$$

Cette relation permet d'exprimer l'influence du temps d'observation  $T$  sur le coefficient de diffusion calculé  $D_T(E)$

## B I B L I O G R A P H I E

- [ 1 ] "Les méthodes de Monté Carlo" J.M. HAMMERSLEY  
D.C. HANDSCOMB, Monographie Dunod
- [ 2 ] W. FAWCETT, A.D. BOARDMAN, S. SWAIN  
J. Phys. Chem. Solids, 31, 1963, (1970)
- [ 3 ] M.A. LITTLEJOHN, J.R. HAUSER, T.H. GLISSON  
J. Appl. Phys., 48, 4587, (1977)
- [ 4 ] A. ALBERIGI QUARANTA, C. JACOBONI, G. OTTAVIANI  
Rivista del Nuovo cimento, 1, 445, (1971)
- [ 5 ] a) J. ZIMMERMAN, Thèse d'Etat, Lille, à paraître  
b) J. ZIMMERMAN, Y. LEROY, E. CONSTANT  
J. Appl. Phys., 49, 3378, (1978)
- [ 6 ] a) H.D. REES, Phys. Lett. 26A, 416, (1968)  
b) H.D. REES, J. Phys. Chem. Solids, 30, 643, (1969)
- [ 7 ] D. L. RODE  
"Semiconductors and semimetals"  
Vol. 10, Academic Press, (1975)
- [ 8 ] E.M. CONWELL, M.O. VASSEL  
Phys. Rev., 166, 797, (1968)
- [ 9 ] D.E. ASPNES, C.G. OLSON, D.W. LYNCH  
Phys. Rev. Lett., 37, 766, (1976)
- [10] D.E. ASPNES,  
Phys. Rev., B14, 5331, (1976)



- [11] H. BROOKS, Advan. Electron. Electron Phys. 7, 85, (1955)  
and C. HERRING, non publié ; voir à  
M. CUEVAS, Phys. Rev. 164, 1025, (1967)
- [12] E.M. CONWELL, V.F. WEISSKOPF  
Phys. Rev., 77, 388, (1950)
- [13] J.G. RUCH, G.S. KINO  
Appl. Phys. Lett., 10, 40, (1967) et Phys. Rev., 174, 921, (1968)
- [14] N.BRASLAU, P.S. HAUGE  
Soumis à Trans. I.E.E.E. Electron. Devices en 1969
- [15] P.A. HOUSTON, A.G.R. EVANS  
Solid State Electron., 20, 197, (1977)
- [16] P.A. WOLFF  
Phys. Rev., 95, 1415, (1954)
- [17] J.G. RUCH, W. FAWCETT  
J. Appl. Phys., 41, 3843, (1970)
- [18] J.P. NOUGIER  
Phys. Stat. Sol. (b), 55, K 43, (1973)
- [19] J.P. NOUGIER  
Physica, 64, 209, (1973)
- [20] B.R. NAG,  
Phys. Rev. B, 11, 3031, (1975)
- [21] J.P. NOUGIER, M. ROLLAND  
J. Appl. Phys., 48, 1683, (1977)
- [22] T. OHMI  
Electron. Commun. Jpn. 51 B, 87, (1968)

- [23] T. OHMI, S. HASUO  
Electron. Commun. Jpn. 52 C, 137, (1969)
- [24] W. FAWCETT, H.D. REES  
Phys. Lett., 29 A, 578, (1969)
- [25] P.E. BAUHAHN, G.I. HADDAD, N.A. MASNARI  
Electron. Lett., 9, 460, (1973)
- [26] M. ABE, S. YANAGISAWA, O. WADA, M. TAKANASHI  
Appl. Phys. Lett., 25, 674, (1974)
- [27] S. CHANDRASEKHAR  
Rev. Mod. Phys., 15, 1-89, (1947)  
(réimprimé dans "Selected Papers on Noise and Stochastic Processes  
édité par N. Wax (Dover, New York, 1954))
- [28] M.S. GUPTA  
J. Appl. Phys., 49, 2837, (1978)
- [29] J. POZELA, A. REKLAITIS  
Sol. State Commun., 27, 1073, (1978)
- [30] G. HILL, P.N. ROBSON, W. FAWCETT  
J. Appl. Phys., 50, 356, (1969)
- [31] W. SHOCKLEY, J.A. COPELAND, R.P. JAMES  
"Quantum Theory of atoms, Molecules and the Solid State"  
Edité par P.O. Lowdin (Academic, New York, 1966) p. 537
- [32] J.P. NOUGIER  
Cours de D.E.A. , Montpellier
- [33] D.C. CHAMPENEY  
"Fourier Transforms and their physical applications"  
Academic Press (1973) London, New York

- [34] S. BONFILS, Thèse de Docteur Ingénieur, Lille, (1976)
- [35] M. ROLLAND, Thèse d'Etat, Montpellier, (1975)
- [36] J. ZIMMERMAN, S. BONFILS, Y. LEROY, E. CONSTANT  
Appl. Phys. Lett., 30, 245, (1977)
- [37] G. PERSKY, D.F. BARTELINK  
J. Appl. Phys., 42, 11, 4414, (1971)
- [38] T.W. SIGMON, J.F. GIBBONS  
Appl. Phys. Lett., 15, 10, (1975)
- [39] J.P. NOUGIER, Thèse d'Etat, Montpellier, (1972)
- [40] A. MAMOUNI, Thèse 3ème Cycle, Lille, (1978)
- [41] D.D. NGUYEN, Thèse 3ème Cycle, Lille, à paraître
- [42] J. GRAFFEUIL, Thèse d'Etat, Toulouse, (1977)
- [43] M. SHUR  
Electronic Letters, 12, 615, (1976)
- [44] S. KRATZER, J. FREY  
J. Appl. Phys., 49, 4064, (1978)
- [45] J. RUCH  
I.E.E.E. Trans. Electron Devices, ED-19, 652, (1972)
- [46] G. HILL, P. ROBSON, A. MAJERFELD, W. FAWCETT  
Electron. Lett., 13, 236, (1977)
- [47] T. MALONEY, J. FREY  
J. Appl. Phys., 48, 781, (1977)
- [48] J. ZIMMERMAN, Y. LEROY, E. CONSTANT et A. KASZYNSKI  
"Noise in Physical Systems"  
Edité par D. Wollf, Springer Verlag, New York, (1978)

- [49] D. C. HERBERT, W. FAWCETT, C. HILSUM  
J. Phys. C. : Solid State Phys., 9, 3969, (1976)
- [50] A.S. SABBAHY, A.R. ADAMS, M.L. YOUNG  
Solid State Elect., 21, 83, (1978)
- [51] VAPAILLE  
"Physique des dispositifs à semiconducteurs"  
"Electronique du Silicium homogène" Masson & Cie
- [52] B. CARNEZ, A. CAPPY, A. KASZYNSKI, G. SALMER  
Proc. 8th E. M. C., SS4.5, p. 410, Paris, (1978)
- [53] A. KASZYNSKI, R. FAUQUEMBERGUE, E. CONSTANT  
à paraître
- [54] E. CONSTANT et Col.  
J.N.M., Lille, 26-28 Juin (1979)
- [55] B. CARNEZ, A. CAPPY, A. KASZYNSKI, E. CONSTANT, G. SALMER  
J. Appl. Phys., à paraître en Juillet 1979
- [56] J.A. COPELAND  
J. Appl. Phys., 38, 3096, (1967)
- [57] P.A. ROLLAND, E. CONSTANT, G. SALMER, R. FAUQUEMBERGUE  
à paraître dans Electronic Letters
- [58] M. DEBLOCK  
D.E.A., Lille, (1979)
- [59] J.W. HARRISON, J.R. HAUSER  
J. Appl. Phys., 47, 292, (1976)
- [60] D. JONES, H. D. REES  
Electr. Lett., 8, 363, (1972)