

N° d'ordre : 483

50376
1980
202

50376
1980
202

THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITÉ DES SCIENCES ET TECHNIQUES DE LILLE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR ès SCIENCES PHYSIQUES

par

Jacques ZIMMERMANN

**ETUDE DES PHENOMENES DE TRANSPORT
ELECTRONIQUE DANS LE SILICIUM DE TYPE N
EN REGIMES STATIONNAIRES ET NON STATIONNAIRES
PAR LA METHODE DE MONTE CARLO
APPLICATION A LA SIMULATION
DE COMPOSANTS SUBMICRONIQUES**



Soutenu le 19 juin 1980 devant la Commission d'Examen

Membres du Jury	M.	G. SALMER	Président
	M.	E. CONSTANT	Rapporteur
	M.	Y. LEROY	Rapporteur
	M.	J.P. NOUGIER	Rapporteur
	M.	R. CASTAGNE	Rapporteur
	M.	H. MARTINOT	Examineur
	M.	G. CONVERT	Invité

A tous ceux qui me sont chers,

Le travail présenté ici a été effectué au Centre Hyperfréquences et Semi-conducteurs, Laboratoire Associé au C.N.R.S. Je remercie Monsieur le Professeur CONSTANT, Directeur du Centre, de m'avoir accueilli dans son laboratoire et de la confiance qu'il m'a toujours témoignée depuis. Il a assuré personnellement la direction de ce travail et m'a largement fait bénéficier de son aide, de ses conseils et de son exemple. Pour ces raisons, je lui suis très profondément reconnaissant.

Monsieur le Professeur SALMER a accepté de présider mon jury et d'examiner mes travaux. Je le remercie du grand honneur qu'il me fait ainsi.

J'exprime ma très sincère gratitude à Monsieur le Professeur LEROY qui a suivi une partie de ce travail et dont les conseils éclairés et l'amicale collaboration ont été un soutien constant et efficace tout au long de cette étude.

Qu'il me soit permis d'exprimer ma sincère reconnaissance à Monsieur le Professeur NOUGIER de l'Université de Montpellier et à Monsieur le Professeur CASTAGNÉ de l'Université de Paris-Sud qui se sont toujours intéressés à mes travaux et qui me font le grand honneur de les juger. Nous avons eu l'occasion d'en discuter à maintes reprises dans le cadre du Gréco Microondes; ces discussions ont souvent été les facteurs déterminants de leur développement.

Mes remerciements vont aussi à Monsieur MARTINOT, Directeur de Recherches au Laboratoire d'Automatique et d'Analyse des Systèmes du C.N.R.S., et à Monsieur CONVERT du Laboratoire Central de Recherches de la société Thomson-CSF, qui ont accepté de participer à mon jury et d'examiner mon travail.

Je veux mentionner les membres de l'équipe "Semiconducteurs" du laboratoire dont l'aide amicale et sympathique m'a été très précieuse: MM. BOITTIAUX, CHAREF, DEBLOCK, et M. FAUQUEMBERGUE dont la grande compétence scientifique s'allie à autant de modestie. Je nommerai également MM. VANBREMEERSCH et VANDERMOERE du laboratoire de technologie, ainsi que M. TINEL du Centre de Calcul. A tous, merci.

Je n'oublierai pas d'associer à ces remerciements l'ensemble du personnel technique et administratif du laboratoire et du Service d'Electronique, en particulier Mme. LECHIEN, MM. ARMANT, JENNEQUIN, MICHON, ANDRIES, PLUQUET, LEMAIRE et DEHORTER, ainsi que Mme. TAILLY qui a eu la tâche très ingrate de dactylographier le mémoire.

Je témoigne enfin toute ma reconnaissance au Centre National de la Recherche Scientifique qui, en m'acceptant dans un poste d'Attaché de Recherche, m'a permis de réaliser l'ensemble de cette étude.

S O M M A I R E

=====

INTRODUCTION

CHAPITRE 1 : ELABORATION DES METHODES DE MONTE CARLO. RAPPELS SUR LES PARAMETRES DU SILICIUM-N.

Page 9	<u>Introduction</u>
Page 11	I. <u>Généralités et rappels sur l'étude théorique des porteurs chauds dans les matériaux semiconducteurs</u>
Page 21	II. <u>Principe et mise en oeuvre de la méthode de Monte Carlo à l'étude de la dynamique électronique</u>
Page 21	II.1. Principe de la méthode
Page 24	II.2. Les différents éléments de la simulation
Page 28	II.3 Evaluation des fonctions de distribution
Page 30	II.4. Méthode de Monte Carlo utilisant les collisions fictives
Page 33	II.5. Méthode de Monte Carlo à discrétisation régulière
Page 37	II.6. Comparaison des deux méthodes. Choix du paramètre δt
Page 37	II.6.1. Cas d'un champ uniforme et statique
Page 39	II.6.2. Champ uniforme variable dans le temps
Page 40	II.6.3. Champ non uniforme pouvant varier dans le temps
Page 40	II.6.4. Choix du paramètre δt
Page 47	III. <u>Le Silicium-N: paramètres de bande et de collision</u>
Page 54	<u>Conclusion</u>
Page 55	<u>Bibliographie</u>

CHAPITRE 2 : EXPLOITATION DE LA METHODE DE MONTE CARLO EN EFFET DE VOLUME. PARAMETRES DU PREMIER ET DU SECOND ORDRE EN CHAMP UNIFORME STATIQUE OU VARIABLE DANS LE TEMPS. QUELQUES VERIFICATIONS EXPERIMENTALES.

Page 63	<u>Introduction</u>
Page 65	Ière partie: <u>Phénomènes de transport en champ statique</u>
Page 67	I.1. Rappels concernant les probabilités régissant les collisions des porteurs avec le réseau et les défauts de réseau

Page 67	I.1.1. Collisions avec le réseau
Page 68	I.1.1.1. Collisions acoustiques intravallées
Page 69	I.1.1.2. Collisions intervallées
Page 71	I.1.2. Collisions sur impuretés ionisées
Page 73	I.1.3. Evolution des probabilités avec l'énergie des porteurs
Page 76	I.2. Etude des paramètres du premier ordre du Silicium-N. Etude des distributions
Page 76	I.2.1. Le champ est parallèle à la direction $\langle 111 \rangle$
Page 80	I.2.2. Le champ est parallèle à la direction $\langle 100 \rangle$. Etude du phénomène de repopulation
Page 84	I.2.3. Evolution de quelques paramètres de transport avec la température et la concentration en impuretés
Page 86	I.2.4. Etude des distributions
Page 93	I.3. Paramètres du second ordre: coefficients de diffusion
Page 93	I.3.1. Rappels de définitions
Page 93	I.3.1.1. Etalement d'un paquet de porteurs
Page 96	I.3.1.2. Coefficient de diffusion de bruit
Page 98	I.3.2. Equivalence des deux définitions
Page 100	I.3.3. Equivalence numérique de D_p et D_B
Page 101	I.3.3.1. Cas des temps courts ($t \ll \tau$)
Page 102	I.3.3.2. Cas des temps longs ($t \gg \tau$)
Page 103	I.3.3.3. Résultats concernant le Silicium N
Page 108	I.3.4. Les coefficients de diffusion en régime statique
Page 108	I.3.4.1. Comparaison des diffusions statiques obtenues par les deux méthodes
Page 114	I.3.4.2. Comparaison avec les résultats expérimentaux
Page 116	I.3.5. Conclusion
Page 117	I.4. Etude du coefficient de diffusion par la mesure du bruit de diffusion. Choix d'une loi $D(E)$
Page 118	I.4.1. Principe de l'expérimentation
Page 120	I.4.2. Le radiomètre bande-X
Page 124	I.4.3. Problème lié à l'échauffement de l'échantillon
Page 124	I.4.4. Les échantillons. Elaboration et caractérisation
Page 126	I.4.4.1. Elaboration des échantillons
Page 128	I.4.4.2. Caractérisation des composants
Page 129	I.4.5. Résultats des mesures de bruit. Comparaison théorie-expérience

Page 137	<u>IIème partie: Phénomènes de transport en champ variable dans le temps</u>
Page 139	II.1. Interprétation physique des phénomènes transitoires liés à l'application brutale d'un champ électrique
Page 144	II.2. Calcul de la mobilité complexe en gammes hyperfréquence et infrarouge lointain. Vérification expérimentale dans le domaine millimétrique
Page 144	II.2.1. Effet de la modulation de vitesse
Page 147	II.2.2. Evolution de la mobilité avec la fréquence
Page 149	II.2.3. Confrontation avec les résultats expérimentaux
Page 150	II.2.3.1. Technique de mesure de conductivité par étalonnage thermique
Page 152	II.2.3.2. Echantillons, résultats expérimentaux, comparaison avec la théorie
Page 155	II.3. Les équations de relaxation
Page 155	II.3.1. Détermination et discussion des équations de relaxation dans un semiconducteur uniforme
Page 159	II.3.2. Approximation des temps de relaxation dépendant de l'énergie seule
Page 159	II.3.2.1. Hypothèses
Page 163	II.3.2.2. Résultats concernant le silicium N
Page 165	II.3.2.2.1. Observation des régimes de survitesse
Page 165	II.3.2.2.2. Calcul de la mobilité complexe hyperfréquence
Page 171	II.3.3. Justification de l'hypothèse des temps de relaxation dépendant de l'énergie seule
Page 177	<u>Conclusion</u>
Page 178	<u>Bibliographie</u>
 <u>CHAPITRE 3: SIMULATION DE COMPOSANTS UNIDIMENSIONNELS ET UNIPOLAIRES DU TYPE N⁺N N⁺. ETUDE DES CARACTERISTIQUES STATIQUES ET DES PROPRIETES DE BRUIT DE FOND.</u>	
Page 185	<u>Introduction</u>
Page 188	I. <u>Préambule. Conditions de passage de porteurs libres dans des créneaux spatiaux de champ électrique. Vitesse de diffusion.</u>

Page 194	II. <u>Simulation d'un composant unidimensionnel. Méthode monoporteur. Comparaison avec les résultats de l'électrocinétique classique.</u>
Page 194	II.1. Généralités et principe de la méthode
Page 198	II.2. Calcul des valeurs moyennes
Page 200	II.3. Elimination du transitoire
Page 201	II.4. Calcul du spectre de bruit de diffusion
Page 202	II.5. Résultats
Page 208	III. <u>Simulation d'un composant unidimensionnel. Méthode multiporteurs. Calcul du bruit de diffusion.</u>
Page 208	III.1. Principe de base
Page 209	III.2. Calcul du bruit en tension
Page 213	III.3. Calcul du bruit en courant
Page 214	III.4. Etude du bruit thermique
Page 215	III.4.1. Calcul analytique du bruit thermique en tension et comparaison avec les résultats de la simulation
Page 223	III.4.2. Calcul du bruit thermique en courant
Page 225	III.5. Etude du bruit thermique de porteurs chauds
Page 230	<u>Conclusion</u>
Page 231	<u>Bibliographie</u>
<u>CHAPITRE 4: POSSIBILITES NOUVELLES DES METHODES DE MONTE CARLO. ETUDE PROSPECTIVE DE QUELQUES FUTURES APPLICATIONS.</u>	
Page 235	<u>Introduction</u>
Page 236	I. <u>Etude des effets de surface.</u>
Page 237	I.1. Effet d'une surface sur la mobilité des porteurs
Page 240	I.2. Etude des paramètres de transport de porteurs chauds en régime d'inversion
Page 248	II. <u>L'interaction électron-électron.</u>
Page 253	III. <u>Le phénomène d'ionisation par choc.</u>
Page 254	IV. <u>La simulation bipolaire.</u>
Page 257	<u>Conclusion</u>
Page 258	<u>Bibliographie</u>

I N T R O D U C T I O N

=====

Les récents progrès accomplis dans les technologies de réalisation de dispositifs de faibles dimensions laissent penser que de nouvelles générations de composants submicroniques feront bientôt leur apparition. En effet, une miniaturisation plus poussée des éléments permettra non seulement la réalisation de circuits intégrés à très haute densité de faible consommation par élément mais aussi il doit être possible en utilisant des zones actives de dimensions de plus en plus faibles de diminuer les temps de transit et de communication et d'augmenter les fréquences de coupure.

On sera ainsi amené à utiliser intensivement dans le domaine des circuits intégrés et des composants microondes des éléments comme des transistors à effet de champ et des transistors MOS fonctionnant à partir de couches épitaxiées ou de couches d'inversion de dimensions de plus en plus submicroniques.

Or, les phénomènes de transport électroniques observés dans ce type de composant peuvent se présenter de façon très différente de ceux qui se manifestent dans le matériau en volume. Dans un dispositif submicronique l'amplitude du champ électrique agissant sur les porteurs est fortement confinée dans l'espace et dans le temps. Les longueurs et les durées de transit dans la zone active du composant deviennent du même ordre de grandeur que le libre parcours moyen et le temps de libre parcours. Il en résulte que le régime stationnaire des électrons dû à l'établissement d'un équilibre entre la perturbation sur les porteurs due au réseau cristallin et celle due au champ électrique n'a pas le temps d'être atteint comme c'est habituellement le cas dans un semiconducteur en volume. Les effets observés permettent d'obtenir des vitesses de dérive des porteurs considérablement plus élevées que celles obtenues en régime stationnaire, et ces phénomènes sont d'autant plus importants que les champs électriques sont élevés. Ils peuvent même se traduire par des couplages entre composants voisins dans des circuits intégrés à très haute densité. Il en ressort qu'une remise en cause des théories classiques de transport et de modélisation de composants doit être effectuée.

Il est donc essentiel de se doter d'outils de travail adaptés à la résolution de ces problèmes particulièrement importants. L'utilisation de la méthode de Monte Carlo s'est fait une place de choix depuis une quinzaine d'années dans l'étude des phénomènes de transport dans les semiconducteurs. Elle permet l'étude de la dynamique électronique dans les matériaux semiconducteurs au niveau microscopique. Elle détermine non seulement les valeurs moyennes mais aussi les valeurs des fluctuations et en particulier elle prend facilement en compte les comportements non stationnaires, c'est-à-dire ceux qui apparaissent quand les gradients spatiaux ou temporels de champ électrique sont particulièrement importants.

Dès lors, on peut envisager de simuler par ce moyen des composants complets, dans lesquels on peut tenir compte des phénomènes, stationnaires ou non, de réaction de charge d'espace et de fluctuations donnant lieu au bruit de fond.

De façon plus précise, il apparait que l'application de la méthode de Monte Carlo permet de se fixer un triple objectif. Premièrement, en facilitant l'étude des phénomènes de mobilité ou de diffusion en volume dans les matériaux, on peut déterminer un certain nombre de paramètres physiques de transport - constantes de couplage électron-phonon en particulier - par la comparaison des résultats obtenus théoriquement avec les données expérimentales. Ce faisant, on peut apporter des éléments utiles et nouveaux sur les mécanismes physiques qui déterminent la dynamique électronique dans un semiconducteur. Deuxièmement en permettant une étude fine et précise des variations de la vitesse de dérive et du coefficient de diffusion en régimes stationnaires ou non, ces méthodes peuvent fournir les données de base nécessaires à la résolution numérique des composants à partir des équations de l'électrocinétique. Troisièmement, les techniques de Monte Carlo permettent dans une assez large mesure la simulation directe de certains de ces composants et s'avère en définitive une méthode d'approche plus précise, plus fiable et même parfois plus simple que les techniques numériques classiques.

Nous nous sommes efforcés au cours de ce travail de montrer et d'illustrer les possibilités que peut présenter la méthode de Monte Carlo dans l'étude de ces trois types de problèmes. Le semiconducteur qui a été retenu pour ce travail est le silicium de type N compte tenu, d'une part,

qu'il reste le matériau le plus utilisé de nos jours en électronique et que d'autre part, il est sans doute aussi le matériau le mieux connu et que des comparaisons avec des résultats expérimentaux sont donc possibles. Néanmoins, il est évident que les méthodologies mises au point dans ce travail peuvent être appliquées sans grande modification aux autres matériaux semiconducteurs.

En pratique, nous avons divisé notre travail en quatre grandes parties.

Dans un premier chapitre, nous étudions de manière aussi physique que possible les méthodes de Monte Carlo. Après avoir étudié de façon générale les phénomènes d'interaction entre l'électron et le réseau cristallin nous exposons en détail la méthode de Monte Carlo utilisée actuellement basée sur le procédé de collision fictive et proposons une méthode quelque peu différente sans doute mieux adaptée à l'étude des composants. Nous faisons ensuite une comparaison critique des deux méthodes. Puis nous décrivons les modèles physiques utilisés pour le silicium de type N, en particulier celui concernant les collisions intervallées.

Dans un second chapitre nous présentons l'ensemble des résultats acquis par notre méthode de Monte Carlo dans le silicium homogène et en volume tout d'abord en régime stationnaire. Nous étudions aussi bien les paramètres du premier ordre (vitesse de dérive, énergie moyenne ...) que ceux du second ordre (tels que les coefficients de diffusion). Les résultats obtenus sur les coefficients de diffusion sont vérifiés expérimentalement grâce à des mesures de température de bruit présentée par les porteurs chauds dans le silicium N.

Nous considérons ensuite les effets liés à l'application d'un champ électrique variant très rapidement en fonction du temps soit sous la forme d'un créneau temporel soit sous celle d'un signal périodique. Nous étudions en particulier les phénomènes non stationnaires qui alors font leur apparition dans le matériau. Nous montrons l'existence des phénomènes de survitesse, de relaxation d'énergie et du moment des porteurs et leurs conséquences sur la dépendance fréquentielle de la mobilité complexe du matériau. Nous présentons également quelques résultats expérimentaux concernant la mesure de la conductivité hyperfréquence du silicium en gamme millimétrique et les confrontons aux résultats théoriques fournis par la méthode de Monte Carlo. Dans la dernière

partie de ce second chapitre nous essayons de justifier physiquement la validité des équations macroscopiques de relaxation qui permettent de retrouver avec une bonne précision grâce à un modèle très simple les phénomènes de survitesse et l'évolution de la mobilité complexe du matériau avec la fréquence.

Le troisième chapitre concerne la simulation unidimensionnelle et unipolaire de composants du type $N^+ N N^+$, prenant en compte les phénomènes dynamiques de charge d'espace. L'objectif est d'essayer de montrer que la méthode de Monte Carlo répond bien aux exigences particulières du calcul de composants de petites dimensions que ce soit au niveau de la détermination des caractéristiques statiques ou au niveau de la détermination des propriétés de bruit.

Dans ce but, au préalable, nous montrons comment la méthode de Monte Carlo tient compte automatiquement du phénomène de diffusion quand existent des variations spatiales de champ électrique. Nous décrivons ensuite une première méthode de simulation de composant basée sur la simulation d'un seul porteur. Cette méthode permet de caractériser les propriétés statiques du composant. Comparant ces résultats avec ceux donnés pour les équations de l'électrocinétique classique, nous mettons en évidence les conditions requises pour que les phénomènes non stationnaires apparaissent dans des composants du type $N^+ N N^+$. Nous exposons ensuite une autre méthode basée sur la simulation d'un grand nombre de porteurs en vue de l'étude du bruit de diffusion thermique. Nous consacrons une attention toute particulière à l'étude du bruit thermique à l'équilibre afin de valider la méthode présentée ici. Nous montrons ensuite quelques résultats concernant le bruit de diffusion de porteurs chauds dans les composants $N^+ N N^+$.

Dans le quatrième et dernier chapitre nous tentons de dresser un panorama des possibilités non encore pleinement exploitées de la méthode de Monte Carlo. Nous montrons en particulier qu'elle peut constituer une méthode très pratique pour l'étude de la dynamique électronique au voisinage d'une surface. Nous faisons également une étude prospective des autres problèmes qui pourraient être abordés par la méthode de Monte Carlo telle la prise en compte

des interactions électron-électron qui sont loin d'être négligeables chaque fois que la concentration en porteurs est élevée dans les composants utilisés. Nous évoquons enfin d'autres applications qui pourraient être développées au moyen de ces méthodes, telles l'étude des phénomènes d'ionisation par choc, la simulation de composants bipolaires ou les hétérojonctions.

L'élaboration des techniques et méthodes décrites dans ce travail est basée sur un certain nombre de travaux effectués antérieurement par d'autres auteurs et il paraît utile de citer les apports les plus importants :

* ceux de Kurosawa [1] de Fawcett [2] de Price [3] et de Rees [4] en ce qui concerne le développement des méthodes de Monte Carlo depuis 1966

* les travaux effectués sur le silicium de type N dans le groupe de Modène, aussi bien sur le plan expérimental [5] que théorique [6]

* les travaux effectués par Nougier [7] en ce qui concerne le développement des mesures de bruit radiométriques et leur utilisation à la détermination des coefficients de diffusion de porteurs chauds.

Partant de ces bases, nous nous sommes efforcés au cours du travail effectué ici d'apporter une contribution originale dont les points les plus saillants concernent sans doute :

- la mise au point d'une méthode de Monte Carlo particulièrement adaptée à la simulation de composants

- l'étude détaillée du comportement fréquentiel et temporel du coefficient de diffusion des électrons dans le silicium, en étudiant en particulier les différences obtenues suivant la direction d'application du champ électrique

- l'étude des possibilités d'utilisation des équations de relaxation de l'énergie et du moment pour décrire les phénomènes non stationnaires dans les semiconducteurs

- la mise au point d'une méthode de simulation de composants basée sur le calcul de l'évolution d'un seul porteur et l'utilisation du procédé pour l'étude des conditions dans lesquelles apparaissent les comportements non stationnaires dans les composants $N^+ N N^+$

- la mise en oeuvre d'une méthode multiparticulaire appliquée au calcul des caractéristiques de bruit de diffusion de porteurs chauds dans les composants $N^+ N N^+$

- enfin la mise au point d'un procédé de calcul original des caractéristiques de transport de porteurs chauds en régime d'inversion au voisinage d'une surface.

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

=====

- [1] T. KUROSAWA
Journal of the Physical Society of Japan, Supplément au volume 21,
p. 424, (1966)
- [2] W. FAWCETT, A.D. BOARDMAN, S. SWAIN
Journal of Physics and Chemistry of Solids, Volume 31, p. 1963, (1970)
- [3] P.J. PRICE
dans "Semiconductors and Semimetals" Volume 14, p 249, Academic
Press, (1979) ainsi que les nombreuses références citées
- [4] H.D. REES
Journal of Physics and Chemistry of Solids, Volume 30, p. 643, (1969)
- [5] C. CANALI, G. OTTAVIANI, A. ALBERIGI QUARANTA
Journal of Physics and Chemistry of Solids, Volume 32, p. 1707, (1971)
- [6] C. CANALI, C. JACOBONI, F. NAVA, G. OTTAVIANI, A. ALBERIGI-QUARANTA
Physical Review B, Volume 12, p. 2265, (1975)
- [7] J.P. NOUGIER, M. ROLLAND
Physical Review B, Volume 8, p. 5728, (1973)

CHAPITRE 1

ELABORATION DES METHODES DE MONTE CARLO.

Rappels sur les paramètres du silicium-N.

INTRODUCTION

Ce chapitre se compose de trois grandes parties. Dans la première, nous dressons un rapide historique des études effectuées sur les phénomènes de porteurs chauds dans les semiconducteurs et nous résumons succinctement les méthodes d'investigation utilisées dans la théorie des phénomènes hors d'équilibre.

Dans la seconde partie, nous exposons le principe des méthodes de Monte Carlo appliquée à l'étude de la dynamique électronique microscopique dans les semiconducteurs. Nous décrivons ensuite les éléments de base nécessaires à la simulation : ce sont, d'une part, la probabilité qui permet de déterminer la durée d'un libre parcours effectué par le porteur entre deux collisions sous la seule influence des forces extérieures appliquées, d'autre part, la description du comportement du porteur durant les collisions. Nous consacrons un paragraphe au problème de l'évaluation des fonctions de distribution en régime statique ou en régime transitoire que l'on peut obtenir à partir de l'histoire des porteurs engendrée par la simulation de Monte Carlo. Nous exposons ensuite les méthodes de simulation proprement dites :

- celle utilisant le procédé des collisions fictives
- celle qui a été développé dans notre laboratoire, procédant par discrétisation régulière du temps.

Nous terminons cette seconde partie par une comparaison critique de ces deux méthodes surtout en ce qui concerne le temps de calcul.

Dans la troisième et dernière partie de ce chapitre, nous faisons quelques rappels concernant les paramètres physiques relatifs au silicium de type N, en particulier en ce qui concerne les phénomènes de collision électron-phonon qui selon les auteurs impliquent des phonons d'énergie différentes associées à des constantes de couplage parfois très diverses. Nous décrivons le modèle que nous avons choisi en justifiant notre choix.

I. GENERALITES ET RAPPELS HISTORIQUES SUR L'ETUDE THEORIQUE DES PORTEURS CHAUDS DANS LES MATERIAUX SEMICONDUCTEURS

Le comportement d'un gaz électronique dans un matériau semiconducteur soumis à une force $q\vec{E}$, est régi par l'équation de transport de Boltzmann. Si l'on considère dans le matériau un ensemble de porteurs indépendants représentés par leurs positions $\vec{r}(t)$ et leurs vecteurs d'onde $\vec{k}(t)$, le couple \vec{k}, \vec{r} définit un état dans l'espace des phases. Si on note par $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$ la densité de probabilité qu'à l'instant t le porteur est dans l'état \vec{k}, \vec{r} , la valeur moyenne de toute grandeur $\phi(\vec{k})$ caractéristique du système vaudra :

$$\phi(\vec{r}, t) = \overline{\phi(\vec{k})} = \frac{1}{4\pi^3} \int_{\text{domaine de } \vec{k}} \phi(\vec{k}) f(\vec{k}, \vec{r}, t) d^3k \quad (1,1)$$

où $\frac{1}{4\pi^3}$ est la densité d'état dans l'espace des phases.

Résoudre l'équation de Boltzmann consiste à trouver l'allure et l'évolution de cette densité, ce qui permet alors de calculer toutes les grandeurs moyennes caractéristiques des phénomènes étudiés: Diffusion, mobilité, ... Sous une forme très générale, l'équation de Boltzmann s'écrit :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} f + q \frac{\vec{E}}{\hbar} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{k}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{collisions}} \quad (1,2)$$

où la fonction f peut dépendre explicitement de \vec{k}, \vec{r} et t . \vec{v} est la vitesse d'un porteur que l'on peut calculer si l'on connaît la structure de bande $\epsilon(\vec{k})$

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon}{\partial \vec{k}} \quad (1,3)$$

f peut dépendre de \vec{r} quand le champ électrique \vec{E} dans le semiconducteur est non uniforme spatialement ; elle peut aussi dépendre explicitement du temps quand on observe des phénomènes non stationnaires dus à la présence de champs dépendant du temps.

Dans le cas d'un système homogène sur lequel aucune force n'est appliquée ($E=0$) la vitesse moyenne des porteurs est nulle et ceux-ci ne sont soumis qu'à l'agitation thermique correspondant à la température du réseau T_L . La fonction de distribution est alors celle de Fermi-Dirac

$$f_0(\vec{k}) = \frac{1}{\exp \left[\frac{\epsilon(\vec{k}) - \epsilon_F}{k_B T_L} \right] + 1}$$

Pour un matériau non dégénéré et à une température qui n'est pas trop basse, on a une bonne approximation de $f_0(\vec{k})$ en écrivant

$$f_0(\vec{k}) = f_0(\epsilon) = A \exp \left\{ - \frac{\epsilon(\vec{k})}{k_B T_L} \right\} \quad (1,4)$$

Quand on soumet les porteurs à un champ électrique la fonction de distribution est modifiée, la vitesse moyenne des porteurs n'est plus nulle et un courant apparaît. Les porteurs absorbent de l'énergie provenant du champ électrique au taux

$$\left(\frac{\partial \epsilon}{\partial t} \right)_{\text{champ}} = q \vec{v} \cdot \vec{E} \quad (1,5)$$

L'équilibre thermodynamique est atteint quand le taux de perte d'énergie due aux collisions $(\partial \epsilon / \partial t)_{\text{collisions}}$, et le taux de gain d'énergie dû au champ électrique sont égaux. La population électronique peut alors avoir une énergie moyenne plus grande que celle du réseau. Il s'ensuit que la nouvelle distribution obtenue dans ce cas pourra être différente de la Maxwellienne (1,4).

Le second membre de l'équation de Boltzmann qui s'écrit $(\partial f / \partial t)_{\text{collisions}}$ représente la variation temporelle de la distribution compte tenu des interactions des porteurs avec le milieu ambiant.

Si $S(\vec{k}, \vec{k}')$ représente la densité de probabilité par unité de temps qu'un porteur dans l'état \vec{k} subisse un choc l'amenant dans un autre état \vec{k}' à d^3k' près, le terme de collision pourra s'écrire [2]

$$(\partial f / \partial t)_{\text{collision}} = - \int d^3k' [S(\vec{k}, \vec{k}') f(\vec{k})(1-f(\vec{k}')) - S(\vec{k}', \vec{k}) f(\vec{k}')(1-f(\vec{k}))]$$

où les termes $1-f$ tiennent compte du principe d'exclusion de Pauli.

Pour un matériau non dégénéré le nombre d'états occupés $f(\vec{k})$ est toujours faible devant 1 et l'état \vec{k}' est donc pratiquement toujours libre, de sorte que

$$(\partial f / \partial t)_{\text{collision}} = - \int d^3k' [S(\vec{k}, \vec{k}') f(\vec{k}) - S(\vec{k}', \vec{k}) f(\vec{k}')] \quad (1,6)$$

ce qui peut se mettre sous la forme

$$(\partial f / \partial t)_{\text{collision}} = - \lambda(\vec{k}) f(\vec{k}) + \int S(\vec{k}', \vec{k}) f(\vec{k}') d^3k'$$

en ayant posé $\lambda(\vec{k}) = \int S(\vec{k}, \vec{k}') d^3k'$.

La masse de littérature consacrée à la résolution de l'équation de Boltzmann, depuis une vingtaine d'années, est considérable et ne pouvant citer celle-ci in extenso, nous référons le lecteur au livre de Conwell [3] qui est un classique

dans ce domaine et à [4] qui représente une complète mise à jour dans ce sujet.

Etant donné la forme intégrodifférentielle de l'équation de Boltzmann et la complexité des interactions subies par les porteurs, il est difficile voire impossible dans le cas général, de trouver une forme analytique exacte de la solution. C'est la raison pour laquelle on a eu recours soit à des hypothèses simplificatrices menant à un traitement analytique ou semi-analytique, soit à des résolutions numériques sur calculateurs.

Dans le cas où le champ électrique est suffisamment faible en amplitude (c'est le cas du régime ohmique) on a coutume d'écrire

$$f(\vec{k}) = f_0(\epsilon) + f_1(\vec{k}) \quad (1,7)$$

où $f_0(\epsilon)$ est une distribution de Boltzmann à la température du réseau et où f_1 est un terme de dérive d'amplitude proportionnelle à la force appliquée et beaucoup plus petit que $f_0(\epsilon)$. De plus, dans la limite d'une bande d'énergie sphérique et parabolique, de collisions élastiques ou tout au moins à forte prédominance élastique et pourvu que $S(\vec{k}, \vec{k}')$ ne dépende que du module de \vec{k} et de l'angle θ entre \vec{k} et \vec{k}' [2], on peut introduire un temps de relaxation ne dépendant que du module de \vec{k} par :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{collision}} = - \frac{f_1(\vec{r}, \vec{k})}{\tau(k)} \quad (1,8)$$

Ceci mène à une expression de f_1 particulièrement simple. Si le champ est appliqué selon la direction \vec{k}_z on trouve pour un système homogène et stationnaire

$$f_1 = \frac{qv_z \tau(k) f_0}{k_{BL}^T} E \quad (1,9)$$

Dans le cas où le champ électrique est si grand que la relation (1,7) n'est plus valable, on peut chercher une solution sous la forme d'un développement en série de polynômes de Legendre

$$f(\vec{k}) = \sum_{n=0}^{\infty} S_n(k) P_n(\cos \theta) \quad (1,10)$$

où $S_n(k)$ ne dépend que du module du vecteur d'onde et où $P_n(\cos \theta)$ est le polynôme de Legendre de degré n , θ représentant l'angle polaire entre le vecteur d'onde \vec{k} et la direction du champ électrique appliqué. Cette écriture nécessite que la fonction $f(\vec{k})$ possède une symétrie de révolution autour de la direction du champ électrique pour que l'angle azimutal de \vec{k} n'intervienne pas. Quand on transporte la forme (1,10) dans l'équation obtenue avec (1,2) et (1,6), en séparant les coefficients des polynômes de tous ordres et en utilisant les propriétés d'orthogonalité des $P_n(\cos \theta)$ pour éliminer la dépendance en θ , on aboutit dans le cas général à un système infini d'équations différentielles couplées reliant entre eux à chaque fois S_{n-1} , S_n et S_{n+1} [5, 6, 10]. L'écriture peut encore être simplifiée en disant que pour des mécanismes de collision approximativement élastiques et isotropes la distribution $f(\vec{k})$ est à peu près symétrique ($f(k,\theta) \approx f(k,-\theta)$), et par suite que le développement peut être arrêté au premier ordre, donnant ainsi

$$f(\vec{k}) = S_0(\epsilon) + S_1(\epsilon) \cos \theta \text{ si } \epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (1,11)$$

où $S_0(\epsilon)$ représente la partie symétrique de la distribution qui à cause de l'effet du champ électrique est différente de $f_0(\epsilon)$.

Ainsi, par exemple dans le cas du Germanium de type P, on a émis l'hypothèse que $S_0(\epsilon)$ peut être représentée par la combinaison de deux Maxwelliennes du type (1,4) dans laquelle T_L est remplacée par deux températures T_e dites électroniques, plus grandes que T_L (ne représentant en fait que l'énergie moyenne des porteurs) ; la limite du domaine d'application de chaque maxwellienne est située à l'énergie du phonon optique intravallée impliqué dans les chocs [7].

Dans le cas d'une bande d'énergie ellipsoïdale, il est toujours possible de se ramener au modèle simple de (1,11), en faisant le changement de coordonnées ramenant à une bande sphérique [8], le champ électrique \vec{E} est alors transformé en un champ électrique équivalent \vec{E}^* par le même changement de coordonnées qui transforme la vallée ellipsoïdale en vallée sphérique. Il est par ailleurs avantageux d'écrire (1,11) sous la forme équivalente suivante [3, 9]

$$f(\vec{k}) = S_0(\epsilon) + k \cos \theta g(\epsilon) \quad (1,12)$$

Au lieu de chercher $f(\vec{k})$ sous forme d'un développement limité qui la plupart du temps est difficilement justifiable, on peut essayer de poser à priori une forme de distribution qui rende compte à la fois de l'effet de dérive des porteurs dans l'espace des \vec{k} et de l'augmentation de leur énergie moyenne au-dessus de l'énergie de réseau. La fonction suivante dite distribution de Maxwell déplacée est souvent employée

$$f(\vec{k}) = A \exp \left\{ - \frac{\hbar^2 (\vec{k} - \vec{k}_d)^2}{2m^* k_B T_e} \right\} \quad (1,13)$$

où A ne dépend pas de \vec{k} , et où $\vec{k}_d = \frac{m^* \vec{v}_d}{\hbar}$, T_e étant de température électronique, \vec{v}_d la vitesse de dérive due au champ appliqué et m^* la masse effective pouvant dépendre éventuellement de l'énergie par

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 \epsilon}{\partial \vec{k}^2}}$$

Cette hypothèse a été émise initialement pour des matériaux où la concentration en porteurs est telle que l'interaction porteur-porteur prédomine sur tous les autres types d'interaction, porteur-réseau en particulier [11, 12].

L'hypothèse d'une distribution telle que (1,13) présente un intérêt certain car si l'on transforme l'équation de Boltzmann en ces deux équations qui lient les taux de perte d'énergie et de moment des porteurs par les collisions aux taux de gain par le champ électrique ainsi qu'il est montré dans [4] et si l'on moyenne celles-ci grâce à (1,13), on aboutit à un système de deux équations non linéaires où les seules inconnues sont v_d et T_e , E jouant le rôle de paramètre. Ces deux équations peuvent être aisément résolues sur un calculateur de table et l'intérêt de (1,13) est de mener à une résolution quasi-analytique du problème. Cette technique peut aussi être appliquée à la détermination des régimes transitoires [13] où v_d et T_e sont variables dans le temps. Les deux équations qui sont à résoudre contiennent alors en plus le temps comme paramètre [14]. De la même manière on peut imaginer de tenir compte d'une évolution spatiale de (13), voire même de résoudre avec cette distribution un composant réel au prix d'une certaine complication [15] où le champ varierait à la fois dans le temps et dans l'espace. Il faut toutefois ne pas oublier que la forme de (1,13) est d'autant plus rigoureuse que les interactions entre porteurs sont prédominantes et qu'elle s'applique d'autant mieux que la concentration en porteurs est élevée.

A la température ambiante en pratique la concentration doit être plus grande que 10^{16} cm^{-3} ce qui est rarement réalisé dans la zone active des composants courants.

Il ressort finalement de tout ce qui vient d'être dit plus haut qu'un traitement analytique n'est possible que dans certains cas particuliers et que les hypothèses faites pour rendre le problème soluble restreignent parfois considérablement le domaine de validité des solutions trouvées. Une étude plus complète nécessitant moins d'hypothèses restrictives peut être entreprise quand on dispose de moyens de calculs suffisants pour résoudre numériquement l'équation de Boltzmann. Il en résulte alors que la qualité des résultats acquis dépend plus des possibilités des calculateurs utilisés que des restrictions physiques. Les méthodes numériques sont essentiellement de deux types : les techniques itératives et les techniques de Monte Carlo. Dans les applications de ces techniques effectuées jusqu'à présent les seules hypothèses restrictives

nécessaires sont les suivantes :

- en premier lieu, les collisions subies par les porteurs quelque-
soit leur type sont instantanées et s'effectuent sur place dans le cristal

- en second lieu, la présence du champ ne modifie pas la façon
dont s'effectue les chocs, en d'autres termes, $S(\vec{k}', \vec{k})$ est indépendant de la
force électrique appliquée et ne dépend que de l'état du porteur à l'instant
considéré. Il en résulte que les collisions d'une part et les accélérations
ou décélérations dues au champ électrique d'autre part, sont des événements
indépendants et parfaitement délimités dans le temps et dans l'espace (les
hypothèses étaient déjà implicitement admises dans les autres méthodes).

Dans la méthode itérative, l'équation de Boltzmann est transformée en
une expression intégrale de $f(\vec{k}, t)$ [16]

$$f(\vec{k}, t) = \int_0^{\infty} ds \int d^3k' f(\vec{k}', t-s) S(\vec{k}', \vec{k} - \frac{q\vec{E}s}{\hbar}) \exp \left\{ - \int_0^s \lambda(\vec{k} - \frac{q\vec{E}y}{\hbar}) dy \right\} \quad (1,14)$$

Une simplification considérable de (1,14) peut être obtenue en superposant
aux mécanismes de collisions existant normalement un nouveau mécanisme qui ne
change pas l'état du système lorsqu'il intervient (c'est la collision fictive
[17]). La densité de probabilité de choc d'une telle collision peut avoir la
forme

$$S_0(\vec{k}, \vec{k}') = \lambda_0(\vec{k}) \delta(\vec{k} - \vec{k}') \quad (1,15)$$

où δ est le symbole de Kronecker. S_0 reliant \vec{k} seulement avec lui-même ne modi-
fie par la trajectoire de la particule, et $\lambda_0(\vec{k})$ peut donc être quelconque.

Choisissant

$$\lambda_0(\vec{k}) = \Gamma - \lambda(\vec{k}) \quad (1,16)$$

où Γ est une constante, on transforme (1,14) sous la forme

$$f(\vec{k}, t) = \int_0^\infty ds \int d^3k' f(\vec{k}', t-s) S^*(\vec{k}', \vec{k} - \frac{q\vec{E}s}{\hbar}) e^{-\Gamma s} \quad (1,17)$$

avec
$$S^*(\vec{k}', \vec{k}) = S(\vec{k}', \vec{k}) + S_0(\vec{k}', \vec{k}) \quad (1,18)$$

Chaque itération procède en deux temps. Une fonction $g_n(\vec{k}, t)$ est calculée à partir de la $n^{\text{ième}}$ évaluation de la fonction f cherchée, selon la relation

$$g_n(\vec{k}, t) = \int d^3k' f_n(\vec{k}', t) S^*(\vec{k}', \vec{k}) \quad (1,19)$$

qui donne alors la $(n+1)^{\text{ième}}$ itération de (1,17)

$$f_{n+1}(\vec{k}, t) = \int_0^\infty ds g_n(\vec{k} - \frac{q\vec{E}s}{A}, t-s) e^{-\Gamma s} \quad (1,20)$$

Après un nombre suffisant d'itérations, les distributions calculées convergent vers une limite $f(\vec{k})$ ne dépendant plus du temps et qui est indépendante de la fonction choisie au départ des itérations. La convergence est d'autant plus rapide que Γ est choisi petit avec la condition que $\lambda_0(\vec{k})$ soit toujours positif ou nul. Cette méthode a été également appliquée au cas de champs électriques variables dans le temps [18].

Une autre méthode itérative repose sur la détermination de la fonction de distribution sous forme d'un développement en série entière par rapport au temps [19]. Le système est soumis à un échelon de champ électrique constant et uniforme à $t \geq 0$. A $t < 0$, le système est en équilibre à champ nul avec $f(\vec{k}, t) \equiv f_0(\epsilon)$. On cherche la nouvelle distribution sous la forme

$$f(\vec{k}, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\partial^n f}{\partial t^n} \right)_{t=0} \frac{t^n}{n!} \quad (1,21)$$

à un instant t ultérieur à 0. Comme on ne peut en fait calculer qu'un nombre limité de dérivées de f , on doit procéder par petits pas Δt successifs, et le processus représenté dans (1,21) est répété à $\Delta t, 2\Delta t, \dots, N\Delta t$ jusqu'à ce que la distribution n'évolue plus. Les dérivées successives nécessaires sont calculées simplement en dérivant terme à terme les deux membres de l'équation de Boltzmann homogène. La méthode est applicable pour toute variation temporelle de champ électrique, le premier pas d'itération à choisir étant celui où le système à l'équilibre est représenté par $f_0(\epsilon)$ qui est la forme la plus simple possible.

* *
*

II. PRINCIPE ET MISE EN OEUVRE DE LA METHODE DE MONTE CARLO A L'ETUDE DE LA DYNAMIQUE ELECTRONIQUE

II.1 PRINCIPE DE LA METHODE.

L'idée de base de la méthode consiste en la simulation du mouvement dans le temps d'un ou plusieurs porteurs par la génération de l'histoire dans l'espace des vecteurs d'onde des points représentatifs de ces porteurs, tenant compte de

- 1) l'accélération due aux forces appliquées aux porteurs (champs électriques dans la majorité des cas)

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{q\vec{E}}{\hbar} \quad (1,22)$$

la connaissance de la bande d'énergie $\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ (cas du modèle simple) permettant de calculer à chaque instant l'énergie du porteur.

- 2) des collisions subies par ces porteurs induisant des transitions brutales entre états.

Connaissant l'histoire dans l'espace des vecteurs d'onde \vec{k} , il est possible de se replacer dans l'espace géométrique réel quand on connaît la structure de bande d'énergie $\varepsilon(\vec{k})$ permettant de calculer la vitesse du ou des porteurs à chaque instant, (relation (1,3)) laquelle, par intégration, donne la position du porteur au cours du temps. Il est possible d'accéder à toutes les grandeurs

moyennes : énergie moyenne, vitesse de dérive, coefficients de diffusion ...
Celles-ci peuvent être déduites de deux façons différentes : soit par l'observation d'un grand nombre de particules permettant le calcul de moyennes d'ensemble (cette définition est utile quand les conditions d'étude changent dans le temps), soit par l'observation d'un seul électron pendant une durée suffisamment grande. Le principe d'ergodisme stipule que pour un système en état stationnaire les deux manières de calculer les moyennes doivent aboutir aux mêmes résultats. L'histoire de chaque électron sera constituée par une suite de vols libres effectués sous l'influence de la force externe, séparés par des chocs sur les différents obstacles présentés par le milieu où évolue le porteur qui sont considérés comme des collisions de durée nulle faisant passer instantanément le vecteur d'onde représentatif du porteur d'une valeur k à une autre valeur k' . Le propre des méthodes de Monte Carlo est de pouvoir obtenir à la fois la durée de vol libre et les états du porteur après les chocs en utilisant un procédé basé d'une part sur le tirage de nombres aléatoires et d'autre part sur la connaissance des densités de probabilité correspondant aux interactions auxquelles est soumis le porteur.

Un des principaux avantages des méthodes de Monte Carlo est leur souplesse d'utilisation. Une fois le processus élémentaire de simulation mis au point les conditions d'utilisation de celui-ci peuvent être pratiquement variées à l'infini. L'application la plus simple que l'on puisse imaginer est l'étude de la dynamique électronique dans un matériau supposé infini et homogène soumis à des conditions stationnaires en fonction du temps. La mise en oeuvre de la méthode ne peut guère être limitée que par l'incertitude où l'on est concernant les caractéristiques du matériau étudié, mais ceci est commun à tout mode d'étude quelque'il soit, Monte Carlo ou autre. La situation peut se compliquer singulièrement quand le matériau étudié est inhomogène ou lorsque le champ appliqué n'est plus constant dans le temps ni uniforme dans l'espace. Dans le cas où les concepts habituels de bande d'énergie, de collisions instantanées restent valides, la méthode de Monte Carlo montre sa supériorité lorsque les phénomènes se compliquent quelque peu, parce qu'elle permet de tenir compte facilement des non stationarités spatiales ou temporelles que l'on veut étudier. Nous pensons que l'on peut insister sur le fait que cette méthode est actuellement la seule susceptible d'étudier les manifestations des porteurs chauds quels qu' soient les régimes de champ appliqué en effet de volume ou dans des composants. Elle tient compte de façon complète des formes de bandes d'énergie même complexes (c'est le

cas des alliages ternaires et quaternaires) et de tous les détails de la dynamique microscopique avec des hypothèses simplificatrices réduites au minimum.

En contre partie, la méthode de Monte Carlo est entachée d'erreur statistique. Comme pour tout phénomène stochastique on peut améliorer la précision en augmentant la durée d'observation t . Malheureusement l'amélioration de l'erreur n'évolue qu'en $1/\sqrt{t}$, et ceci peut être une gêne importante quand on étudie des comportements fins : l'estimation d'une mobilité différentielle négative ou d'une vitesse pic en fonction de certains paramètres (température ou pureté du matériau, par exemple) nécessite un soin particulier en l'absence d'une relation analytique. Il en découle que cette méthode nécessite parfois des moyens de calcul importants.

Une autre propriété caractéristique jouant en défaveur de la méthode de Monte Carlo est que celle-ci fonctionne moins bien en champ faible qu'en champ fort au moins quand on s'intéresse à la vitesse de dérive. Il est moins facile de calculer une mobilité ohmique pour laquelle le champ doit être faible qu'une vitesse de dérive limite pour laquelle le champ doit être fort. En effet la précision obtenue sur la valeur de \bar{v} dépend directement du rapport $\sqrt{\Delta v^2}/\bar{v}$ qui tend vers l'infini quand le champ tend vers 0. Une bonne estimation de la moyenne exigera une longue intégration et par conséquent un allongement du temps calcul.

Dans nombre de méthodes de résolution des phénomènes de transport de porteurs chauds, nous savons que la force externe est traitée comme une perturbation et que les résultats obtenus sont parfois plus dignes de confiance en champ faible qu'en champ fort. Un des intérêts de la méthode de Monte Carlo est que la force n'est jamais traitée comme une perturbation, levant ainsi une hypothèse restrictive.

La mise en oeuvre des principes rappelés plus haut a été effectuée de deux façons différentes. La plus ancienne est due à Kurosawa [23] et a été reprise et considérablement améliorée par Rees, Fawcett et Price [17, 20, 24, 25]. Elle a, par la suite, connu un grand succès et a été appliquée à de nombreux matériaux. Nous reviendrons plus loin en détail sur cette méthode. Signalons seulement pour l'instant qu'elle consiste à calculer suivant une distribution bien particulière les durées "exactes" s'écoulant entre deux collisions successives, situant ainsi les états du porteur au cours du temps. C'est à partir d'une histoire irrégulièrement échantillonnée que les paramètres de transport recherchés doivent être appro-

chés par le calcul des moyennes adéquates.

La méthode que nous avons développée dans notre laboratoire est sensiblement différente en ce sens que l'état du porteur est examiné régulièrement dans le temps permettant ainsi d'obtenir une histoire régulièrement échantillonnée avec un pas temporel δt choisi suffisamment petit. Le choix du pas δt est un des problèmes majeurs dans cette deuxième méthode. Nous nous étendrons plus loin sur cette question. Dans cette méthode, le porteur subit successivement des phases d'accélération libre de durée δt au bout desquelles la probabilité de collision est testée à l'aide du tirage d'un nombre aléatoire. Il en résulte que l'on obtiendra ainsi une décomposition des durées de libres parcours en un nombre entier de fois le pas δt choisi.

Le but de ce chapitre est non seulement de décrire ces méthodes, mais il est aussi de mettre en lumière les aspects particuliers à chacune d'elles et d'en analyser les avantages et les inconvénients. Néanmoins avant de poursuivre, il semble nécessaire de rappeler un certain nombre de concepts qui seront utiles à l'élaboration de ces méthodes : probabilités de vol libre, de collision et de réorientation durant une collision.

II.2 LES DIFFERENTS ELEMENTS DE LA SIMULATION.

Rappelons que nous avons défini par $S_q(\vec{k}, \vec{k}')$ la densité de probabilité par unité de temps qu'un porteur de vecteur d'onde \vec{k} passe de façon instantané dans un autre état \vec{k}' par l'intermédiaire d'une collision de type q . S'il existe N processus différents de collision, q sera compris entre 1 et N . L'expression exacte de ces différentes probabilités est donnée par la physique du solide. Nous détaillerons ce point en présentant les paramètres particuliers au silicium type N en fin de ce chapitre et au début du chapitre 2.

Pour l'instant, nous voulons déterminer la probabilité qu'un porteur effectue un vol libre de durée quelconque Δt sachant qu'il est soumis à un champ électrique \vec{E} et à N processus de collision de types quelconques. La relation entre champ et vecteur d'onde est donnée par le principe de la dynamique (relation (1,22)) et nous noterons par $\lambda(\vec{k})$ la probabilité par unité de temps que

le porteur ayant le vecteur d'onde \vec{k} subisse une collision de type quelconque l'amenant dans un autre état \vec{k}' différent de \vec{k} . On a évidemment par définition

$$\lambda(\vec{k}) = \int d^3k' \sum_{q=1, \dots, N} S_q(\vec{k}, \vec{k}') \quad (1,23)$$

Supposons qu'à l'instant $t = 0$, le porteur est dans l'état décrit par \vec{k} . La probabilité $P(t)$ que le porteur effectue un vol libre de durée supérieure à t est le produit de deux probabilités statistiquement indépendantes. L'une est la probabilité que le porteur effectue un vol libre de durée supérieure à $t - dt$, l'autre qu'il ne subisse pas de collision entre $t - dt$ et t . Cette dernière vaut $1 - \lambda(\vec{k}(t-dt))dt$. On a donc

$$P(t) = P(t-dt)[1 - \lambda[\vec{k}(t-dt)]dt] \quad (1,24)$$

Faisant tendre dt vers 0 on trouve

$$\frac{dP}{dt} = - \lambda[\vec{k}(t)]P(t) \quad (1,25)$$

ce qui une fois intégré donne

$$P(t) = \exp \left\{ - \int_0^t \lambda[\vec{k}(t')] dt' \right\} \quad (1,26)$$

Dans le cas où le champ appliqué est constant et uniforme nous avons (figure 1.1)

$$\vec{k}(t+\Delta t) = \vec{k}(t) + \frac{q\vec{E}\Delta t}{\hbar} \quad \text{d'après (1,22)}$$

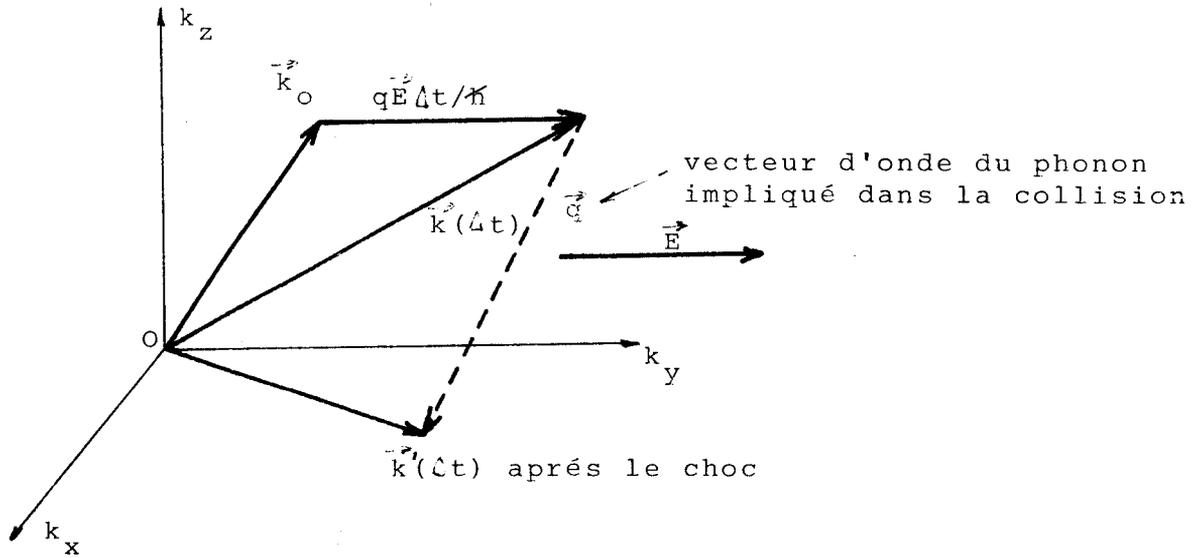


FIGURE 1,1 Evolution du vecteur d'onde sous l'influence du champ électrique. En champ statique, la contribution du champ électrique est proportionnelle à la durée du libre parcours Δt .

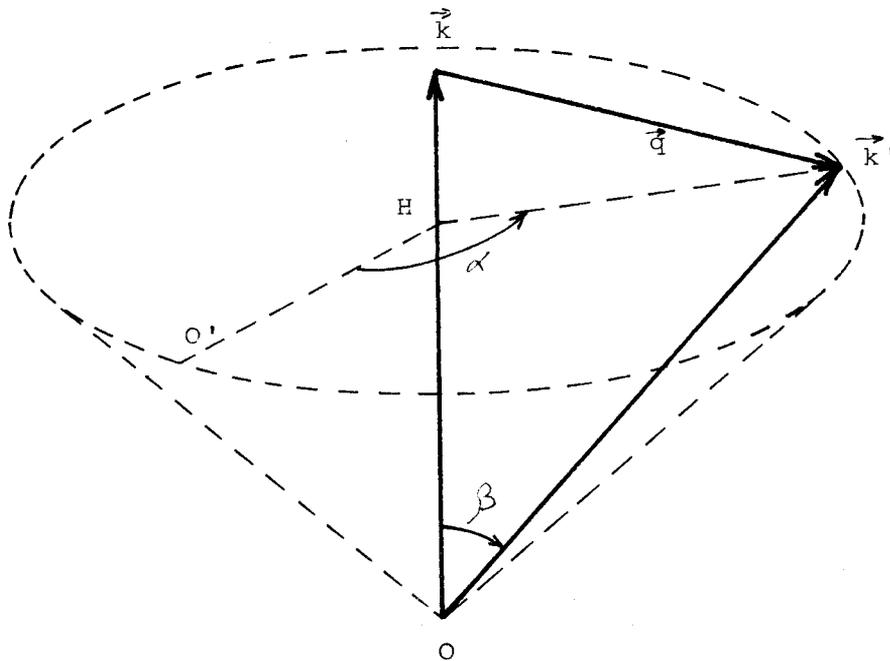


FIGURE 1,2 Evolution du vecteur d'onde au moment de la collision. β spécifie l'angle entre les directions des vecteurs \vec{k} et \vec{k}' . Le lieu de \vec{k}' est un cône de demi-angle au sommet β , le lieu de l'extrémité de \vec{k} un cercle ayant pour axe la direction de \vec{k} . L'angle azimutal α est aléatoire et à distribution uniforme entre 0 et 2π .



On peut aussi remarquer que si la probabilité $\lambda[\vec{k}(t)]$ ne dépend pas ou peu du vecteur $\vec{k}(t)$, la distribution des temps de libre parcours est une distribution de Poisson. Dans la suite, la probabilité $\lambda[\vec{k}(t)]$ dépendra toujours fortement de \vec{k} et $P(t)$ présentera des écarts plus ou moins importants par rapport à une loi de Poisson.

Déterminer la durée des libres parcours effectués par le porteur n'est pas tout ; encore faut-il spécifier ce qu'il devient après le choc. La quantité $S_q(\vec{k}, \vec{k}')$ nous renseigne sur cela. Elle contient l'information sur les positions du vecteur d'onde avant et après le choc, celui-ci s'effectuant de telle sorte qu'il vérifie les principes de conservation de l'énergie et du vecteur d'onde (ou moment)

$$\epsilon(\vec{k}') = \epsilon(\vec{k}) \pm \hbar \omega_q \quad (1,27a)$$

$$\vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q} \quad (1,27b)$$

où $\hbar \omega_q$ et \vec{q} sont l'énergie et le vecteur d'onde du phonon impliqué dans la collision, le signe + indiquant qu'il y a eu absorption du phonon, le signe - qu'il y a eu émission. On repère généralement la position du nouveau vecteur \vec{k}' par rapport à celle de \vec{k} par l'angle β dont tourne la direction du vecteur d'onde durant la collision. $S_q(\vec{k}, \vec{k}')$ donne alors la densité de probabilité de cet angle β ($0 < \beta < \Pi$) qui peut être aussi une fonction de l'énergie

$$P(\beta) = A.F(\epsilon(\vec{k}'), \beta) \sin \beta \quad (1,28)$$

Comme $\epsilon(\vec{k}')$ est connue d'après (1,27a), cette probabilité $P(\beta)$ peut être normalisée sans difficulté.

La position azimutale de \vec{k}' autour de \vec{k} est généralement aléatoire entre 0 et 2π , l'origine des angles pouvant alors être prise de façon quelconque (figure 1.2)

La relation de dispersion énergie-vecteur d'onde étant connue, l'évolution de la vitesse du porteur dans l'espace réel est donnée par

$$v(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \quad (1,29)$$

et l'intégration dans le temps de celle-ci permet de connaître la position du porteur dans le cristal à chaque instant.

II.3 EVALUATION DES FONCTIONS DE DISTRIBUTION.

Nous avons vu précédemment que parmi les quantités fondamentales qui conditionnent l'évolution des porteurs figurent la fonction de distribution du moment $f(\vec{k})$ et la densité d'énergie $n(\epsilon)$ donnant le nombre de porteurs dont l'énergie vaut ϵ à $d\epsilon$ près. En effet ces fonctions qui peuvent dépendre aussi de l'espace et du temps permettent de calculer toutes les quantités moyennes qui caractérisent le régime que l'on étudie. Il faut cependant mentionner dès maintenant que tout en étant capable de déterminer ces distributions les méthodes de Monte Carlo permettent le calcul direct des valeurs moyennes sans avoir à calculer au préalable ces distributions. Néanmoins, il peut être utile de les connaître ne serait-ce que pour éclaircir l'interprétation de certains résultats.

Si l'on considère un matériau à bande de conduction multiple, comme le silicium, le GaAs ou l'InP, les distributions peuvent être différentes pour chaque vallée. Ceci résulte du fait que les porteurs ne subissent pas les mêmes interactions selon la vallée où ils se trouvent et aussi du fait qu'ils ressentent le champ électrique différemment à cause des masses effectives qui diffèrent d'une bande à l'autre. On doit dans ce cas considérer des histogrammes particuliers à chaque type de vallée. Ayant divisé l'espace réciproque en cellules élémentaires de volumes égaux $\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z$ chacune centrée sur un point $\{k_x, k_y, k_z\}$, la valeur de la fonction de distribution $f(k_x, k_y, k_z)$ sera proportionnelle au temps total que le porteur aura séjourné dans le volume élémentaire autour du point considéré. Cette distribution est normée automatiquement quand on la divise par la durée totale de simulation.

D'autre part, la population moyenne d'une vallée particulière sera définie comme proportionnelle au temps total passé par le porteur dans la vallée considérée.

On peut de la même façon définir soit globalement soit dans chaque vallée la densité d'énergie $n(\epsilon)$ en discrétisant l'échelle des énergies avec un pas $\Delta\epsilon$ et en comptant le temps de séjour de l'énergie du porteur autour de ϵ à $\Delta\epsilon$ près.

Ces définitions ne sont toutefois valables que si le système observé est stationnaire. Quand le système est non-stationnaire, c'est-à-dire quand les distributions dépendent explicitement du temps, les définitions précédentes doivent s'appliquer non plus à un seul, mais à toute une population de porteurs équivalents que l'on observe simultanément et les distributions seront dans ce cas proportionnelles au nombre de porteurs présents à un instant donné t , dans le volume $\Delta^3 k$ centré sur \vec{k} , dans l'intervalle $\Delta\epsilon$ centré sur ϵ , dans la vallée considérée. La normalisation se fait alors par rapport au nombre total de porteurs. L'extension de ces définitions à des distributions qui dépendraient aussi de la position dans l'espace réel est immédiate.

II.4 METHODE DE MONTE CARLO UTILISANT LES COLLISIONS FICTIVES.

Considérons un porteur qui à l'instant t vient de subir une collision l'ayant amené dans l'état $\vec{k}(t)$. Nous savons que la probabilité que ce porteur effectue un vol libre de durée Δt puis subisse un choc durant dt vaut

$$p(\Delta t)dt = \lambda[\vec{k}(t+\Delta t)] \exp \left\{ - \int_0^{\Delta t} \lambda[\vec{k}(t+u)]du \right\} dt \quad (1,30)$$

En effet les événements de vol libre et de choc sont supposés être statistiquement indépendants. C'est la probabilité (1,30) qui donnera les durées de vol libre qui seront effectivement suivies d'un choc. La procédure adoptée initialement par Kurosawa [23] pour déterminer les temps de libre parcours était de tirer des nombres r à distribution uniforme entre 0 et 1 et de résoudre l'équation intégrale suivante

$$r = \int_0^{\Delta t} p(\Delta t) d\Delta t \quad (1,31)$$

Malheureusement dans le cas général l'expression de (1,30) est assez complexe et l'équation (1,31) n'est pas intégrable analytiquement. Pour simplifier l'expression de (1,30), Rees [17] a suggéré d'ajouter à l'ensemble des mécanismes de collisions entrant en jeu un processus d'interaction qui ne modifie pas l'état du système lorsqu'on le fait intervenir : c'est ce qu'on appelle le processus de collision fictive dont la probabilité par unité de temps vaut

$$d^3k' S_0(\vec{k}, \vec{k}') = \lambda_0(\vec{k}) \delta(\vec{k} - \vec{k}') d^3k' \quad (1,32)$$

Cette probabilité est non nulle seulement si $\vec{k} = \vec{k}'$. On voit donc que si l'on ajoute cette probabilité aux autres $S_q(\vec{k}, \vec{k}')$ elle ne modifiera en rien la trajectoire de l'électron. En conséquence de quoi la fonction $\lambda_o(\vec{k})$ peut être choisie de façon tout à fait arbitraire. Dans la méthode de Monte Carlo habituelle on choisit la fonction $\lambda_o(\vec{k})$ de sorte que

$$\lambda_o(\vec{k}) + \lambda(\vec{k}) = \Gamma = \text{constante indépendante de } \vec{k},$$

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

$$p(\Delta t) = \Gamma e^{-\Gamma \Delta t} \quad (1,33)$$

et si r est un nombre aléatoire à distribution uniforme entre 0 et 1 on aura d'après (1,31)

$$\Delta t = -\frac{1}{\Gamma} \text{Lnr} \quad (1,34)$$

Il faut cependant que Γ soit au moins égal au plus grand des $\lambda(\vec{k})$ susceptibles d'être atteints, de telle manière à éviter des valeurs négatives de $\lambda_o(\vec{k})$.

Etant donné que pour utiliser la relation (1,33) il faut se fixer à l'avance la valeur de Γ , il est nécessaire de connaître à priori la valeur maximum que prendra la quantité $\lambda(\vec{k})$ dans la simulation envisagée. La valeur de Γ ne peut donc être donnée que par l'expérience et la vérification que $\lambda_o(\vec{k}) \geq 0$ quelque soit \vec{k} n'est faite qu'à posteriori.

Une fois la durée de vol libre Δt déterminée, on calcule l'ensemble des probabilités des interactions susceptibles de se produire à l'instant considéré.

Comme l'on a nécessairement par définition

$$\sum_{q=0}^N \lambda_q(\vec{k}) = \Gamma \quad (1,35)$$

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

$$s < \sum_{q=0}^m \lambda_q(\vec{k}) = \lambda_0(\vec{k}) + \sum_{q=1}^m \lambda_q(\vec{k}) \quad (1,36)$$

pour tout m , de choisir le processus d'interaction qui interviendra effectivement. Il apparaît dans ce test que la collision choisie peut être une collision fictive dont la probabilité est λ_0 . Si c'est le cas, elle laissera le vecteur d'onde inchangé et le mouvement se poursuivra directement pour le Δt suivant. Dans le cas contraire, de nouveaux nombres aléatoires permettent de définir la position du vecteur d'onde après le choc suivant le mode décrit au paragraphe précédent. Il y a avantage dans cette procédure à choisir la valeur de Γ de manière à minimiser le nombre de collisions fictives puisque ces collisions ne jouent aucun rôle sur la trajectoire de l'électron dans l'espace des phases.

La suite des valeurs instantanées enregistrées durant la simulation par cette méthode constitue une histoire irrégulièrement échantillonnées dans le temps. De celle-ci il est toujours possible de tirer un échantillonnage régulier lorsque le champ de force appliqué est indépendant du temps. Lorsque ceci n'est pas le cas, le champ pouvant dépendre du temps ou de la position dans l'espace réel, la mise en oeuvre est un peu plus délicate. Nous reviendrons sur ce point plus loin lors de la comparaison critique de cette méthode avec celle que nous avons utilisée et qui est décrite au paragraphe suivant.

Il nous faut signaler que cette première méthode a été utilisée par de nombreux auteurs pour étudier un grand nombre de matériaux. En particulier, elle a été détaillée par Fawcett, Boardman et Swain [20, 27] dans l'étude du GaAs ; elle est décrite aussi sur un plan un peu plus général par AlberigiQuaranta, Jacoboni et Ottaviani en ce qui concerne l'étude des composés III-V et II-VI [26]. Plus récemment elle a aussi été utilisée en champ uniforme et statique pour l'étude du GaAs, en particulier pour tenir compte de la nouvelle bande

d'énergie à trois vallées donnée dans la littérature [28, 29]. Elle a été aussi utilisée sur d'autres matériaux moins courants que ceux qui servent aux applications hyperfréquences usuelles tels le CdTe [30] et le GaN [31]. Outre cela, il existe de nombreuses études sur les électrons et les trous dans le Germanium et le Silicium dues au groupe de Modène [32, 35] couplées de nombreuses mesures expérimentales de vitesse de dérive et de coefficients de diffusion de paquet [36, 38]. Parce que la méthode de Monte Carlo est particulièrement apte à prendre en compte des formes de bande d'énergie, même compliquées et des mécanismes de transfert arbitrairement nombreux, elle est utilisée actuellement dans l'étude de nombreux complexes ternaires et quaternaires, en particulier par Littlejohn [39, 41] et Ikona [42].

On peut citer nombre d'autres études utilisant la méthode de collisions fictives [43, 47] ; une bibliographie complète concernant les articles antérieurs à 1977 peut être trouvée dans un article de synthèse de Price [4]. Pour l'instant nous laissons de côté les applications aux composants réels semi-conducteurs. Nous reviendrons sur cette question dans le chapitre 3. De même, en ce qui concerne les coefficients de diffusion qui sont plus rarement donnés dans la littérature parce que plus difficiles à calculer, nous aurons l'occasion de citer à nouveau un certain nombre de ces travaux au cours du chapitre 2.

II.5 METHODE DE MONTE CARLO A DISCRETISATION REGULIERE.

Dans la méthode que nous présentons maintenant et que nous utilisons généralement au laboratoire depuis plusieurs années, nous renonçons à calculer directement un temps de libre parcours, qu'il soit fictif ou non. Nous décomposons l'histoire du porteur que nous voulons simuler en pas temporels réguliers de durée δt choisie de façon convenable. Les conditions de ce choix seront exposées un peu plus loin. A chaque pas δt , l'état du porteur est connu, car soumis à la force, son vecteur d'onde évolue suivant la relation (pour un champ statique)

$$\vec{k}(t+\delta t) = \vec{k}(t) + \frac{qE\delta t}{\hbar} \quad (1,37)$$

entre deux instants successifs. A chaque instant $t_n = n\delta t$, la probabilité $\lambda[\vec{k}(t_n)]$ que le porteur subisse une collision sera connue et pourra être utilisée pour déterminer par tirage au sort si une collision a effectivement lieu ou non à la fin du δt considéré. Dans ce but on comparera la quantité $\lambda[\vec{k}(t_n)]\delta t$ à un nombre r tiré au hasard dans une distribution uniforme entre 0 et 1. Ce nombre r sert aussi au choix de l'interaction qui aura effectivement lieu dans le cas où le test est positif (figure 1.3)

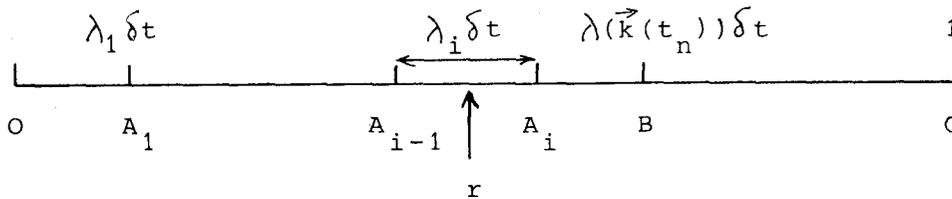


FIGURE 1,3 Le schéma indique la procédure de choix de l'interaction. Quand r se situe entre les points A_{i-1} et A_i le $i^{\text{ème}}$ type d'interaction a lieu. Le segment BC représente la probabilité qu'il ne se passe rien après le pas δt considéré.

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

La première constatation est que les libres parcours vécus par le porteur sont nécessairement constitués d'un nombre entier de pas δt . Plus le δt est petit plus la valeur approchée de la durée de libre parcours sera bonne. Il en résulte que δt doit être beaucoup plus petit que le plus court des libres parcours. Cette condition garantit également que la quantité $\lambda[\vec{k}(t_n)]\delta t$ ne peut jamais être plus grande que 1. De plus, le tirage de r se faisant selon une distribution uniforme, le fait de tirer la $i^{\text{ème}}$ interaction ne dépend pas de

l'ordre dans lequel on a sérié ces interactions, le résultat du test ne dépend que de la largeur $\lambda_{\vec{k}} \delta t$ du segment correspondant, soit en pratique de l'énergie du porteur au moment considéré*.

La figure 1.4 représente l'organigramme général de la procédure de Monte Carlo que nous venons de décrire appliquée à un matériau dont la bande d'énergie est du type

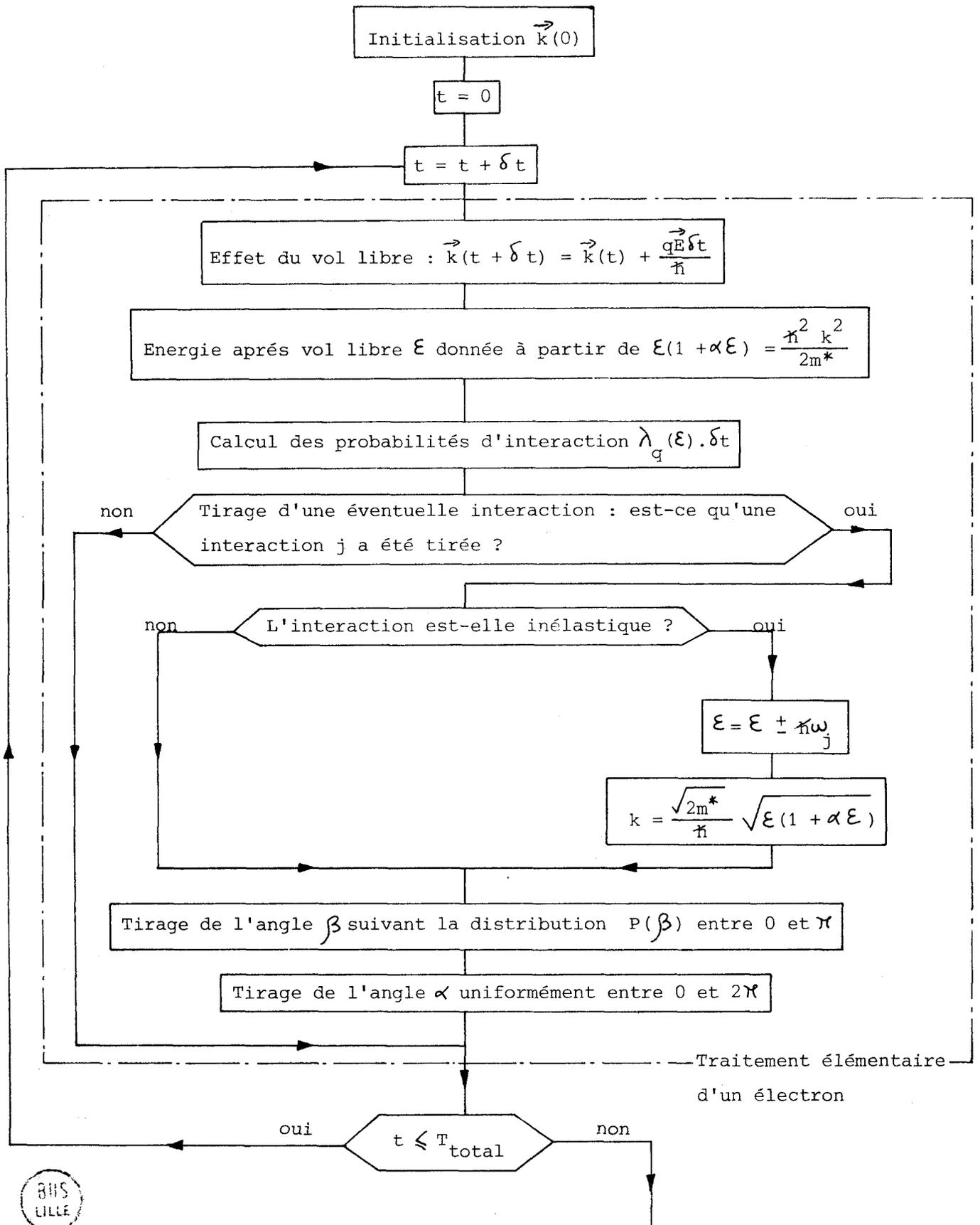
$$\epsilon(1 + \alpha\epsilon) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

Nous avons appliqué la méthode que nous venons d'exposer tout d'abord au silicium de type N [48]. Par la suite elle a été utilisée pour l'étude dans ce laboratoire des composés III-V : GaAs [49] et InP, puis ensuite aux composés ternaires et quaternaires de tous ordres [50].

Afin d'illustrer cette méthode, nous avons représenté sur la figure 1.5 un court fragment de la trajectoire d'un électron (cas du silicium N) au cours du temps dans l'espace réel et dans l'espace réciproque. Le champ de 50000 V/cm est appliqué ici suivant la direction <100> qui est aussi celle de l'axe \vec{Oy} . On remarque que le porteur a tendance à se déplacer vers la droite qui est la direction du champ électrique**. Les points anguleux de la trajectoire en projection dans le plan xOy représentent les collisions subies par le porteur.

* Dans ce rapport, il faut mentionner que la probabilité $\lambda(\vec{k})$ peut toujours s'exprimer en fonction de l'énergie du porteur seul même lorsque la bande d'énergie est anisotrope et non-parabolique.

** Dans les calculs nous avons toujours supposé la charge de l'électron comme positive.



BUS
LILLE

FIGURE 1,4 Organigramme général de notre procédure de Monte Carlo.

II.6 COMPARAISON DES DEUX METHODES. CHOIX DU PARAMETRE δt .

Pour mettre en évidence les avantages et les inconvénients de chacune des méthodes exposées dans ce chapitre, il faut envisager toutes les situations pouvant se présenter. Ces situations sont au nombre de trois et nous aurons l'occasion, durant les développements ultérieurs de ce travail, de les rencontrer toutes successivement.

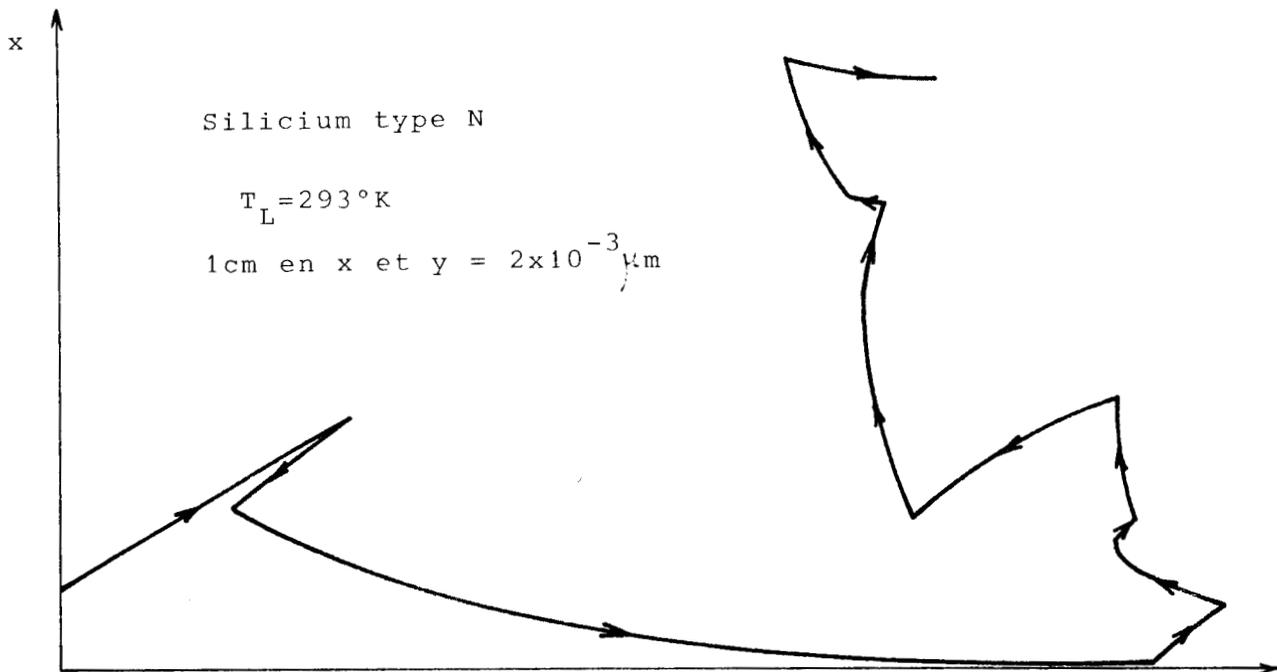
La première est l'application d'un champ de force uniforme et indépendant du temps, la seconde est l'application d'un champ uniforme spatialement et variable dans le temps, la troisième est l'application d'un champ non uniforme spatialement et dépendant du temps : ce cas serait celui d'un composant tenant compte du phénomène dynamique de charge d'espace. Nous tâcherons de montrer que les deux méthodes sont le plus souvent complémentaires et que l'utilisation de l'une ou l'autre dépend de l'application que l'on veut en faire.

II.6.1 Cas d'un champ uniforme et statique.

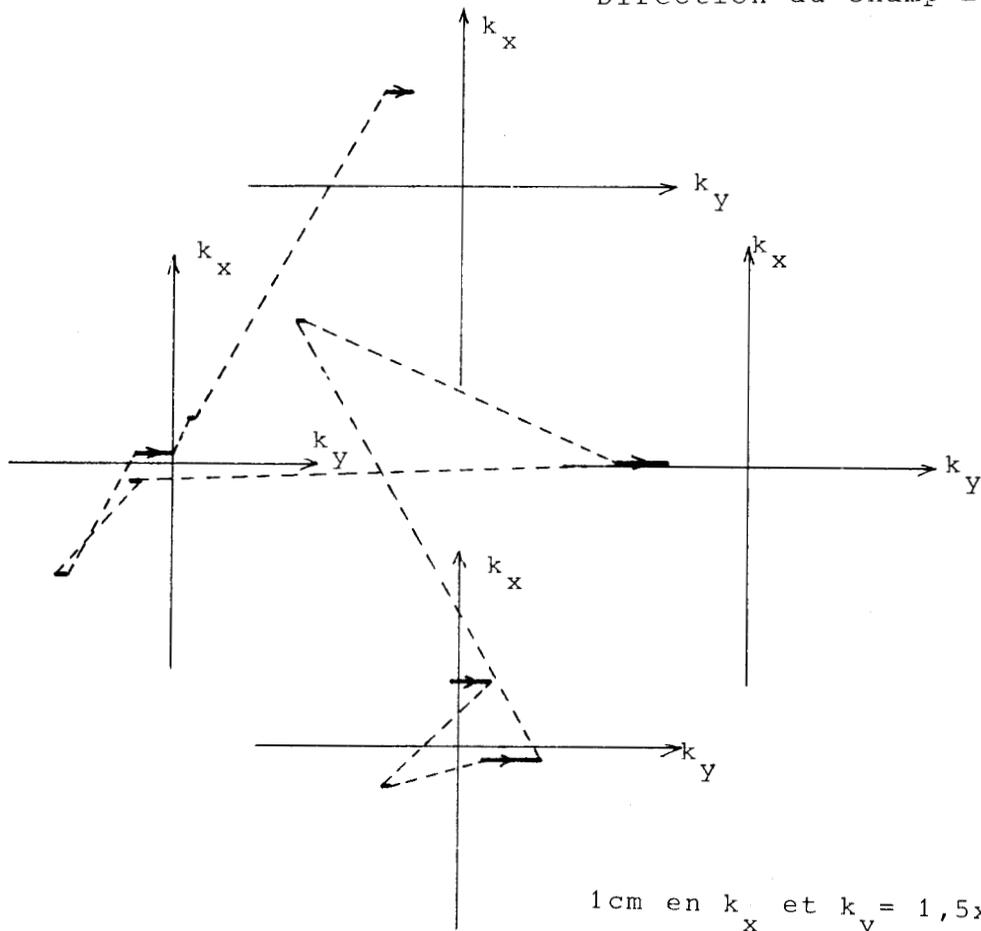
C'est le cas qui se présente lorsque l'on étudie les phénomènes stationnaires de transport en volume. La vitesse de dérive, calculée à l'aide de la première méthode, est obtenue directement de l'histoire irrégulière générée par celle-ci. Dans la seconde méthode la prise d'information est un échantillonnage régulier de la vitesse et la moyenne s'effectue directement.

Quand on veut calculer les coefficients de diffusion le problème est légèrement différent. Pour la diffusion par paquet on veut observer l'évolution temporelle de la quantité

$$\bar{z}^2 - \bar{z}^2 = F(t)$$



Direction du champ E: y



1cm en k_x et $k_y = 1,5 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$



FIGURE 1,5 Evolution du porteur simulé: dans l'espace réel (cadre du haut) et dans l'espace des vecteurs d'onde (cadre du bas).

où \bar{z} et \bar{z}^2 sont les moments de la distribution spatiale d'un paquet d'électrons. Comme ceux-ci doivent être observés au même instant, la méthode à collision fictive nécessite d'extraire de l'histoire réellement générée une sous-histoire régulière pour pouvoir calculer à chaque même instant la valeur de $F(t)$. Dans l'autre méthode la sous-histoire régulière est générée directement et le calcul de $F(t)$ est immédiat. Dans les conditions actuelles de champ électrique l'extraction d'une sous-histoire se fait sans difficulté.

II.6.2 Champ uniforme variable dans le temps.

Les conclusions peuvent être différentes selon que le champ est déterminé dans le temps ou selon qu'il est à variations aléatoires.

En effet dans la première méthode on examine pendant une certaine durée l'évolution du porteur pour pouvoir calculer la durée Δt d'un libre parcours. Cela implique que durant ce laps de temps l'évolution du champ électrique soit connue. Si cette évolution est connue d'avance cette opération ne pose pas de problème et le Δt une fois calculé on aura

$$\vec{k}(t + \Delta t) = \vec{k}(t) + \frac{q}{\hbar} \int_t^{t+\Delta t} E(t') dt'$$

la quantité $\lambda[\vec{k}(t+\Delta t)]$ étant elle aussi parfaitement connue le choix du mécanisme de collision pourra se faire sans difficulté. Par contre, si le champ appliqué est à variation aléatoire (cette situation est envisagée en plusieurs occasions dans ce travail) et même si le libre parcours Δt est calculable grâce à un choix correct de Γ , l'état du porteur à $t + \Delta t$ ne pourra plus être calculé et les probabilités de collision non plus. Ce cas se présente en particulier quand le champ considéré $\vec{E}(t)$ dépend de l'état de la ou des particules à l'instant considéré.

La méthode par discrétisation régulière du temps permet de lever facilement cette difficulté car nous considérerons que le champ agissant entre t et $t + \delta t$ sera précisément celui qui est calculé à l'instant t où l'état des particules est parfaitement connu. Dans la mesure où δt est suffisamment petit (en particulier devant Δt) l'erreur commise en négligeant la variation de $\vec{E}(t)$ durant t et $t + \delta t$ pourra être minimisée. Il est évident que le champ sera recalculé en tenant compte du nouvel état du système à $t + \delta t$ et qu'il agira entre $t + \delta t$ et $t + 2\delta t$. En raison des arguments que nous venons de présenter, nous pensons que la méthode de Monte Carlo par discrétisation régulière du temps est d'un emploi très souple. Elle nous dispense de connaître a priori la fonctionnelle qui doit exister entre le champ électrique à chaque instant et l'état global de l'ensemble des porteurs que l'on considère.

II.6.3 Champ non uniforme pouvant varier dans le temps.

C'est typiquement le cas qui se présente dans une simulation de composant où l'on tient compte des phénomènes de charge d'espace. Il est certain qu'il est plus simple de mettre en oeuvre un calcul portant sur une population de porteurs quand on regarde tous les individus au même instant ainsi que nous l'avons dit au paragraphe précédent. Nous en verrons un exemple au cours du chapitre 3 où le calcul de la fonction de corrélation d'une tension ou d'un courant de bruit peut être effectué immédiatement sans supplément de calcul dans la simulation elle-même. Néanmoins, si l'on ne s'intéresse qu'à des phénomènes statiques ou à variations lentes les deux méthodes pourraient être utilisées, chacune dans les cas où elle s'applique le plus facilement.

II.6.4 Choix du paramètre δt .

Le choix d'une valeur correcte de δt dans notre méthode est en quelque sorte l'équivalent du choix d'une valeur correcte de Γ dans l'autre, puisque pour l'une comme pour l'autre les résultats obtenus doivent être indépendants de δt ou de Γ . Nous avons dit précédemment que δt doit être plus petit que le

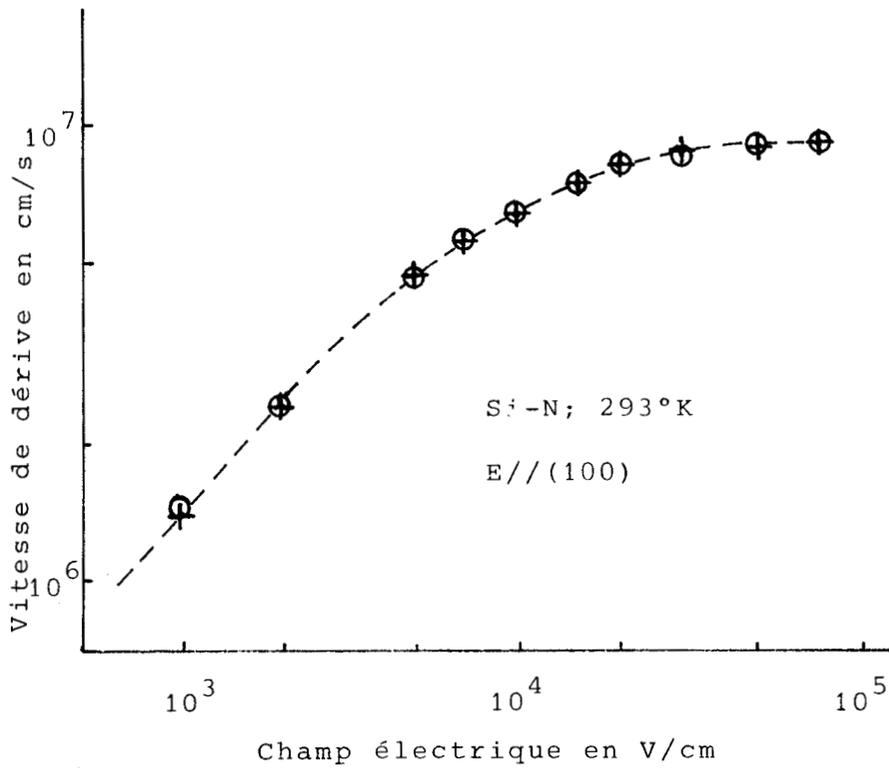


FIGURE 1,6 Influence du pas δt sur la vitesse de dérive.

Les croix sont obtenues avec les δt standard. Les cercles sont obtenus avec des δt dix fois plus petits.

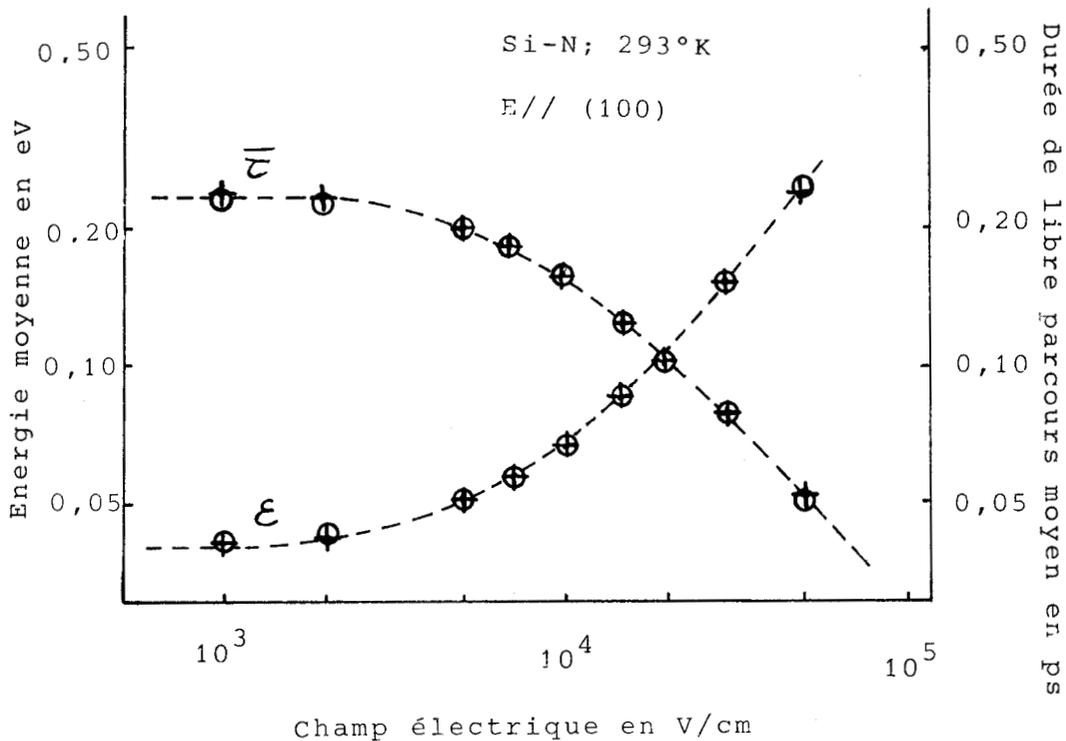


FIGURE 1,7 Influence du pas δt sur l'énergie moyenne des porteurs et le temps de libre parcours moyen.

Les croix sont obtenues avec les δt standard. Les cercles sont obtenus avec des δt dix fois plus petits.



plus petit des libres parcours. Si cette condition est vérifiée, on aura l'assurance que pour la plus forte valeur de $\lambda(\vec{k})$ la probabilité de choc $\lambda(\vec{k})\delta t$ sera beaucoup plus petite que 1. La valeur maximum atteinte par $\lambda(\vec{k})$ au cours d'une simulation donne un ordre de grandeur du plus petit des libres parcours et par conséquent une valeur optimale de δt . En général nous avons fait en sorte que la valeur maximum atteinte par $\lambda(\vec{k})\delta t$ au cours d'une simulation soit $\lambda_{\max}\delta t$, ne dépasse pas $\frac{1}{2}$ à quelques pour cent près. Typiquement il en résulte que les valeurs de δt adoptées sont comprises entre $5 \cdot 10^{-15}$ sec et $2 \cdot 10^{-14}$ sec dans la plupart des cas. Afin d'illustrer ce point nous comparons sur la figure 16 les résultats obtenus en ce qui concerne la vitesse de dérive dans le silicium N pur calculée avec les δt standard déjà donnés et avec des δt dix fois plus petits. On remarquera le bon accord existant entre les deux caractéristiques ainsi obtenues. Il est évident que dans le second cas le nombre d'échantillonnages était multiplié par 10 de façon à intégrer la valeur moyenne sur le même laps de temps, c'est-à-dire sur une statistique équivalente. Dans la figure 17 nous montrons la courbe correspondante pour l'énergie moyenne et pour le temps de libre parcours moyen. Ici encore on remarque le bon accord entre les deux types de résultats. Dans les conditions où nous avons calculé ces courbes on ne note aucun écart systématique qui montrerait que le choix fait sur les valeurs de δt deviendrait discutable à partir d'une certaine valeur de champ électrique.

Dans la figure 1.8 nous reportons les fréquences de collisions intervallée (N_{iv}) toutes fortement inélastiques et les fréquences de collision intervallée (N_{ac}) qui dans le cas présent sont les collisions sur phonons acoustiques de grande longueur d'ondes considérées comme élastiques. On constatera que les fréquences de collision ne sont pratiquement pas affectées par la valeur du δt choisi. Il apparaît donc de façon évidente d'après l'expérience qu'il y a avantage à travailler avec des δt suffisamment grands afin de minimiser dans la mesure du possible les pertes de temps calcul. En effet un pas δt choisi très petit augmente d'autant la probabilité $1 - \lambda(\vec{k})\delta t$ que le porteur ne subisse pas de collision à l'instant considéré et par voie de conséquence augmente le nombre de calculs inutiles des valeurs des différentes probabilités $\lambda_q(\vec{k})\delta t$.

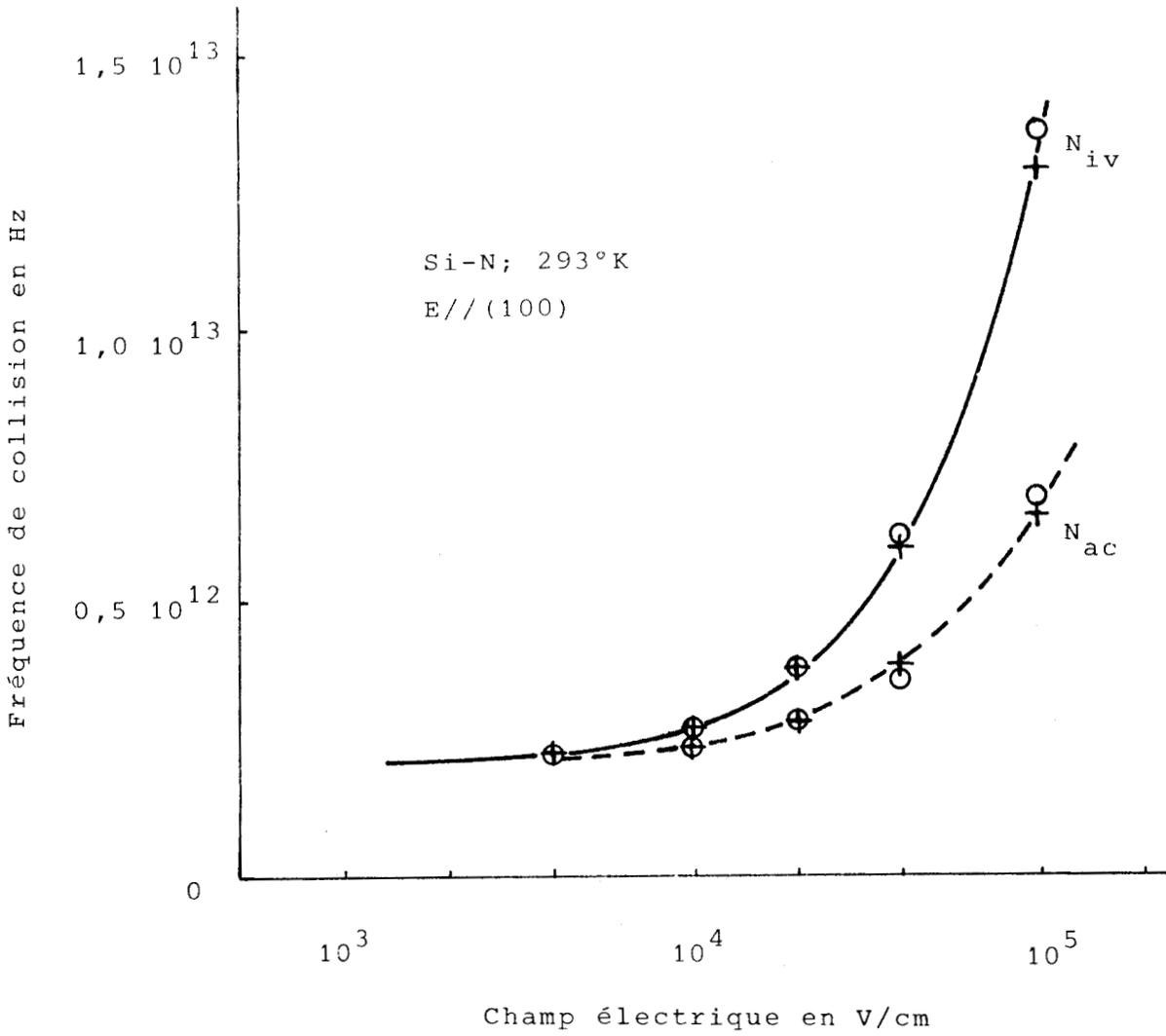


FIGURE 1,8 Fréquence des collisions intervallée N_{iv} et intravallée N_{ac} en fonction du champ électrique.

Influence du pas temporel δt . Les croix sont obtenues avec les δt standard, les cercles avec des δt dix fois plus petits.



La condition imposée dans la méthode à collisions fictives est que $\Gamma \geq \lambda_{\max}(\vec{k})$. Ceci revient à dire que la durée de libre parcours moyen sera telle que

$$\overline{\Delta t} = \frac{1}{\Gamma} \leq \frac{1}{\lambda_{\max}(\vec{k})} \quad (1,38)$$

Par contre dans notre méthode, la condition imposée est

$$\delta t \ll \frac{1}{\lambda_{\max}(\vec{k})} \quad (1,39)$$

Du point de vue du temps calcul, la première méthode est donc plus favorable puisqu'elle nécessite un moins grand nombre de calcul des probabilités $\lambda_q \delta t$. C'est d'ailleurs là l'unique différence étant donné que les interactions elles-mêmes surviennent en même nombre, à durée de simulation égale, dans l'une et l'autre des deux méthodes.

Néanmoins nous avons vu plus haut que la condition

$$\delta t < \frac{1}{2 \lambda_{\max}(\vec{k})} \quad (1,40)$$

menait à des résultats satisfaisants dans le domaine d'utilisation. Dans la mesure où la valeur moyenne de $\lambda(\vec{k})$ est telle que

$$\overline{\lambda(\vec{k})} \approx \frac{\lambda_{\max}}{5}$$

la condition exprimé par la relation (1,39) peut se réduire à

$$\delta t < \frac{1}{\lambda_{\max}(\vec{k})}$$

ce qui garantit effectivement que pour l'interaction moyenne on ait

$$\delta t \ll \frac{1}{\lambda(\vec{k})}$$

Dans ces conditions on remarque que la méthode à intervalles discrets n'utilisera en pratique qu'un δt environ deux fois plus petit que le $\overline{\Delta t}$ donné par la méthode à collisions fictives (relation (1,38) et (1,40)), elle nécessitera de ce fait un temps calcul un peu plus élevé*.

Néanmoins le δt choisi ne doit pas être trop grand : $\lambda(\vec{k})\delta t$ indique en fait la probabilité que le porteur considéré ait subi un choc entre t et $t + \delta t$. Dans la simulation ce choc est fixé en réalité à l'instant $t + \delta t$ et les quantités observées sont aussi calculées à cet instant là. Il est évident que plus le δt est petit, plus l'instant réel du choc et l'instant où celui-ci est simulé seront rapprochés, et plus la simulation du phénomène physique étudié sera exacte.

* Remarquons que le temps de calcul varie moins vite que le rapport $1/\delta t$. En effet si le nombre de tirages au sort effectués est bien proportionnel à $1/\delta t$, le nombre d'interactions effectives dont le traitement nécessite de longs calculs n'en dépend pas.

III. LE SILICIUM N : PARAMETRES DE BANDE ET DE COLLISION

La bande de conduction du silicium est formée de six ellipsoïdes ou vallées dont les minimums indirects relatifs sont à 1,12 eV au-dessus de la bande de valence. Les centres des vallées sont situés dans les six directions $\langle 100 \rangle$ à $k_m = 0,85 K_0$ du centre de la zone de Brillouin, chacun des axes $\langle 100 \rangle$ formant l'axe de révolution de chacun des ellipsoïdes [56]. Dans l'hypothèse où ces vallées sont également non-paraboliques, on aura pour la vallée centrée en $(0,85; 0; 0)$

$$\epsilon(1 + \alpha\epsilon) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{(k_x - k_m)^2}{m_l} + \frac{k_y^2 + k_z^2}{m_t} \right)$$

faisant apparaître les masses effectives longitudinales et transversales. Il y a cinq autres relations du même type pour les cinq autres vallées, que l'on obtient par permutation sur k_x , k_y et k_z [51]. Les valeurs des masses effectives m_l et m_t ont été mesurées par des expériences de résonance cyclotronique. Différents auteurs ont donné des valeurs de plus en plus précises pour aboutir aux suivantes : $m_l = 0,9163 m_0$ et $m_t = 0,1905 m_0$ [52, 54].

On peut considérer comme négligeable la présence d'autres minimums relatifs situés à environ un eV au-dessus des minimums fondamentaux et qui restent pratiquement dépeuplés même en régime de champ électrique intense.

La figure 1.9 montre la disposition des six vallées qui viennent d'être décrites.

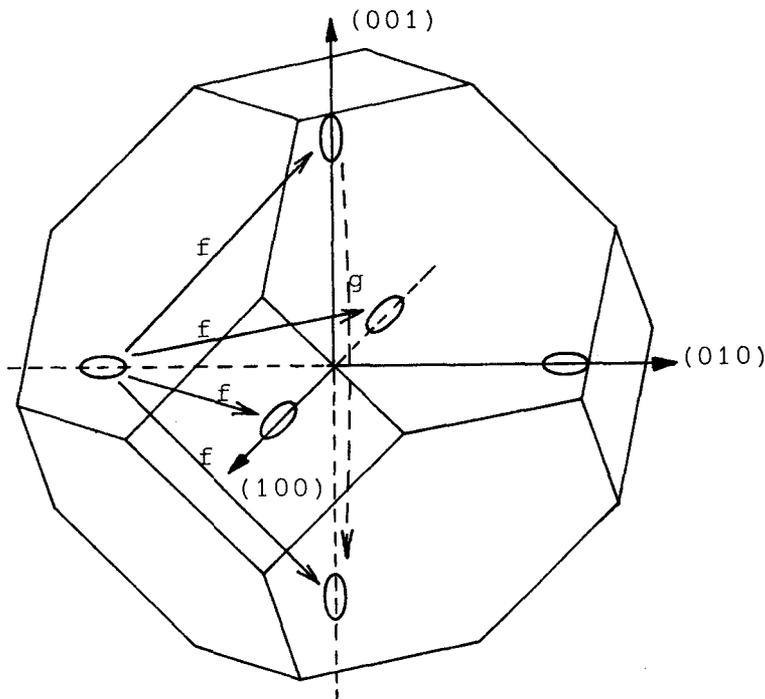


Figure 1.9. Première zone de Brillouin de la bande de conduction du silicium.

Les six minima équivalents ont des surfaces isoénergie ellipsoïdales et sont situés le long des axes $\langle 100 \rangle$ approximativement aux points indiqués sur la figure.

A 300°K les surfaces $\epsilon = 2 k_B T_L$ ont la taille indiquée sur le dessin.

Les flèches indiquent les transitions intervallées.

Parmi les mécanismes de collisions que les porteurs sont susceptibles de subir, nous devons distinguer les collisions intravallées et les collisions intervallées. Les collisions intravallées provoquent des transitions du vecteur d'onde des porteurs à l'intérieur de la même vallée. Elles peuvent être de plusieurs types : collisions sur phonons acoustiques de grande longueur d'onde ($|\vec{q}|$ petits) que l'on peut considérer comme élastiques aux températures usuelles ($T_L > 40^\circ\text{K}$) ; collisions sur phonons optiques de grande longueur d'onde mais d'énergies élevées. Harrison a montré que ce second mécanisme est tout à fait négligeable dans le Silicium [55]. Les collisions sur phonons optiques polaires et sur phonons acoustiques piezoélectriques n'existent pas. Pour un matériau dopé, les collisions avec les impuretés ionisées sont supposées intravallées et élastiques.

Les collisions intervallées sont de deux types. Elles peuvent occasionner les transferts entre deux vallées dont les axes principaux sont perpendiculaires. Ces transitions, dites du type f, relient chaque vallée à quatre autres vallées à l'intérieur de la première zone de Brillouin.

L'autre type de collision intervallée connecte deux vallées dont les axes principaux sont colinéaires, ce sont les transitions dites du type g, et une seule vallée est connectée par leur intermédiaire à chacune des six autres. Les transitions sont indiquées par des flèches dans la figure 1.9. En l'espace d'une vingtaine d'années, divers modèles ont été décrits dans la littérature [35, 36, 57 à 63].

Des travaux théoriques portant sur les propriétés de symétrie de la bande de conduction ont montré que certaines transitions intervallées sont interdites.

Seules peuvent intervenir dans les transitions de type g les phonons de la branche longitudinale optique et pour les transitions f les phonons des branches transverses optiques et longitudinales acoustiques. Cependant, il existe des résultats expérimentaux [57, 61] qui semblent indiquer que d'autres transitions intervallées interdites par les règles de sélection interviendraient. Aussi les modèles mis au point ne tiennent parfois pas compte de ces règles. Ceci est vrai en particulier pour ce qui concerne les études de porteurs chauds. Ainsi, on a avancé comme argument que les règles de sélection ne pourraient s'appliquer stricto sensu qu'à des porteurs à l'équilibre thermodynamique (porteurs froids) qui s'éloignent peu de leur positions d'équilibre au fond des vallées et plus difficilement à des porteurs chauds qui, à cause de l'agitation thermique plus importante, peuvent s'éloigner notablement du centre des vallées. Nous donnons dans le tableau 1.1 ci-dessous les valeurs proposées avant 1970 dans la littérature pour les énergies et les constantes de couplage des transitions f et g.

L'énergie des phonons peut se déduire du diagramme de dispersion du matériau [64] à partir des modules des vecteurs d'onde des phonons nécessaires aux transitions. Ils sont du type Umklapp ainsi qu'il est montré dans [63]. Les valeurs des constantes de couplage sont des paramètres ajustables permettant d'obtenir les meilleurs accords entre théories et expérimentations. Dans le tableau 1 ces valeurs sont données en valeurs réduites par rapport à la constante de couplage des phonons acoustiques transversaux intravallées.



TABLEAU 1

	g θ_1 en °K	f θ_2 en °K	f θ_3 en °K	$W'_1 = W_1 / W_{ac}$	$W'_2 = W_2 / W_{ac}$	$W'_3 = W_3 / W_{ac}$
Long [63]	190	630	-	0,15	2	-
Dumke [59]	307	534	-	0,835	0,334	-
Folland [61]	290	558	695	0,623	0,124	0,49
Onton [60]	307	540	-	0,635	0,635	-
Costato et Reggiani [62]	307	540	-	0,915	0,130	-

Depuis lors d'autres modèles ont été présentés. Une discussion très détaillée des différents modèles peut être trouvée dans l'important article de Norton [57]. Plus récemment Portal [58] a identifié un certain nombre de transitions dans le silicium N à l'aide de mesures de résonance magnétophonon. Ce genre d'expérimentation présente l'avantage de donner de façon assez directe les énergies des phonons mis en jeu dans les transitions. Toutefois, il ne renseigne pas sur la valeur des constantes de couplage associées à ces phonons.

Un modèle a été mis au point permettant d'expliquer de façon satisfaisante le phénomène de repopulation des vallées de silicium N quand le champ électrique est appliqué suivant la direction $\langle 100 \rangle$ [55, 66]. L'évolution du rapport $r = n_c/n_h$ des populations des vallées froides et des vallées chaudes avec le champ électrique est particulièrement sensible au modèle utilisé et l'ajustement des paramètres que sont les constantes de couplage peut se faire de façon assez aisée (l'équation de transport de Boltzmann est elle-même résolue par une méthode itérative). Ce travail a évidemment été effectué à la température de 77 °K où l'effet de repopulation des vallées d'où découle l'effet d'anisotropie de la vitesse de dérive est particulièrement sensible.

Dans le même temps un autre modèle présenté par Canali et Coll [35] a permis de vérifier théoriquement avec une précision assez satisfaisante des mesures de vitesse de dérive dans les directions $\langle 111 \rangle$ et $\langle 100 \rangle$, depuis le régime de mobilité jusqu'à la vitesse de saturation et dans une gamme de température de réseau s'étendant de 8 °K à 530 °K. Etabli initialement dans l'hypothèse de bandes d'énergie paraboliques, ce modèle est de loin le plus complexe puisqu'il comporte six transitions différentes, trois étant du type f et trois étant du type g. Dans le tableau 2 sont résumés et comparés les paramètres déterminés par Canali et par Nash. Sont indiquées les énergies de phonons en degré Kelvin ainsi que les amplitudes des potentiels de déformation associés (les constantes de couplage sont proportionnelles au carré de ces derniers et au nombre de vallées en connexion avec le type de transition considéré). La différence essentielle existant entre les deux modèles est la présence dans le modèle de Canali d'un phonon supplémentaire de type g, d'énergie élevée, non



	θ_{f_1}	θ_{f_2}	θ_{f_3}	θ_{g_1}	θ_{g_2}	θ_{g_3}		E_1
Canali et al. [35]	210°K 1,510 ⁷	500°K 3,410 ⁸	630°K 410 ⁸	140°K 510 ⁷	210°K 810 ⁷	700°K 310 ⁸	eV/cm	9 eV
Nash et al. [66]	- -	- -	680°K 6,8510 ⁸	140°K 610 ⁷	210°K 710 ⁷	- -	eV/cm	9,27 eV

Pour un modèle à bandes non paraboliques ($\alpha = 0,5 \text{ eV}^{-1}$) la constante de couplage du phonon f_2 doit avoir la valeur $2,510^8 \text{ eV/cm}$ [36] dans le modèle de Canali.

TABLEAU 2

prévu par l'expérimentation de Portal. Le modèle présenté donne de très bons résultats pour la mobilité ohmique dans une très large gamme de température de réseau. Néanmoins il mène à des valeurs de vitesse limite en champ fort un peu trop élevées aux températures de réseau proche de l'ambiante. Par ailleurs, l'interprétation de résultats expérimentaux de coefficients de diffusion a nécessité de modifier le modèle et introduire l'hypothèse de bandes non-paraboli-ques [36]. Ainsi avec un facteur de non-parabolicité $\alpha = 0,5 \text{ eV}^{-1}$, le potentiel D_{f_2} doit être diminué de $3,4 \cdot 10^8 \text{ eV/cm}$ à $2,5 \cdot 10^8 \text{ eV/cm}$ pour maintenir une valeur correcte de la mobilité ohmique.

Parce que le modèle de Canali nous a semblé très complet et surtout parce que c'est celui qui s'accorde le mieux avec le plus grand nombre de résultats expérimentaux, nous l'avons adopté comme modèle pour notre propre étude.

* *
*

CONCLUSION

Au cours de ce premier chapitre, nous nous sommes efforcés de présenter les procédés de simulation de Monte Carlo dans le cadre général des études effectuées sur les porteurs chauds dans les semiconducteurs. Nous avons d'abord décrit les deux méthodes actuellement utilisées qui sont :

- la méthode de simulation faisant usage des collisions fictives,
- la méthode à discrétisation régulière du temps.

Nous avons essayé dans la mesure du possible de mettre en évidence les avantages et les inconvénients de chacune d'elles. Nous avons particulièrement insisté sur les critères de choix du paramètre temporel δt qui est un des problèmes majeurs dans la mise en oeuvre de la seconde méthode.

Pour terminer ce premier chapitre nous avons dégagé le modèle que nous avons utilisé pour traiter la dynamique des électrons dans le silicium de type N, en nous efforçant de justifier les raisons de ce choix.

* *
*

BIBLIOGRAPHIE DU CHAPITRE 1

- [1] J.R. BARKER, *Notes de Cours de l'Ecole d'Eté de l'OTAN sur la Physique des Electrons chauds dans les Semiconducteurs*, URBINO, Italie, Juillet 1979.
- [2] J. TAVERNIER, D. CALECKI, *Introduction aux Phénomènes de Transport Linéaires dans les Semiconducteurs*, MASSON, Paris 1970.
- [3] E.M. CONWELL, *High Field Transport in Semiconductors*, dans *Solid-State Physics Supplement 9*, Academic Press, 1967.
- [4] P.J. PRICE, *Solid-State Electronics*, Volume 21, p. 9 (1977) (ainsi que l'ensemble des articles du même volume).
- [5] H.G. REIK, H. RISKEN, *Physical Review*, Volume 124, p. 777 (1961).
- [6] G.A. BARAFF, *Physical Review*, Volume 133, p. A26, (1964).
- [7] G. PERSKY, D.J. BARTELINK, *Physical Review B*, Volume 1, p. 1614, (1970).
- [8] C. HERRING, E. VOGT, *Physical Review*, Volume 101, p. 944, (1956).
- [9] B.R. NAG, *Theory of Electrical Transport in Semiconductors*, Pergamon Press, (1972).
- [10] M. ASCHE, O.G. SARBEI, *Physica Status Solidi*, Volume 33, p. 9, (1969).
- [11] H. FROELICH, B.V. PARANJAPE, *Proceedings of the Physical Society of London*, Volume B 69, p. 21 (1956).

- [12] P.P. DEBYE, E.M. CONWELL, *Physical Review*, Volume 93, p. 693, (1954).
- [13] D.K. FERRY, même référence que [1].
- [14] P. DAS, D.K. FERRY, *Solid-State Electronics*, Volume 19, p. 851, (1976).
- [15] R. BOSCH, H. THIM, *I.E.E.E. Transactions on Electron Devices*, Volume 21, p. 16, (1974).
- [16] H. BUDD, *Physical Review*, Volume 158, p. 798, (1967) ; cette expression est une généralisation de l'intégrale de R. CHAMBERS, *Proceedings of the Physical Society of London*, Volume A 65, p. 458, (1952).
- [17] H.D. REES, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Volume 30, p. 643, (1969).
- [18] H.D. REES, *IBM Journal of Research and Development*, Volume 13, p. 537, (1969).
- [19] J.P. NOUGIER, M. ROLLAND, *Physical Review B*, Volume 8, p. 5728, (1973).
- [20] W. FAWCETT, A.D. ROARDMAN, S. SWAIN, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Volume 31, p. 1963, (1970).
- [21] V.L. VIDRO, V.B. GORFINKEL, *Soviet Physics Semiconductors*, Volume 11, p. 267, (1977).
- [22] G. BACCARANI, C. JACOBONI, A.M. MAZZONE, *Solid-State Electronics*, Volume 20, p. 5, (1977).
- [23] T. KUROSAWA, *Journal of the Physical Society of Japan*, Supplément 21, p. 424 (1966).
- [24] J.G. RUCH, W. FAWCETT, *Journal of Applied Physics*, Volume 41, p. 3843, (1970).
- [25] P.J. PRICE, *IBM Journal of Research and Development*, Volume 17, p. 39, (1973).

- [26] A. ALBERIGI QUARANTA, C. JACOBONI, G. OTTAVIANI, *Revista del Nuovo Cimento*, Volume 1, p. 445, (1971).
- [27] A.D. BOARDMAN, W. FAWCETT, H.D. REES, *Solid State Communications*, Volume 6, p. 305, (1968).
- [28] M.A. LITTLEJOHN, F.R. HAUSER, T.H. GLISSON, *Journal of Applied Physics*, Volume 48, p. 4587, (1977).
- [29] A. KASZYNSKI, *Thèse de Docteur-Ingénieur*, Université des Sciences et Techniques de Lille, (1979).
- [30] C. CANALI, M. MARTINI, G. OTTAVIANI, *Physical Review B*, Volume 4, p. 422, (1971).
- [31] M.A. LITTLEJOHN, J.R. HAUSER, T.H. GLISSON, *Applied Physics Letters*, Volume 26, p. 625, (1975).
- [32] L. REGGIANI, C. CANALI, F. NAVA, G. OTTAVIANI, *Physical Review B*, Volume 16, p. 2781, (1977).
- [33] F. NAVA, C. CANALI, V. CAPELLANI, J. GAVIOLI, G. OTTAVIANI, *Journal of Physics C*, Volume 9, p. 1685, (1976).
- [34] G. OTTAVIANI, L. REGGIANI, C. CANALI, F. NAVA, A. ALBERIGI QUARANTA, *Physical Review B*, Volume 12, p. 3318, (1975).
- [35] C. CANALI, C. JACOBONI, F. NAVA, G. OTTAVIANI, A. ALBERIGI QUARANTA, *Physical Review B*, Volume 12, p. 2265, (1975).
- [36] C. CANALI, C. JACOBONI, G. OTTAVIANI, A. ALBERIGI QUARANTA, *Applied Physics Letters*, Volume 27, p. 278, (1975).
- [37] F. NAVA, C. CANALI, L. REGGIANI, D. GASQUET, J.C. VAISSIERE, J.P. NOUGIER, *Journal of Applied Physics*, Volume 50, p. 922, (1979).
- [38] L. REGGIANI, C. CANALI, F. NAVA, A. ALBERIGI QUARANTA, *Journal of Applied Physics*, Volume 49, p. 4446, (1978).
- [39] J.R. HAUSER, M.A. LITTLEJOHN, T.H. GLISSON, *Applied Physics Letters*, Volume 28, p. 459, (1976).

- [40] M.A. LITTLEJOHN, J.R. HAUSER, T.H. GLISSON, *Applied Physics Letters*, Volume 30, p. 242, (1977).
- [41] J.R. HAUSER, T.H. GLISSON, M.A. LITTLEJOHN, *Solid State Electronics*, Volume 22, p. 487, (1979).
- [42] T. IKOMA, K. SAKAI, Y. ADACHI, H. YANAI, *Japanese Journal of Applied Physics*, Volume 16, p. 1379, (1977).
- [43] J.G. RUCH, *I.E.E.E. Transactions*, Volume ED 19, p. 652, (1972).
- [44] S. KRATZER, J. FREY, *Journal of Applied Physics*, Volume 49, p. 4064, (1978).
- [45] P.A. LEBWOHL, *Journal of Applied Physics*, Volume 44, p. 1744, (1973).
- [46] G. HILL, P.N. ROBSON, A. MAJERFELD, W. FAWCETT, *Electronics Letters*, Volume 13, p. 235, (1977).
- [47] R.A. WARRINER, *Solid-State and Electron Devices*, Volume 1, p. 92, (1977).
- [48] J. ZIMMERMANN, Y. LEROY, E. CONSTANT, *Journal of Applied Physics*, Volume 49, p. 3378, (1978).
- [49] R. FAUQUEMBERGUE, J. ZIMMERMANN, A. KASZYNSKI, E. CONSTANT, *A paraître dans Journal of Applied Physics*.
- [50] R. FAUQUEMBERGUE, A. KASZYNSKI, E. CONSTANT, *Contrat D.R.E.T "Dynamique électronique dans les composés III.V ternaires et quaternaires"*.
- [51] C. HERRING, *Bell System Technical Journal*, Volume 34, P. 237, (1955).
- [52] R.N. DEXTER, H.J. ZEIGER, B. LAX, *Physical Review*, Volume 104, p. 637, (1956).
- [53] C.J. RAUCH, J.J. STICKLER, M.J. ZEIGER, G.S. HELLER, *Physical Review Letters*, Volume 4, p. 64, (1960).

- [54] J.C. HENSEL, H. HASEGAWA, N. NAKAYAMA, *Physical Review*, Volume 138, p. A225, (1965).
- [55] W.A. HARRISON, *Physical Review*, Volume 101, p. 1281, (1956).
- [56] A.K. HOCHBERG, C.R. WESTGATE, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Volume 31, p. 2317, (1970).
- [57] P. NORTON, T. BRAGGINS, H. LEVINSTEIN, *Physical Review B*, Volume 8, p. 5632, (1973).
- [58] J.C. PORTAL, L. EAVES, S. ASKENAZY, R.A. STRADLING, *Solid State Communications*, Volume 14, p. 1241, (1974).
- [59] W.P. DUMKE, *Physical Review Letters*, Volume 118, p. 938, (1960).
- [60] A. ONTON, *Physical Review Letters*, Volume 22, p. 288, (1969).
- [61] N.O. FOLLAND, *Physical Review B*, Volume 1, p. 1648, (1970).
- [62] M. COSTATO, L. REGGIANI, *Physica Status Solidi b*, Volume 38, p. 665, (1970).
- [63] D. LONG, *Physical Review*, Volume 120, p. 2024, (1960).
- [64] B.N. BROCKHOUSE, *Physical Review Letters*, Volume 2, p. 256, (1959).
- [65] J.W. HOLM-KENNEDY, K.S. CHAMPLIN, *Journal of Applied Physics*, Volume 43, p. 1878, (1972).
- [66] J.G. NASH, J.W. HOLM-KENNEDY, *Physical Review B*, Volume 15, p. 3994, (1977).

CHAPITRE 2

EXPLOITATION DE LA METHODE DE MONTE CARLO EN EFFET DE VOLUME.

Paramètres du premier et du second ordre
en champ uniforme statique ou variable dans le temps.

Quelques vérifications expérimentales.

INTRODUCTION

Nous ne faisons pas dans ce chapitre un exposé exhaustif de tous les problèmes concernant les phénomènes de transport qui peuvent être abordés et au moins partiellement résolus grâce à la méthode de Monte Carlo. Nous dirigeons plutôt notre étude vers les questions auxquelles s'adapte particulièrement cette méthode. C'est de toute évidence le cas des coefficients de diffusion et des phénomènes non stationnaires en régime de porteurs chauds.

Nous avons divisé ce chapitre en deux grandes parties. Dans la première partie nous exposons les résultats relatifs aux phénomènes de transport observés en régime de champ statique (bien qu'en étudiant le coefficient de diffusion nous envisageons le temps et la fréquence comme paramètres les résultats présentés sont obtenus en champ statique).

Nous commençons par l'étude des paramètres du premier ordre : mobilité, énergie moyenne, ... et des fonctions de distribution du moment et de l'énergie en fonction de l'amplitude et de la direction du champ électrique afin de mettre en évidence les phénomènes d'anisotropie propres au silicium-N. Nous passons ensuite aux paramètres du second ordre : coefficients de diffusion, équivalence de la diffusion d'étalement et de la diffusion de bruit. Nous définissons avec précision sous quelles conditions les coefficients de diffusion statiques doivent être déterminés. Nous faisons pour terminer cette première partie une incursion dans le domaine expérimental avec des résultats de mesure de bruit de diffusion thermique dans des composants N^+NN^+ nous permettant de vérifier certains résultats expérimentaux de coefficients de diffusion donnés dans la littérature.

Dans la seconde partie de ce chapitre nous étudions le comportement du matériau en régime de champ variable dans le temps. Ce peut être le cas soit de créneaux temporels de champ électrique qui permettent de mettre en évidence

le phénomène de survitesse, soit de la réponse du matériau à un signal sinusoïdal d'amplitude plus ou moins grande (régime linéaire et non linéaire). Dans un premier temps nous étudions les évolutions transitoires des fonctions de distribution et envisageons l'influence de celles-ci sur le comportement transitoire de la vitesse et de l'énergie. Nous calculons ensuite la mobilité complexe des porteurs dans le domaine des hyperfréquences et de l'infrarouge lointain. Nous faisons alors une nouvelle incursion dans le domaine expérimental en présentant des résultats de mesures de conductivité hyperfréquence en gamme millimétrique qui nous permettent de vérifier certains de nos résultats théoriques.

L'étude des composants utilisant les matériaux semiconducteurs en régime de champ fort serait simplifiée s'il était possible de disposer d'une description simplifiée de la dynamique non stationnaire des porteurs. C'est pourquoi nous étudions la validité des équations de conservation de l'énergie et du moment formulées à l'échelle macroscopique mettant en jeu les notions de temps de relaxation moyens de l'énergie et du moment ne dépendant que de l'énergie moyenne des porteurs. Nous tentons d'expliquer les raisons du bon accord obtenu entre les résultats fournis par la méthode des temps de relaxation et ceux obtenus par la méthode de Monte Carlo plus rigoureuse (l'étude se limite aux paramètres du premier ordre : vitesse et énergie moyenne).

* *
*

1ère Partie

PHENOMENES DE TRANSPORT EN CHAMP STATIQUE

I.1 RAPPELS CONCERNANT LES PROBABILITES REGISSANT LES COLLISIONS DES PORTEURS AVEC LE RESEAU ET LES DEFAUTS DE RESEAU

Nous avons mentionné au cours du chapitre précédent quelles étaient les différentes interactions que les porteurs étaient susceptibles de subir durant leur évolution dans le cristal. Nous avons également décrit les bandes d'énergie de conduction qui régissent l'évolution des porteurs entre les collisions. Bien que les rappels que nous faisons ici concernent désormais des résultats classiques, nous pensons qu'ils s'avèrent nécessaires dans la mesure où ils constituent bien souvent une aide très utile à la compréhension des phénomènes observés.

Rappelons que $S(\vec{k}, \vec{k}')$ représente par définition la densité de probabilité par unité de temps qu'un porteur effectue durant un choc, une transition l'amenant de l'état \vec{k} dans un autre état \vec{k}' .

I.1.1 Collisions sur le réseau.

Elles sont de deux types, en ce qui concerne le silicium .

- a) Les collisions sur phonons acoustiques de grande longueur d'onde autorisent des transferts $\vec{k} \rightarrow \vec{k}'$ avec échange de phonons de faible énergie correspondant à des vecteurs d'onde \vec{q} très petits. Ces transitions intravallées sont considérées comme quasiment élastiques aux températures étudiées.
- b) Les collisions intervallées impliquant des phonons (optiques et acoustiques) de grande énergie et de grand vecteur d'onde sont par contre fortement inélastiques.

I.1.1.1. Collisions acoustiques intravallées

Le processus de collision par interaction avec le potentiel de déformation dû aux vibrations acoustiques de grandes longueur d'onde a été élaboré par Shockley et Bardeen [1]. Cette interaction est considérée comme élastique au-dessus de quelques degrés Kelvin et l'on peut écrire

$$\bar{n}_q \approx \bar{n}_q + 1 \approx \frac{k_B T}{\hbar \omega_q}$$

où $\hbar \omega_q$ est l'énergie du phonon, pour le nombre de phonons par mode. Incluant l'effet de la non-parabolicité des bandes d'énergie, la probabilité cherchée vaudra [2] :

$$S(\vec{k}, \vec{k}') d^3k' = \frac{q^2 k_B T E_1^2}{4\pi^2 \hbar s^2 \rho} G(\vec{k}, \vec{k}') \delta(\epsilon(\vec{k}) - \epsilon(\vec{k}')) d^3k' \quad (2,1)$$

en ayant tenu compte de \bar{n}_q , de la densité d'états dans l'espace réciproque ($=V/8\pi^3$). s est la vitesse du son isotrope, ρ la densité du matériau et E_1 (en eV) le module du potentiel de déformation acoustique. Dans le cas d'une bande d'énergie parabolique on aurait $G = 1$ et S ne dépendrait plus de l'angle entre \vec{k} et \vec{k}' . Pour des bandes non paraboliques, l'expression de $G(\vec{k}, \vec{k}')$ a été donnée par Kane [3, 4]. Pour un facteur de non-parabolicité α non nul, G est toujours plus petit que 1. Toutefois dans le silicium où le facteur α n'est pas très élevé, G n'est jamais beaucoup plus petit que 1, et dans la plupart des cas peut être négligé et considéré égal à 1. En fait l'influence fondamentale de α se fait sentir au niveau de la relation entre vecteur d'onde instantané et vitesse instantanée. Il a pour effet de minimiser les variations de vitesse, par rapport aux variations du vecteur d'onde en vertu de la relation

$$\vec{v} = \frac{\hbar \vec{k}}{m^*} \frac{1}{1+2\alpha\epsilon}$$

La densité de probabilité par unité de temps $\lambda_{ac}(\epsilon)$ qu'un porteur effectue une transition l'amenant de l'état \vec{k} (avec $\epsilon = \epsilon(\vec{k})$) vers un autre état quelconque s'intègre pour donner

$$\lambda_{ac}(\epsilon) = \frac{q^2(2m_D^*)^{3/2} k_B T_L E_1^2}{2\Pi\rho_s^2 \hbar^4} \frac{1}{\sqrt{\epsilon(1+\alpha\epsilon)}} \quad (2,2)$$

où m_D^* est la masse de densité d'état ($m_D^* = (m_l m_t^2)^{1/3}$). Quant à la probabilité de rotation de \vec{k} vers \vec{k}' , par l'angle β , elle est donnée par $P(\beta)d\beta = \sin\beta d\beta$ [5].

1.1.1.2. Collisions intervallées.

Le traitement qui est effectué pour les collisions intervallées est identique à celui effectué pour les interactions avec les phonons optiques non-polaires (interaction dominante dans le germanium de type P) à ceci près que les états initiaux et finals ne sont pas dans la même vallée et que la probabilité de transfert doit être proportionnelle également au nombre de vallées accessibles. De plus, Harrison a montré [6] que l'élément de matrice associé au processus d'interaction sur les phonons optiques non polaires peut être d'ordre 0 ou d'ordre plus élevé en développement de \vec{k}/K_0 (ou \vec{k} est le vecteur d'onde mesuré par rapport au fond de la vallée considérée et \vec{K}_0 est le vecteur de base du réseau réciproque) mais que seul le terme d'ordre 0 apporte une contribution significative du même ordre de grandeur que celle correspondant aux interactions sur phonons acoustiques élastiques, les contributions aux ordres supérieurs restant négligeables [7]. Ceci conduit à une forme de $S_{ij}(\vec{k}, \vec{k}')$ (où i désigne la vallée de départ et j la vallée d'arrivée) similaire à (2,1) [7]

$$S_{ij}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{q^2 D_{ij}^2 z_j}{8\Pi^2 \rho \omega_{ij}} G_{ij}(\vec{k}, \vec{k}') \begin{cases} (\bar{N}_{ij}+1)\delta(\epsilon(\vec{k}) - \epsilon(\vec{k}') + \hbar\omega_{ij}) \\ \bar{N}_{ij}\delta(\epsilon(\vec{k}) - \epsilon(\vec{k}') - \hbar\omega_{ij}) \end{cases} \quad (2,3)$$

où le terme supérieur concerne la collision avec émission de phonon, et le terme inférieur la collision avec absorption de phonon. $\hbar\omega_{ij}$ étant l'énergie échangée durant l'interaction ($\hbar\omega_{ij} = k_B \theta_{ij}$ est du même ordre de grandeur que $k_{BL} T$), D_{ij} étant le module du potentiel de déformation intervallée (exprimé en eV/m) et \bar{N}_{ij} étant le nombre de phonons par mode

$$\bar{N}_{ij} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{ij}}{k_B T_L}\right) - 1}$$

z_j est le nombre de vallées accessibles pour le transfert considéré. Les valeurs des énergies de phonons impliqués dans ces collisions et les valeurs de D_{ij} associées ont été résumées au tableau 2 du chapitre 1. De même que précédemment on peut considérer que $G_{ij} \approx 1$ est une bonne approximation. Il résulte de cela que tous les états finals sur la surface d'énergie $\epsilon(\vec{k}') = \epsilon(\vec{k}) \pm \hbar\omega_{ij}$ sont équiprobables. L'intégration de $S_{ij}(\vec{k}, \vec{k}')$ sur tous les états finals \vec{k}' donne

$$\lambda_{ij}(\epsilon) = \frac{q^2 z_j (m_D^*)^{3/2} D_{ij}^2}{\sqrt{2\pi} \rho \omega_{ij} \hbar^3} (\bar{N}_{ij} + 1) \{(\epsilon - \hbar\omega_{ij})(1 + \alpha[\epsilon - \hbar\omega_{ij}])\}^{1/2} (1 + 2\alpha[\epsilon - \hbar\omega_{ij}])$$

si $\epsilon > \hbar\omega_{ij}$,

ou bien

$$\lambda_{ij}(\epsilon) = 0 \text{ si } \epsilon \leq \hbar\omega_{ij},$$

en ce qui concerne l'émission de phonon et

$$\lambda_{ij}(\epsilon) = \frac{q^2 z_j (m_D^*)^{3/2} D_{ij}^2}{\sqrt{2\pi} \rho \omega_{ij} \hbar^3} \bar{N}_{ij} \{(\epsilon + \hbar\omega_{ij})(1 + \alpha[\epsilon + \hbar\omega_{ij}])\}^{1/2} (1 + 2\alpha[\epsilon + \hbar\omega_{ij}])$$

en ce qui concerne l'absorption de phonon.

I.1.2. Collision sur impuretés ionisées.

Le traitement donné à ce type de collision est assez analogue à celui qui a permis d'aboutir aux expressions du paragraphe précédent. Le potentiel de perturbation est celui dû à l'attraction coulombienne entre l'électron et le centre ionisé. Ce potentiel peut être décrit de deux façons différentes :

- dans l'hypothèse de Conwell-Weisskopf [8] celui-ci est un potentiel strictement coulombien limité à une distance b qui est la demi-distance moyenne entre deux centres ionisés voisins*

$$V_1(\vec{r}) = \frac{-q^2}{4\pi\epsilon'|\vec{r}|}, \quad |\vec{r}| \leq b = \frac{1}{2 N_i^{1/3}} \quad (2,4)$$

par rapport au centre situé en $\vec{R} = 0$. Pour une distribution d'atomes d'impuretés on aura comme potentiel total

$$V(r) = \sum_{\vec{R}} \frac{-q^2}{4\pi\epsilon'|\vec{r}-\vec{R}|}, \quad |\vec{r}-\vec{R}| \leq b \quad (2,5)$$

- dans l'hypothèse de Brooks-Herring [9], on suppose que l'influence du nuage électronique dans lequel baigne l'électron que l'on examine est de faire décroître le potentiel binaire plus vite qu'une loi en r^{-1} . On lui donne la forme

* Il en résulte l'existence d'un angle minimum de déviation β_m correspondant à l'angle de déflexion de la trajectoire d'un électron de vitesse v dont le paramètre d'impact est égal à b : $\beta_m = 2 \text{ Arc tg } \left\{ q N_i^{1/3} / (4\pi\epsilon') / \epsilon(1+\alpha\epsilon) \right\}$

$$V_1(\vec{r}) = \frac{-q^2}{4\pi\epsilon'|\vec{r}|} e^{-B|\vec{r}|} \quad (2,6)$$

où le paramètre d'écran B est lié à la concentration N_i des électrons par

$$B^2 = \frac{q^2 N_i}{\epsilon' k_B T_L}$$

où ϵ' est ici la permittivité de réseau. Le potentiel total pourra alors s'écrire

$$V(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} \frac{-q^2}{4\pi\epsilon'|\vec{r}-\vec{R}|} e^{-B|\vec{r}-\vec{R}|} \quad (2,7)$$

Par ailleurs le processus de collision peut être considéré comme élastique eu égard à l'inertie de l'ion impureté beaucoup plus lourd que l'électron incident. Il en résulte pour la probabilité de transition entre \vec{k} et \vec{k}' la densité [2, 10]

$$S_i(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{q^4 N_i}{4\pi^2 \epsilon' \hbar} \frac{G(\vec{k}, \vec{k}')}{(|\vec{k}-\vec{k}'|^2 + B^2)^2} \delta(\epsilon(\vec{k}) - \epsilon(\vec{k}')) \quad (2,8)$$

pour le modèle de Brooks-Herring ; le modèle de Conwell-Weisskopf donnerait la même expression avec $B = 0$, mais de plus l'angle entre \vec{k} et \vec{k}' serait limité inférieurement par β_m (qui dépend de la vitesse incidente).

Sommant $S_i(\vec{k}, \vec{k}')$ sur tous les états \vec{k}' possibles, on aboutit à (dans la limite $G(\vec{k}, \vec{k}') \approx 1$)

$$\lambda_i(\varepsilon) = \frac{q^2 m_D^{*1/2} k_B T_L}{4\pi \varepsilon' \hbar^2 \sqrt{2}} [\varepsilon(1+\alpha\varepsilon)]^{-1/2} (1+2\alpha\varepsilon) \quad (2,9)$$

et la distribution de l'angle de déviation β de la trajectoire est telle que

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

où r est un nombre aléatoire à distribution uniforme entre 0 et 1.

Ces relations sont celles fournies par le modèle de Brooks-Herring. Pour le modèle de Conwell-Weisskopf on trouverait

$$\lambda_i(\varepsilon) = \frac{q^4 N_i}{16\pi \sqrt{2m_D^*} \varepsilon^{1/2}} [\varepsilon(1+\alpha\varepsilon)]^{-3/2} (1+2\alpha\varepsilon) \frac{1}{2} \left(\frac{1+x_m}{1-x_m} \right) \quad (2,10)$$

où $x_m = \cos \beta_m$ et $\cos \beta = \frac{r(1+x_m) - 2x_m}{r(1+x_m) - 2}$

I.1.3. Evolution des probabilités avec l'énergie des porteurs.

Nous avons représenté sur les figures 2,1 et 2,2 l'évolution des densités de probabilité de collision précédemment calculées. La figure 2,1 concerne les différentes interactions électron-phonon incluses dans le modèle. Ainsi, on peut juger en particulier de l'importance relative des transferts de type g par rapport aux transferts de type f . Les premiers sont toujours beaucoup moins nombreux que les seconds pour toutes les valeurs de l'énergie et à toute température de réseau. Les points anguleux présentés par certaines courbes indiquent le seuil d'énergie à partir duquel l'émission du phonon concerné devient possible.

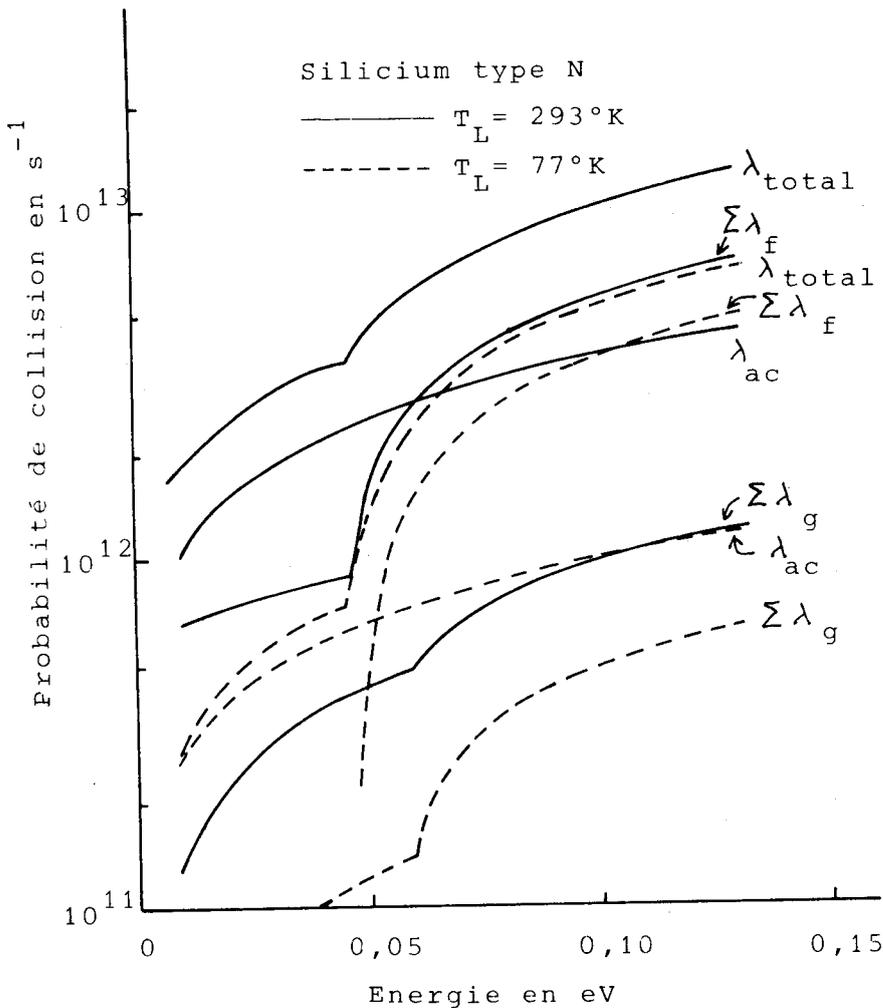


FIGURE 2,1

Evolution des probabilités de choc avec l'énergie (collisions électron-phonon)

λ_{ac} : collisions avec les phonons acoustiques de grande longueur d'onde.

λ_f : collisions intervalles de type f.

λ_g : collisions intervalles de type g.

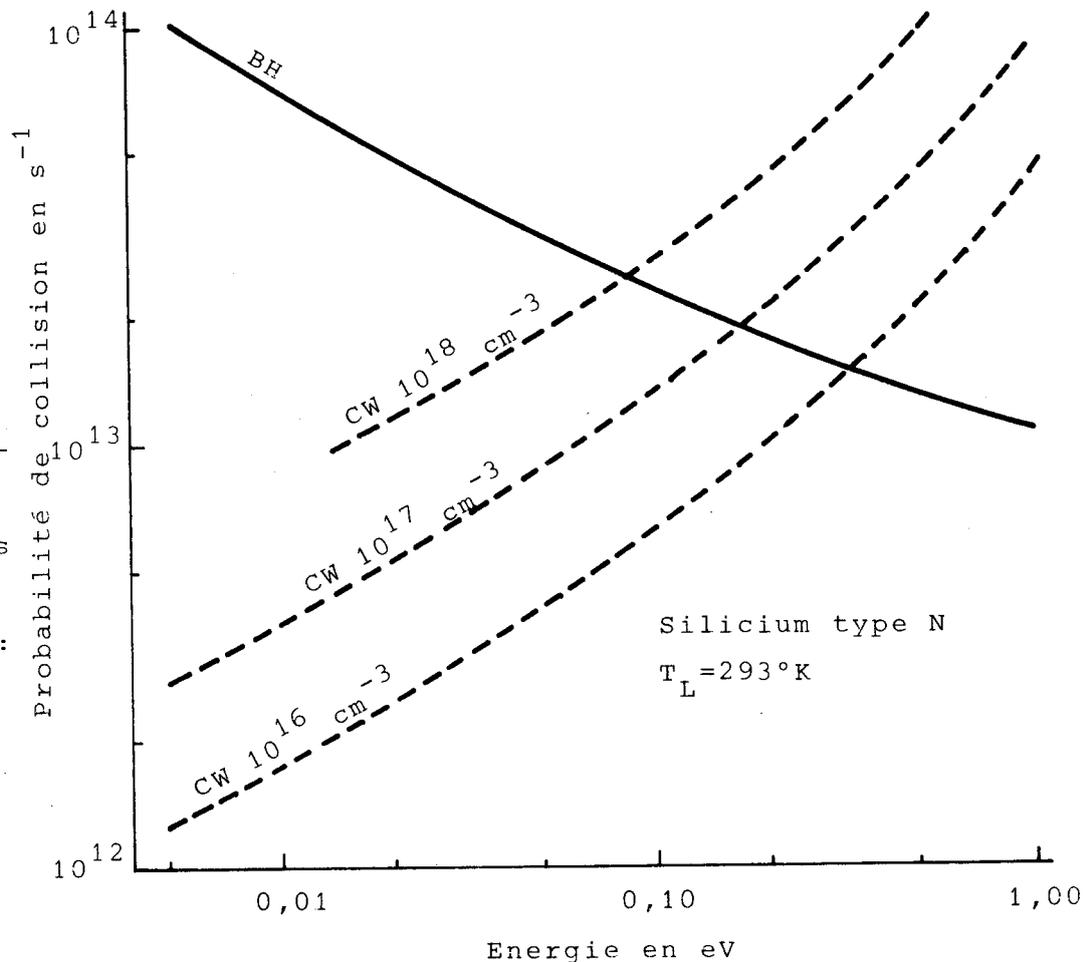


FIGURE 2,2

Evolution de la probabilité de collision sur impuretés ionisées

Comparaison des modèles de Brooks-Herring: (BH) et de Conwell-Weisskopf: (CW).



Par ailleurs on constate que la probabilité de collision sur les phonons acoustiques élastiques reste en général du même ordre de grandeur que celle des collisions intervallées. En fait, il faut abaisser la température de réseau au-dessous de 30 °K pour constater que seules subsistent les collisions intervallées avec émission de phonon. Dans tous les cas la probabilité de transition est une fonction croissante de l'énergie (seules les interactions sur phonons optiques polaires et phonons acoustiques piézoélectriques ont un comportement contraire [2]).

La figure 2.2 concerne l'évolution des probabilités d'interaction sur les impuretés ionisées pour les deux modèles présentés ici. Dans la limite où α , facteur de non-parabolicité reste faible le modèle de Brooks-Herring indique que $\lambda_i(\epsilon)$ varie comme $\epsilon^{-1/2}$, ne dépend pas de la concentration en impureté, est proportionnel à T_L (à cause du paramètre d'écran B). Concernant le modèle de Conwell-Weisskopf, dans les mêmes conditions, on trouve que (2,10) donne

$$\lambda_i(\epsilon) = \frac{\pi}{2} \frac{N_i^{1/3}}{\sqrt{2m_D^*}} \sqrt{\epsilon(1+\alpha\epsilon)} (1+2\alpha\epsilon) \quad (2,11)$$

ce qui montre entre autre que l'évolution avec l'énergie est contraire à la précédente. D'autre part, $\lambda_i(\epsilon)$ est proportionnel à $N_i^{1/3}$, c'est-à-dire inversement proportionnel à la distance moyenne entre deux impuretés voisines. Il apparait ainsi une importante différence entre les deux modèles, mais en pratique cette différence n'est qu'apparente. En effet, $\lambda_i(\epsilon)$ ne représente qu'un élément du phénomène de collision ; l'autre élément est représenté par la probabilité de l'angle de déflexion β dans la collision. Globalement, l'effet sur la mobilité sera le même, car le temps de relaxation τ_i qui est donné pour une collision élastique par

$$\frac{1}{\tau_i} = \int S_i(\vec{k}, \vec{k}') (1 - \cos\beta) d^3k'$$

tient compte de l'effet de la réorientation, et a pour les deux modèles une dépendance en $\epsilon^{+3/2}$ [7], le facteur multiplicatif étant le même. Les deux expressions de τ_i ne diffèrent que par un terme logarithmique qui change peu avec l'énergie du porteur.

On voit donc que lorsque l'énergie du porteur est très faible la probabilité de collision avec les impuretés ionisées devient très grande dans le modèle de Brooks-Herring. Du point de vue d'une simulation de Monte Carlo, cela exige de choisir un δt très petit. Ceci n'est pas le cas du modèle de Conwell-Weisskopf pour lequel la probabilité de collision est une fonction croissante de l'énergie, et reste limité à des valeurs raisonnables même à énergie élevée et à forte densité d'impuretés (figure 2.2). C'est la raison pour laquelle nous avons utilisé le modèle de Conwell-Weisskopf.

I.2. ETUDE DES PARAMETRES DU PREMIER ORDRE DU SILICIUM DE TYPE N. ETUDE DES DISTRIBUTIONS.

Ce paragraphe est consacré à la description de quelques résultats typiques obtenus concernant les paramètres du premier ordre dans le silicium-N : vitesse de dérive et énergie moyenne dans différentes conditions de polarisation du matériau et à différentes température de réseau ($0 \leq E \leq 50$ kV/cm ; $77^0\text{K} \leq T_L \leq 293^0\text{K}$). La plupart des résultats présentés ici ont été obtenus en appliquant le champ dans la direction $\langle 111 \rangle$, ce qui est le cas le plus intéressant du point de vue pratique. L'application d'un champ électrique suivant la direction $\langle 100 \rangle$ fait apparaître un intéressant phénomène de repopulation entre les six vallées de conduction qu'il nous a paru intéressant d'étudier.

I.2.1. Le champ est parallèle à la direction $\langle 111 \rangle$.

Le fait remarquable dans cette condition de polarisation est que les six vallées présentent une parfaite symétrie par rapport à la direction du champ électrique. Il s'ensuit que les porteurs seront échauffés par le champ électrique de la même façon, quelle que soit la vallée où ils sont situés.

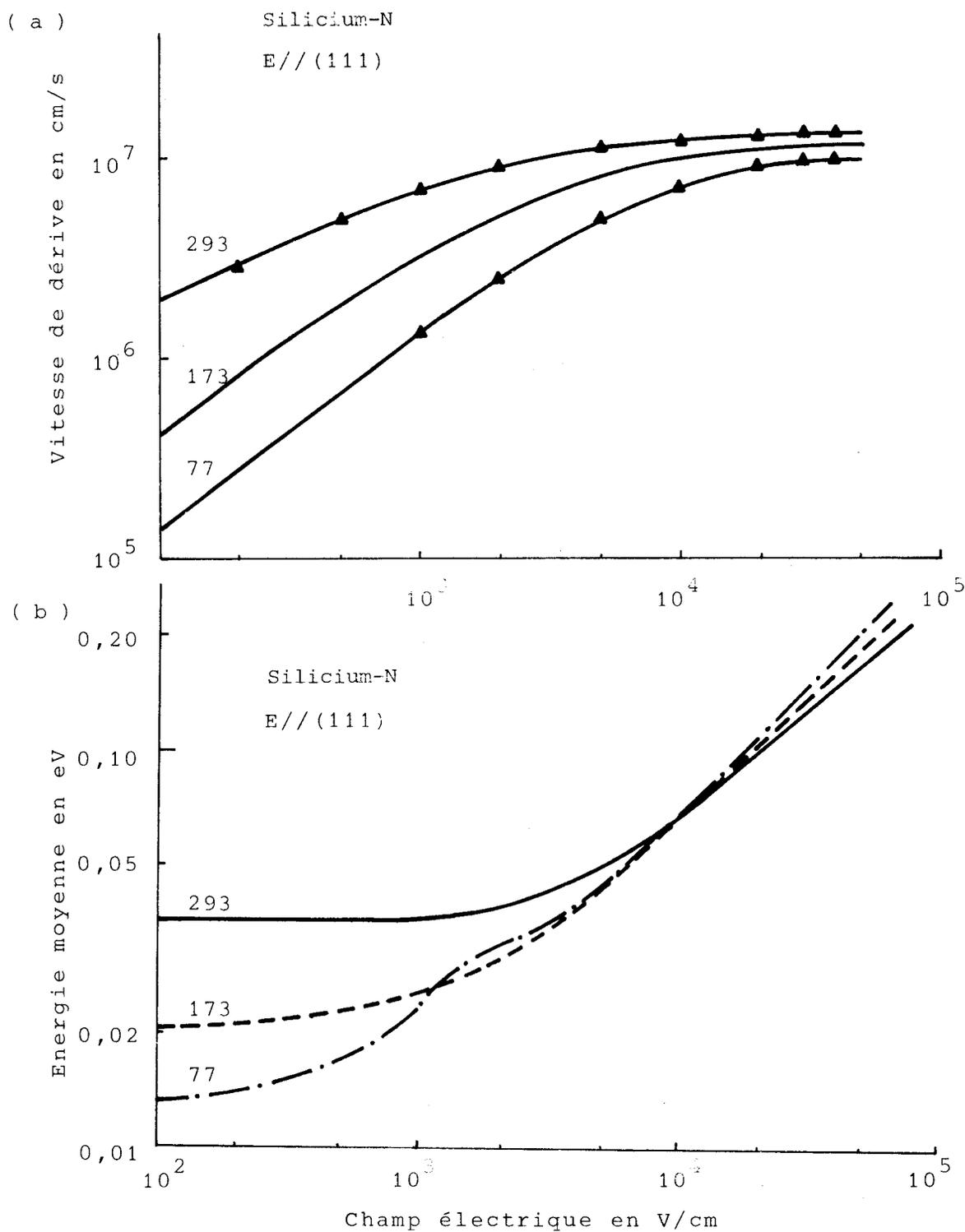


FIGURE 2,3

Evolution des vitesse de dérive et énergie moyenne avec le champ électrique, à trois températures de réseau. Les triangles sont les résultats expérimentaux de Canali /5/.



La distribution $f(\vec{k})$ est identique pour chaque vallée et chacune possède la même vitesse de dérive et la même énergie moyenne pour le même champ électrique. Il en résulte que la vitesse de dérive est une fonction monotone croissante. Les figures 2.3a et 2.3b représentent les évolutions de la vitesse de dérive et de l'énergie moyenne avec l'amplitude du champ électrique. Celles-ci sont représentées à $T_L = 77, 173$ et 293 °K. Le comportement observé est assez différent selon la température de réseau. A 77 °K pour les champs électriques voisins de zéro, l'énergie des porteurs est petite et la distribution est faible. Il en résulte qu'il n'y a pratiquement aucun porteur susceptible d'émettre des phonons intervallées de haute énergie, c'est-à-dire aucun porteur dont l'énergie soit au moins égale à l'énergie émise dans une collision inélastique. Il en résulte une augmentation assez rapide de l'énergie moyenne. Néanmoins quand le champ augmente, l'ensemble des porteurs s'échauffant, la distribution d'énergie s'élargissant, le nombre de porteurs susceptibles d'émettre des phonons augmente, et l'acroissement d'énergie moyenne avec le champ électrique sera plus faible. Aux températures de réseau plus hautes ce phénomène n'est pas détectable car même en champ faible, la densité d'énergie des porteurs est assez large pour permettre une émission assez importante de phonons très énergétiques englobant tous les types de phonons intervenant dans les collisions.

Par ailleurs, nous avons comparé les vitesses de dérive calculées avec les résultats expérimentaux obtenus par le groupe de Modène [5]. Ces résultats ont été obtenus par la technique du temps de vol sur un matériau très pur ; ce sont certainement à l'heure actuelle les résultats les plus sûrs disponibles dans la littérature qui aient été obtenus sur le silicium. On observera le bon accord existant entre théorie et expérience aussi bien à 77 °K qu'à 293 °K.

La figure 2.4 montre l'évolution des mêmes paramètres que précédemment pour différentes valeurs de concentration en impuretés du matériau entre 0 et 10^{17} cm⁻³. Un dopage élevé causant une forte diminution de la mobilité en champ faible n'a plus que peu d'importance en régime de champ fort, étant donné que les porteurs en s'échauffant et devenant plus rapides subissent de moins en moins l'influence des centres ionisés. Les courbes ont donc tendance à se rejoindre en champs très élevés. Des résultats semblables avaient été obtenus par d'autres moyens par

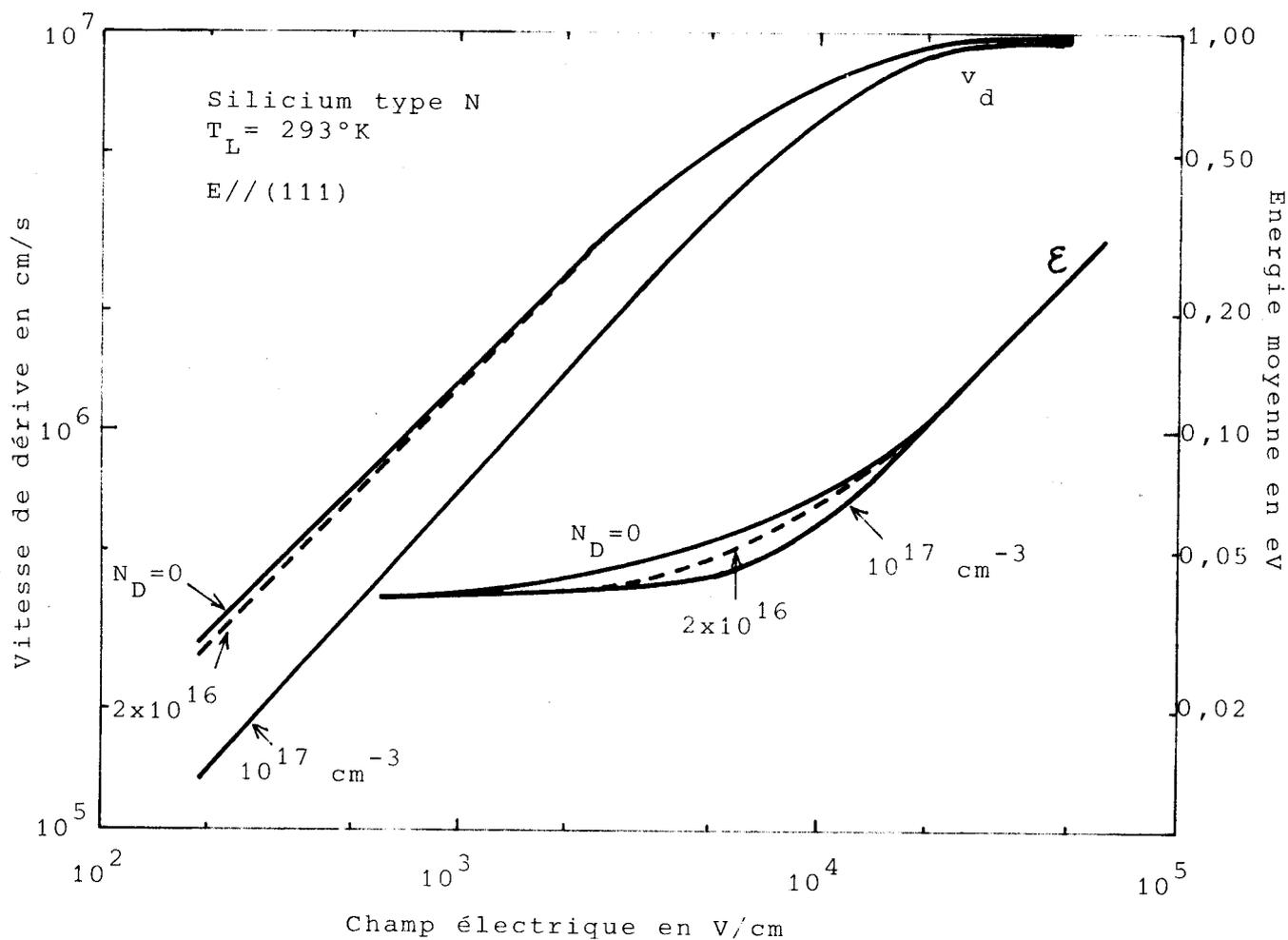


FIGURE 2,4

Evolution des vitesse de dérive et énergie moyenne avec le champ électrique et la concentration en impuretés.



Scharfetter et Gummel [11] et servent encore à l'élaboration des modèles simulant les composants microondes utilisant le silicium N. Le calcul de telles caractéristiques est nécessaire dans la mesure où l'on n'a pas les moyens d'effectuer actuellement une mesure expérimentale de vitesse de dérive dans des matériaux aussi fortement dopés que ceux qui servent dans certains composants comme les diodes à avalanche ou les transistors à effet de champ.

I.2.2. Le champ est parallèle à la direction $\langle 100 \rangle$. Etude du phénomène de repopulation.

La situation qui se présente dans ce cas est résumée dans le schéma ci-dessous (figure 2.5)

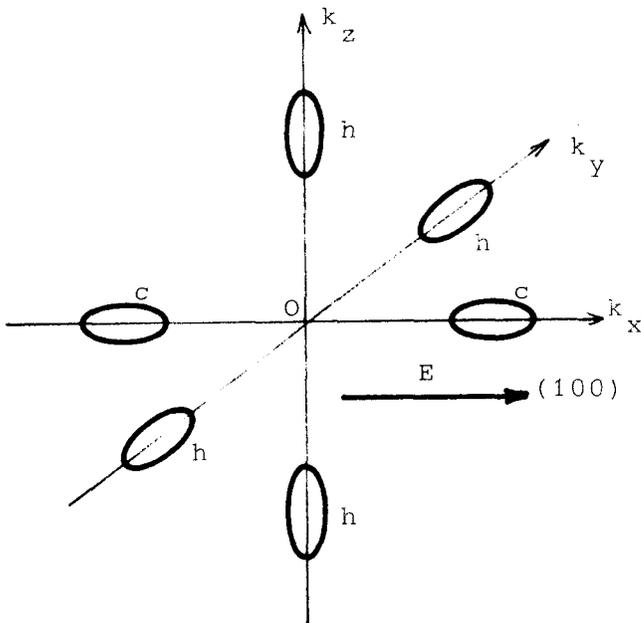


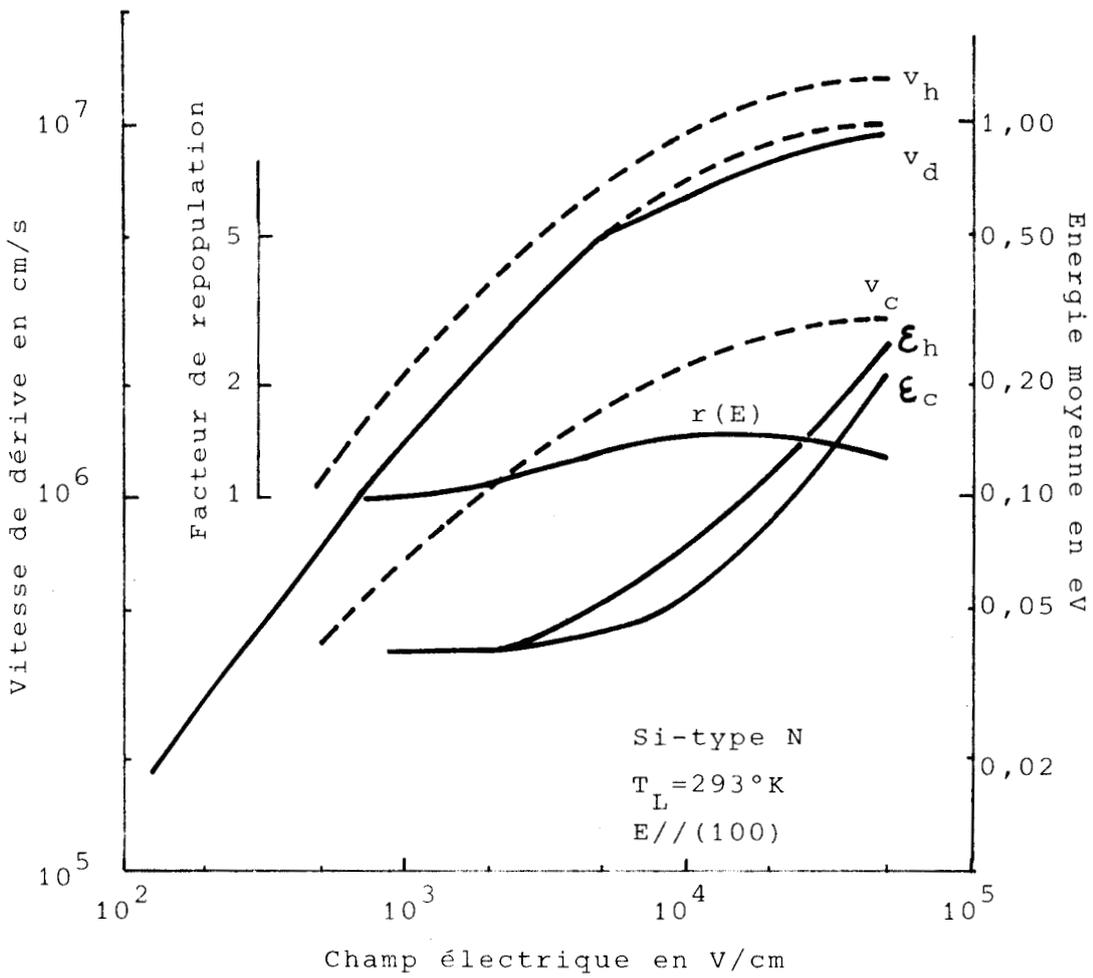
FIGURE 2,5

Positions des vallées chaudes "h" et des vallées froides "c" quand le champ électrique est appliqué suivant la direction (100) .

Dans les conditions présentes il se trouve que le porteur situé dans une vallée notée 'C' ne subira pas l'influence du champ électrique de la même façon que le porteur se trouvant dans une vallée notée 'H'. En effet, dans le premier cas le porteur aura dans la direction du champ électrique la masse m_{\perp} (grande) ; dans le second cas, il aura la masse m_t (faible). A champ égal l'accélération sera plus faible en 'C' qu'en 'H', dans le même temps le gain d'énergie (ou la perte) sera plus faible en 'C' qu'en 'H'. L'énergie et la vitesse moyenne des porteurs seront donc elles aussi plus faibles en 'C' (vallées froides) qu'en 'H' (vallées chaudes). De même si la population des porteurs est également réparties entre les six vallées à champ nul, il n'en va plus de même en champ fort. En effet, les porteurs des vallées chaudes auront tendance à effectuer un grand nombre de transitions f les amenant dans une vallée froide (la moitié des transitions f seront de ce type), et dans un premier temps les vallées chaudes auront tendance à se vider au profit des vallées froides. Toutefois si le champ est suffisamment grand, les porteurs des vallées froides seront eux aussi suffisamment échauffés pour effectuer des transitions f , vers les vallées chaudes, et ces transitions compenseront au moins partiellement la diminution de la population électronique dans les vallées chaudes. On doit donc s'attendre à constater en champ très fort un retour au moins partiel vers une répartition égale des populations des vallées. Il en résulte aussi que la contribution des porteurs de chacune des vallées sera différente selon l'amplitude du champ électrique autant en ce qui concerne la vitesse de dérive qu'en ce qui concerne l'énergie moyenne.

Un certain nombre de résultats sont donnés sur les figures 2.6a, 2.6b et 2.7. Sur les figures 2.6a et b sont reportés les allures des vitesses de dérive et les énergies moyennes à 77 °K et 293 °K. On constatera que l'effet d'anisotropie lié au phénomène de repopulation est nettement plus marqué en basse température. Ceci est dû au fait qu'à 77 °K, les porteurs des vallées froides ne peuvent pas effectuer de transferts vers les vallées chaudes compte tenu de la faible distribution de leur énergie, ce qui n'est pas le cas

(a)



(b)

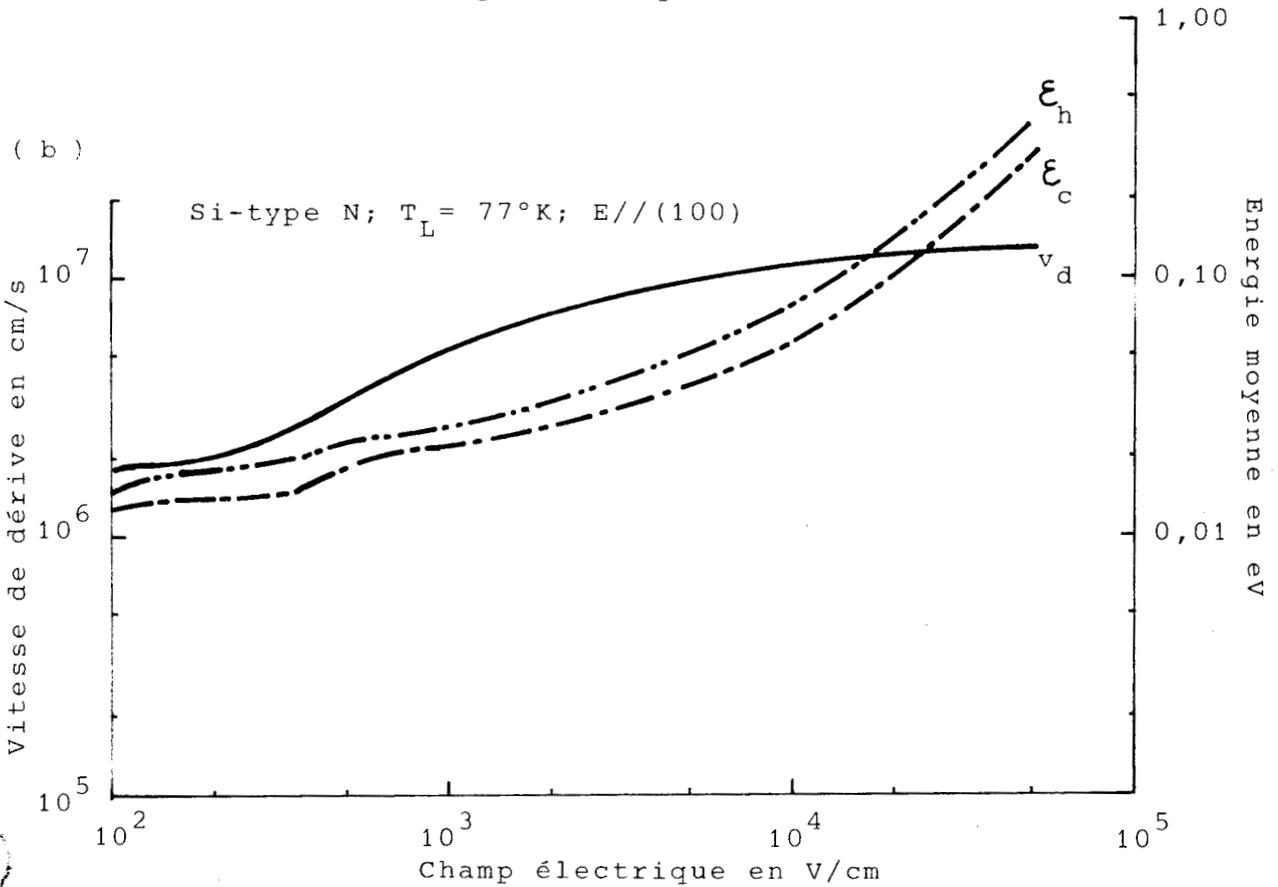


FIGURE 2,6

Evolution des vitesse de dérive, énergie moyenne et facteur de repopulation avec le champ électrique à deux températures de réseau.



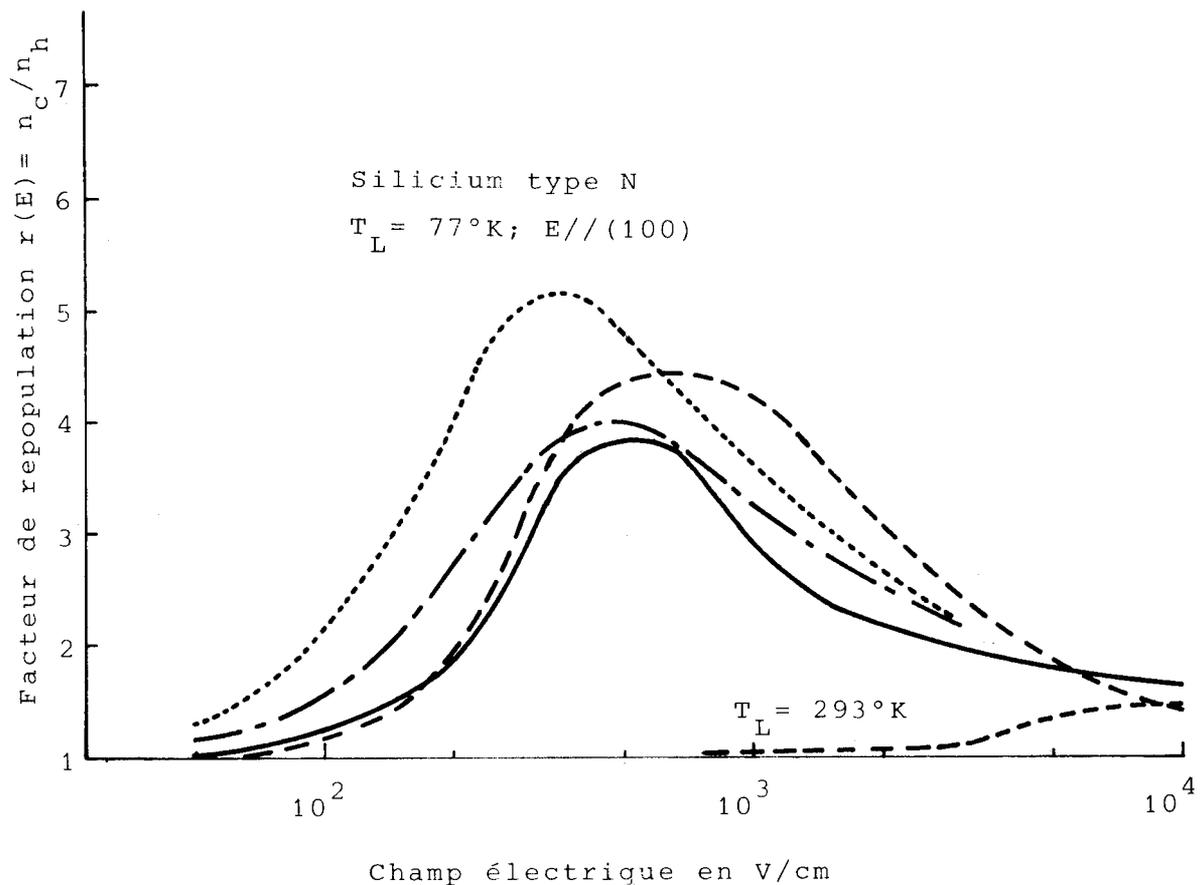


FIGURE 2,7

Evolution du facteur de repopulation avec le champ électrique à 77°K.

- expérimental Holm-Kennedy /14/
- . - expérimental Champlin /64/
- expérimental Nougier /13/
- résultats Monte Carlo



à 293 °K. On constatera qu'à champ très fort, les énergies moyennes de chaque type de vallées tendent à se rapprocher sensiblement. Par contre, les vitesses de dérive dans chaque vallée se saturent toutes deux vers des limites très différentes. Indiquons par ailleurs que l'on peut trouver une mobilité différentielle négative aux températures plus petites que 40 °K aux alentours de 100 V/cm. Ce fait a été constaté expérimentalement [5, 12].

Sur la figure 2.7, nous avons reporté l'évolution du facteur de repopulation $r(E)$ décrivant le rapport de la population des vallées froides sur celle des vallées chaudes. L'effet est bien sur beaucoup plus marqué à 77 °K qu'à 293 °K. Nous avons comparé les résultats obtenus à 77 °K avec des résultats expérimentaux disponibles dans la littérature. Les résultats expérimentaux sont obtenus directement à partir de la mesure des caractéristiques $v_d(E)$ d'un même matériau dans les directions $\langle 111 \rangle$ et $\langle 100 \rangle$ [13, 14]. La dispersion des résultats théoriques et expérimentaux est assez grande. En fait il s'avère que le facteur r est un paramètre très sensible à la précision des mesures. Ceci expliquerait au moins en partie la dispersion des résultats présentés. Une autre raison serait que ceux-ci ont été obtenus sur des matériaux de concentrations en impuretés sensiblement différentes.

I.2.3. Evolution de quelques paramètres de transport avec la température et le dopage.

Dans les études qui visent la simulation de composants à partir des équations de l'électrocinétique la connaissance des vitesses de dérive en fonction du champ électrique est considérée comme une donnée de base (le problème de la diffusion sera évoqué plus loin). A ce titre la mobilité ohmique, la vitesse de saturation des porteurs et le champ critique défini comme le rapport des deux premières jouent un rôle particulièrement important. La méthode de Monte Carlo permettant une détermination aisée de ceux-ci, nous les avons reportés dans la figures 2.8a pour un matériau pur en fonction de la température de réseau, dans la figure 2.8b à la température de 293 °K en fonction de la concentration en impuretés.

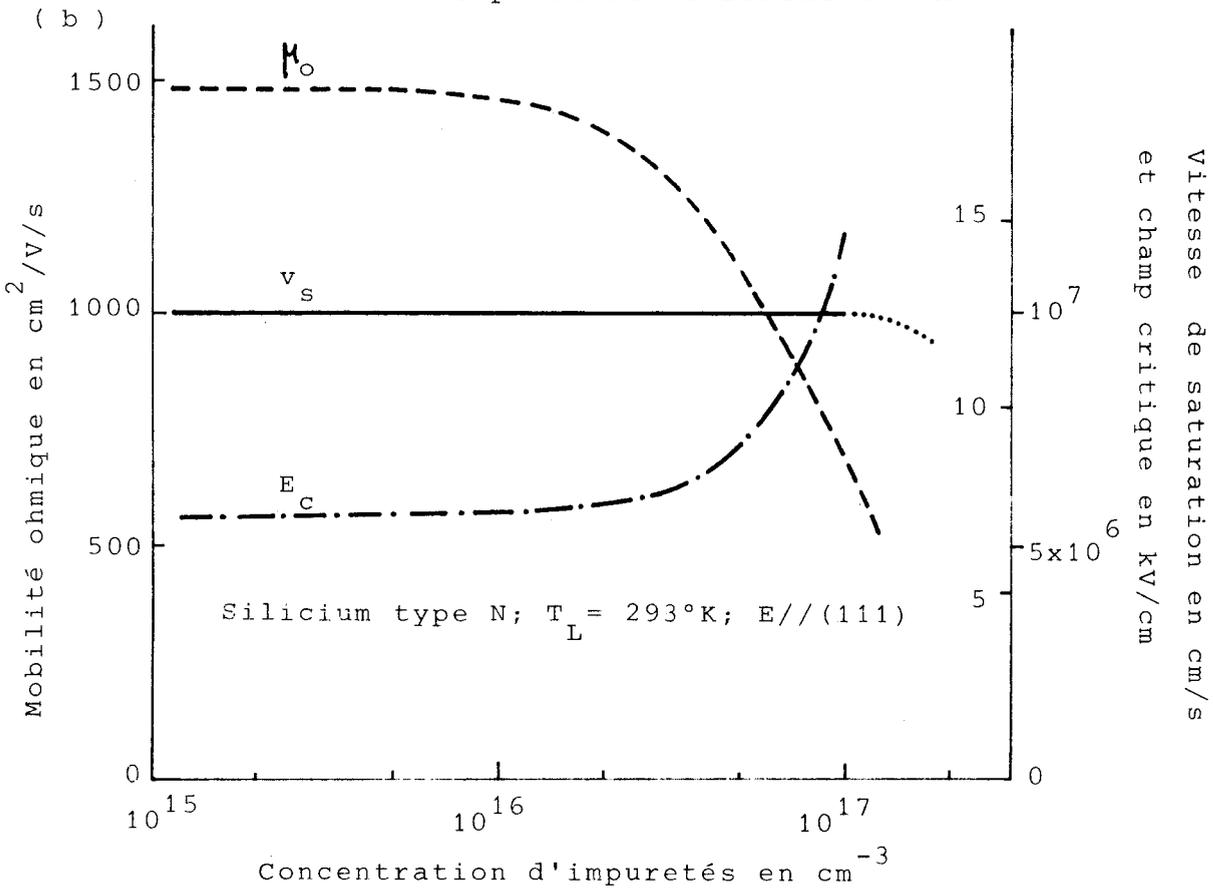
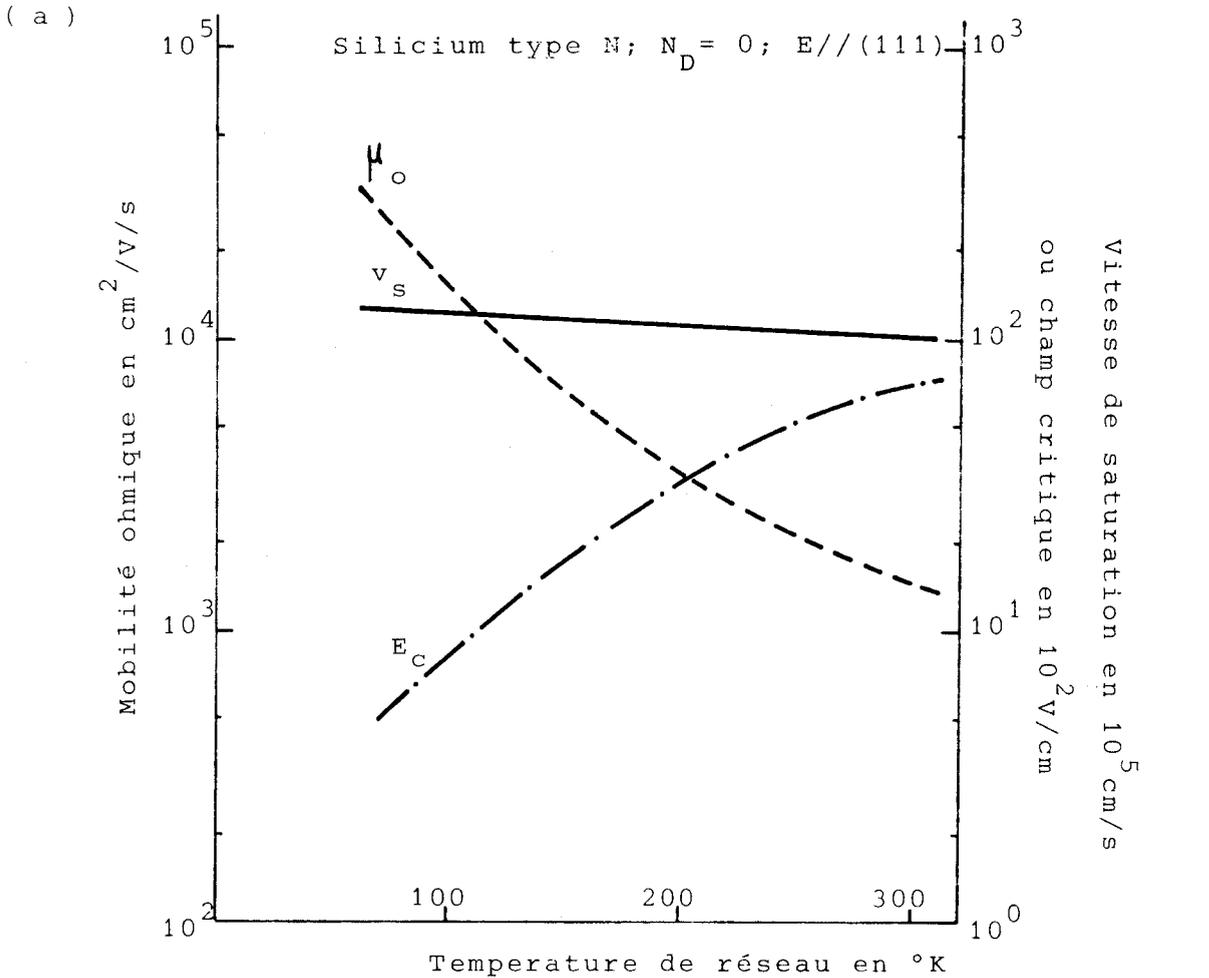


FIGURE 2,8

Evolution de la mobilité, de la vitesse de saturation, et du champ critique avec la température de réseau, et la concentration en impuretés.



I.2.4. Etude des distributions.

Nous avons déjà souligné le fait que dans les applications des méthodes de Monte Carlo, les paramètres de transport cherchés peuvent être calculés sans détermination préalable des distributions $f(\vec{k})$ et $n(\epsilon)$. Toutefois, on peut s'intéresser à celles-ci au moins pour vérifier à posteriori deux des hypothèses majeures qui ont été faites pour la résolution de l'équation de Boltzmann ($f(\vec{k})$ et $n(\epsilon)$ ont été définies au chapitre 1):

- Premièrement, dans quelle mesure l'hypothèse d'une maxwellienne déplacée est-elle valable pour décrire la distribution cherchée ?

- Deuxièmement, dans quelles limites de développement de $f(\vec{k})$ en polynômes de Legendre limité au premier ordre est-il suffisant ?

Une remarque importante concerne la façon dont on calcule les fonctions de distribution. Pour définir une fonction du type $f(k_x, k_y, k_z)$ sur l'espace réciproque, nous devons diviser ce dernier en un grand nombre de cellules parallélépipédiques. Pour obtenir une bonne définition de f , ces cellules doivent être suffisamment petites. Ceci conduit à un encombrement mémoire et à des durées de temps calcul prohibitifs. Comme, en général, on s'intéresse à l'évolution de la distribution dans la direction du champ électrique (effet de dérive) on calcule plutôt la fonction

$$G(k_x) = \int \int f(k_x, k_y, k_z) dk_y dk_z \quad (2,12)$$

lorsque le champ est appliqué selon la direction \vec{Ok}_x . C'est la fonction $f(\vec{k})$ partiellement intégrée, dont le calcul ne nécessite qu'un découpage en tranches (perpendiculaires à \vec{Ok}_x) de l'espace réciproque. Numériquement, la fonction $G(k_x)$ sera obtenue avec une meilleure précision statistique que la fonction $f(\vec{k})$ à temps de calcul égal. De plus, la densité $n(\epsilon)$ est liée à la distribution d'énergie $f(\epsilon)$ par $n(\epsilon) = \epsilon^{1/2} f(\epsilon)$.

Par ailleurs, le calcul du développement de f en série de polynôme de Legendre nécessite une détermination préalable de $f(\vec{k})$ en coordonnées polaires $f(k, \theta, \phi)$. La symétrie de $f(\vec{k})$ par rapport à ϕ fera que l'on s'intéressera à

$$G(k, \theta) = \int f(k, \theta, \phi) d\phi \quad (2,13)$$

Nous avons donc divisé le demi-plan (k, θ) en segments d'angle $\Delta\theta$ tous égaux, la longueur des segments Δk suivants la loi $\Delta k_n = (\sqrt{2}-1)\Delta k_{n-1}$ afin que les éléments de surface produits par ce découpage soient d'aire identique. Ayant défini la fonction G par le comptage dans chaque cellule, nous calculons les trois premiers termes du développement d'après la relation

$$S_1(k) = \frac{2l+1}{2} \int_0^\pi G(k, \theta) P_1(\cos\theta) \sin\theta d\theta \quad (2,14)$$

Dans la figure 2.9, nous comparons la distribution thermique à champ nul obtenue par l'observation d'un seul électron au cours du temps à 293 et 77 °K avec la distribution théorique correspondante qui est $A \exp(-\epsilon/K_B T_L)$. Les figures 2.10 et 2.11 montrent l'évolution de la densité d'énergie et de la fonction de distribution longitudinale quand le champ augmente. La figure 2.10 montre en particulier que pour les champs correspondant à la saturation de vitesse, la densité d'énergie est pratiquement plate sur un large spectre d'énergie. A ceci correspond aussi un très fort étalement de la distribution dans l'espace des phases comme on peut le voir dans la figure 2.11. On observe également que cette distribution est fortement dissymétrique par rapport à son maximum. Ceci montre que de telles distributions ne peuvent pas être approximées par une maxwellienne déplacée qui postule la symétrie comme le montre son expression

$$f(\vec{k}) = A \exp \left\{ \frac{-\pi^2 (\vec{k} - \vec{k}_d)^2}{2m^* k_B T_e} \right\}$$

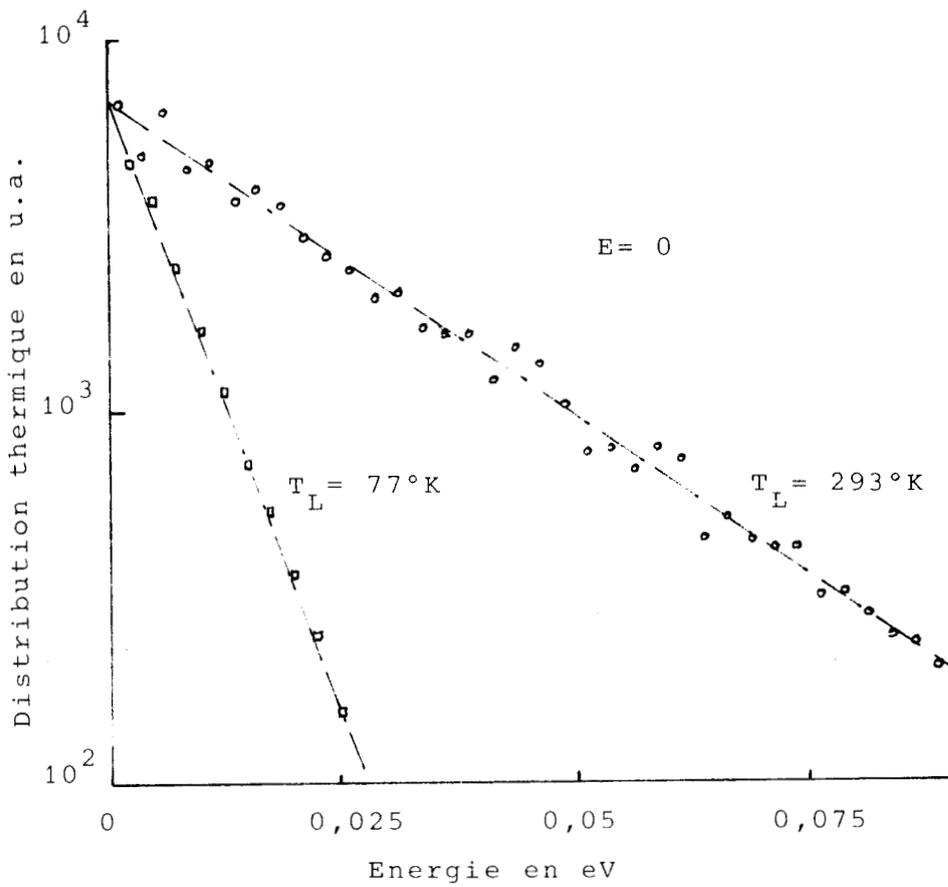


FIGURE 2,9

Distribution thermique à champ nul calculée par la simulation de Monte Carlo (Les droites sont les distributions théoriques).

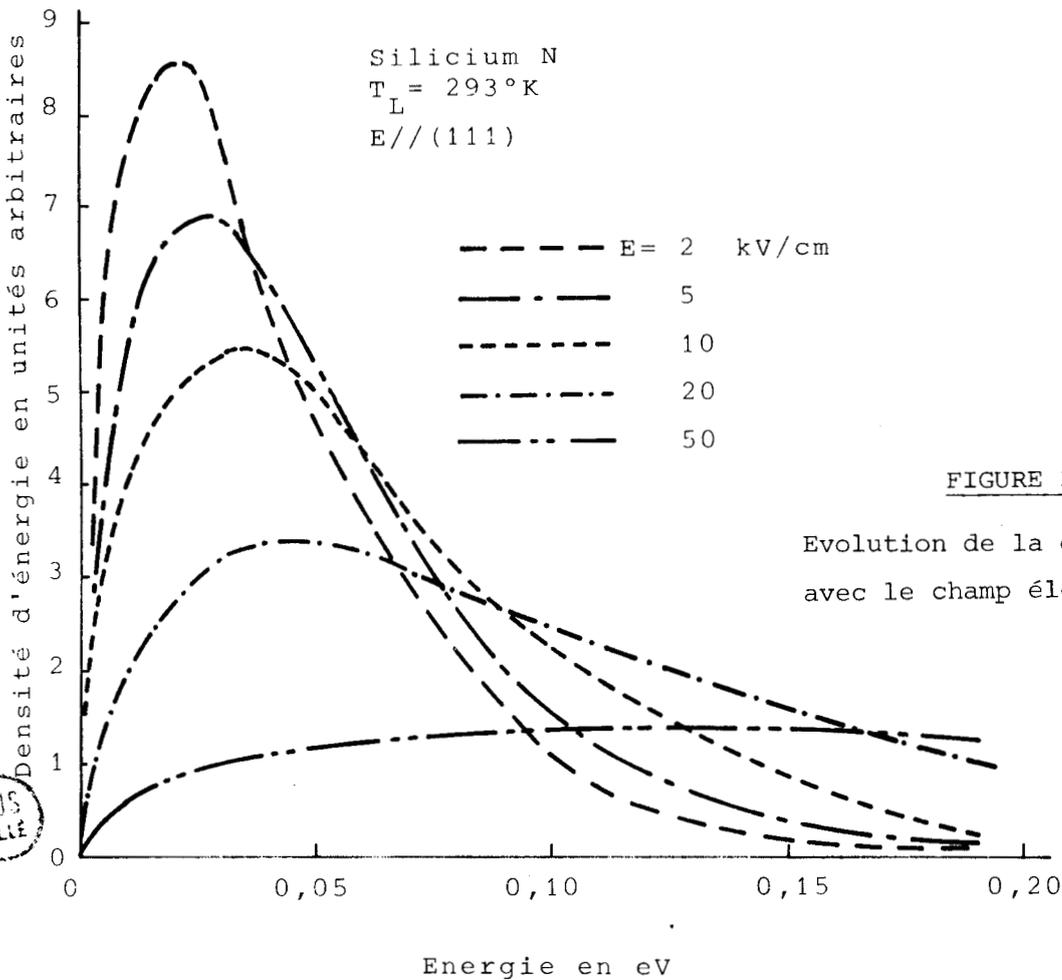


FIGURE 2,10

Evolution de la densité d'énergie avec le champ électrique.

BUS
LILLE

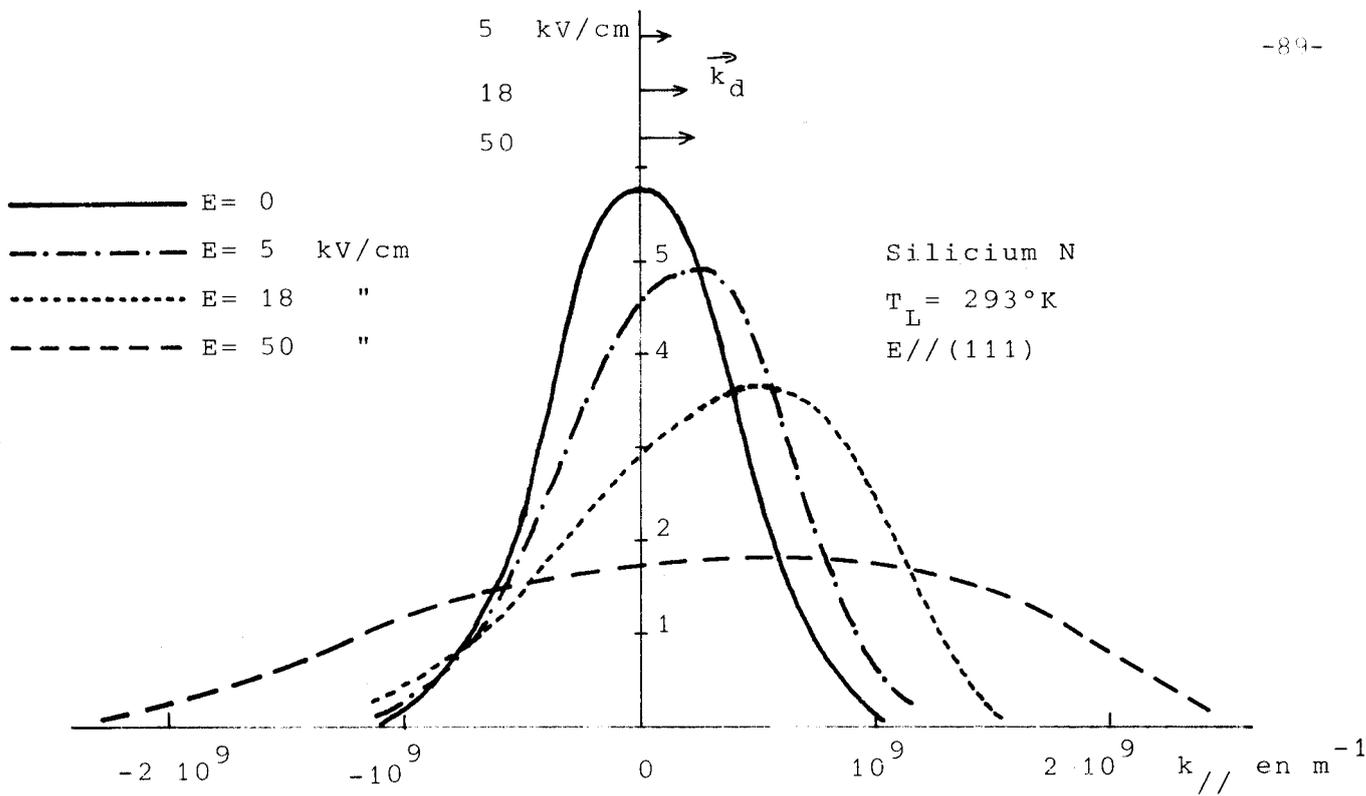


FIGURE 2,11

Evolution des distributions $G(k_{//})$ du moment avec le champ électrique à 293°K . Les fonctions sont données en unités arbitraires.

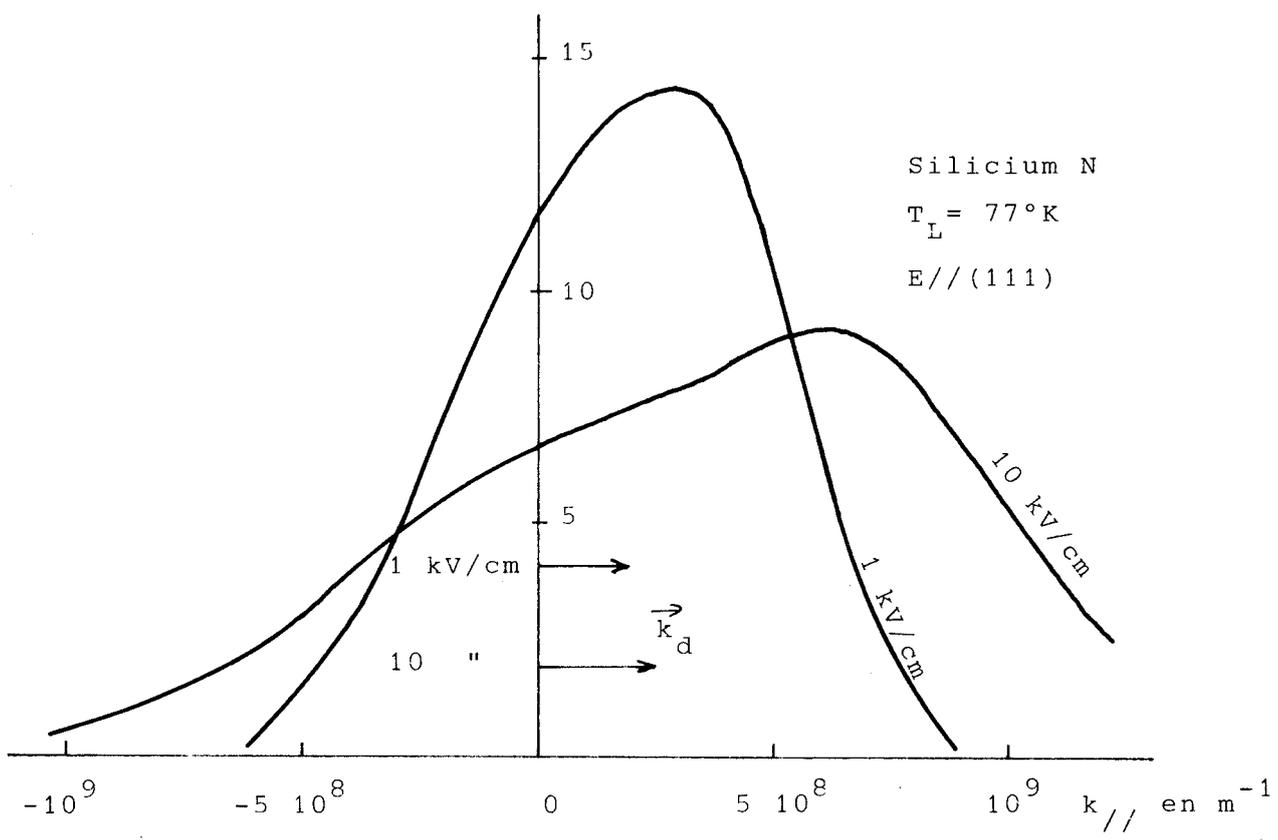


FIGURE 2,12

Evolution des distributions $G(k_{//})$ du moment avec le champ électrique à 77°K . Les fonctions sont données en unités arbitraires.

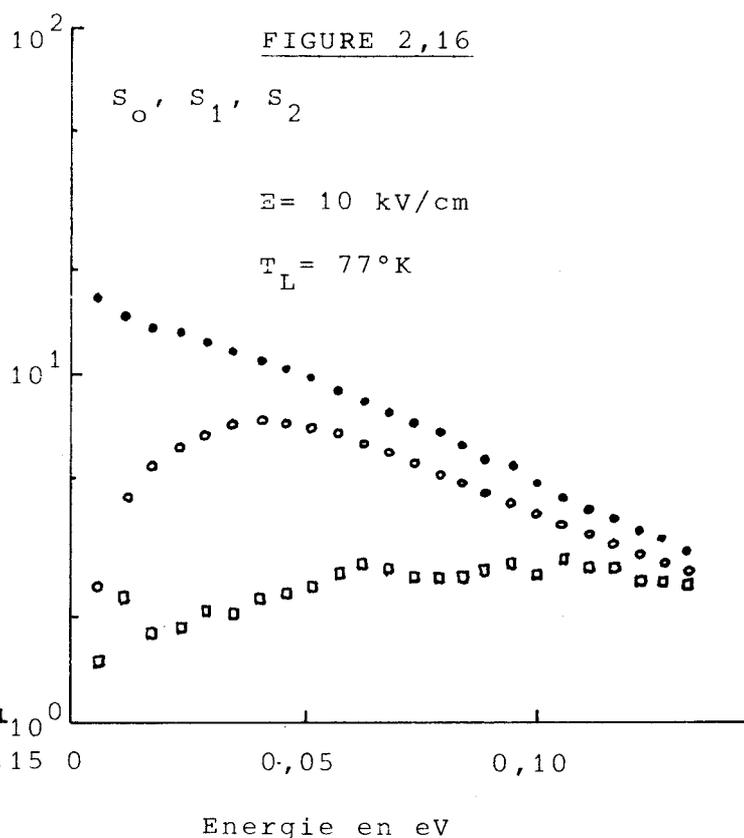
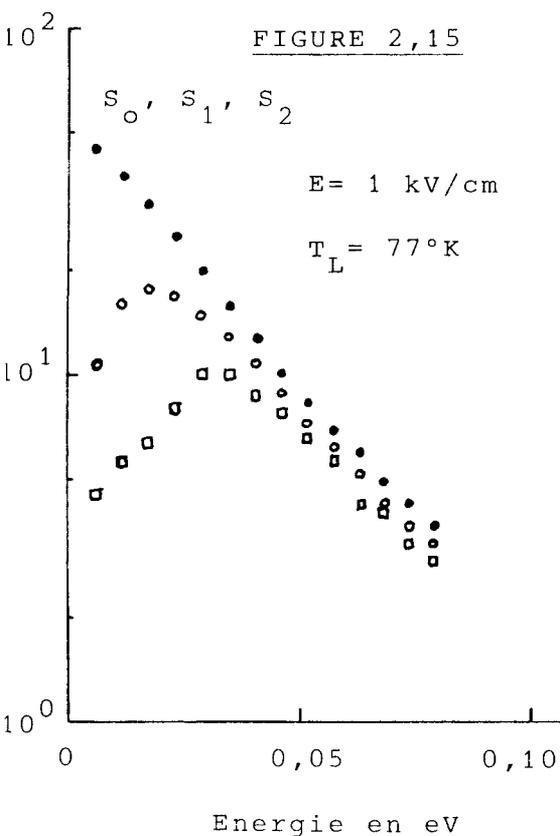
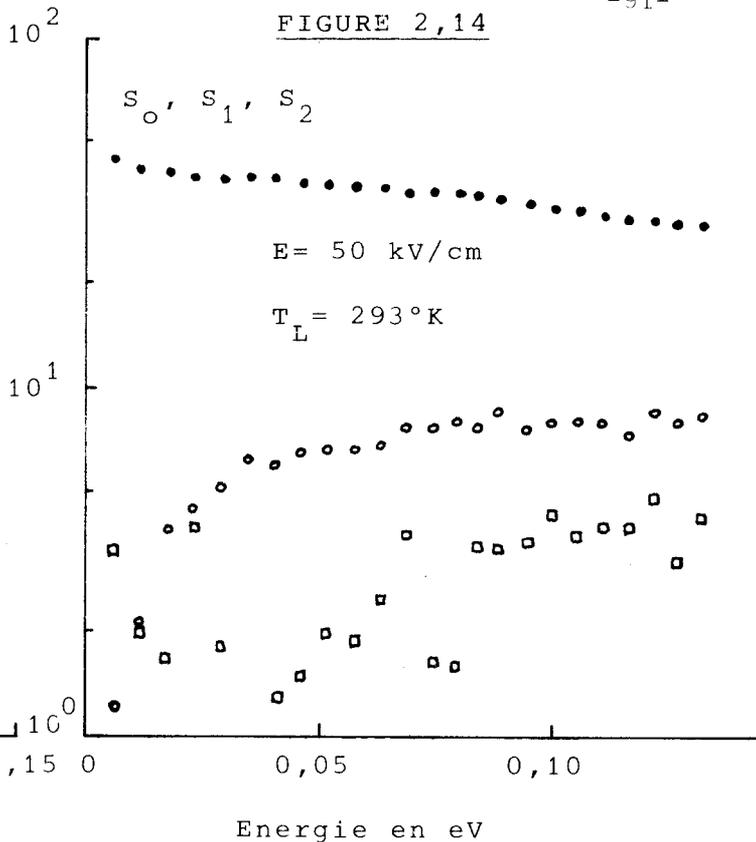
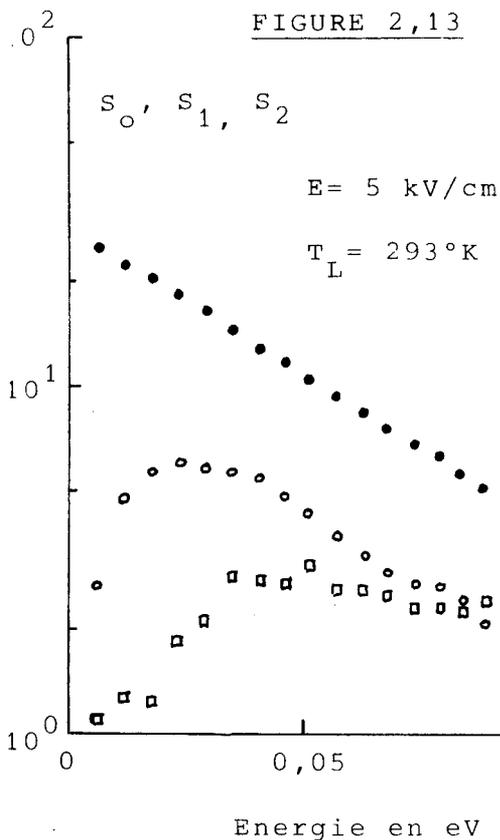


$f(\vec{k})$ présente un maximum pour $\vec{k} = \vec{k}_d$ et garde sa valeur quand $\vec{k} - \vec{k}_d$ change de signe. De plus, le sommet de la distribution se déplace en général d'une quantité plus grande que \vec{k}_d qui est proportionnelle à la vitesse de dérive. A 77 °K on obtient le même type de résultat (figure 2.12).

Sur les figures 2.13 à 2.16, nous avons effectué la décomposition des distributions en série de polynômes de Legendre jusqu'à l'ordre 2 afin de comparer le comportement de $S_0(\epsilon)$ et $S_2(\epsilon)$ avec l'énergie et l'amplitude du champ électrique. Les figures 2.13 et 2.14 concernent les résultats à 293 °K. On notera que S_2/S_0 croît quand l'énergie augmente, ce qui signifie que la dissymétrie de $f(k)$ augmente quand on s'éloigne du fond de la bande de conduction vers les énergies élevées. Par contre, quand le champ électrique est suffisamment fort pour que la distribution soit très large, la dissymétrie est moins forte et le facteur S_2/S_0 reste faible, même à énergie élevée. Ainsi à 293 °K la troncature de $f(\vec{k})$ à l'ordre 1 est d'autant mieux justifiée que le champ électrique est élevé et que l'on considère les énergies proches du centre de la bande de conduction.

Les figures 2.15 et 2.16 concernent des résultats obtenus à 77 °K. On remarque que pour $E = 1$ KV/cm, S_0 , S_1 et S_2 sont du même ordre de grandeur pour les énergies supérieures à 0,03 eV et que la troncature à l'ordre 1 n'est pas justifiée. Par contre lorsque le champ est assez fort pour que les porteurs soient en régime de vitesse saturée le rapport S_2/S_0 diminue de nouveau car la fonction $f(\vec{k})$ est alors très étalée.

L'étude des distributions lorsque le champ est appliqué dans la direction $\langle 100 \rangle$ permet de comparer l'évolution des distributions dans les vallées chaudes et dans les vallées froides, les résultats obtenus sont représentés figure 2.17. Les deux distributions observées sont très différentes. L'étalement de la distribution est beaucoup plus fort dans les vallées chaudes. Comme celles-ci sont plus nombreuses que les vallées froides, la distribution globale observée est assez proche de celles qui caractérisent les vallées chaudes.



Décomposition des distributions $f(k)$ en polynômes de Legendre à 293°K (figures 2,13 et 2,14) et 77°K (figures 2,15 et 2,16) et diverses valeurs du champ électrique ($E//\langle 111 \rangle$). \bullet : S_0 ; \circ : S_1 ; \square : S_2 .



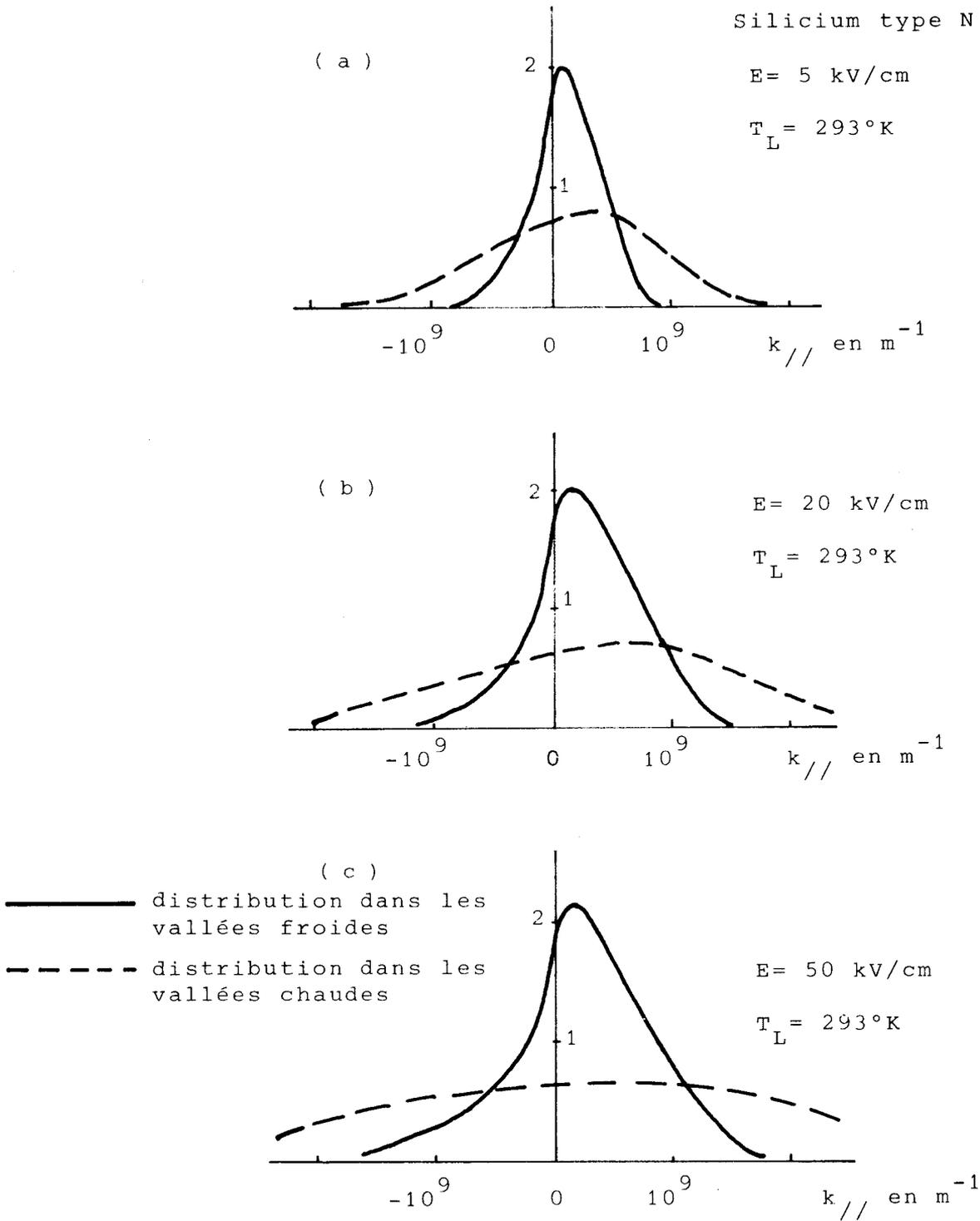


FIGURE 2,17

Evolution des distributions $G(k_{//})$ données en unités arbitraires, avec le champ électrique appliqué suivant la direction (100) à 293°K .



I.3. PARAMETRES DU SECOND ORDRE : COEFFICIENT DE DIFFUSION.

Dans ce paragraphe nous rappelons tout d'abord les différentes façons de définir le coefficient de diffusion qui peut caractériser soit l'étalement d'un paquet de porteurs en excès à l'intérieur d'un matériau, soit le désordre lié aux fluctuations de vitesse des porteurs.

On distingue ainsi le coefficient de diffusion d'étalement et le coefficient de diffusion de bruit, lesquels peuvent être reliés également au coefficient de diffusion qui définit le courant de diffusion des porteurs quand existe un gradient de concentration.

L'équivalence théorique et numérique en champ électrique élevé des coefficients de diffusion d'étalement et de bruit est un problème qui n'a été abordé que très récemment dans le cas d'un certain nombre de semiconducteurs [15, 16]. Nous montrons que l'égalité des deux coefficients requiert des conditions sur les temps d'observation pour l'un, sur les fréquences de mesure pour l'autre. L'étude numérique que nous présentons ensuite permet de chiffrer ces temps et ces fréquences et de montrer l'égalité numérique des deux coefficients lorsque ces conditions sont respectées. Nous nous intéressons aussi à leur évolution avec le temps et la fréquence. En particulier nous analysons les différences existant entre ces évolutions selon que le matériau est polarisé dans la direction $\langle 111 \rangle$ ou dans la direction $\langle 100 \rangle$. Dans une dernière partie nous comparons certains de nos résultats obtenus en régime statique avec les résultats expérimentaux disponibles actuellement dans la littérature.

I.3.1. Rappels de définitions.

I.3.1.1. Etalement d'un paquet de porteurs.

Cet aspect de la diffusion est lié à la dispersion naturelle de la position des porteurs d'un paquet entraîné ou non par un champ électrique. Si l'on imagine deux porteurs qui à un instant donné t_0 passent au même point du cristal, au bout d'un certain temps T , les positions $x_1(T)$ et $x_2(T)$ de ces porteurs

mesurées suivant une même direction seront différentes du fait des fluctuations aléatoires de la vitesse des porteurs le long de la trajectoire et l'éventualité que les valeurs $x_1(T)$ et $x_2(T)$ puissent être exactement égales à un instant quelconque T est exclue. Si l'on imagine qu'à un instant t_0 l'on ait N porteurs en $x = 0$ et $y = 0$ (la concentration est un Dirac dans l'espace à un instant t_0), on observera à l'instant T ultérieur que le paquet se sera déplacé dans l'ensemble suivant la direction indiquée par le champ électrique appliqué selon \vec{Ox} , qu'à la position $x(T) = v_d T$, la concentration possède un maximum et que les porteurs se sont distribués autour de cette position (figure 2.18).

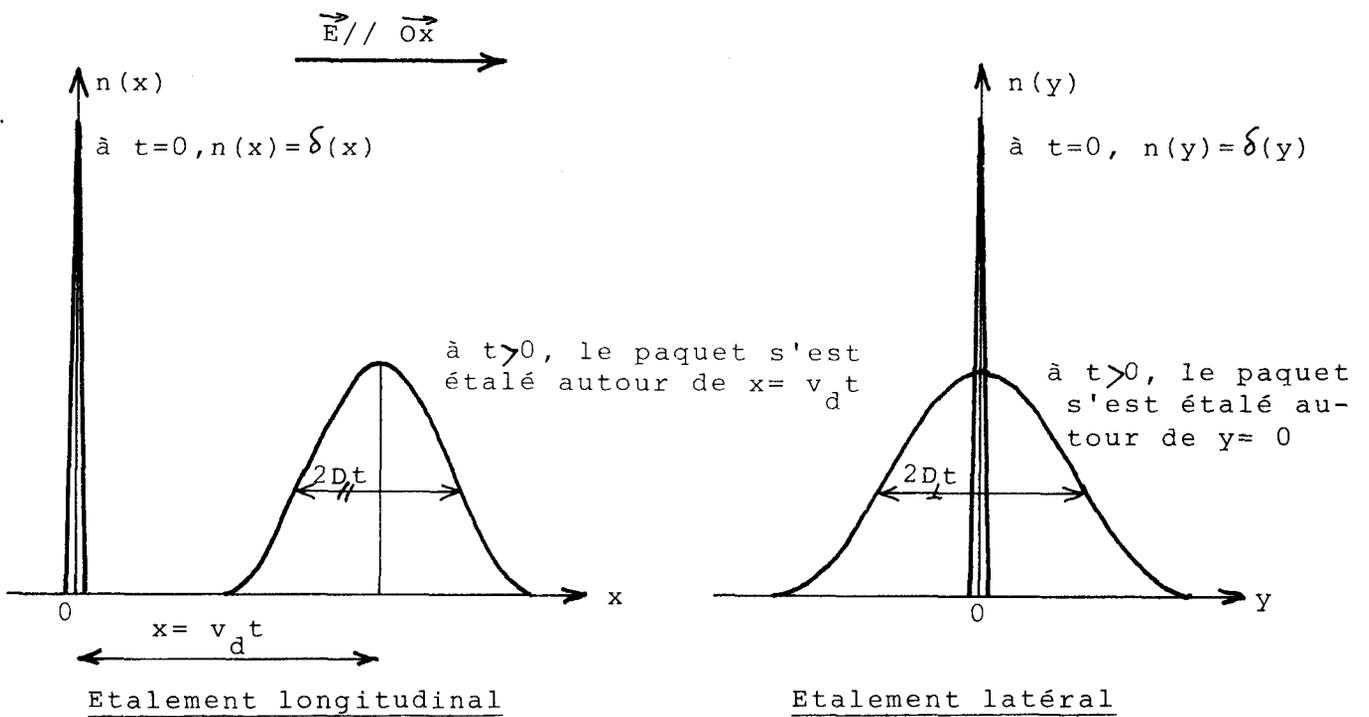


FIGURE 2,18 Effets de la diffusion longitudinale et de la diffusion transversale sur un paquet de porteurs.

Si l'on observe ce qui se passe selon la direction y perpendiculaire à la direction du champ, on verra que le paquet s'est également étalé autour de son maximum, mais que ce dernier reste en $y = 0$. Les coefficients de diffusion statiques (parallèle ou transverse par rapport à la direction du champ appliqué) mesurent la vitesse d'étalement du paquet au cours du temps. Plus précisément

$$D_{P//}(E) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2t} \text{var } x(t) \quad (2,15)$$

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

où $\text{var}x(t)$ et $\text{var } y(t)$ sont les variances des distances parcourues par les porteurs dans une direction respectivement parallèle et perpendiculaire à celle du champ appliqué. On a supposé ici qu'à l'instant t_0 où le système commence à être observé celui-ci est dans son état stationnaire correspondant au champ électrique appliqué.

La méthode de Monte Carlo ne pouvant simuler qu'un nombre fini de pas temporels élémentaires, le temps d'observation t ne pourra pas tendre vers l'infini, et les coefficients de diffusion seront alors donnés d'après [15] par

$$D_{P//}(t,E) = \frac{\text{var}x(t)}{2t} \quad (2,16)$$

$$D_{P\perp}(t,E) = \frac{\text{var}y(t)}{2t}$$

Le nombre total de pas élémentaires de simulation nN (N électrons et $T_{\max} = n\delta t$) étant limité par les possibilités du ordinateur, une augmentation du nombre N de porteurs entraîne une diminution de la durée de simulation et vice versa. L'estimation de la variance nécessitant un nombre minimum de porteurs, la durée d'observation sera limitée par valeurs supérieures. Pour des temps d'observation t suffisamment grand $D_{p//}$ et $D_{p\perp}$ ne varient plus avec le temps. Par contre pour des temps d'observation courts $D_{p//}$ et $D_{p\perp}$ varient avec t . On voit qu'il est nécessaire de définir une valeur minimum du temps d'observation à partir de laquelle les coefficients ne dépendent plus du temps de façon estimable. L'étude de l'évolution fréquentielle du coefficient de diffusion permet d'estimer cette valeur minimum.

1.3.1.2. Coefficient de diffusion de bruit.

L'autre aspect du phénomène de diffusion se traduit par le bruit lié aux fluctuations des vitesses des porteurs. Ce bruit de diffusion est caractérisé par sa densité spectrale en puissance $S(\omega)$ qui est, en vertu du théorème de Wiener-Kintchine, la transformée de Fourier de la fonction de corrélation des fluctuations de vitesse

$$\phi_{//}(t) = \langle (v_x(t+u) - v_d)(v_x(u) - v_d) \rangle$$

et

$$S_{//}(\omega) = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_{//}(t) \exp(-j\omega t) dt \tag{2,17a}$$

$$\phi_{\perp}(t) = \langle v_y(t+u)v_y(u) \rangle$$

et

$$S_{\perp}(\omega) = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_{\perp}(t) \exp(-j\omega t) dt \tag{2,17b}$$

v_d est la vitesse de dérive stationnaire due au champ appliqué et le symbole $\langle \rangle$ représente la prise d'une moyenne sur le temps noté u . On a alors le coefficient voulu par

$$D_B(\omega) = \frac{S(\omega)}{4} = \int_0^{\infty} \phi(t) \cos \omega t \, dt \quad (2,18a)$$

le coefficient de diffusion statique étant donné par

$$D_B = \lim_{\omega \rightarrow 0} D_B(\omega) = \int_0^{\infty} \phi(t) \, dt \quad (2,18b)$$

Si l'on définit un temps de corrélation τ par

$$\tau = \frac{1}{\phi(0)} \int_0^{\infty} \phi(t) \, dt = \tau(E) \quad (2,19)$$

les coefficients de diffusion seront donnés par les relations

$$D_{B//}(E) = \text{var} v_{//}(E) \tau_{//}(E) \quad (2,20)$$

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

La détermination des coefficients de diffusion de bruit repose sur l'intégration d'une fonction sur un domaine infini. Toutefois, les fonctions de corrélation s'annulent aux temps longs car alors les valeurs de la vitesse aux instants

$t+u$ et u sont totalement décorréllées. On pourra donc remplacer la borne infinie par une borne finie. Néanmoins une difficulté supplémentaire existe dans la mesure où d'un point de vue statistique la fonction de corrélation calculée ne s'annule jamais mais fluctue plus ou moins fortement autour de zéro. Ces fluctuations sont d'autant plus faibles que l'intégrale effectuée pour le calcul de $\phi(t)$ est calculée sur une simulation plus longue. Ceci implique qu'il n'y a pas un gain de temps calcul déterminant entre les deux modes de calcul possibles des coefficients de diffusion (étalement ou bruit).

D'une façon générale, la détermination des coefficients de diffusion nécessite une analyse pendant un temps d'observation aussi grand que possible et il faut dans chaque cas pratique étudier avec soin si les temps de calcul utilisés sont suffisants.

1.3.2. Equivalence théorique des deux définitions.

Les définitions des coefficients de diffusion que nous venons de donner reposent sur l'analyse de deux conséquences d'un même phénomène physique qui est celui de la fluctuation stochastique de la ou des vitesses d'un ou plusieurs porteurs soumis aux interactions aléatoires avec le milieu où ils évoluent. On peut se poser la question de savoir dans quelles conditions les paramètres ainsi définis sont égaux [17].

Considérons la fonction de corrélation $\phi(t)$ que l'on calcule

$$\phi(t) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T [v(t+u) - v_d][v(u) - v_d] du \tag{2,21}$$

laquelle peut être considérée pour toute valeur de t comme la limite quand $T \rightarrow \infty$ d'une fonction $\phi_T(t)$ qui est la fonction de corrélation de la restriction $\Delta v_T(t)$ à l'intervalle $[0, T]$ de la fluctuation de vitesse $\Delta v(t) = v(t) - v_d$ définie sur l'intervalle $[0, \infty]$. Cette restriction admet comme transformée de Fourier

$$V_T(\omega) = \int_0^T \Delta v_T(t) \exp(-j\omega t) dt$$

On peut alors écrire

$$\phi(t) = \lim_{T \rightarrow \infty} \phi_T(t) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \Delta v_T(t) * \Delta v_T(-t)$$

où * est le produit de convolution de Δv_T par elle-même. Prenant la transformée de Fourier des deux membres on trouve

$$S(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} |V_T(\omega)|^2 \tag{2,22}$$



qui moyennée sur un ensemble de N porteurs donne

$$S(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \overline{\left| \int_0^T \Delta v_T(t) \exp(-j\omega t) dt \right|^2} = 2D_B(\omega)$$

Or le coefficient de diffusion de bruit était aussi défini par

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

si bien que

$$D_B = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \overline{\left| \int_0^T \Delta v_T(t) dt \right|^2} \tag{2,23}$$

Dans $\overline{\left| \int_0^T \Delta v_T(t) dt \right|^2}$ on reconnaît la variance de position des N porteurs à l'instant T, et l'on aboutit à la relation :

$$D_B(\omega) = D_P(T) \quad (2,24)$$

$$\omega \rightarrow 0 \quad T \rightarrow \infty$$

Il y a égalité du coefficient de diffusion de bruit en basse fréquence avec le coefficient de diffusion d'étalement de paquet aux temps très longs. En pratique ceci correspond, d'une part aux fréquences très faibles devant l'inverse du temps de corrélation τ , d'autre part à des temps d'observation très grands devant le temps de corrélation.

1.3.3. Equivalence numérique de D_p et D_B .

Compte tenu de ce qui vient d'être dit en ce qui concerne la détermination du coefficient de diffusion statique par l'étalement du paquet de porteur, on peut se demander quel intérêt il y a à parler d'un coefficient de diffusion de bruit. En fait cet intérêt est double.

D'une part il y a un intérêt direct à connaître $D_B(\omega)$ c'est-à-dire à connaître la dépendance fréquentielle du coefficient de diffusion dans la mesure où ce paramètre permet de caractériser les propriétés de bruit de diffusion des composants utilisant le matériau étudié. Il s'avère que les fréquences à partir desquelles D_B commence à varier sensiblement sont de l'ordre de 150 à 300 GHz comme le montre l'expérience. Ces fréquences sont à la limite de ce qui est concevable actuellement dans le domaine de certains composants microondes. Il pourrait alors s'ensuivre une modification plus ou moins profonde des propriétés de bruit de fond de ces composants, ce qui pourrait influencer à la fois sur leur fonctionnement et sur leurs conditions d'utilisations. Dans le domaine

fréquentiel inférieur, la dépendance fréquentielle de D_B ne se fera pas sentir et l'évolution du bruit de fond est liée alors uniquement aux caractéristiques de fonctionnement du composant : condition de polarisation, détermination de la carte du champ électrique interne, temps de transit des porteurs ...

D'autre part, le second intérêt de connaître $D_B(\omega)$ est de mettre en lumière la dualité existant entre ce paramètre et $D_p(t)$. En particulier il est nécessaire de connaître le temps minimal T nécessaire à une bonne détermination du coefficient de diffusion par étalement. Deux cas peuvent être considérés.

I.3.3.1. Cas des temps courts ($t \ll \tau$).

Dans ce cas ni les collisions subies par les porteurs ni le champ appliqué n'ont le temps de faire varier la vitesse. Il en résulte que

$$D_p(t) = \frac{\text{var}x(t)}{2t} = \frac{\left(\int_0^t (v(t) - v_d) dt \right)^2}{2t} = \frac{t}{2} \text{var } v \quad (2,25)$$

D_p varie linéairement avec le temps d'observation et ne dépend que de la variance de la vitesse. Si l'instant d'observation t est beaucoup plus petit que le temps de corrélation les collisions n'ont pas encore le temps d'intervenir, et l'étalement du paquet ne dépend que de la distribution initiale des vitesses des porteurs. De plus, du point de vue de la statistique, c'est la partie de la courbe la plus aisée à obtenir lors de la simulation de l'étalement d'un paquet de porteurs par la méthode de Monte Carlo. Au domaine des temps très courts correspond le domaine des fréquences élevées du spectre de $D_B(\omega)$, et il est intéressant de remarquer que ce sont les valeurs de D_B pour les fréquences les plus élevées qui sont les plus difficiles à obtenir du fait que $D_B(\omega)$ est la transformée de Fourier d'une fonction entachée de fluctuations statistiques plus ou moins fortes (relations 2,18).

I.3.3.2. Cas des temps longs ($t \gg \tau$).

C'est précisément à cette condition que l'égalité entre les coefficients de diffusion de bruit et d'étalement est garantie. Dans ce cas la variance des positions dans les directions longitudinale et perpendiculaire varie linéairement avec le temps et les valeurs de $D_p(t)$ ne doivent plus dépendre du temps. A ce domaine temporel correspond la partie basse fréquence du spectre $D_B(\omega)$, c'est-à-dire celle où le spectre est blanc. L'expérience montre que dans la plupart des matériaux et dans la plupart des conditions de champ électrique les fréquences incriminées sont de l'ordre de 100 GHz. Ceci indique que l'on doit observer l'étalement du paquet pendant au moins 2 psec avant de constater que $D_p(t)$ ne change plus de valeur.

Globalement, les spectres $D_p(\omega = \frac{1}{t})$ et $D_B(\omega)$ ont des allures très voisines. Une relation générale entre $D_p(t)$ et $D_B(\omega)$ a d'ailleurs été obtenue récemment durant l'élaboration de ce travail [15]

$$D_p(t) = \frac{t}{\pi} \int_0^{\infty} \left[\frac{\sin(\omega t/2)}{t/2} \right]^2 D_B(\omega) d\omega \quad (2,26)$$

Le cas le plus simple auquel on pourrait appliquer cette relation serait celui d'un matériau en l'absence de champ électrique. La fonction de corrélation correspondante est une exponentielle décroissante et le temps de corrélation τ est le temps de relaxation moyen du moment. Le spectre correspondant serait :

$$D_B(\omega) = \frac{D_c}{1 + \omega^2 \tau^2}$$

et la variance des déplacements associée serait

$$\text{var } x(t) = 2D_0 t + 2D_0 \tau \left(e^{-\frac{t}{\tau}} - 1 \right)$$

donnant pour coefficient de diffusion

$$D_p(t) = D_o + \frac{D_o \tau}{t} \left(e^{-\frac{t}{\tau}} - 1 \right)$$

Malheureusement l'allure des spectres n'est jamais si simple. Mais la relation (2,26) montre que le comportement des porteurs en étalement est entièrement déterminable lorsque l'on connaît le spectre de diffusion de bruit ou la fonction de corrélation du système.

I.3.3.3. Résultats concernant le silicium type N.

Nous avons calculé les fonctions de corrélation de vitesse et les spectres associés $D_B(\omega)$ pour un certain nombre d'amplitudes de champ électrique appliqué soit suivant la direction $\langle 100 \rangle$ (figures 2.19 et 2.20) soit suivant la direction $\langle 111 \rangle$ (figures 2.21 et 2.22). Dans chaque cas nous effectuons, sur la même courbe et pour les mêmes conditions, la comparaison entre le spectre de bruit $D_B(\omega)$ et le spectre en étalement $D_p(\omega = \frac{1}{t})$. Bien que la relation (2,26) montre qu'il n'existe pas un rapport simple entre D_B et D_p , on constate que les évolutions avec la fréquence sont tout à fait similaires. En particulier les spectres dans la direction $\langle 100 \rangle$ (figures 2.19 et 2.20) passent par un maximum et ne sont pas des fonctions monotones décroissantes (remarquons que les fonctions de corrélation associées passent alors par des valeurs négatives), contrairement aux spectres dans la direction $\langle 111 \rangle$ (figures 2.21 et 2.22) qui sont toujours monotonement décroissantes et sont associés à des fonctions de corrélation restant toujours positives.

On sait que quand le champ est appliqué suivant la direction $\langle 100 \rangle$ on observe des transferts entre vallées non-équivalentes, chaque type de vallées étant caractérisé par une vitesse de dérive différente, l'une étant plus petite et l'autre plus grande que la vitesse de dérive globale. Ce fait est à rapprocher de ce qui se passe dans le GaAs et l'InP pour les champs supérieurs au champ de seuil occasionnant également des transferts entre vallées non équivalentes.

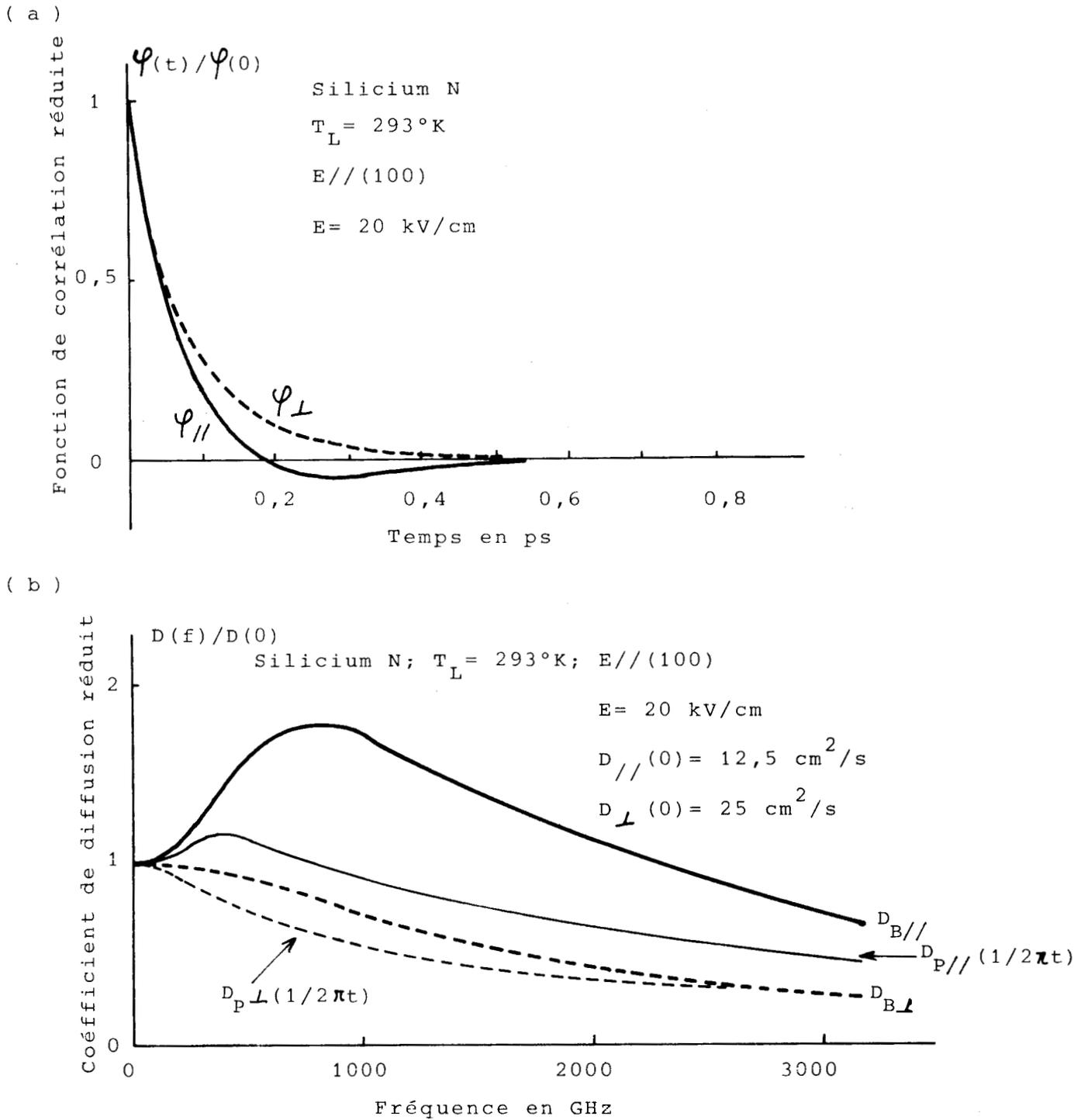


FIGURE 2,19

Fonctions de corrélation et spectres de diffusion de bruit associés. Comparaison aux spectres de diffusion d'étalement: $\vec{E} // (100)$. $E = 20 \text{ kV/cm}$



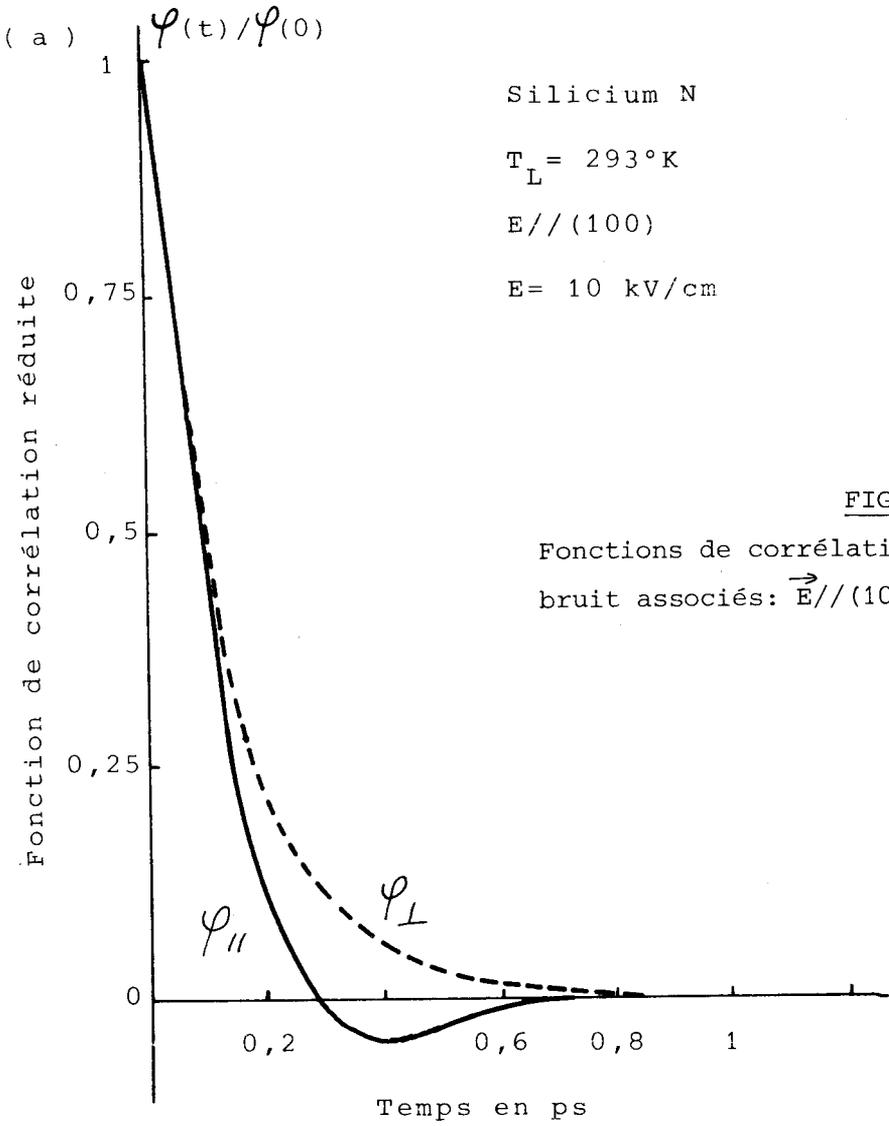
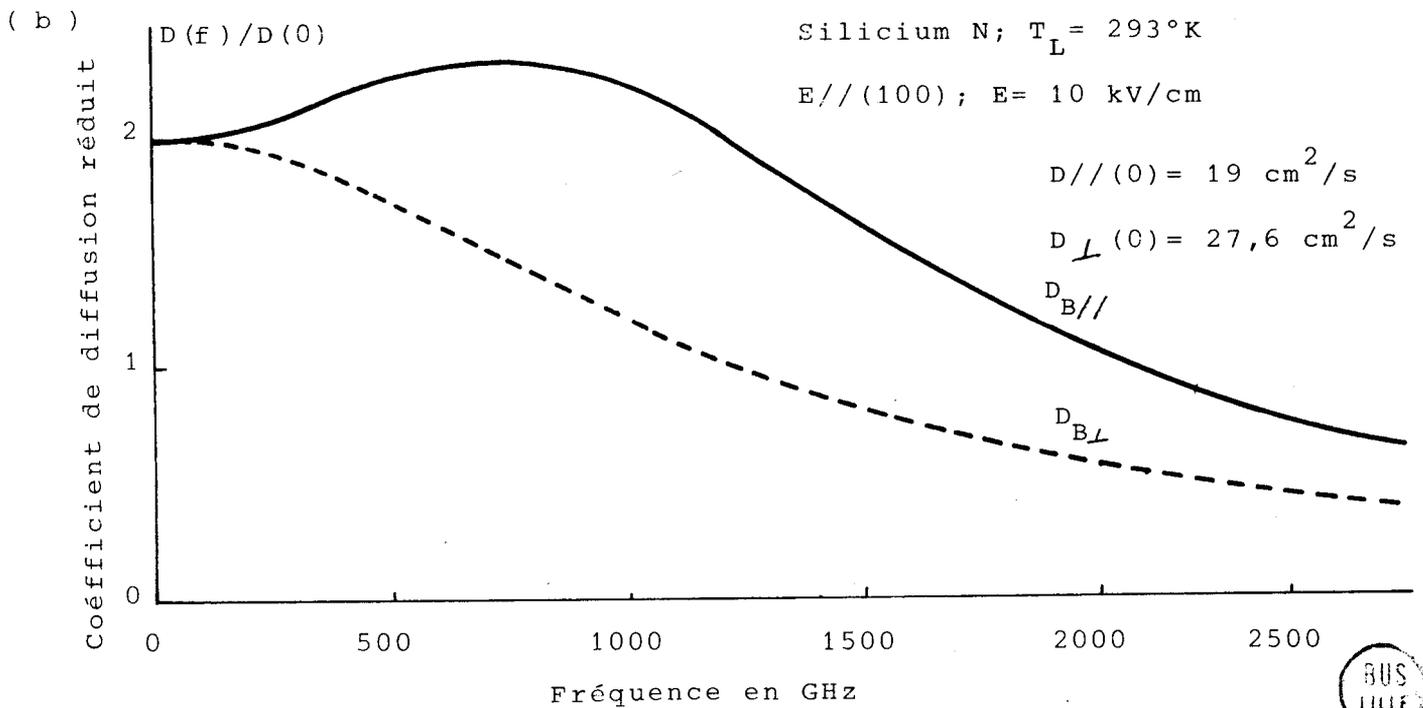


FIGURE 2,20

Fonctions de corrélation et spectres de diffusion de bruit associés: $\vec{E} // (100)$. $E = 10 \text{ kV/cm}$.



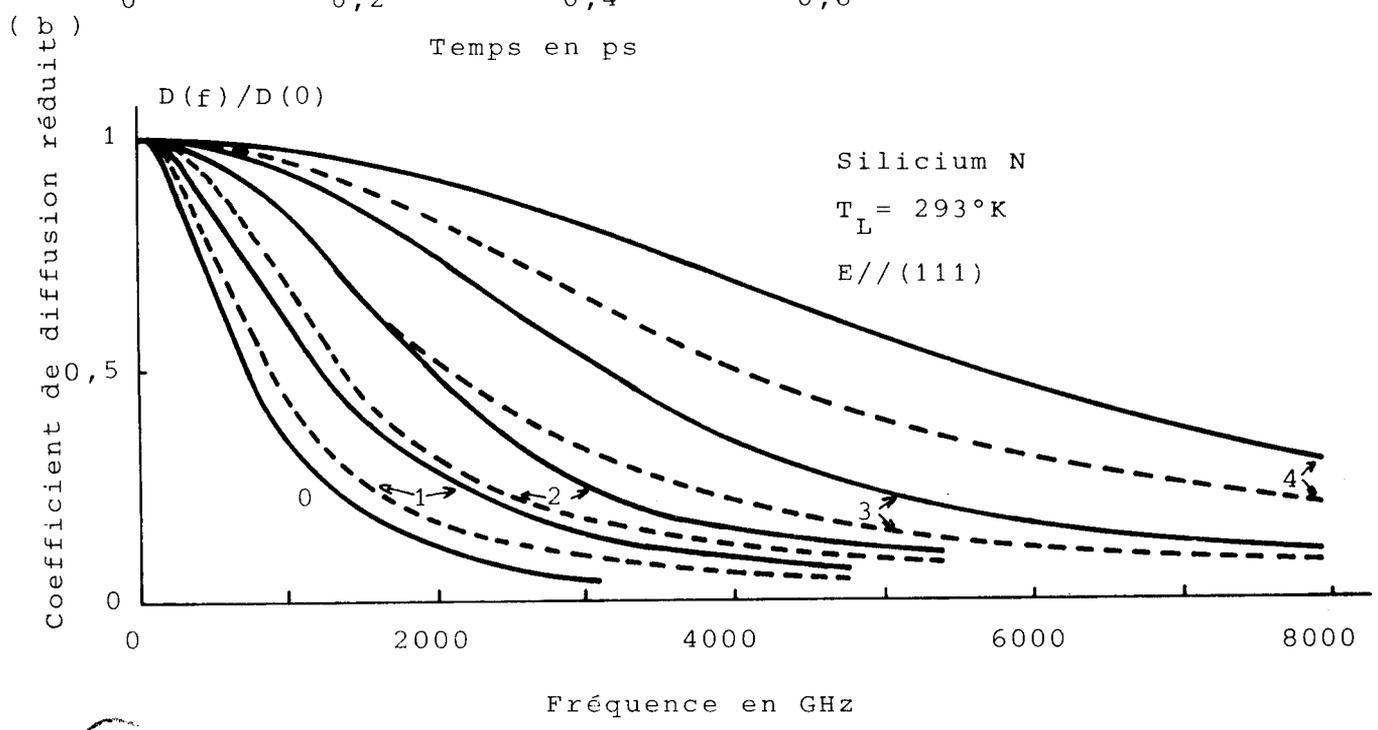
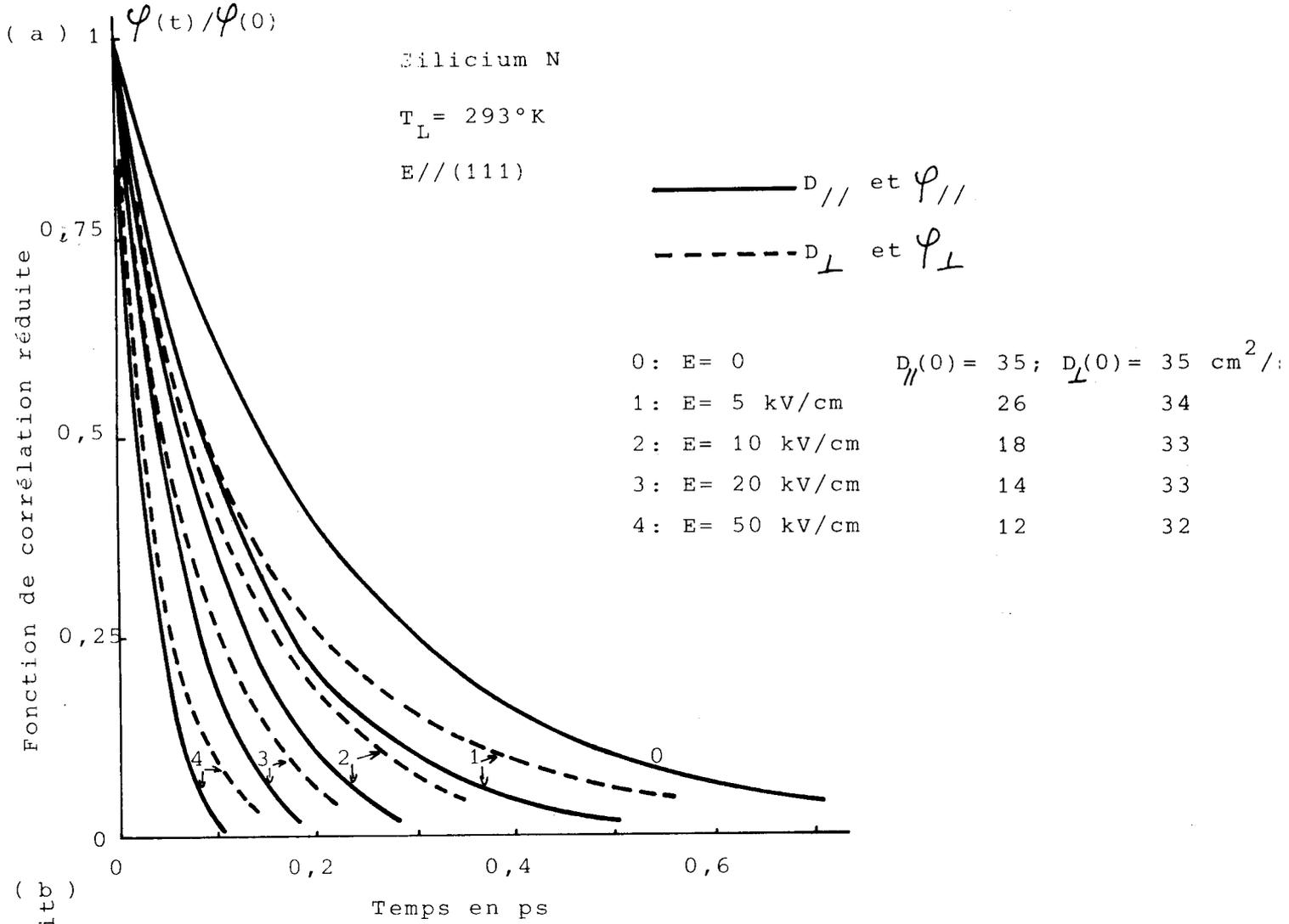
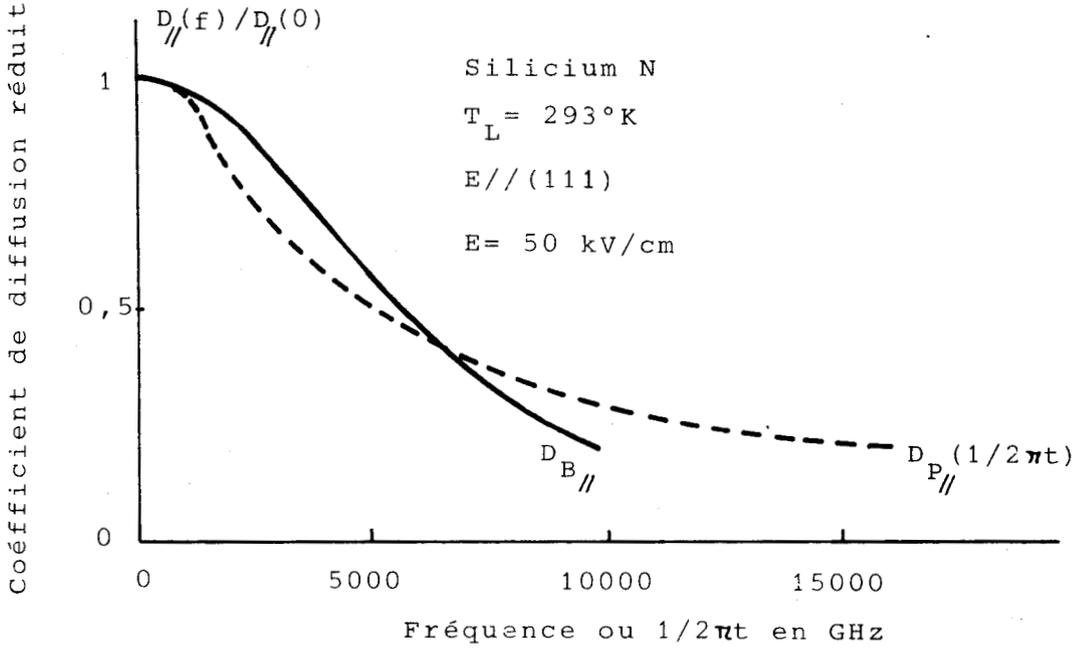


FIGURE 2,21

Fonctions de corrélation et spectres de diffusion de bruit associés: $E // (111)$.

(a)



(b)

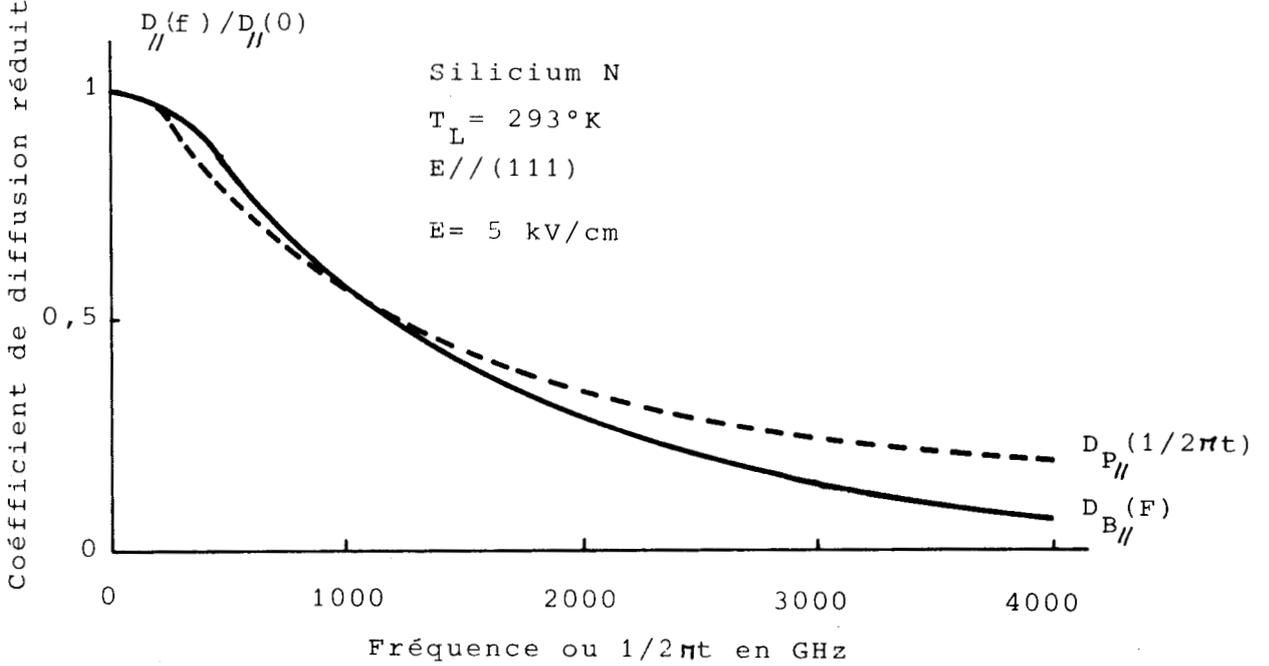


FIGURE 2,22

Comparaison des coefficients de diffusion de bruit et d'étalement en fonction de la fréquence à deux valeurs de champ électrique: $E // (111)$.

(a) : $E = 50 \text{ kV/cm}$

(b) : $E = 5 \text{ kV/cm}$



Dans ces conditions, pour ces deux matériaux, on observe que le coefficient $D_B(\omega)$ passe par un maximum de manière analogue aux résultats présentés ici. Nous avons tenté d'expliquer ce phénomène dans une publication récente [16].

Il n'en va pas de même lorsque le champ est appliqué suivant l'axe $\langle 111 \rangle$ car dans ces conditions les transferts de porteurs s'effectuent entre vallées équivalentes, toutes caractérisées par la même vitesse de dérive égale à la vitesse de dérive globale. Les fonctions de corrélation sont alors toujours à allure exponentielle et les spectres associés toujours monotonement décroissants.

La comparaison des spectres D_B et D_p présentés permet de trouver où se situe la limite au-dessous de laquelle on a effectivement identité entre les deux coefficients de diffusion statiques. On trouve ainsi, dans la plupart des cas, que l'observation de l'étalement du paquet doit se poursuivre au moins pendant 2 psec. On est sûr qu'aux temps ultérieurs on se trouvera bien dans la partie linéaire de la variance de position. Aux temps inférieurs à 2 psec on trouverait un coefficient de diffusion ou trop grand ou trop petit suivant le cas considéré.

I.3.4. Les coefficients de diffusion en régime statique

I.3.4.1. Comparaison des diffusions statiques obtenues par les deux méthodes.

Nous avons représenté sur les figures 2.23a et 2.23b quelques résultats obtenus pour la variance de position des porteurs lorsque le champ est appliqué suivant la direction $\langle 100 \rangle$. Sur la figure 2.23a on a remarqué que la dépendance aux temps courts de la variance de position est non linéaire comme le prévoit la théorie (relation 2.25). On observera également le comportement différent des variances longitudinales et transversales pour les champs les plus élevés. La variance longitudinale décrit un coude très net et se

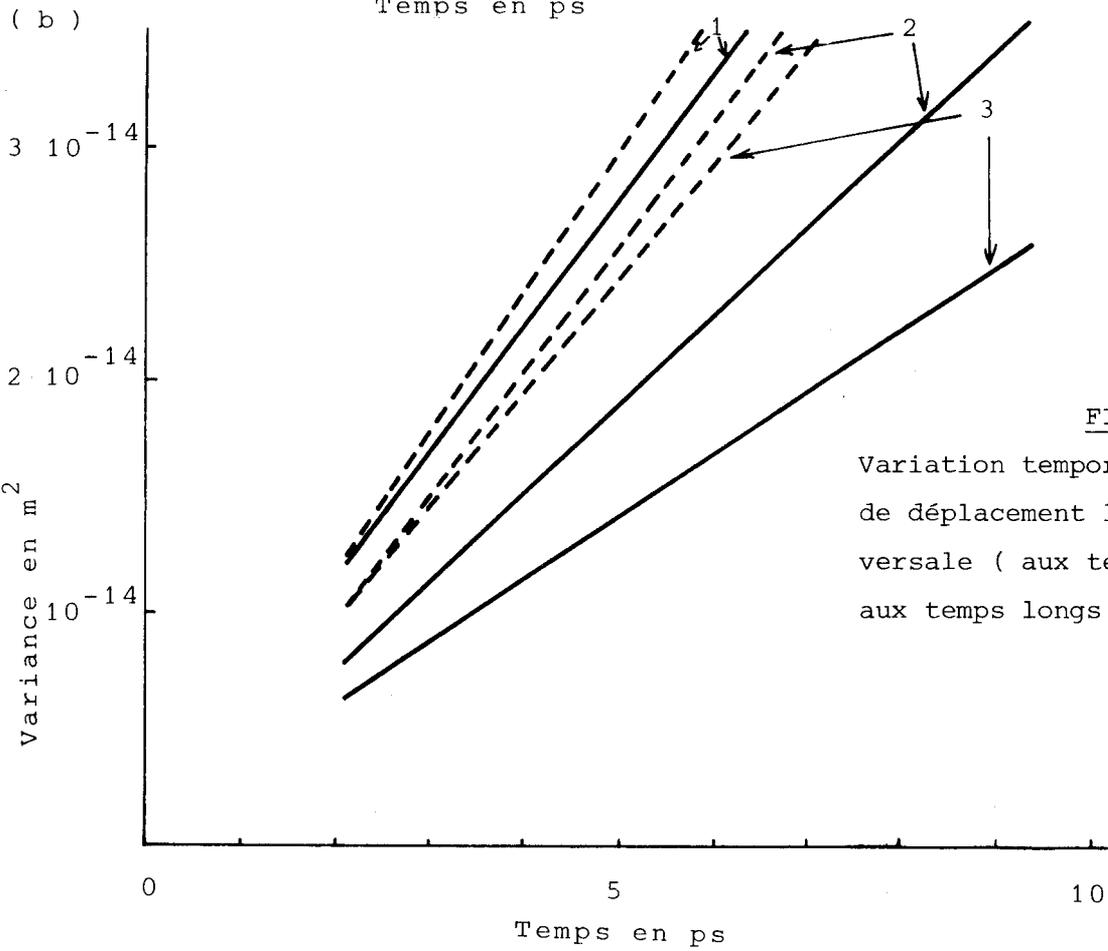
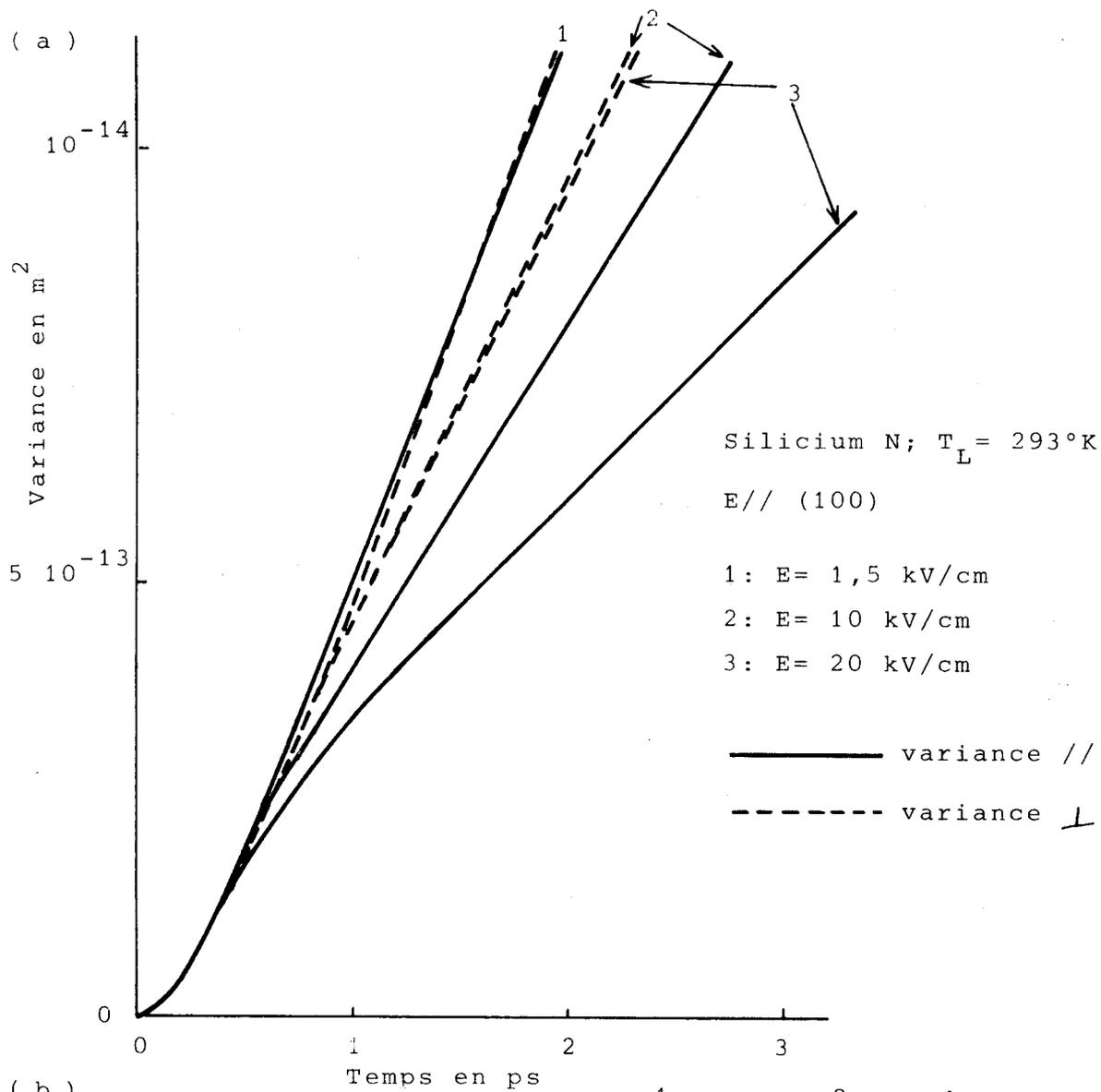


FIGURE 2,23

Variation temporelle de la variance de déplacement longitudinale et transversale (aux temps courts en (a), aux temps longs en (b)).



sépare de la variance transversale donnant lieu à un coefficient de diffusion nettement moins élevé. Dans le cas où $E = 1500$ V/cm, le phénomène d'anisotropie des vallées évoqué plus haut n'apparaît pas encore de façon nette, et le coude n'existe pas. La figure 2.23b montre le comportement des mêmes paramètres aux temps longs. La linéarité observée pour les variances est manifeste. Signalons que les courbes montrées ici sont obtenues par la simulation d'un paquet de 1000 électrons.

Concernant la définition de la diffusion par le bruit nous avons dans le cas statique

$$D_{B//} = \langle \Delta v_{//}^2 \rangle \tau_{//} \quad (2,27)$$

$$D_{B\perp} = \langle \Delta v_{\perp}^2 \rangle \tau_{\perp}$$

les variances de vitesse et les temps de corrélation sont obtenus directement par le calcul de la fonction de corrélation puisque nous avons

$$\langle \Delta v_{//}^2 \rangle = \phi_{//}(0) \text{ et } \langle \Delta v_{\perp}^2 \rangle = \phi_{\perp}(0) \quad (2,28)$$

$$\tau_{//} = \frac{1}{\phi_{//}(0)} \int_0^{\infty} \phi_{//}(t) dt \text{ et } \tau_{\perp} = \frac{1}{\phi_{\perp}(0)} \int_0^{\infty} \phi_{\perp}(t) dt \quad (2,29)$$

Nous avons déjà montré dans les figures 2.19 à 2.21 certaines des fonctions de corrélation obtenues. La figure 2.24 montre les évolutions des variances de vitesse et des temps de corrélation qui en sont tirés. Ce qui frappe dans la variation de ces paramètres avec l'amplitude du champ électrique, dans les deux cas de polarisation, est que les variances restent toujours voisines, alors que les temps de corrélation sont très différents (sauf à champ faible) avec la relation $\tau_{//} < \tau_{\perp}$. Il en résulte que l'on aura toujours $D_{B\perp} > D_{B//}$,

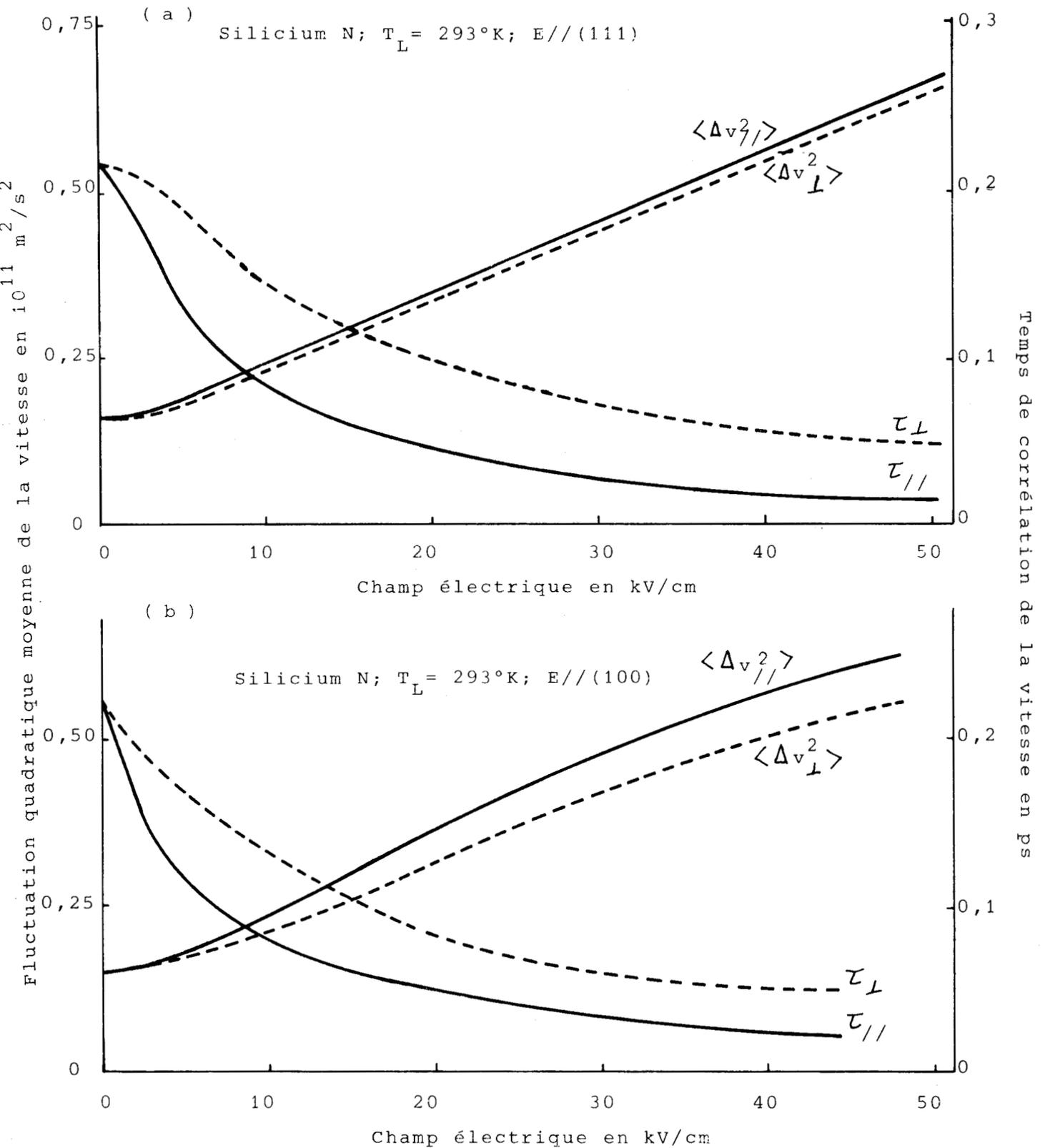


FIGURE 2,24

Evolution des variances de vitesse Δv^2 et des temps de corrélation avec le champ électrique.

En (a) : $\vec{E} // (111)$; en (b) : $\vec{E} // (100)$.



et c'est bien ce que l'on constate sur les figures 2.25 et 2.26 où ont été reportées les variations de $D_{//}$ et D_{\perp} en fonction du champ électrique appliqué selon la direction $\langle 111 \rangle$ (figure 2.25) et selon la direction $\langle 100 \rangle$ (figure 2.26). On y remarquera le bon accord existant entre les résultats acquis par les deux méthodes :

- par l'observation de l'étalement d'un paquet d'électrons et l'utilisation des relations (2,16)

- par le calcul de la fonction d'autocorrélation des vitesses et l'utilisation des relations (2,20).

Il reste maintenant à expliquer qualitativement pourquoi le coefficient de diffusion perpendiculaire D_{\perp} est plus grand que le coefficient de diffusion longitudinal $D_{//}$.

Si l'on examine l'évolution au cours du temps des deux composantes $v_{//}$ et v_{\perp} de la vitesse d'un porteur soumis à un champ électrique on constate que seule la composante $v_{//}$ subit l'effet perturbateur du champ électrique. A la perte d'information sur $v_{//}$ due au chocs subis par le porteur au cours du temps, s'ajoute celle due à l'effet du champ électrique. Quand le champ augmente le porteur s'échauffe et subit un plus grand nombre de collisions par unité de temps ce qui a pour effet de provoquer une perte d'information plus rapide donc de diminuer le temps de corrélation $\tau_{//}$. La contribution du champ est, elle aussi, d'autant plus grande que le champ est élevé. Comme la composante v_{\perp} ne subit pas l'effet du champ électrique (ou très peu, si l'on veut tenir compte du facteur de non parabolicité) et ne change que par l'effet des collisions, le temps de corrélation τ_{\perp} doit décroître moins vite que $\tau_{//}$ quand le champ augmente. Par contre, les fluctuations quadratiques moyennes $\langle \Delta v_{//}^2 \rangle$ et $\langle \Delta v_{\perp}^2 \rangle$ ne dépendent que de l'énergie du porteur qui a un caractère isotrope restent toujours proches l'une de l'autre et augmentent semblablement quand le champ électrique augmente. Ceci montre que $D_{B_{//}} < D_{B_{\perp}}$, sauf à champ nul.

La variance de déplacement calculée dans la définition de la diffusion par le paquet indique comment le paquet de porteurs s'élargit et s'étale au cours du temps. La contribution individuelle moyenne de chaque porteur à cet

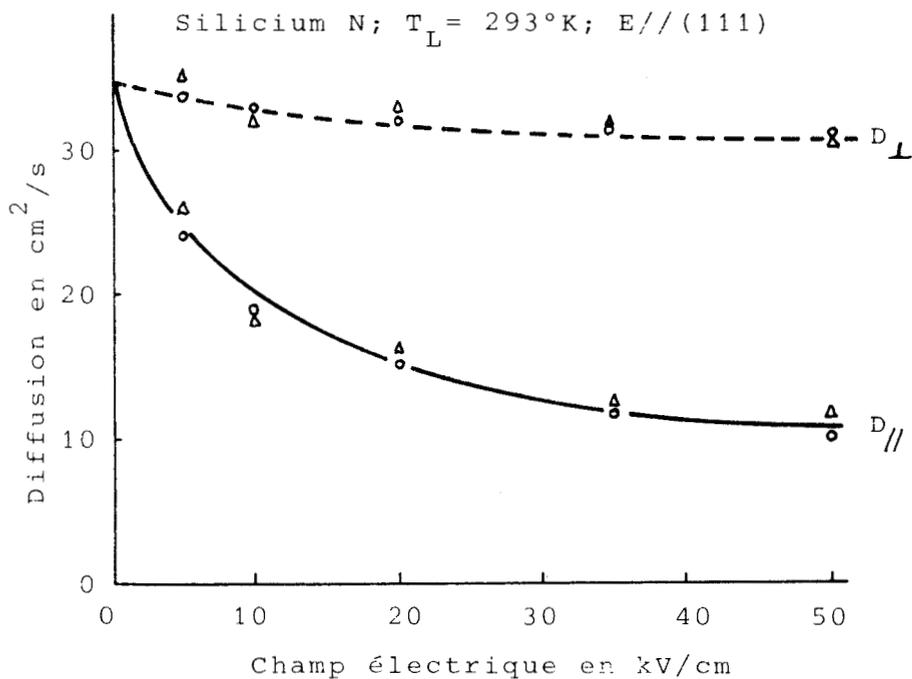


FIGURE 2,25

Coefficients de diffusion de bruit (Δ) et d'étalement (\circ) en fonction du champ électrique: $E // (111)$.

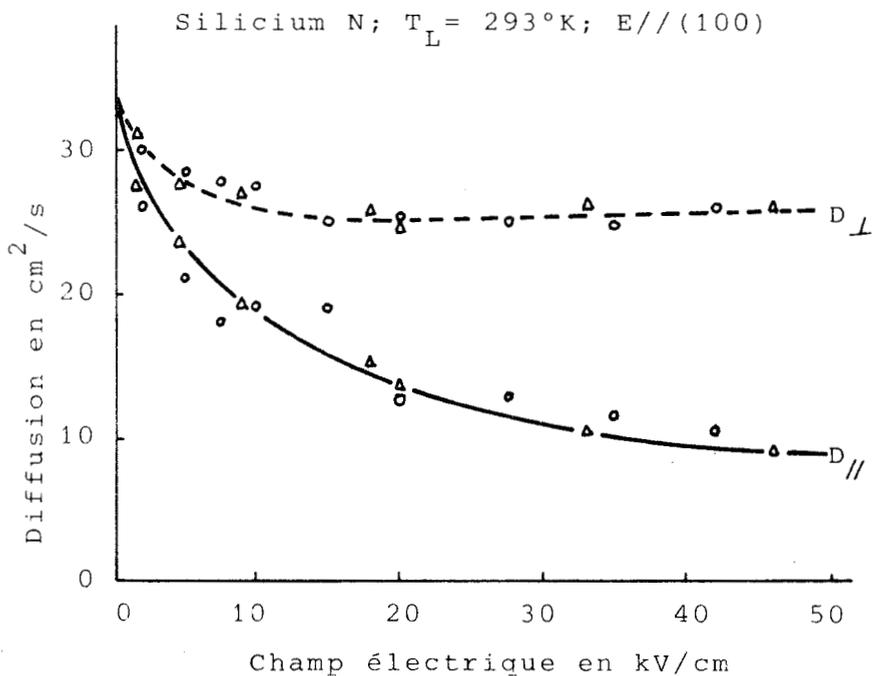


FIGURE 2,26

Coefficients de diffusion de bruit (Δ) et d'étalement (\circ) en fonction du champ électrique: $E // (100)$.



élargissement vaudra pour chacune des directions

$$\tau_{//} \sqrt{\langle \Delta v_{//}^2 \rangle} \text{ et } \tau_{\perp} \sqrt{\langle \Delta v_{\perp}^2 \rangle}$$

Du fait que la seconde est plus grande que la première l'étalement du paquet sera plus grand dans le sens transversal que dans le sens longitudinal et par conséquent $D_{P//} < D_{P\perp}$. Toutefois, cette hiérarchie de valeur existant entre les deux composantes du coefficient de diffusion n'apparaît qu'à fréquence basse ou à des temps d'observation élevés. Dans certains cas elles peuvent être du même ordre de grandeur : c'est ce que l'on peut constater par exemple sur la figure 2.19b aux alentours de 800 GHz.

1.3.4.2 Comparaison avec les résultats expérimentaux.

Si l'on considère les résultats obtenus dans la littérature, on constate que dans l'ensemble la confrontation des calculs théoriques aux déterminations expérimentales n'est que moyennement satisfaisante. On n'a pas toujours apporté tout le soin nécessaire à une bonne détermination théorique de ces paramètres. Par ailleurs les techniques de mesure (temps de vol, mesures radiométriques de bruit) sont difficiles à mettre en oeuvre, souvent assez peu précises. La détermination des coefficients de diffusion par la méthode de temps de vol consiste à observer l'étalement d'un paquet de porteurs dans un semiconducteur homogène. Cette méthode a été utilisée pour le silicium, le germanium et l'arséniure de gallium, ainsi que pour des semiconducteurs plus rares comme CdTe par exemple.

Dans l'expérience de temps de vol, on utilise des échantillons assez épais munis de deux contacts, l'un réalisé à partir d'un dépôt d'aluminium, l'autre réalisé à partir d'un dépôt Cr-Au par exemple, l'ensemble donnant une structure assez analogue à une diode PIN. Le volume du composant doit être de très haute pureté afin d'éviter les phénomènes de piégeage et d'obtenir un temps de réponse correct de l'échantillon. De plus la faiblesse du courant de conduction dû à la polarisation externe assure une bonne uniformité du champ électrique interne. Des paires électron-trou peuvent être créées au voisinage du contact P soit par un faisceau laser [18,22], soit par un canon à électrons rapides.

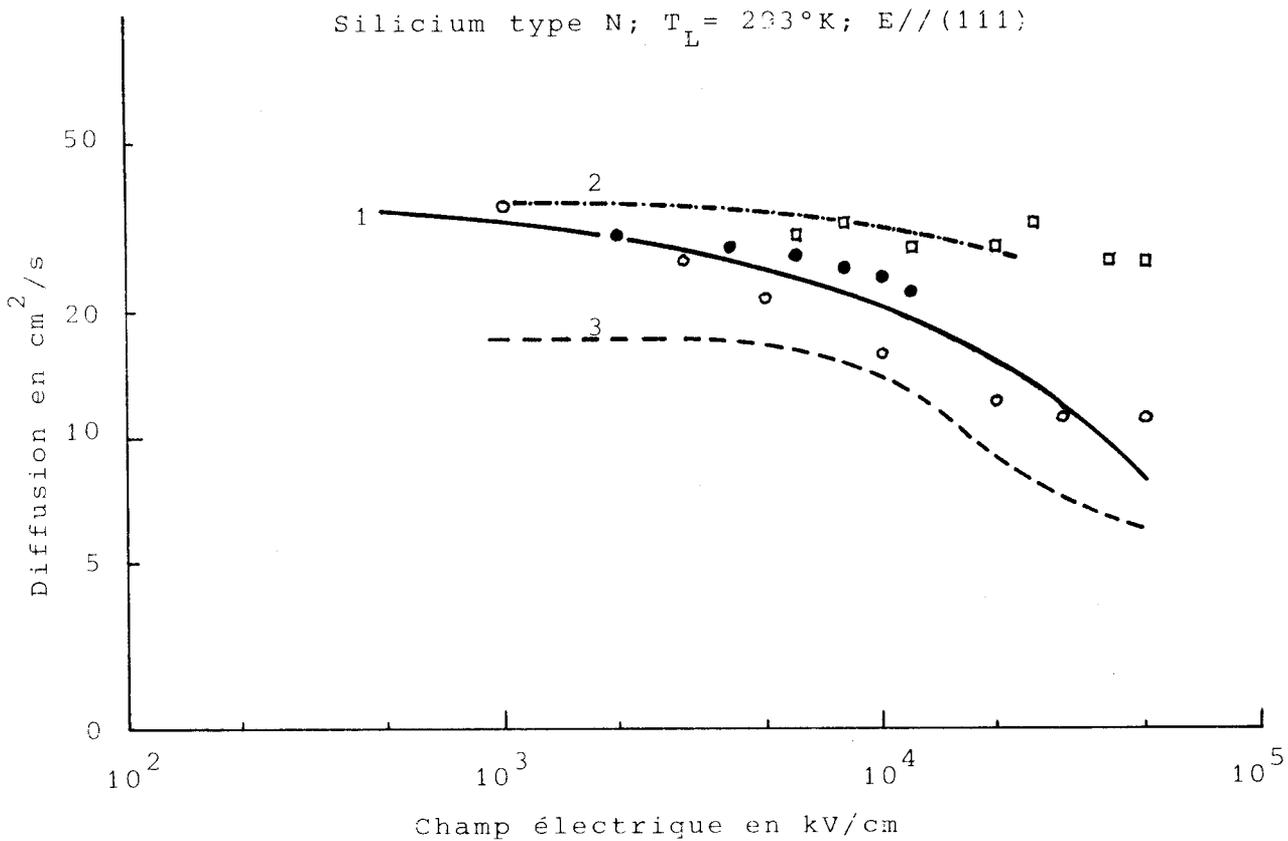


FIGURE 2,27

Coefficient de diffusion: comparaison théorie-expérience (à la température ambiante).

- $D_{//}$ Sigmon et Gibbons /19/
- $D_{//}$ Canali et al. /22/
- $D_{//}$ théorie Monte Carlo $N_D = 0$
- - - $D_{//}$ théorie Monte Carlo $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
- D_{\perp} Persky et Bartelink /20/
- · - D_{\perp} théorie Monte Carlo $N_D = 0$



Le composant étant polarisé en inverse (tension négative au contact P), les électrons sont entraînés vers l'autre électrode (polarisée positivement) tandis que les trous sont aspirés directement dans la partie P. Durant leur transit dans l'échantillon les porteurs créent dans le circuit extérieur un courant induit dont les caractéristiques sont liées soit à la vitesse de dérive (durée moyenne de l'impulsion de courant), soit au coefficient de diffusion (temps de montée et de descente). Cette technique a permis de mesurer les coefficients de diffusion longitudinaux en particulier dans le silicium N [19, 22].

Sur la figure 2.27, nous avons regroupé et comparé certains résultats théoriques et expérimentaux disponibles dans la littérature. Ils concernent des mesures effectuées à la température ambiante lorsque le champ est appliqué suivant la direction $\langle 111 \rangle$. Nous montrons les résultats expérimentaux obtenus par Canali et al. [22] concernant $D_{//}$, ainsi que ceux obtenus par Sigmon et Gibbons [19] ; nous avons reporté également les résultats expérimentaux de Persky et Bartelink [20] concernant D_{\perp} . Pour comparaison nous avons aussi reporté les résultats théoriques obtenus par la simulation de Monte Carlo. On constatera que l'ordre de grandeur existant entre les valeurs expérimentales de $D_{//}$ et D_{\perp} est conforme à celui prévu par la théorie : $D_{\perp} > D_{//}$. On remarquera aussi que les valeurs mesurées par Canali décroissent fortement en régime de champ fort : ceci est conforme également aux résultats théoriques. De ce fait, l'écart existant entre les résultats expérimentaux obtenus par Canali et par Sigmon et Gibbons demeure inexpliqué. Il faut d'ailleurs noter que des analyses théoriques du phénomène de diffusion, autres que celle de Monte Carlo, confirment que $D_{//}$ doit fortement décroître quand le champ électrique augmente [23, 24].

I.3.5 Conclusion.

Le but de ce paragraphe était d'étudier les phénomènes de diffusion dans les semiconducteurs et dans le silicium de type N en particulier. Deux définitions possibles de diffusion sont avancées : l'une par l'étalement d'un paquet d'électrons et l'autre par le bruit. Si ces deux définitions sont équivalentes en régime statique une analyse plus approfondie a permis d'étudier leur évolution avec le temps ou avec la fréquence, et de définir les conditions devant être

réalisées pour déterminer ces paramètres avec exactitude. Néanmoins, l'accord entre la théorie et l'expérience est assez moyen et en conséquence il ne nous a pas paru inutile d'entreprendre à notre tour une étude expérimentale de ces phénomènes de diffusion.

I.4 ETUDE DU COEFFICIENT DE DIFFUSION PAR LA MESURE DU BRUIT DE DIFFUSION. CHOIX D'UNE LOI $D(E)$.

Nous nous sommes largement étendu dans le paragraphe précédent sur la définition et la mesure expérimentale du coefficient de diffusion par l'étalement d'un paquet d'électrons. Dans ce paragraphe nous nous proposons d'étudier l'autre aspect du phénomène de diffusion : celui qui donne lieu au bruit thermique ou de diffusion. La technique expérimentale utilisée est la mesure de la température équivalente de bruit de diffusion dans des échantillons homogènes ou non, à l'aide d'un radiomètre.

L'intérêt des mesures de puissance de bruit de diffusion est double. D'une part, celui-ci est lié au coefficient de diffusion de bruit via la relation d'Einstein généralisée. La mesure de la température équivalente de bruit permet de déterminer les coefficients de diffusion de bruit [25] par l'intermédiaire de la mobilité différentielle. Les résultats ainsi acquis peuvent être confrontés à ceux fournis par les mesures de temps de vol, tout en donnant des renseignements qui peuvent être précieux pour la compréhension des phénomènes microscopiques de dynamique des porteurs. D'autre part, la mesure et la détermination théorique du bruit de diffusion d'une structure se rapprochant d'un composant a un intérêt propre car les phénomènes de bruit interviennent comme limitation fondamentale du fonctionnement de nombreux composants. Il importe donc de bien le connaître afin de minimiser par une optimisation convenable le bruit créé dans un composant. Ces phénomènes ont été étudiés dans le germanium [26, 28] et le silicium [29, 30]. Il y a eu ces dernières années un regain d'intérêt dans ce domaine, en particulier pour le silicium [31, 33] et l'arséniure de gallium [33, 34].

Dans ce paragraphe, nous présentons d'abord une méthode de mesure du bruit de diffusion dans des structures N^+NN^+ de faible longueur ($W \approx 10 \mu m$) à l'aide d'une technique radiométrique, analogue à [32], mais appliquée à la fréquence de 10 GHz. Nous étudions ensuite des structures de type Gunn planar et méso où les champs électriques peuvent atteindre des amplitudes supérieures à 50 kV/cm. Par ailleurs, un calcul théorique utilisant les données obtenues expérimentalement (vitesse de dérive et coefficient de diffusion) nous permet de déterminer la température équivalente de bruit présentée par les échantillons étudiés en vue de vérifier le degré d'incertitude des lois de variation des coefficients de diffusion avec le champ électrique.

I.4.1 Principe de l'expérimentation.

Ce schéma de principe du radiomètre est donné sur la figure 2.28.

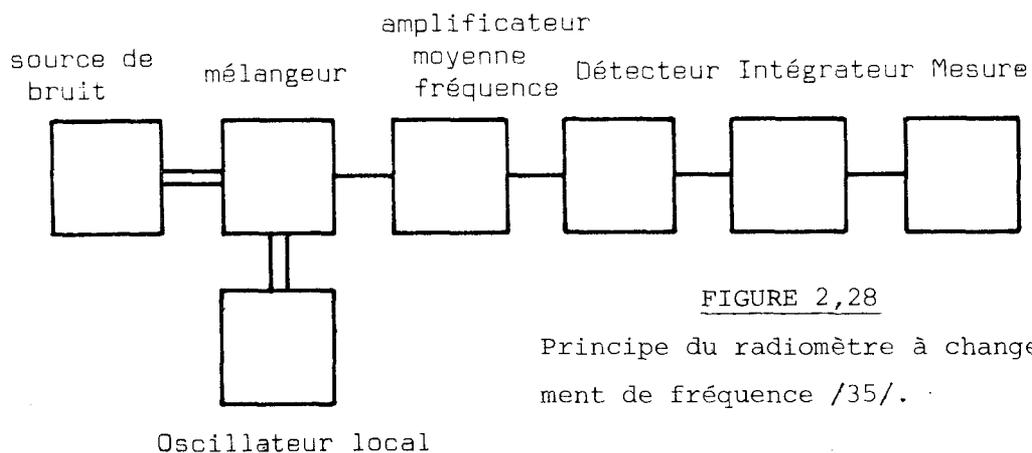


FIGURE 2,28

Principe du radiomètre à changement de fréquence /35/.

Le mélangeur effectue un battement entre le signal délivré par la source de bruit à mesurer et le signal de l'oscillateur local et délivre un signal à moyenne fréquence qui est amplifié et détecté avant la mesure. La tension mesurée est proportionnelle à $T_A + T_R$ où T_A est la température de bruit à mesurer et T_R la température équivalente du récepteur et de la chaîne de mesure. On peut s'affranchir de T_R en modulant le signal émis par la source à mesurer. Le signal soumis à l'amplification a alors la forme suivante (figure 2.29)

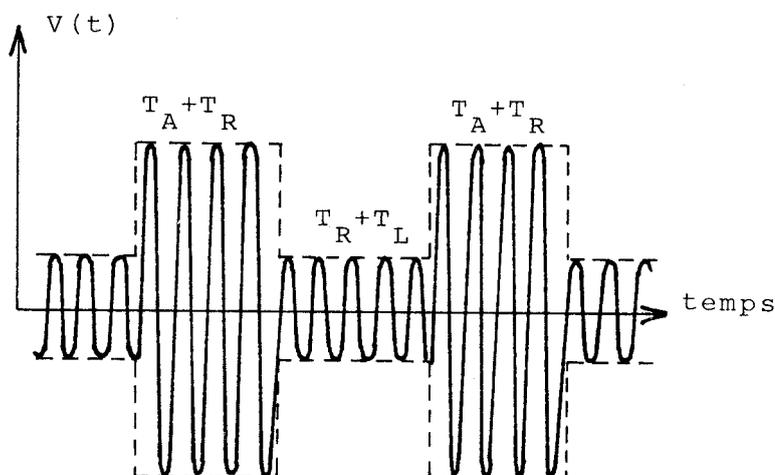


FIGURE 2.29.

Effet de la modulation de T_A sur le signal délivré par le mélangeur (F.I.)

Un système à détection synchrone permet d'extraire une tension proportionnelle à $T_A - T_L$ où T_L est la température ambiante ou plus exactement celle du système modulateur associé à une ligne non réciproque. En pratique la mesure de la température de la source se fait par comparaison avec le bruit délivré par une source de bruit étalon dont le niveau peut être réglé pour donner à la sortie du détecteur synchrone la même tension que celle produite par le signal à mesurer (figure 2.30).

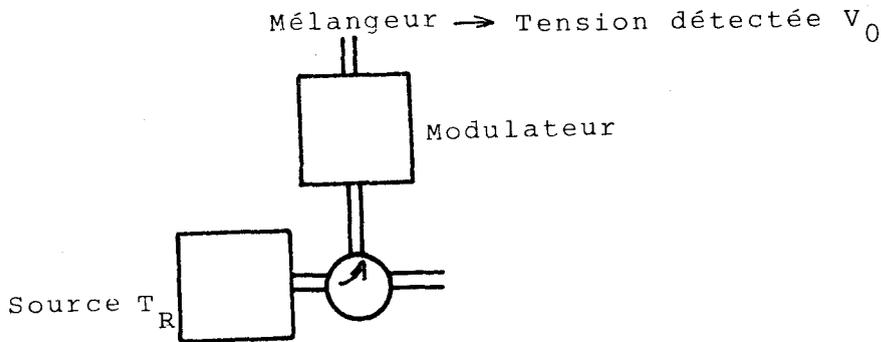
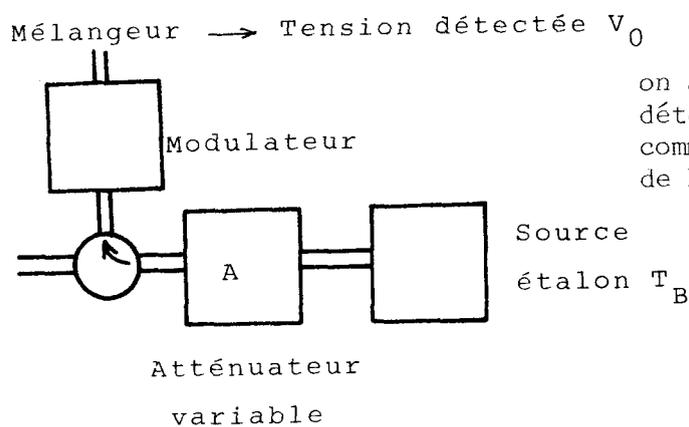


FIGURE 2.30.



Principe de mesure de T_R :

on ajuste A pour que le niveau détecté reste le même quand on commute l'une ou l'autre source de bruit.

I.4.2 Le radiomètre bande X.

Les mesures effectuées et présentées dans ce paragraphe sont faites dans la bande X, entre 8,5 et 10,5 GHz. Le choix de cette bande de fréquence permet de réduire au maximum l'effet de toutes les sources de bruit en $1/f$ dues en particulier à la qualité plus ou moins bonne des contacts des échantillons ou au phénomène de génération recombinaison [36]. Le schéma général du radiomètre bande X est donné sur la figure 2.31.

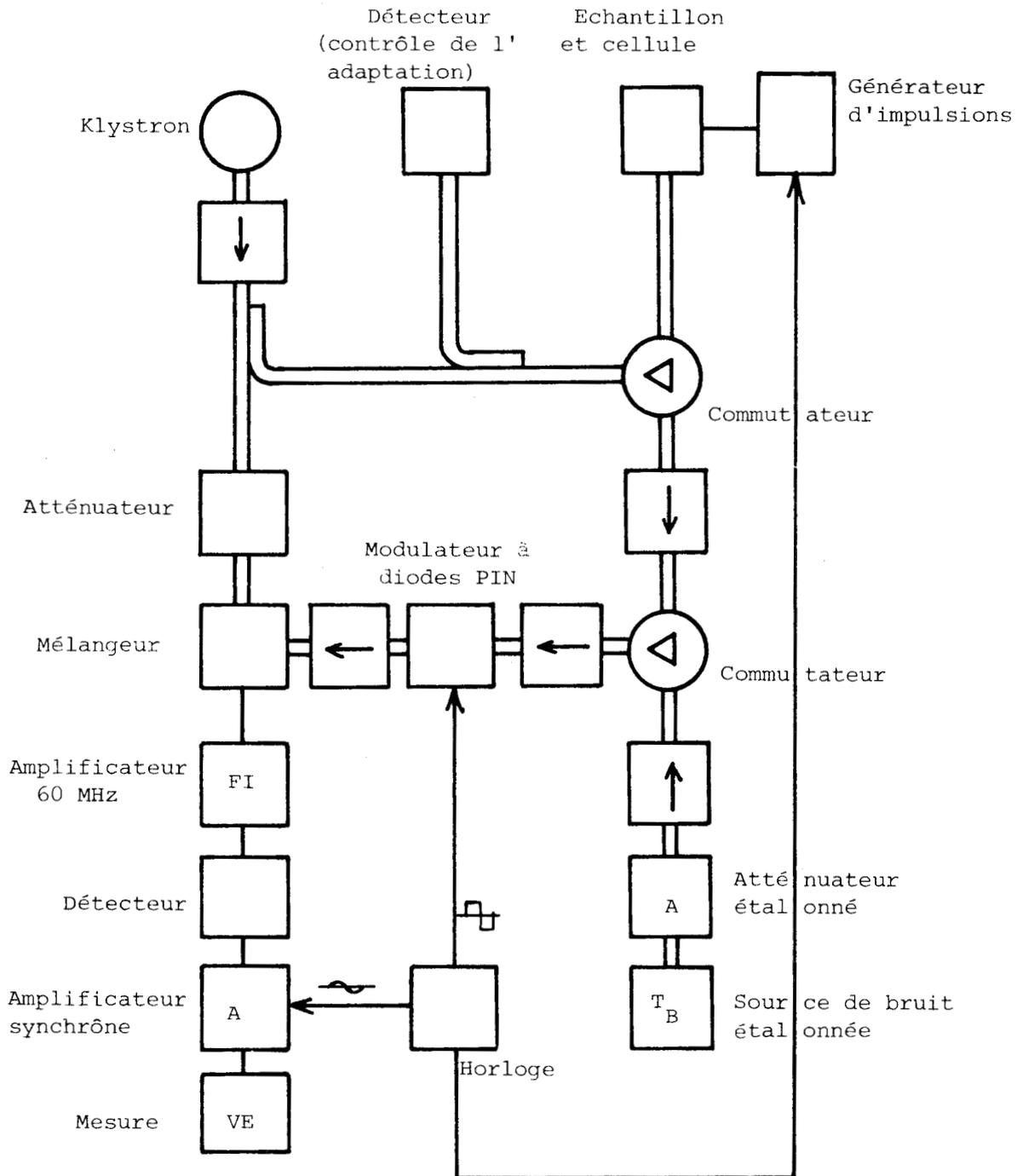


FIGURE 2,31

Schéma du radiomètre hyperfréquence de mesure de bruit de diffusion.



Il est constitué des éléments suivants :

- Un oscillateur local : klystron Philips 2K25 (8,5 à 10 GHz) ou un générateur Férisol (8 à 11 GHz).

- Un mélangeur R.H.G. 1 à 12 GHz, avec une bande passante de 300 MHz, un facteur de bruit de 9,5 dB.

- Une source de bruit étalon à plasma Philips PPU 500 K délivrant une température de 21800 °K, associée à un atténuateur étalonné 0-50 dB.

- Un modulateur à diode PIN Hewlett-Packard commandé par un générateur d'impulsions piloté par une horloge commandant simultanément la polarisation de l'échantillon et la détection synchrone.

Afin d'éliminer l'influence des coefficients de réflexion parasites, le radiomètre est muni de plusieurs lignes unidirectionnelles. Il s'avère que le radiomètre est assez sensible pour mesurer un écart de température de 1 °K par rapport à la température ambiante. Un certain nombre de test préliminaires ont été effectués pour vérifier en particulier que la température d'un corps mesurée au radiomètre est égale à la température du même corps mesurée avec un thermomètre ou un thermocouple. Une autre série de tests permet de se rendre compte de l'effet du coefficient de réflexion propre du corps à mesurer. L'ensemble de ce travail est exposé dans la thèse de S. Bonfils [37]. En général, nous utilisons le radiomètre muni d'une ligne adaptatrice à "slugs" permettant l'adaptation de l'échantillon avec sa cellule en vue d'obtenir le maximum de puissance détectée.

Les échantillons étant polarisés en impulsions plus ou moins longues, il faut qu'il y ait synchronisme entre l'impulsion produisant les porteurs chauds (de durée τ) et l'ouverture θ du radiomètre correspondant au sens passant du modulateur à diode PIN (figure 2.32). Il en résulte que la puissance de bruit vue par le radiomètre vaut

$$P = k_B T_{\text{bruit}} FB$$

(B étant la bande passante du radiomètre et F la fréquence de répétition des impulsions) et il y a avantage à mesurer le bruit avec l'ouverture θ maximum autorisée par la durée de l'impulsion τ .

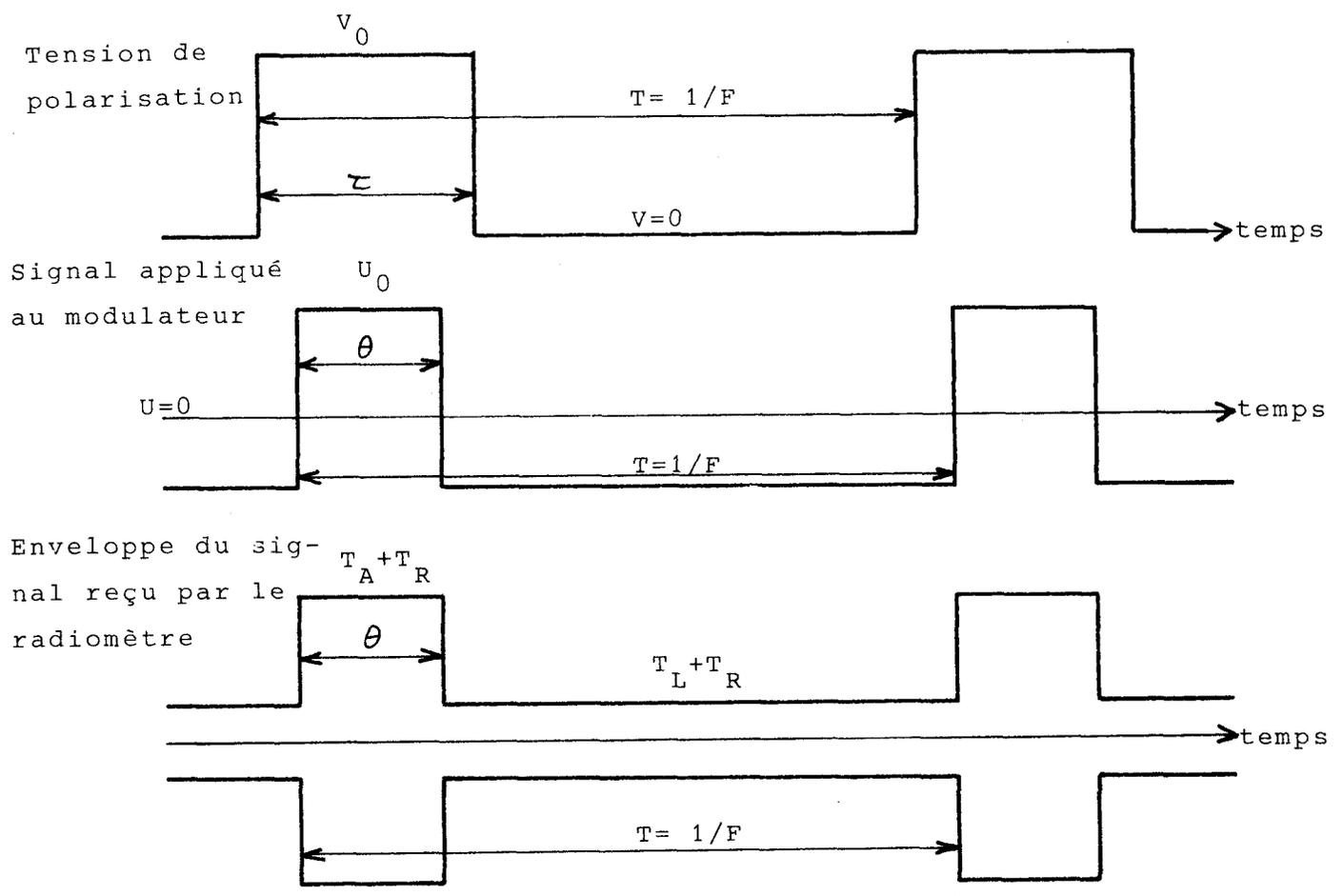


FIGURE 2,32 Schéma temporel du bruit produit et mesuré.



I.4.3. Problème lié à l'échauffement de l'échantillon.

Un des obstacles essentiels rencontrés dans les études s'occupant de porteurs chauds sont les phénomènes d'échauffement thermique qui apparaissent en champ fort. Pour éviter l'échauffement du matériau par effet Joule, il faut utiliser des techniques impulsionnelles afin de limiter au maximum la puissance dissipée par les échantillons. Des mesures de résistance thermique jonction-ambiante [37] nous ont permis d'estimer R_{th} à $40 \text{ }^{\circ}\text{K/W}$ pour nos échantillons. L'élévation moyenne de la température de l'échantillon vaut alors

$$\Delta T_L = R_{th} \bar{P} = V_o I_o \tau F R_{th}$$

où V_o , I_o est le point de polarisation, τ la durée et F la fréquence de répétition de l'impulsion. En général nous avons travaillé avec une fréquence de répétition située entre 1 et 100 kHz, et une durée d'impulsion variable de 100 à 1 μsec suivant le point de polarisation étudié. Nous montrons sur la figure 2.33 les points de la caractéristique mesurés dans les mêmes conditions que celles où nous avons mesuré le bruit de diffusion ; ceux-ci permettent de voir la faible influence de l'échauffement du réseau à tension et puissance croissante. En fait, dans les conditions indiquées ici la température de réseau ne doit pas varier de plus de 3 à 4 $^{\circ}\text{K}$.

I.4.4. Les échantillons. Elaboration et caractérisation.

Nous avons utilisé essentiellement deux sortes d'échantillons pour les mesures de bruit en champ fort. Les premiers échantillons qui furent utilisés étaient des structures N^+NN^+ planar obtenues à partir de plaquettes N^+N épitaxiées tirées dans la direction $\langle 111 \rangle$ et munis de deux contacts ohmiques. L'épaisseur

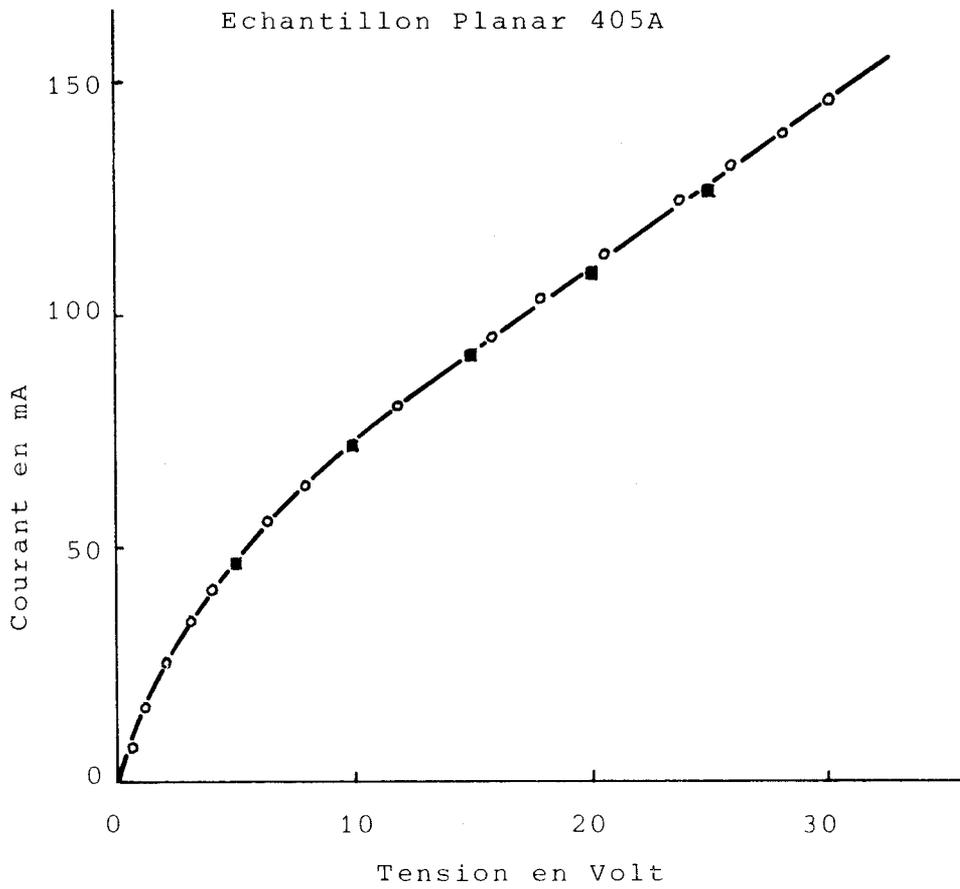


FIGURE 2,33

Caractéristique courant-tension d'un échantillon Planar 405A:

- $\tau = 1 \mu\text{s}$, $F = 50 \text{ Hz}$
- τ variable, $F = 1 \text{ kHz}$
- théorique



moyenne de ces épitaxies était de $8,5 \mu\text{m}$ et leur résistivité de $10 \Omega\text{-cm}$ à la température ambiante. Ces échantillons étaient montés à l'extrémité d'une ligne microruban 50Ω , le substrat étant collé sur le plan de masse par une colle Epoxy conductrice et le contact au microruban étant obtenu par soudure aux ultrasons d'un mince fil d'or ou d'aluminium. La monture était reliée au radiomètre par une transition OSM-guide bande X et l'adaptation assurée par un adaptateur à vis dans ce cas. Par la suite, ce système fut modifié et les échantillons furent montés dans des boîtiers spéciaux pour hyperfréquences du type D047, et ceux-ci placés à l'extrémité d'une ligne coaxiale 50Ω supportant également le système d'adaptation à slugs coulissants (monture Iglésias). Nous avons également utilisé des échantillons de type méssa obtenus à partir d'épitaxies $\langle 111 \rangle$ d'épaisseur comprise entre 10 et $12 \mu\text{m}$, et de résistivité $9 \Omega\text{-cm}$ à la température ambiante. Ces échantillons étaient montés dans des boîtiers et utilisés avec la ligne coaxiale (figure 2.34).

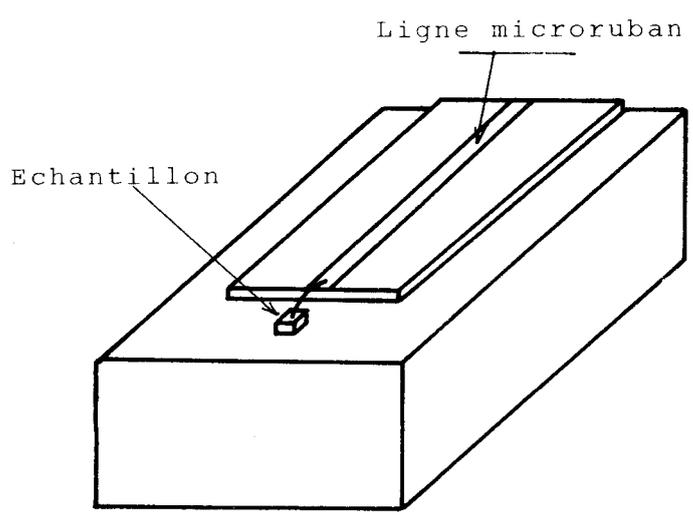
I.4.4.1. Elaboration des échantillons.

Un certain nombre des échantillons que nous avons étudiés ont également servi à l'élaboration de limiteurs et modulateurs rapides hyperfréquences [38]. Compte tenu des avantages de la structure méssa sur la structure planar pour ces applications, le centre de technologie de notre Laboratoire a surtout élaboré des composants méssa [39]. Néanmoins, nous avons pu, au début de notre action, utiliser des échantillons planar référencés sous le numéro 405 A (en partie réalisés au LAAS).

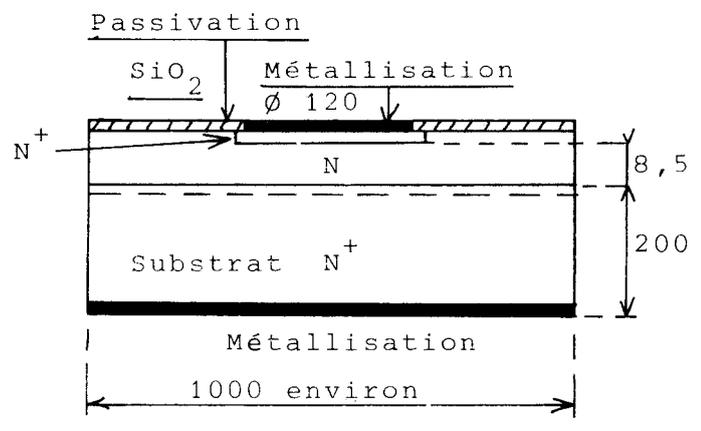
Les technologies planar et méssa sont voisines l'une de l'autre. Nous décrivons rapidement la réalisation de la structure méssa.

Après un nettoyage et un dégraissage très soigneux, la plaquette épitaxiée N^+N reçoit une diffusion au phosphore (produit silicafilm Emulsitone) sur les deux faces créant ainsi deux zones (épaisseurs $0,5$ à $2 \mu\text{m}$) surdopées (N^{++}) qui assureront la qualité des contacts ohmiques. Suivent une désoxydation et une

FIGURE 2,34

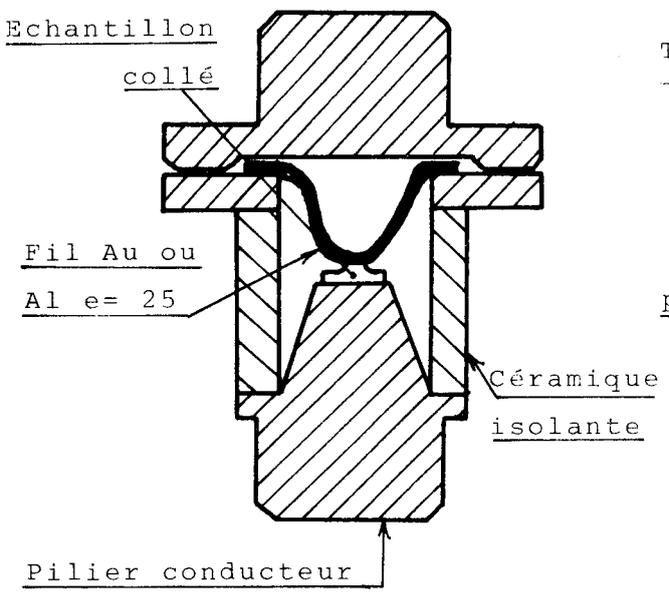


Structure microruban

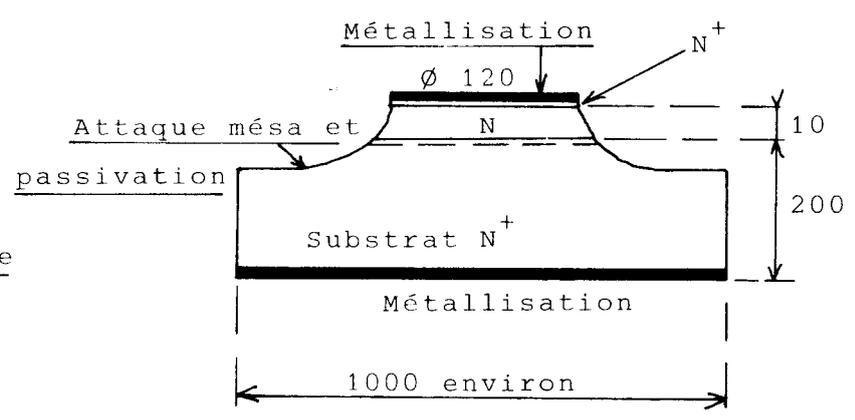


Echantillon Planar

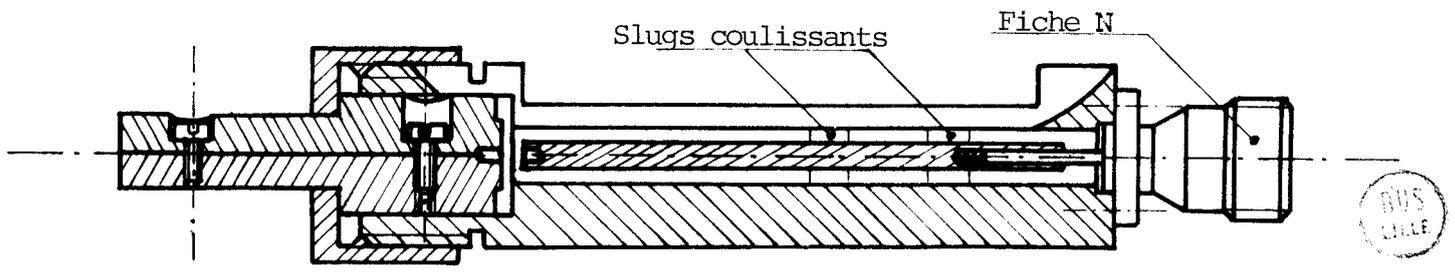
Toutes les dimensions sont en μm



Encapsulation



Echantillon Méso



Monture de type Iglésias



métallisation sous vide avec l'aluminium. On procède alors à la photogravure des contacts à l'aide de résine photosensible puis à l'attaque méso proprement dite. Enfin, les échantillons sont découpés puis encapsulés. Dans la technologie planar, la diffusion est précédée d'une oxydation et de l'ouverture de fenêtres de diffusion ; l'attaque méso est remplacée par une simple passivation en surface.

I.4.4.2. Caractérisation des composants.

Si l'on veut confronter les résultats expérimentaux avec les résultats théoriques acquis sous différentes hypothèses de calcul, il nous faut connaître toutes les caractéristiques des échantillons étudiés : longueur de la zone de transit, conductivité ohmique de celle-ci, surface des contacts. Ces paramètres sont difficiles à obtenir directement sur de tels échantillons. Nous ne disposons que d'ordre de grandeur pour ces quantités. Nous sommes donc amenés à effectuer une modélisation théorique en vue d'obtenir la valeur de ces paramètres avec une meilleure approximation. En pratique la confrontation est faite sur la caractéristique courant-tension isotherme mesurée en impulsions. L'ajustement se fait assez aisément par l'intermédiaire de la résistance ohmique et de la résistance de charge d'espace.

Cette modélisation est faite en résolvant numériquement l'équation obtenue à partir du principe de conservation du courant total et de l'équation de Poisson :

$$j(t) = qv_d E(x) \left[N_D(x) + \frac{\epsilon}{q} \frac{\partial E}{\partial x} \right] - qD_L [E(x)] \left[\frac{dN_D}{dx} + \frac{\epsilon}{q} \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} \right] + \epsilon' \frac{\partial E}{\partial t} \quad (2,30)$$

La méthode de résolution de cette équation a été décrite en grands détails dans des travaux précédents [38, 40]. Ces travaux discutent également la validité et la stabilité des solutions obtenues. Les données de base sont la caractéristique $v_d(E)$ du matériau (la fréquence de travail et les dimensions

des échantillons nous autorisent à considérer tous les phénomènes comme stationnaires) et la variation supposée du coefficient de diffusion $D_L(E)$ avec le champ électrique. Ces paramètres sont connus à partir d'expérimentations indépendantes. Les profils de dopage des échantillons sont donnés par des fonctions d'erreur.

Les figures 2.33 et 2.35 montrent la comparaison entre expérience et théorie pour deux échantillons planar et méssa de caractéristiques voisines, cette comparaison étant ici effectuée au niveau des caractéristiques courant-tension. Ces caractéristiques nous ont montré l'assez grande insensibilité des résultats obtenus aux valeurs de coefficients de diffusion utilisés. Le coefficient de diffusion influe peu sur les caractéristiques du premier ordre de nos échantillons (ce qui n'est pas le cas des paramètres du second ordre).

La figure 3.36 montre quelle peut être l'allure du champ électrique dans le composant. Ces courbes concernent l'échantillon 405 A polarisé à 80 et 200 m A. Le fort courant appliqué à la structure entraîne un très fort excès de porteurs injectés dans la zone de transit produisant ainsi une très forte non-uniformité du champ électrique qui peut atteindre des valeurs élevées de l'ordre de 100 kV/cm. C'est là l'intérêt de travailler avec de telles structures car dans cette zone les porteurs sont en régime de vitesse saturée et leur coefficient de diffusion peut avoir fortement diminué [22]. Il devient possible de tester les lois $D_L(E)$ jusqu'au régime de saturation de vitesse, chose qui est difficilement faisable sur un matériau en volume de concentration en impuretés équivalente.

I.4.5. Résultats des mesures de bruit. Comparaison théorie-expérience.

Sur la figure 2.37 nous donnons les résultats concernant les échantillons planar 405 A [37, 41]. Ces résultats ont été obtenus à la fréquence de 9,7 GHz.

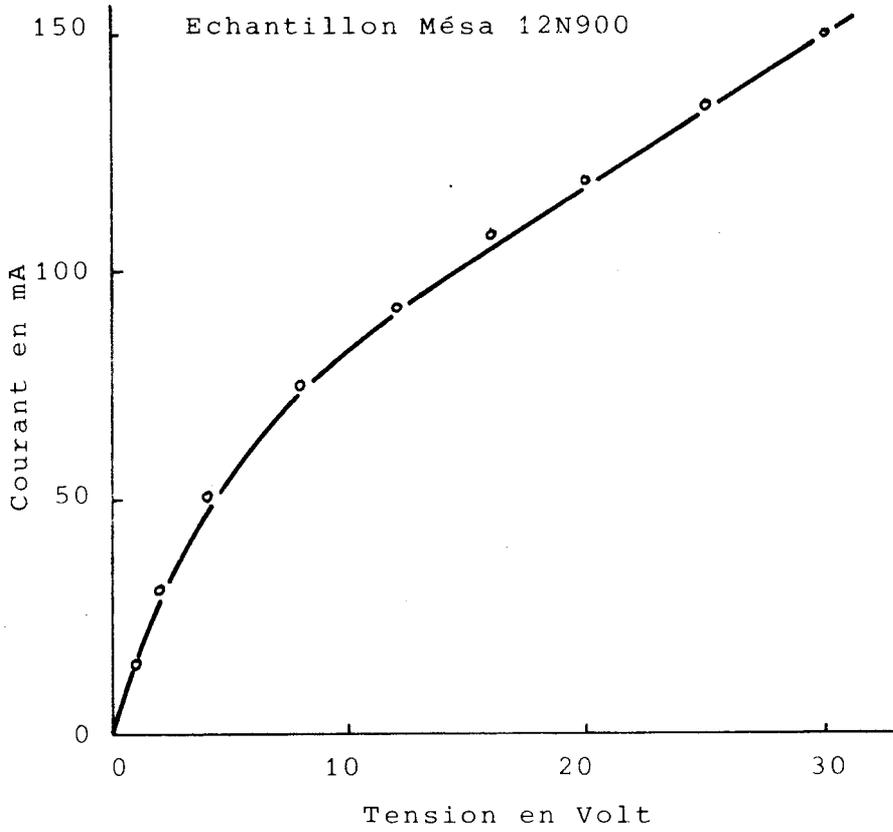


FIGURE 2,35

Caractéristique courant-tension d'un échantillon Mésa 12N900.

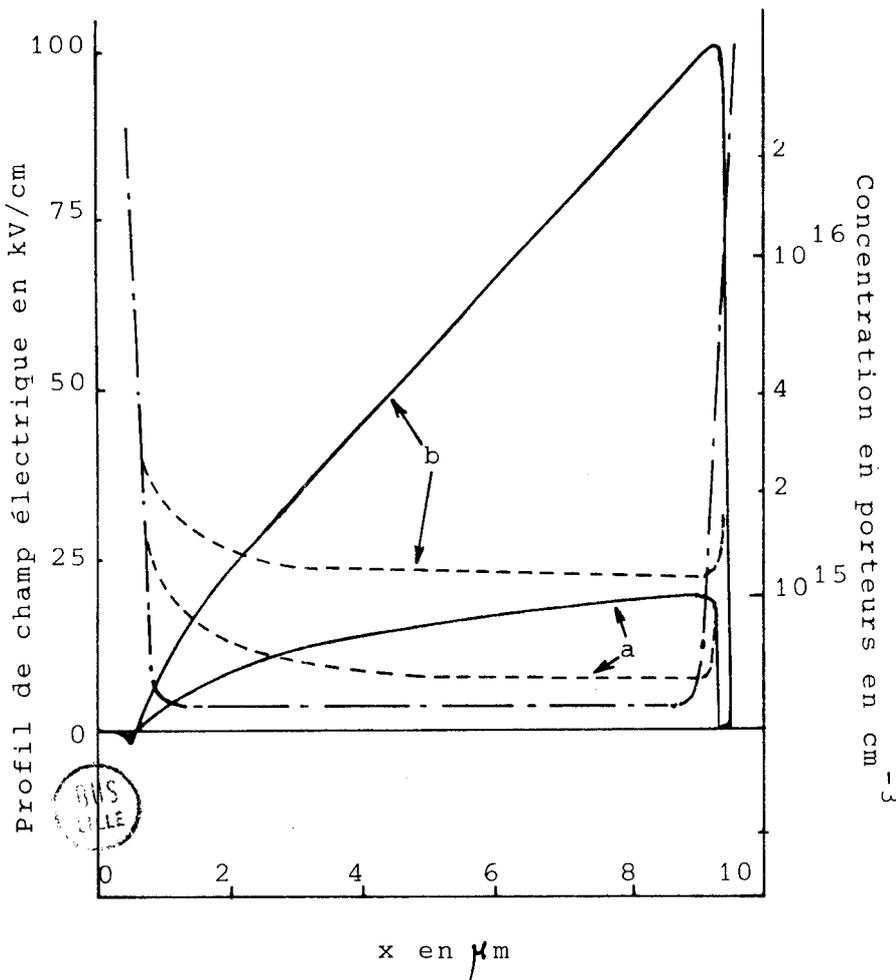


FIGURE 2,36

Profils de champ électrique et de densité de porteurs (échantillon 405A) pour deux courants de polarisation:

- a: $I_0 = 80 \text{ mA}$
- b: $I_0 = 200 \text{ mA}$

Echantillon Planar 405A

$T_L = 293^\circ\text{K}; \text{Si-N (111)}$

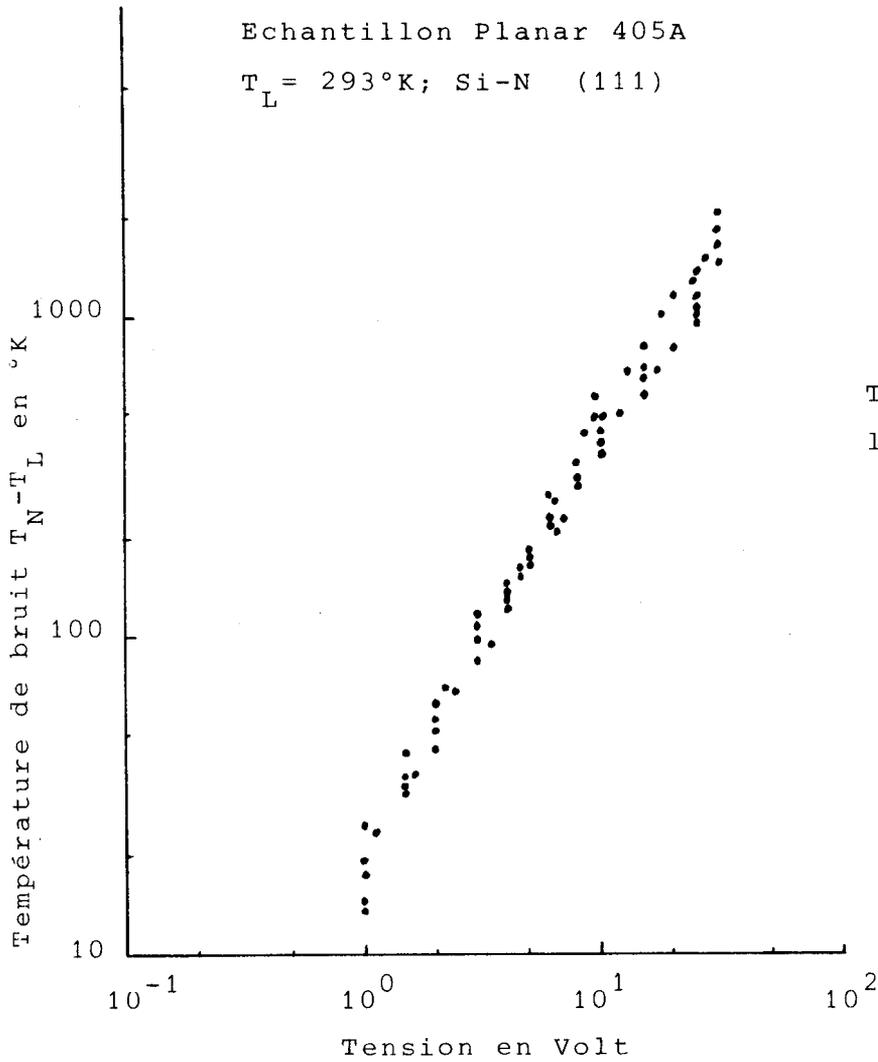


FIGURE 2,37

Température de bruit d'un échantillon 405A mesurée à 9,3 GHz /37/.

Echantillon Méssa 12N900

$T_L = 293^\circ\text{K}; \text{Si-N(111)}$

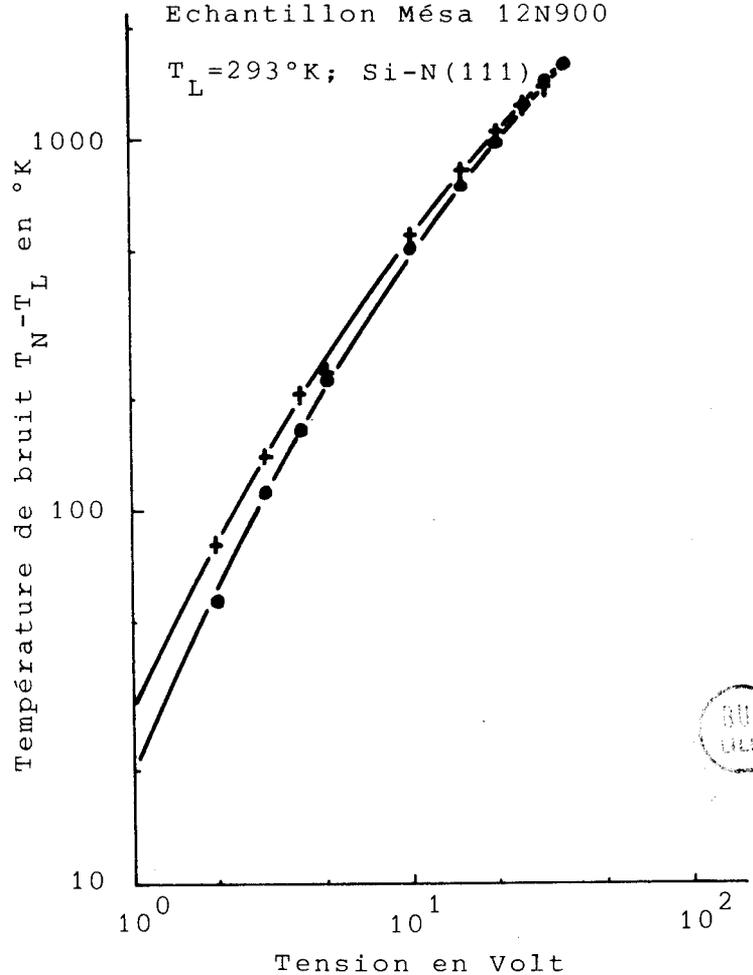


FIGURE 2,38

Température de bruit d'un échantillon Méssa 12N900 mesurée à 8,5 GHz.

- + tension négative au méssa
- tension positive au méssa



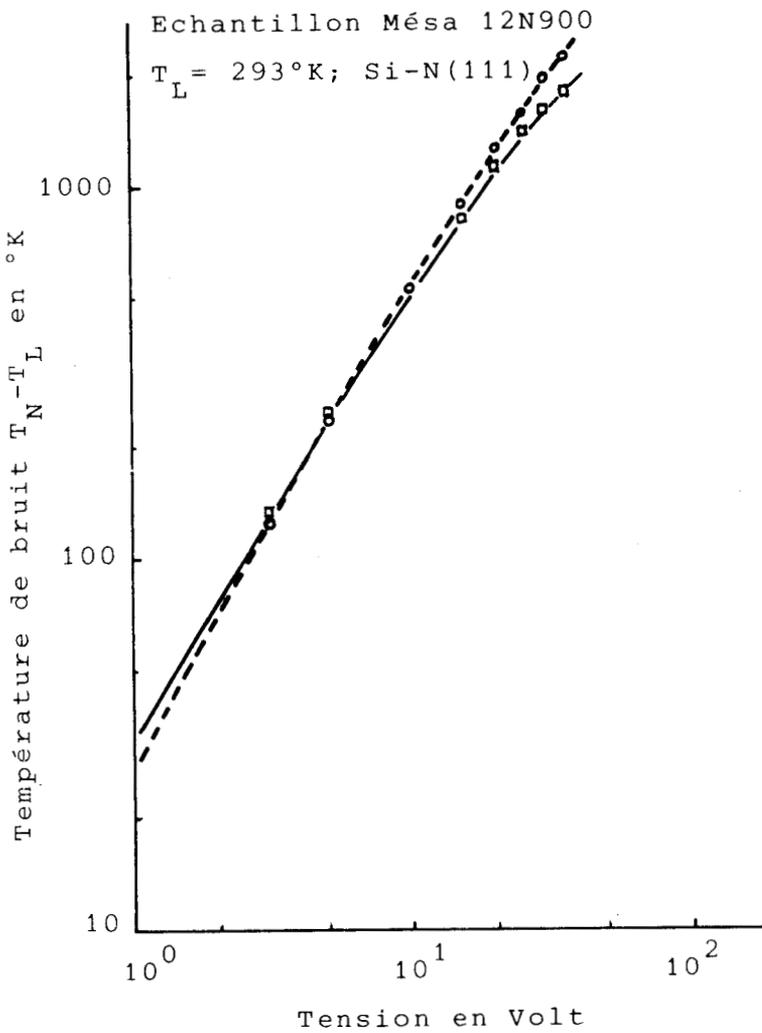


FIGURE 2,39

Température de bruit d'un échantillon 12N900 mesurée à:

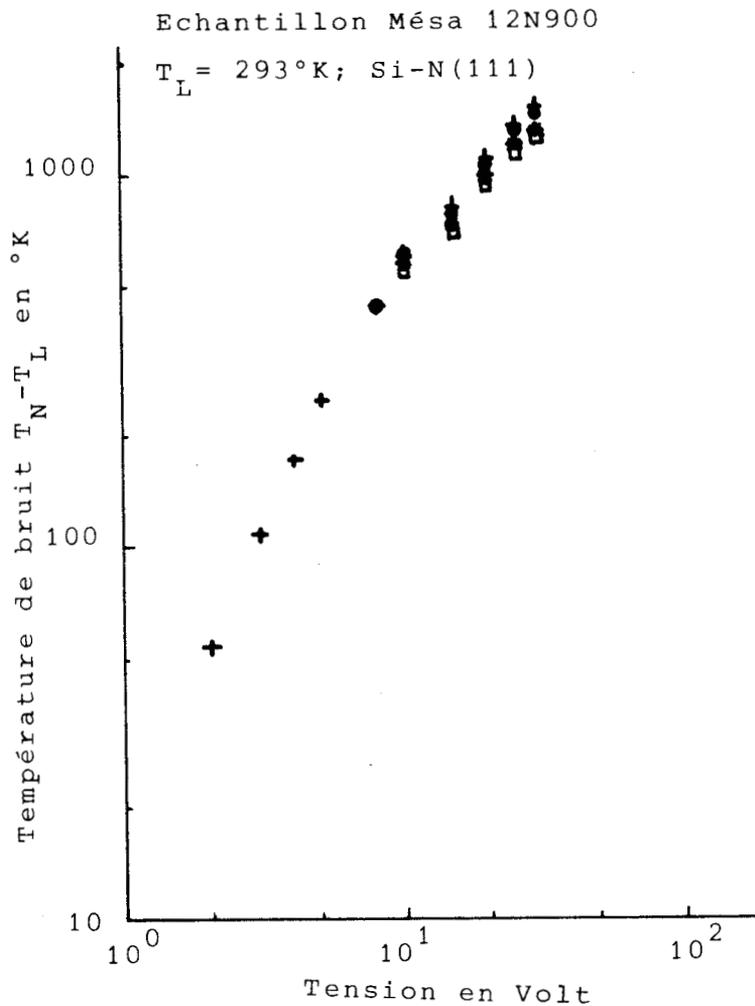
- $f = 10,5 \text{ GHz}$
- $f = 8,5 \text{ GHz}$

FIGURE 2,40

Température de bruit d'un échantillon 12N900 mesurée à 9,7 GHz:

- + début d'impulsion } $\tau = 2 \mu\text{s}$
- fin d'impulsion }
- * début d'impulsion } $\tau = 4 \mu\text{s}$
- fin d'impulsion }

(fréquence de répétition $F = 85\text{kHz}$)



Les points représentés concernent en fait un grand nombre d'échantillons différents mais de mêmes caractéristiques. Ils ont été obtenus sur des montures du type ligne microruban et avec réalisation d'adaptation d'impédance [37].

Sur les figures 2.38, 2.39 et 2.40 nous montrons quelques résultats concernant les échantillons épitaxiés méssa. Ces échantillons sont du type 12N900, de 11 à 12 μm de longueur et de résistivité de l'ordre de 9 $\Omega\text{-cm}$.

La figure 2.38 montre la dissymétrie des caractéristiques $T_N(V_O)$ quand on inverse le sens de la polarisation sur l'échantillon. Cette dissymétrie est sans doute liée à la dissymétrie propre du profil de dopage des échantillons sur laquelle nous n'avons malheureusement aucun renseignement. Elle est plus marquée en champ faible qu'en champ fort. Signalons que cette dissymétrie n'était pas détectable sur les caractéristiques statiques.

La figure 2.39 montre des mesures effectuées sur le même échantillon à deux fréquences différentes 8,5 et 10,5 GHz. Les deux caractéristiques tendent à s'écarter légèrement quand la tension appliquée croît. L'écart restant toutefois assez limité, il est difficile de l'attribuer à un effet spécifique de la fréquence (variation de l'angle de transit). Des mesures effectuées sur les échantillons de type planar n'avaient pas révélé de variation de la température de bruit avec la fréquence dans le domaine de la bande X [37].

La figure 2.40 montre des résultats obtenus sur un échantillon identique à ceux étudiés dans les figures 2.38 et 2.39, lorsque les conditions de polarisation sont telles que l'on est certain d'avoir échauffement du composant. On trouve dans ce cas que ΔT_N est plus petit que précédemment à tension identique. En principe si le réseau s'échauffe de ΔT_L , la quantité mesurée vaut $\Delta T_N = \Delta T_L + \Delta T_{N_e}$ où ΔT_{N_e} est la température de bruit des électrons à la température du réseau $T_L + \Delta T_L$. Il semble qu'il y ait ici un phénomène de compensation entre ΔT_L et ΔT_{N_e} , cette dernière décroissant plus vite que ΔT_L ne croît. Il paraît difficile de dire dans ces conditions si cette diminution est due à la variation de la mobilité différentielle du matériau ou à la variation du coefficient de diffusion avec la température de réseau.

Nous avons vu à la fin du paragraphe I.3 que les mesures de temps de vol ont donné pour les coefficients de diffusion longitudinal des résultats pouvant être très différents. Ainsi alors que Sigmon et Gibbons ont trouvé que celui-ci variait peu avec le champ électrique, Canali et al. ont trouvé que celui-ci au contraire variait fortement pour diminuer au tiers de sa valeur en champ très fort. Nous allons tâcher de confronter les valeurs de ce coefficient à nos résultats de mesures de bruit de diffusion. Pour ce faire nous nous servirons de la formule bien connue [42]

$$T_N(f) = \frac{Sq^2}{K_B R_e |Z(f)|} \int_0^W n(x) D_N[E(x)] |\nabla Z(f,x)|^2 dx \quad (2.31)$$

où x est l'abscisse, S la surface de l'échantillon, $Z(f)$ est l'impédance petit signal à la fréquence de mesure, $n(x)$ est la densité de porteurs mobiles, $|\nabla Z(f,x)|$ est le module du champ d'impédance à l'abscisse x . $D_N(E)$ est le coefficient de diffusion dont il faut connaître la variation en fonction du champ électrique local. Nous utilisons dans ce but différentes lois dont nous pouvons ainsi étudier le degré de validité (la fréquence de mesure de bruit est ici très inférieure à la fréquence de corrélation des fluctuations de vitesse des porteurs). On voit d'après 2,31 que si l'on connaît $n(x)$, $E(x)$, $D_N(E)$ et $|\nabla Z(f,x)|$ on pourra calculer la température équivalente de bruit T_N . Le programme de simulation dont nous avons parlé plus haut permet le calcul en tout point et à tout instant du champ local $E(x,t)$ ainsi que celui du courant total $J(t)$. Nous pourrions donc calculer le champ d'impédance par [42]

$$|\nabla Z(f,x)| = \frac{E_1(f,x)}{S J_1(x)}$$

où E_1 et J_1 sont les premiers harmoniques du développement en série de Fourier de $E(x,t)$ et $J(t)$.

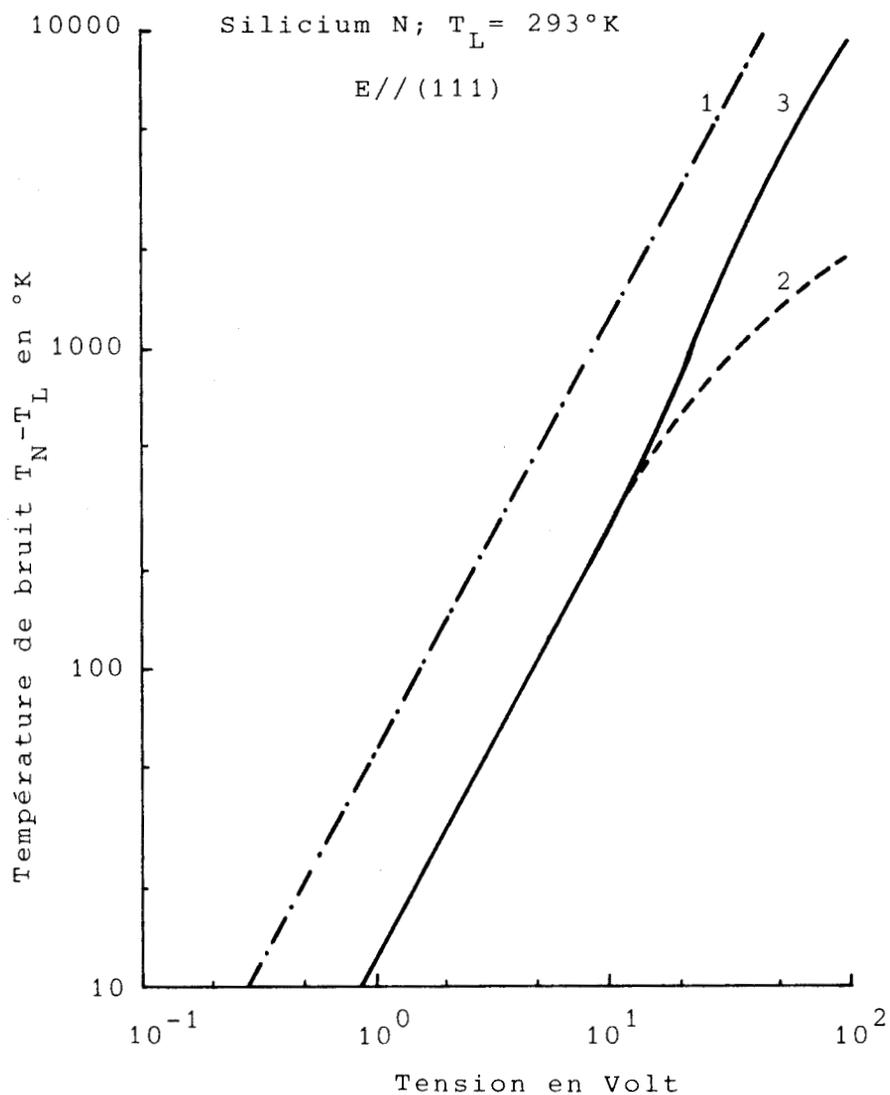


FIGURE 2,41

Température de bruit théorique d'un échantillon
 Planar 405A:

- 1: hypothèse $D(E) = D_0 = 35 \text{ cm}^2/\text{s}$
- 2: hypothèse $D_{\text{sécant}}$
- 3: hypothèse $D(E)$ mesuré par Canali /22/



Nous avons essayé les trois lois $D_N(E)$ suivantes :

1°) $D_N = D_L = 35 \text{ cm}^2/\text{sec}$ pour tout champ électrique ce qui est une approximation des résultats de Sigmon et Gibbons.

2°) $D_N = D_0 / (1 + \mu_0 E / v_s)$ qui est une loi souvent utilisée dans les simulations de composants.

3°) $D_N(E) = D_L(E)$ donnée pour Canali et al.

Les résultats obtenus apparaissent dans la figure 2.41. Alors que le coefficient de diffusion n'avait pratiquement pas d'influence sur les caractéristiques statiques, il influe très fortement sur la valeur de la température équivalente de bruit. Ceci pouvait être prévu étant donné que D_N joue en facteur multiplicatif dans l'intégrant de la formule (2,31).

L'hypothèse d'un coefficient D_N qui ne dépendrait pas du champ électrique (courbe 1) mène à des températures de bruit trop élevées. La loi empirique (courbe 2) semble approximer les résultats de façon plus satisfaisante surtout en polarisation faible. Par contre, dans la limite de la précision expérimentale, la loi de diffusion donnée par Canali (courbe 3) approxime relativement bien nos résultats expérimentaux surtout en champ électrique très fort. Ceci tend à confirmer l'exactitude des déterminations expérimentales de Canali et al. [22].

En définitive, bien que cette méthode de détermination du coefficient de diffusion par le bruit soit très indirecte, elle est à notre connaissance la seule qui permette de juger de ce paramètre à des champs aussi élevés que 70 KV/cm.

* *
*

2eme Partie

PHENOMENES DE TRANSPORT EN CHAMP VARIABLE
DANS
LE TEMPS

II.1 INTERPRETATION PHYSIQUE DES PHENOMENES TRANSITOIRES LIES A L'APPLICATION BRUTALE D'UN CHAMP ELECTRIQUE.

Le phénomène de survitesse apparaissant dans les semiconducteurs lorsque les porteurs sont soumis à des champs largement variables dans le temps a déjà été souvent examiné par de nombreux auteurs, lesquels n'ont pas manqué de souligner l'intérêt pratique de ce phénomène, en particulier au niveau des composants submicromiques [43, 50].

On considère un matériau qui au premier stade n'est soumis à aucun champ électrique. Les porteurs mobiles sont alors en équilibre thermique avec le réseau, et leur distribution est une distribution de Maxwell-Boltzmann, laquelle est isotrope pour les porteurs situés dans une même vallée. A l'instant $t=0$ on applique un champ électrique aux porteurs. Celui-ci a pour effet immédiat de déplacer les points représentatifs des électrons dans la même direction de l'espace des vecteurs d'onde. Dans le même temps, du fait de ce mouvement, environ la moitié des porteurs auront vu leur énergie augmenter tandis que l'autre moitié l'aura vu diminuer. Il en résultera une forte augmentation de la vitesse d'ensemble des électrons alors que leur énergie moyenne n'aura pratiquement pas changé de valeur. Par la suite les électrons les plus énergétiques qui sont aussi les plus rapides commenceront à subir des collisions qui auront pour effet de redistribuer aléatoirement leurs vecteurs d'onde. Il en résultera que, pour les temps plus courts que la durée de libre parcours des porteurs, le champ appliqué aura pour effet de déplacer la distribution sans la modifier, dans la direction du champ électrique, puis par la suite de l'élargir lorsque les porteurs les plus énergétiques subiront des collisions qui auront pour effet de redistribuer leur vecteur d'onde.

Ces considérations sont illustrées dans les figures 2.42, 2.43 et 2.44 où un certain nombre de résultats obtenus par la méthode de Monte Carlo sont reportés. La figure 2.42 concerne le cas où on applique brutalement un champ $E = 50$ kV/cm,

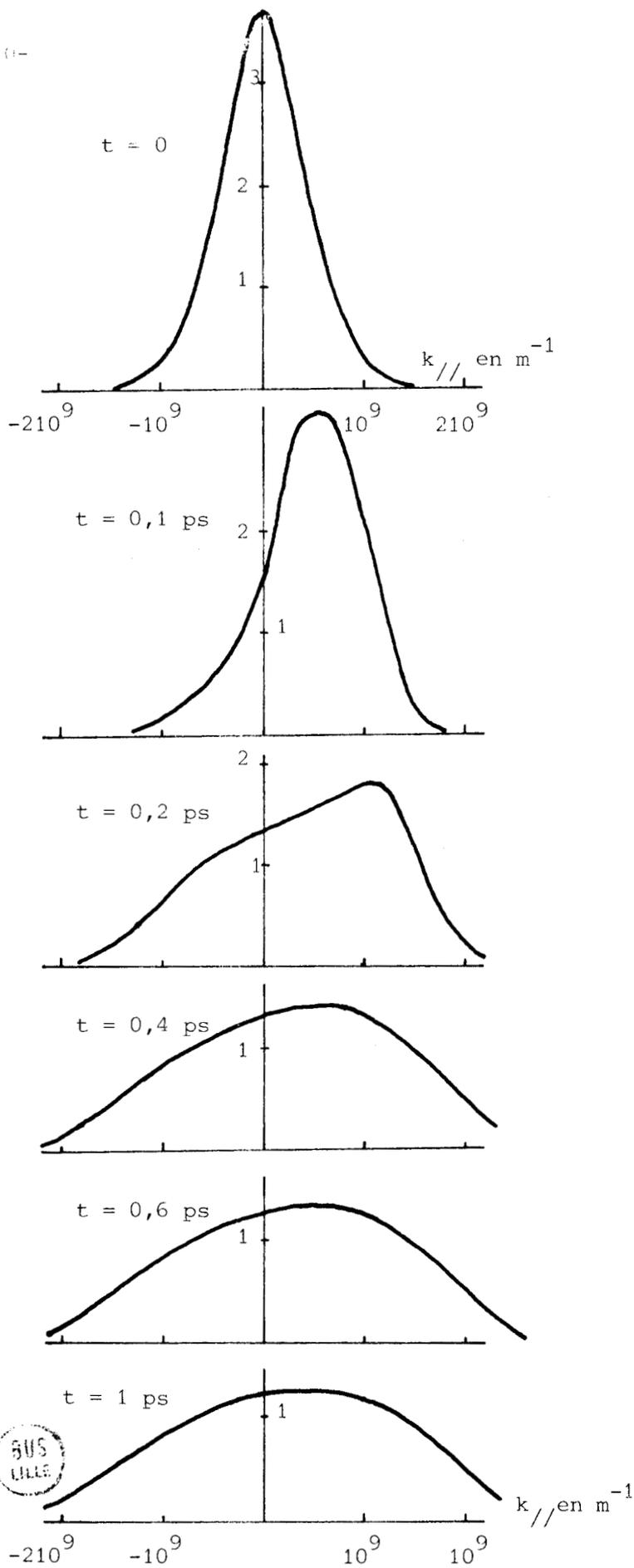


FIGURE 2,42

Le matériau est soumis à un échelon de champ électrique $E(t)=0-50$ kV/cm. Evolution transitoire de la fonction de distribution $G(k_{//})$ donnée en unités arbitraires.
 $T_L = 293^\circ\text{K}$; $E//(111)$

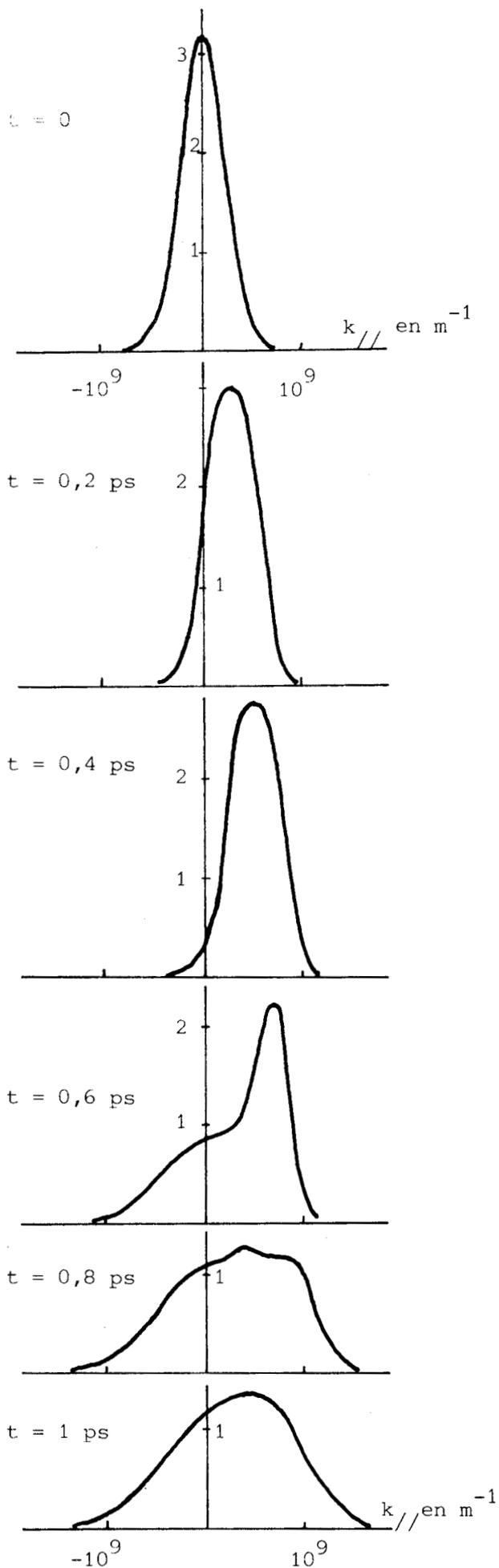


FIGURE 2,43

Mêmes conditions qu'en figure 2,42 avec $E(t)=0-10$ kV/cm et $T_L = 77^\circ\text{K}$

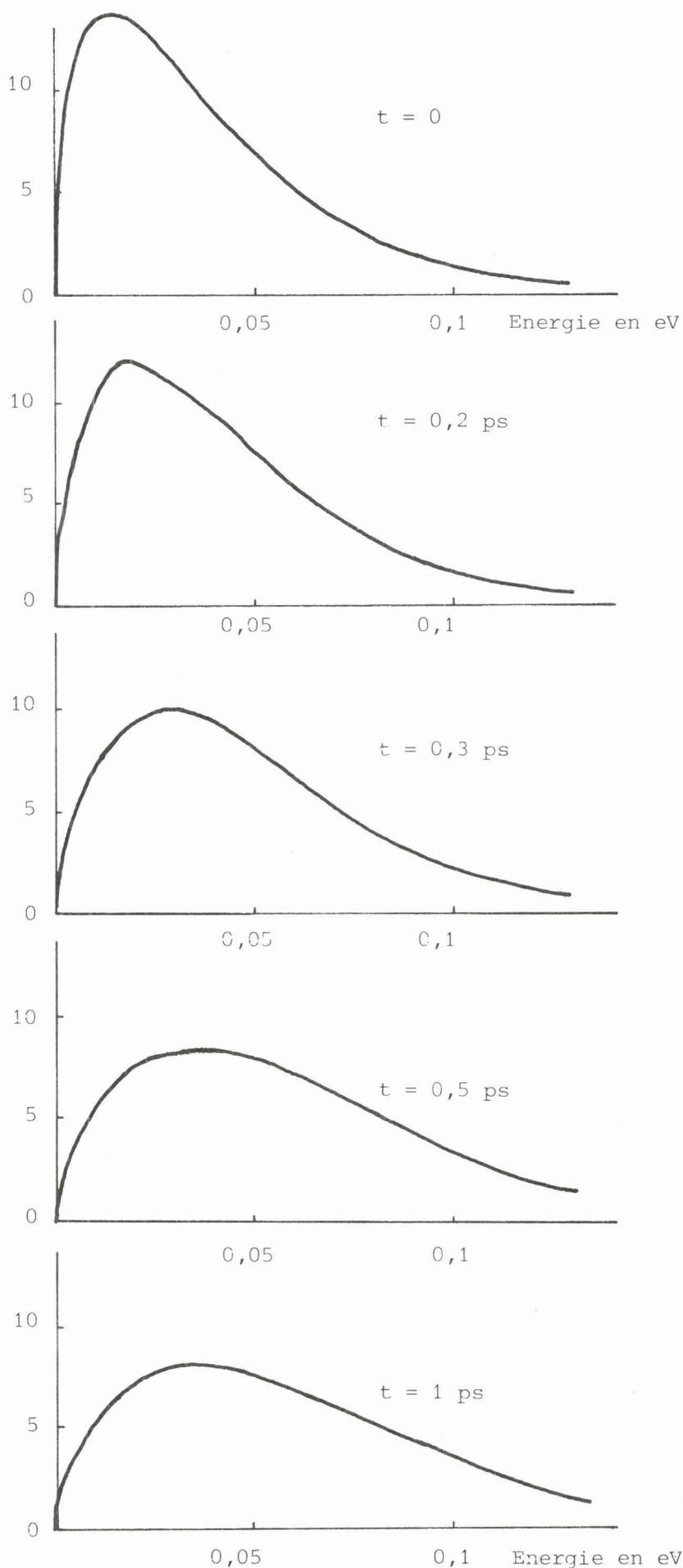


FIGURE 2,44

Le matériau est soumis à un échelon de champ électrique $E(t) = 0-10 \text{ kV/cm}$. Evolution temporelle de la densité d'énergie $n(E, t)$ donnée en unités arbitraires. $T_L = 293^\circ\text{K}$; $E//(111)$



à la température ambiante. La distribution $G(k_{//})$ a été calculée à différents instants depuis l'état initial où elle est maxwellienne jusqu'à l'étalement maximum correspondant au régime statique. On peut remarquer en particulier que le maximum présenté par la distribution peut se déplacer fortement, bien au delà de la position de ce maximum correspondant au cas statique. La période où l'étalement de la distribution s'effectue se situe entre 0,1 et 0,4 picoseconde. En fait, jusqu'à $t = 0,1$ psec les porteurs sont en accélération, quasilibre, et la montée de la vitesse est quasi-linéaire (le maximum atteint peut être rendu arbitrairement grand en augmentant l'amplitude du champ appliqué). Par la suite, les collisions devenant plus nombreuses, la distribution s'étale, l'énergie moyenne augmente, la vitesse rediminue jusqu'à sa valeur statique. Sur la figure 2.43 nous présentons un cas similaire obtenu avec un champ de 10 kV/cm à la température de 77 °K. Les phénomènes, quoique différents quantitativement, sont qualitativement les mêmes que ceux de la figure 2.42. Sur la figure 2.44, nous avons représenté l'évolution temporelle de la densité d'énergie $n(\epsilon) = \epsilon^{1/2} f(\epsilon)$ qui montre bien l'échauffement des porteurs par l'augmentation de la densité aux énergies élevées.

Les courbes de vitesse et d'énergie en fonction du temps correspondant aux cas présentés ici sont données dans le paragraphe II.3 de ce chapitre. Nous avons représenté ici un cas où le champ électrique est appliqué suivant la direction $\langle 100 \rangle$ (figure 2.45a et 2.45b) avec $E = 50$ kV/cm.

Sur la figure 2.45a sont représentées les évolutions de l'énergie et de la vitesse ainsi que celle du rapport $r(t)$ des populations dans les vallées non équivalentes. On remarquera que, durant un certain laps de temps, il existe une distribution exédentaire des porteurs dans les vallées froides. La figure 2.45b montre l'évolution de la vitesse dans les vallées froides et dans les vallées chaudes. Les deux vitesses ne passent pas par leur maximum au même instant. Ceci est normal étant donné que les porteurs plus chauds des vallées "h" diffusent plus vite et en plus grand nombre sous l'effet des collisions que ceux des vallées froides "c" dont les porteurs sont moins énergétiques et moins rapides.

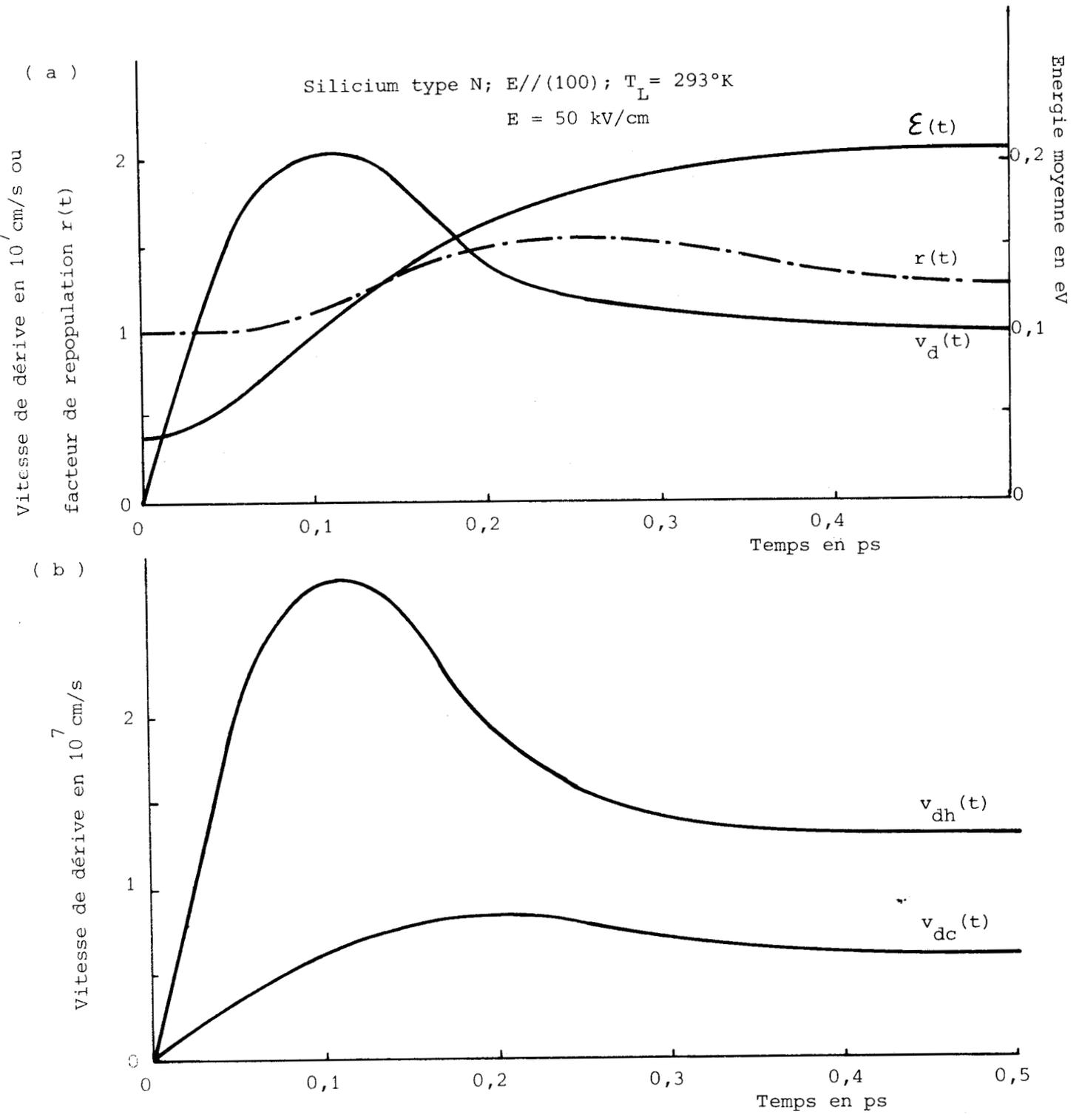


FIGURE 2,45

Réponses transitoires à un échelon de champ électrique $E(t) = 0-50 \text{ kV/cm}$ appliqué selon l'axe (100). La figure (a) montre le phénomène de repopulation transitoire par $r(t)$; la figure (b) montre la réponse en vitesse pour chaque type de vallée.



II.2. CALCUL DE LA MOBILITE COMPLEXE EN GAMMES HYPERFREQUENCE ET INFRAROUGE LOINTAIN. VERIFICATION EXPERIMENTALE DANS LE DOMAINE MILLIMETRIQUE.

Parmi les paramètres importants nécessaires à la modélisation de nombreux composants hyperfréquences figure la mobilité complexe du matériau. Elle conditionne pour une bonne part leur comportement en haute fréquence, en particulier lorsque les fréquences de travail sont proches des fréquences de relaxation du matériau. En effet, à fréquence relativement basse la mobilité dynamique est égale à la pente de la caractéristique $v_d(E)$ du matériau autour du point de fonctionnement déterminé par la valeur du champ continu statique. Par contre, en haute fréquence, ceci peut ne plus être vrai et en particulier en régime de vitesse saturée ($E \geq 50$ kV/cm) la mobilité peut ne plus être nulle. Ce fait reste encore relativement mal connu et ne peut être ignoré dans la modélisation des composants haute fréquence.

II.2.1. Effet de modulation de vitesse.

L'effet de modulation de la vitesse de dérive par un champ périodique quelconque peut être aisément étudié par la méthode de Monte Carlo [51, 55]. De plus les régimes linéaires ou non linéaires en haute fréquence peuvent être étudiés tour à tour aussi facilement. Nous nous occupons ici du calcul de la mobilité petit signal du matériau dans tout le spectre de fréquence recouvrant les fréquences caractéristiques des relaxations du moment et de l'énergie des porteurs. Nous considérons donc que nous appliquons au matériau le champ électrique suivant

$$E(t) = E_0 + E_1 \sin(2\pi f t) \quad (2.32)$$

Dans les cas étudiés ici, la fréquence f varie dans tout le domaine millimétrique et submillimétrique soit entre 50 et 10000 GHz. Pour le calcul de la mobilité nous avons fixé $E_1 = E_0/10$. Ces champs sont supposés uniformes et parallèles à la direction $\langle 111 \rangle$. La figure 2.46 montre comment l'effet de modulation de vitesse est observé.

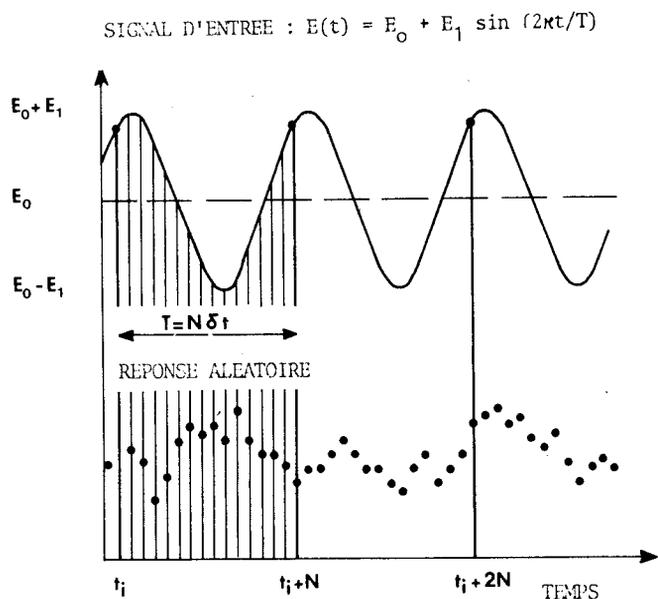


FIGURE 2.46

Le paramètre aléatoire observé est enregistré en réponse au champ modulant $E(t)$. La période T ayant été divisée en N intervalles de durée δt , la réponse moyenne est obtenue en moyennant les valeurs à $t_i, t_{i+N}, t_{i+2N}, \dots$

La réponse moyenne ayant été calculée sur un nombre suffisant de périodes du signal d'entrée, le calcul de l'amplitude du premier harmonique fournit la mobilité $\mu^* = \mu' + j\mu''$.

Sur la figure 2.47 nous montrons un exemple de réponse de la vitesse de dérive à trois fréquences différentes pour les mêmes valeurs de champ électrique. Dans le cas présent E_0 et E_1 sont du même ordre de grandeur afin de bien mettre en évidence l'effet de modulation de vitesse qui se manifeste dans la région à vitesse saturée ($50 \leq E(t) \leq 150$ kV/cm). On notera l'augmentation de la

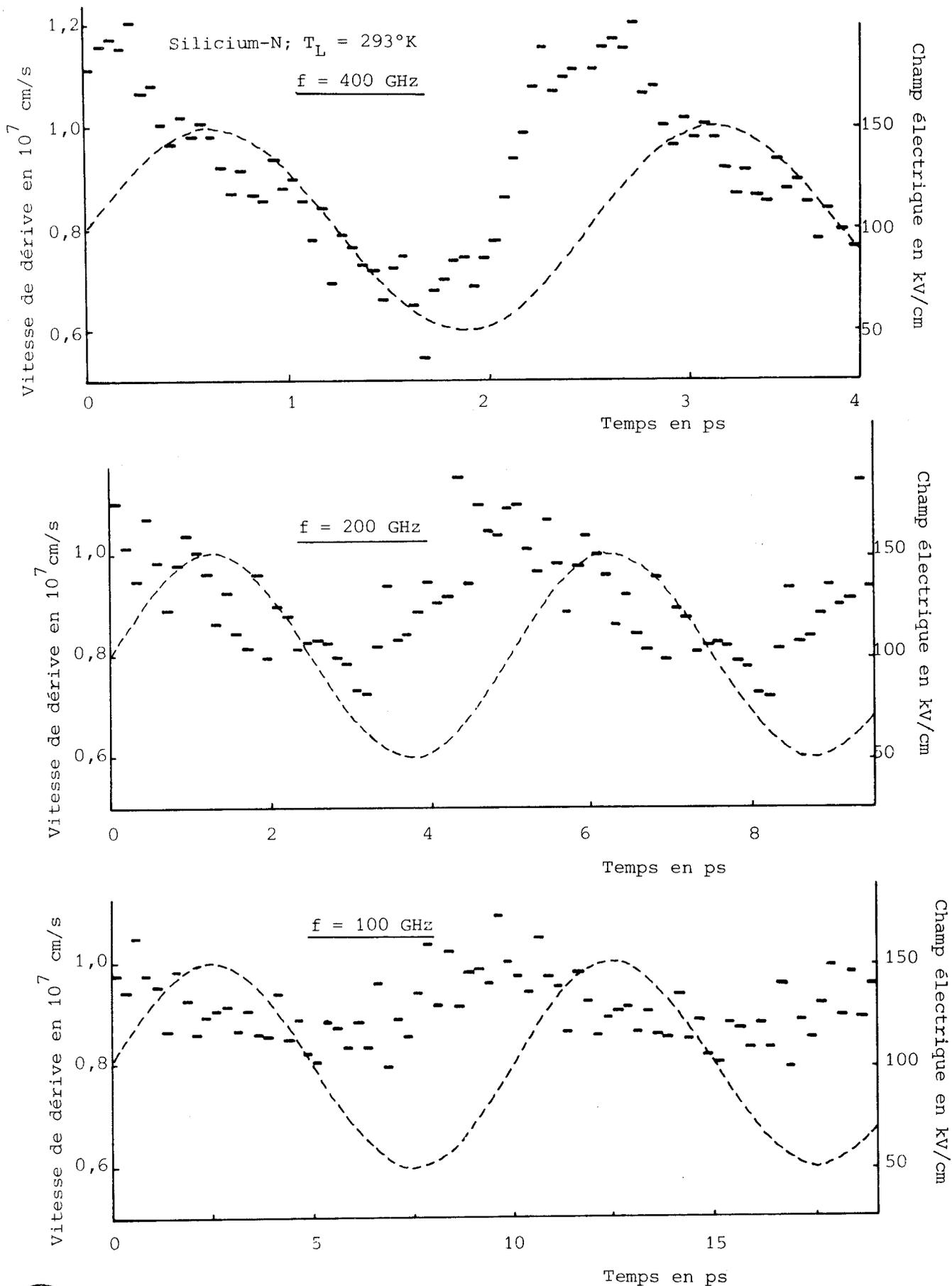


FIGURE 2,47

Quelques réponses moyennes des porteurs à un champ sinusoidal avec $E = 100 \text{ kV/cm}$ et $E_1 = 50 \text{ kV/cm}$ appliqués selon la direction (111), aux trois fréquences 400, 200, et 100 GHz.



profondeur de modulation lorsque la fréquence augmente, mettant ainsi en évidence un effet de relaxation particulièrement marqué à 400 GHz.

II.2.2. Evolution de la mobilité avec la fréquence.

Considérons d'abord les résultats obtenus lorsque le champ électrique est tel que la mobilité différentielle statique n'est pas nulle ($E_0 = 10 \text{ kV/cm}$). Ceux-ci apparaissent sur la figure 2.48.

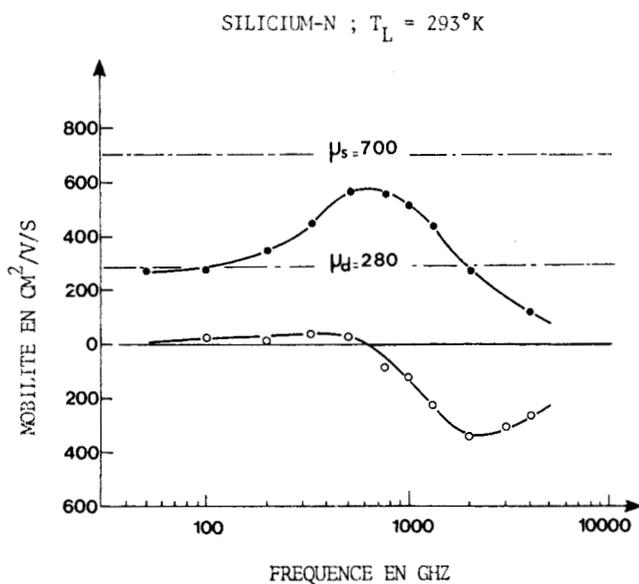


FIGURE 2.48.

$E_0 = 10 \text{ kV/cm}$, $E_1 = 1 \text{ kV/cm}$.

(La position des points calculés donne une idée de la précision obtenue).

- : mobilité réelle
- : mobilité imaginaire

On peut remarquer qu'en deçà de 100 GHz la partie réelle μ' de la mobilité demeure pratiquement égale à la mobilité statique qui vaut $\mu_d \approx 280 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Quand la fréquence croît le calcul montre que la partie réelle augmente tandis qu'apparaît une mobilité imaginaire μ'' qui contribue à la variation de la cons-

te diélectrique totale du matériau. Dans le domaine des fréquences submillimétriques, la mobilité réelle μ' diminue. Ce phénomène correspond à l'effet de relaxation du moment des porteurs qui apparaît ici au-delà de 600 GHz (figure 2.48).

D'autres résultats, apparaissant sur la figure 2.49, concernent l'évolution de la mobilité complexe des porteurs en régime de vitesse saturée ($E_0 = 50$ kV/cm et $\mu_d \approx 0$).

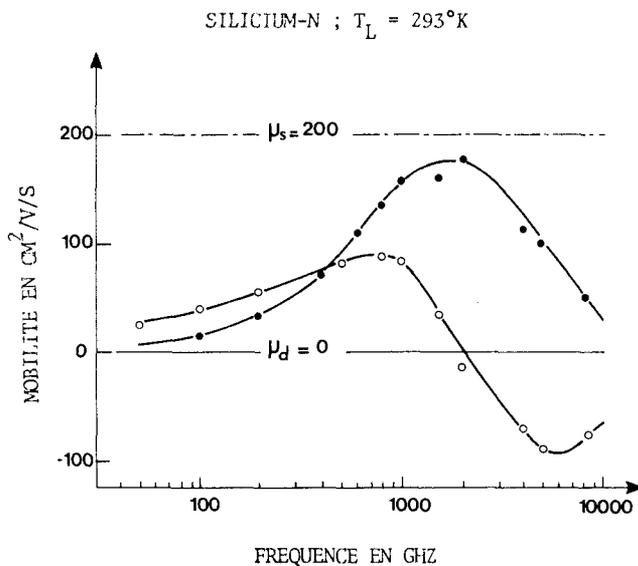


FIGURE 2.49

$E_0 = 50$ kV/cm $E_1 = 10$ kV/cm

Le champ électrique balaye la zone à saturation de vitesse.

($40 \leq E \leq 60$ kV/cm)

- : mobilité réelle
- : mobilité imaginaire

Dans ces conditions le champ électrique balaye la région où la mobilité différentielle statique est nulle. On observe une mobilité réelle très faible en deçà de 100 GHz. Quand la fréquence croît, la mobilité augmente et tend vers la mobilité sécante $\mu_s = v_s/E_0$, passe pour un maximum vers 1500 GHz puis décroît lorsque la fréquence devient du même ordre de grandeur que l'inverse du temps de relaxation du moment des porteurs. Simultanément la partie imaginaire μ''

change de signe à la fréquence pour laquelle μ' passe par le maximum. L'effet observé peut s'expliquer de la façon suivante : lorsque la fréquence du champ appliqué est du même ordre de grandeur que la fréquence moyenne de collision, les porteurs peuvent être fortement accélérés ou ralentis entre deux collisions successives. Il en résulte que dans le domaine millimétrique une modulation de la vitesse due à E_1 entre en jeu et induit une mobilité supplémentaire même dans la zone où la vitesse est saturée. Ce phénomène produit une absorption supplémentaire dans le domaine hyperfréquence et infrarouge lointain qui persiste jusqu'à ce que les fréquences correspondant à la relaxation du moment soient atteintes.

II.2.3. Confrontation avec les résultats expérimentaux.

En vue de vérifier les résultats théoriques précédents nous allons donner quelques résultats expérimentaux obtenus sur la conductivité présentée par le silicium dans le domaine des 4 et 2 mm de longueur d'onde. Nous ne décrivons que sommairement la technique utilisée, celle-ci ayant été décrite en détail par ailleurs [56, 58].

Utiliser des mesures de conductivité des matériaux semiconducteurs en vue de calculer les temps de relaxation est une vieille idée [59] et elle a été appliquée sous diverses formes au GaAs [60, 62, 63, 66, 68], au silicium et au germanium [63, 64, 67] et à d'autres matériaux (tels InP, GaSb, InSb) [61, 65, 66, 68]. Ces techniques nécessitent en général de résoudre un problème d'hyperfréquences assez complexe : le calcul de l'impédance d'un barreau de matériau traversant un guide d'onde nécessairement ouvert pour la polarisation du matériau [64], ou bien le calcul du coefficient de qualité d'une cavité dont on perturbe l'une des parois constituée du matériau à étudier [65].

Une autre méthode permettant de caractériser les phénomènes de relaxation des porteurs repose sur la détermination des harmoniques produits par la non-linéarité du matériau. Cette technique a été appliquée en particulier au germanium et au silicium [69, 70].

II.2.3.1. Technique de mesure de conductivité par étalonnage thermique.

La technique que nous avons mise au point utilise un principe très simple et est en fait une méthode de comparaison. Elle est basée sur le fait qu'il est possible de modifier et généralement de diminuer la conductivité du matériau

- soit en échauffant seulement les porteurs par l'application d'une impulsion de champ électrique suffisamment courte (pour éviter d'échauffer le réseau),

- soit en échauffant le matériau (le réseau) par une puissance électrique continue.

Nous considérons une lame à faces planes et parallèles constituée d'un matériau caractérisé par sa conductivité et sa permittivité diélectrique. Les coefficients de transmission et de réflexion que présente cette lame à une onde hyperfréquence dépendent de ces deux grandeurs. En élevant la température de l'échantillon, à condition de ne pas augmenter le nombre des porteurs thermiques, on diminue la conductivité et on augmente la transmission. Si, par ailleurs sur le même échantillon on applique des impulsions de champ électrique suffisamment courtes, les porteurs seuls ont le temps de s'échauffer, et on remarque également une diminution de la conductivité : la transmission est modifiée dans le même sens que dans le cas précédent. L'idée de base est d'obtenir la même variation de conductivité hyperfréquence par l'une ou l'autre des deux méthodes (figure 2.50). Ainsi, lorsque les deux effets sont identiques, la conductivité peut être obtenue facilement en mesurant la résistance de l'échantillon quand on lui applique la puissance continue. En effet, la conductivité du silicium en champ faible à la température ambiante est la même qu'à fréquence nulle tant que

$$2\pi f \tau_p \ll 1$$

τ_p étant le temps de relaxation moyen du moment.

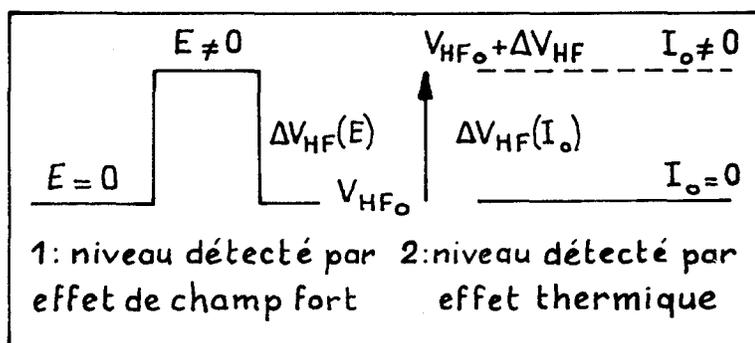


FIGURE 2.50

Principe de mesure de la conductivité hyperfréquence par étalonnage thermique.

L'intérêt de cette méthode de détermination de la conductivité par étalonnage thermique "in situ" est qu'elle permet une mesure directe de celle-ci en s'affranchissant de toute hypothèse ou calcul nécessaire pour relier l'information à obtenir à la transmission de l'échantillon. Elle permet d'éviter l'inconvénient des méthodes citées plus haut qui font appel à des mesures et à des calculs d'impédance.

Par contre, l'inconvénient essentiel de la méthode est le suivant : la variation de permittivité obtenue par effet thermique en échauffant le réseau et par effet de champ fort en échauffant les électrons ne sont généralement pas identiques. Pour que la méthode utilisée soit valable il est nécessaire que dans les deux cas la variation de permittivité $\Delta\epsilon'$ soit négligeable. Ceci peut être obtenu lorsque la concentration en impuretés, donc en porteurs libres, est suffisamment faible. Il est toujours possible de s'assurer que les effets liés à la variation de permittivité $\Delta\epsilon'$ sont négligeables en utilisant la méthode de comparaison précédemment décrite pour déterminer la conductivité hyperfréquence à partir du coefficient de réflexion au lieu du coefficient de transmission. Dans le cas où la permittivité n'intervient pas on doit trouver la même valeur de conductivité (ou de mobilité) quand on la mesure par l'intermédiaire de l'un ou l'autre coefficient [56].

La technique proposée n'est, par son principe même, susceptible de ne donner que la valeur de la mobilité réelle. Enfin, lorsque la température du réseau devient importante la génération de porteurs thermiques ne peut plus être négligée. Il en résulte en pratique que la conductivité réduite continue ne peut diminuer au maximum que d'un facteur de l'ordre de trois et la mesure de conductivité hyperfréquence au-delà de cette limite nécessite une extrapolation de l'étalonnage thermique.

II.2.3.2. Echantillons, résultats expérimentaux, comparaison avec la théorie.

- a) Les échantillons pour lesquels nous avons obtenu les résultats présentés plus loin sont des "silistances 300 μm ". Ceux-ci sont fabriqués à partir de plaquettes de silicium dopées au phosphore tirées dans la direction $\langle 111 \rangle$, de 300 μm d'épaisseur. Leur résistivité est comprise entre 9,8 et 11,4 $\Omega\text{-cm}$. La plaquette est tout d'abord enrichie sur les deux faces par dépôt et diffusion de phosphore, sur une profondeur de 1 μm environ. Sont déposées ensuite une couche de chrome puis une couche d'or de protection assurant un bon contact électrique. La plaquette est finalement découpée en carrés de 1 mm^2 de section environ.
- b) Le schéma synoptique du banc de mesure est donné sur la figure 2.51. La partie hyperfréquence a été mise au point dans la bande 70 GHz (klystron Philips) et dans la bande 120 GHz (klystron Varian). Le circuit de polarisation en impulsion de l'échantillon est pourvu d'un système d'échantillonnage à mémoire permettant une mesure précise des valeurs crêtes du courant et de la tension appliqués à l'échantillon. La mesure de l'impulsion détectée est faite en temps réel sur un oscilloscope rapide.
- c) Résultats. Nous montrons des résultats obtenus avec les échantillons décrits plus haut aux fréquences $f = 68,3$ GHz et $f = 123,3$ GHz sur les figures 2.52, 2.53 et 2.54.

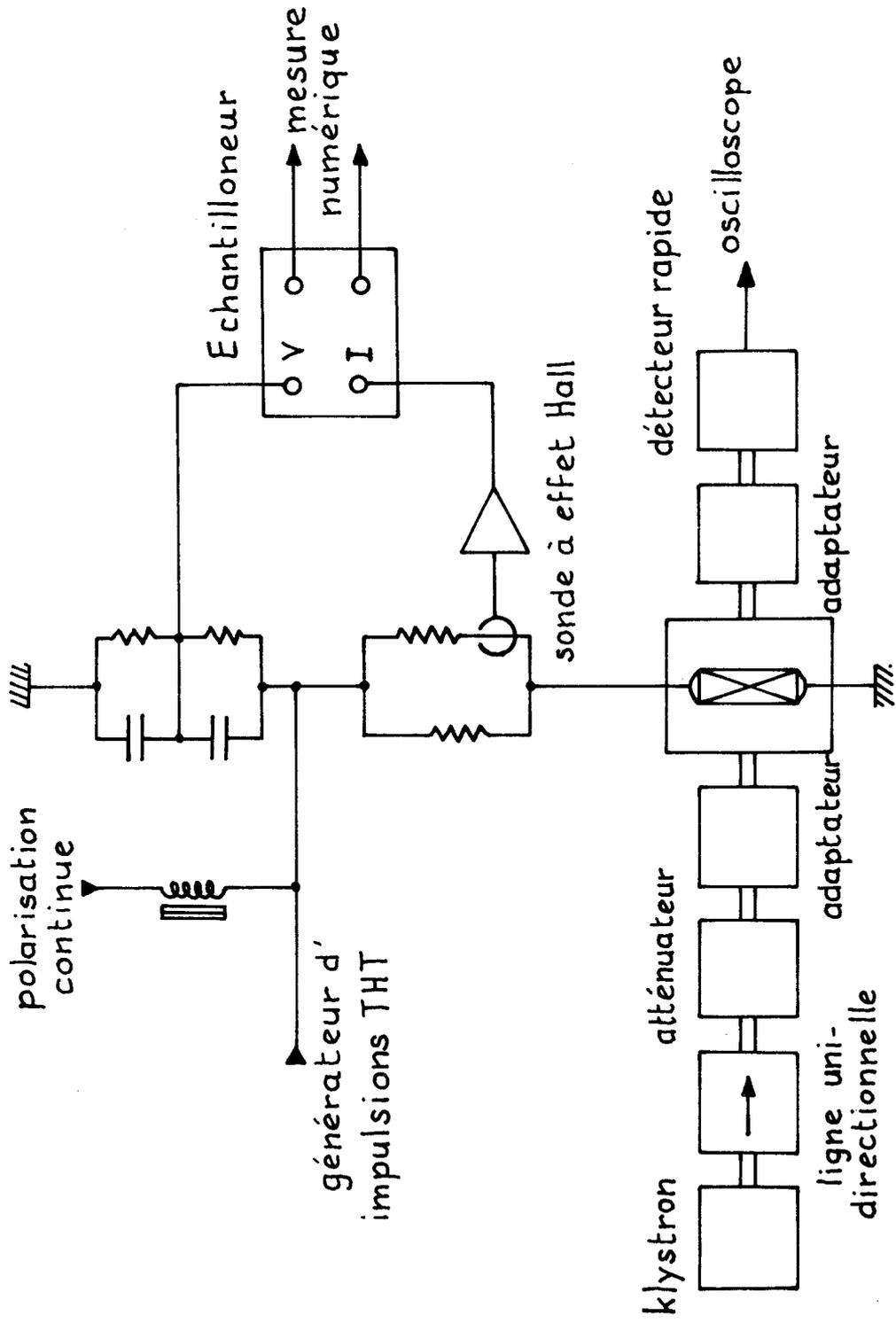


FIGURE 2.51

Schéma synoptique du banc de mesure de conductivité hyperfréquence.



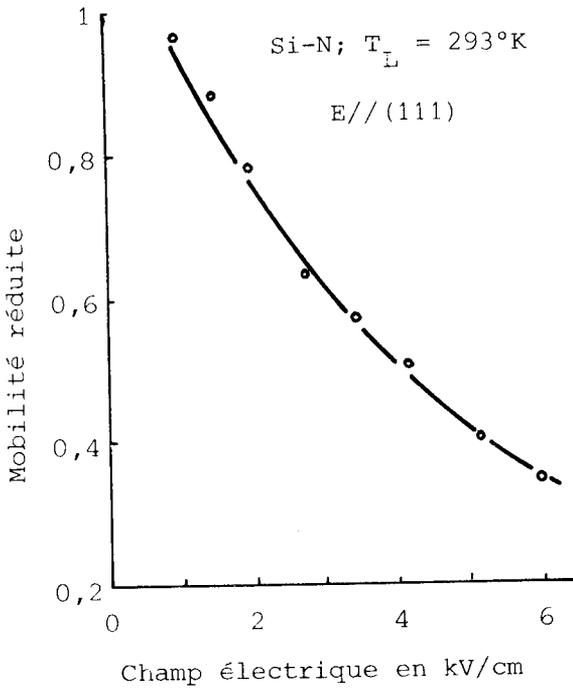


FIGURE 2,52

Comparaison entre les mobilités mesurées en réflexion (●) et en transmission (courbe pleine) sur un échantillon de type Silistance $300 \mu\text{m}$ à $f = 68,3 \text{ GHz}$.

FIGURE 2,53

Mobilité mesurée en transmission à $68,3 \text{ GHz}$ sur Silistances $300 \mu\text{m}$.

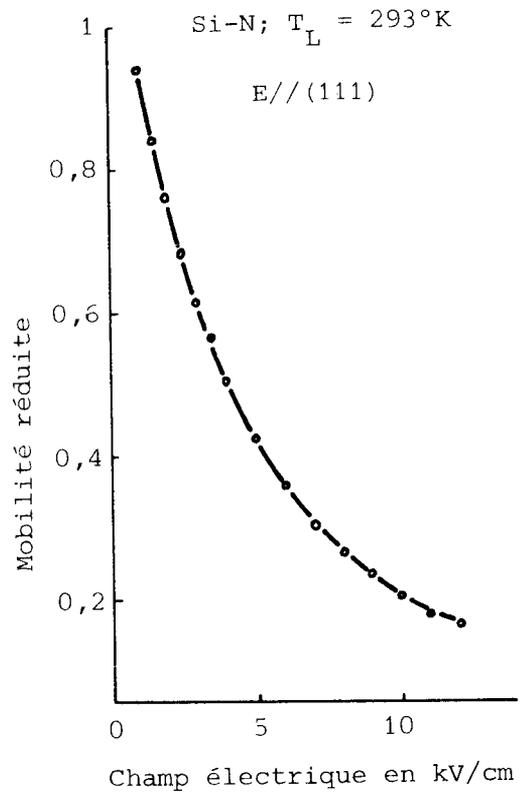
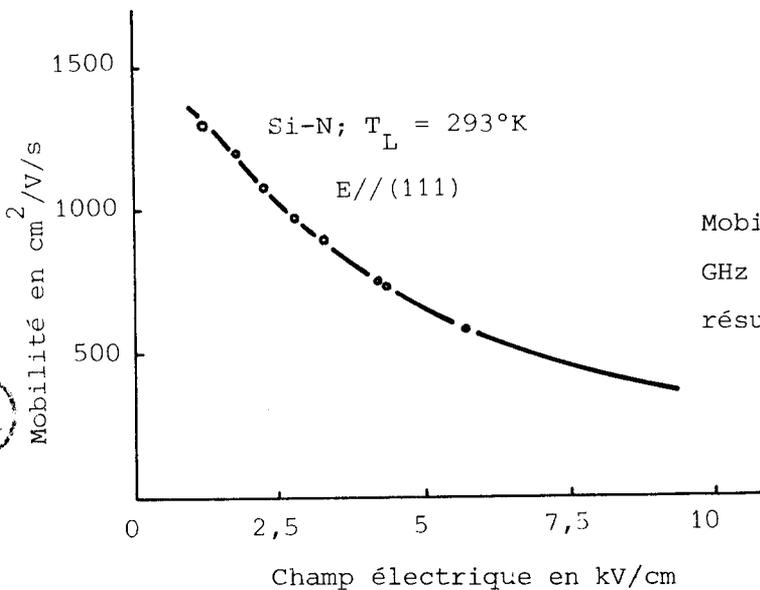


FIGURE 2, 54

Mobilité mesurée en transmission à $123,3 \text{ GHz}$ (●). La courbe pleine représente les résultats obtenus par Monte Carlo.



BNS
LILLE

Sur la figure 2.52, nous montrons des résultats de mesure de la mobilité réduite μ'/μ_0 en transmission et en réflexion sur le même échantillon à la fréquence de 68,3 GHz. On remarque le bon accord obtenu entre les deux types de résultats.

Sur la figure 2.53, les résultats en transmission sont obtenus sur un échantillon de même type à la même fréquence, mais au-delà de 6 kV/cm, les points ont été obtenus par extrapolation de l'étalonnage thermique de l'échantillon. Enfin, des résultats de mesure obtenus sur le même échantillon à la fréquence de 123,3 GHz ont été comparés à ceux calculés dans les mêmes conditions de champ et de fréquence par la méthode de Monte Carlo (figure 2.54). On pourra noter l'assez bon accord obtenu compte tenu de l'imprécision statistique qui entache toujours les résultats de Monte Carlo. La précision de mesure sur les points expérimentaux peut être estimée à environ 5 %, les points montrés ici étant des moyennes obtenues sur plusieurs séries de mesures.

II.3. LES EQUATIONS DE RELAXATION.

II.3.1. Détermination et discussion des équations de relaxation dans un semiconducteur uniforme.

Les équations de relaxation qui gouvernent l'évolution des paramètres du premier ordre d'un système en régime non stationnaire se mettent sous la forme bien connue (ϵ représente l'énergie et p le moment moyen des porteurs)

$$\frac{d\bar{\epsilon}}{dt} = q E(t) \bar{v} - \frac{\bar{\epsilon} - \epsilon_L}{\tau_\epsilon} \quad (2,33)$$

$$\frac{d\bar{p}}{dt} = q E(t) - \frac{\bar{p}}{\tau_p} \quad (2,34)$$

où les $\overline{\quad}$ réfèrent à une moyenne prise sur l'ensemble: $\overline{\epsilon}$, \overline{v} et \overline{p} sont donc des fonctions du temps.

Le problème qui se pose à nous est de savoir ce que représentent réellement les temps de relaxation τ_{ϵ} et τ_p . La validité et la rigueur des équations de relaxation ainsi écrites reposent en fait sur la définition et sur les hypothèses faites pour les temps de relaxation. En cherchant à déduire ces équations de l'équation de transport de Boltzmann (ETB) non stationnaire mais homogène nous pouvons obtenir une forme générale de τ_{ϵ} et τ_p , dépendant de la valeur instantanée de la distribution $f(\vec{k}, t)$ qui valident de ce fait les équations (2,33) et (2,34) de façon tout à fait rigoureuse.

Nous partons de l'équation de transport écrite sous la forme (pour un semiconducteur homogène $\partial f / \partial r = 0$)

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{q \vec{E}(t)}{\hbar} \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} + \iiint [S(\vec{k}', \vec{k}) f(\vec{k}', t) - S(\vec{k}, \vec{k}') f(\vec{k}, t)] d^3 k' \quad (2,35)$$

où f dépend explicitement de \vec{k} et de t . Nous transformons tout d'abord cette équation en une équation de relaxation pour la valeur moyenne sur l'ensemble d'un observable $\phi(\vec{k})$ quelconque. Pour cela on multiplie membre à membre l'E.T.B. par $\phi(\vec{k})$ et on intègre sur l'espace des \vec{k} . En remarquant que $\phi(\vec{k})$ commute avec $\frac{\partial}{\partial t}$, que $f(\vec{k}, t)$ s'annule aux bornes du domaine de \vec{k} plus vite que toute fonction $\phi(\vec{k}), \vec{k}$ tendant vers l'infini; en remarquant aussi que \vec{k} et \vec{k}' sont des variables indépendantes et muettes, que l'on peut les intervertir sans changer la valeur de l'intégrale et que, de même, on peut changer l'ordre d'intégration sur \vec{k} et \vec{k}' , on aboutit à l'équation suivante [71]

$$\frac{d\overline{\phi}}{dt} = \frac{q}{\hbar} \cdot \frac{E \partial \overline{\phi}}{\partial \vec{k}} + \iiint S(\vec{k}, \vec{k}') [\phi(\vec{k}') - \phi(\vec{k})] d^3 k' \quad (2,36)$$

où

$$\overline{\phi} = \overline{\phi(t)} = \iiint \phi(\vec{k}) f(\vec{k}, t) d^3k \quad (2,37)$$

Nous voyons donc que (2,36) régit l'évolution de la valeur moyenne sur l'ensemble de tout observable $\phi(\vec{k})$. Regardons ce qui se passe si $\phi(\vec{k}) = \epsilon(\vec{k}) - \epsilon_L$ représente l'écart de l'énergie instantanée du porteur par rapport à l'énergie moyenne du réseau ϵ_L . On trouve immédiatement la forme suivante

$$\frac{d\overline{\epsilon}}{dt} = q\overline{v} E(t) - \frac{\overline{\epsilon} - \epsilon_L}{\tau_\epsilon(t)} \quad (2,38)$$

avec

$$\tau_\epsilon(t) = \frac{- \iiint \epsilon(\vec{k}) f(\vec{k}, t) d^3k + \epsilon_L}{\iiint d^3k f(\vec{k}, t) \iiint S(\vec{k}, \vec{k}') [\epsilon(\vec{k}') - \epsilon(\vec{k})] d^3k'} \quad (2,39)$$

De même, en faisant $\phi(\vec{k}) = k_x$ composante du vecteur \vec{k} dans la direction du champ $\vec{E}(t)$ (supposé parallèle à \vec{Ox}), on a

$$\frac{d\overline{p_x}}{dt} = q E(t) - \frac{\overline{p_x}}{\tau_p(t)} \quad (2,40)$$

avec

$$\tau_p(t) = \frac{- \iiint k_x f(\vec{k}, t) d^3k}{\iiint d^3k f(\vec{k}, t) \iiint S(\vec{k}, \vec{k}') \frac{(k'_x - k_x)}{x} d^3k'} \quad (2,41)$$

L'évaluation exacte de τ_ϵ et τ_p nécessite de connaître $f(\vec{k},t)$, c'est-à-dire d'avoir déjà résolu le système. Comme les équations (2,33) et (2,34) veulent en fait se substituer à l'équation de Boltzmann rigoureuse, on est amené à faire des approximations.

Ainsi, si l'on pouvait admettre que $f(\vec{k},t)$ est pleinement déterminée par la seule connaissance de l'énergie moyenne $\epsilon(t)$ on pourrait alors dire que τ_p et τ_ϵ ne sont fonction que de l'énergie moyenne instantanée. C'est ce cas que nous considérons au paragraphe suivant.

On pourrait effectuer le calcul en admettant que $f(\vec{k},t)$ est une maxwellienne déplacée (hypothèse valable surtout si la concentration en porteurs est suffisamment élevée) de la forme suivante :

$$f(\vec{k},t) = A \exp \left\{ \frac{-\pi^2(\vec{k}-\vec{k}_d(t))^2}{2m^*k_B T_e(t)} \right\} \quad (2,42)$$

avec

$$\vec{k}_d(t) = \frac{\vec{p}}{\hbar} \quad \text{et} \quad T_e(t) = \frac{2\bar{\epsilon}}{3k_B}$$

est une température électronique qui ne représente en fait que l'énergie moyenne des porteurs. En insérant (2,42) dans les équations (2,38) à (2,41) on aboutirait à deux équations différentielles sur le temps non linéaires ne contenant comme inconnues que la vitesse de dérive moyenne et la température électronique où le champ électrique jouerait le rôle de paramètre. Leur forme compliquée ne serait due en fait qu'à la forme compliquée mais bien connue de $S(\vec{k},\vec{k}')$ et la solution à trouver serait bien sûr du ressort du calcul numérique.

II.3.2. Approximation des temps de relaxation dépendant de l'énergie seule.

II.3.2.1. Hypothèses.

Cette approximation consiste à écrire les équations (2,33) et (2,34) sous la forme suivante :

$$\frac{d\bar{\epsilon}}{dt} = q\bar{v} E(t) - \frac{\bar{\epsilon} - \epsilon_L}{\tau_{\epsilon}(\bar{\epsilon})} \quad (2,43)$$

$$\frac{d\bar{p}}{dt} = q E(t) - \frac{\bar{p}}{\tau_p(\bar{\epsilon})} \quad (2,44)$$

c'est-à-dire que ce qui détermine la valeur des temps de relaxation à un instant donné, ce n'est plus la fonction de distribution des porteurs à l'instant considéré, mais seulement la valeur de leur énergie moyenne (sur l'ensemble). Pour pouvoir appliquer les relations (2,43) et (2,44) il suffit d'admettre que la distribution $f(\vec{k}, t)$ figurant dans les expressions (2,39) et (2,41) est entièrement déterminée par la seule connaissance de l'énergie moyenne instantanée des porteurs. S'il en résulte que les équations (2,43) et (2,44) sont moins rigoureuses que (2,38) et (2,40) du fait de l'approximation qui vient d'être faite, il se trouve que le système formé par (2,43) et (2,44) est très facile à résoudre. En effet, en remarquant que (2,43) et (2,44) doivent être vraies également en régime stationnaire on trouve

$$\tau_{\epsilon}(\epsilon_S) = \frac{\epsilon_S - \epsilon_L}{qv_S E_S} \quad (2,45)$$

$$\tau_p(\epsilon_S) = \frac{p_S}{q E_S} \quad (2,46)$$

pour tout champ statique E_S . Dans le cas d'un modèle simple on aura $\vec{p} = m^* \vec{v}$ et en reportant (2,45) et (2,46) dans (2,43) et (2,44) on trouve

$$\frac{dm \bar{v}}{dt} = q [E(t) - \frac{\bar{v}}{v_S} E_S(\epsilon)] \quad (2,47)$$

$$\frac{d\bar{\epsilon}}{dt} = q [E(t) \bar{v} - E_S(\epsilon) v_S] \quad (2,48)$$

dans lesquelles on reconnaît que v_S n'est autre que la vitesse de dérive statique des porteurs correspondant au champ E_S . La valeur de E_S est déterminée à chaque instant à partir de la valeur de ϵ grâce à la caractéristique (inversée dans le cas présent) énergie moyenne statique des porteurs en fonction du champ électrique telle que celle que nous avons montrée au début de ce chapitre.

Le traitement numérique de ces équations est très facile. En effet, si l'on substitue aux dérivées temporelles figurant dans (2,47) et (2,48) leur développement limité au premier ordre, on pourra exprimer par deux relations itératives les valeurs de l'énergie et de la vitesse $\epsilon(t+\Delta t)$ et $v(t+\Delta t)$ en fonction de toutes les valeurs connues et de celles déjà calculées à l'instant t précédent. Les valeurs initiales dont on part à $t = 0$ seront $v(t=0) = 0$ et $\epsilon(t=0) = \epsilon_L = \frac{3}{2} k_B T_L$.

L'intérêt de la méthode présentée ici est que l'on peut étudier tout comportement transitoire des porteurs, par le calcul de la vitesse et de l'énergie au cours du temps, lorsque ceux-ci sont soumis à un champ $E(t)$ quelconque. On peut effectuer ce travail sur un calculateur de bureau de petit format (type HP 9835) et en un temps très court (quelques minutes). Les éléments de base nécessaires au problème sont

- a) la connaissance de la vitesse de dérive du matériau en fonction du champ électrique dans les conditions où l'étude est faite (direction, température de

réseau, ...) ; ce paramètre est bien connu expérimentalement pour un grand nombre de matériaux ;

b) la connaissance de l'énergie moyenne des porteurs en fonction du champ électrique ; ce paramètre n'est pas connu expérimentalement tout au moins dans les conditions où nous l'entendons ici. Il doit être calculé théoriquement par exemple par la résolution de l'E.T.B. en régime statique ou par tout autre moyen. Il est néanmoins très souvent donné dans la littérature pour un grand nombre de matériaux.

D'autre part, il nous faut souligner que dans bien des cas le modèle de bande d'énergie n'est pas simple. Par exemple dans le cas du silicium N, elle peut être à la fois non parabolique et non sphérique. La masse effective dont on doit tenir compte dans (2,47) et (2,48) dépend alors de l'énergie et de la direction dans laquelle le champ est appliqué. Dans le cas du GaAs et de l'InP, la masse dépend notablement de l'énergie lorsque les transferts entre les vallées centrale et satellite deviennent importants. Il en résulte que l'information concernant la variation de la masse avec l'énergie moyenne doit être donnée d'avance. Elle peut être calculée théoriquement par les mêmes moyens que ceux qui permettent de calculer l'énergie moyenne. Le système (2,47) et (2,48) sera alors résolu non pour v , mais pour p .

Considérons le cas du silicium type N supposé polarisé suivant la direction $\langle 111 \rangle$. Il est bien connu que dans ces conditions les porteurs sont échauffés par le champ électrique de la même façon quelle que soit la vallée à laquelle ils appartiennent. Dans ces conditions le matériau se comporte comme s'il n'y avait qu'une vallée centrale isotrope avec la masse effective m_0^* donnée par

$$m_0^* = \frac{3}{\frac{1}{m_l^*} + \frac{2}{m_t^*}} \quad (2,49)$$

Cependant, dans le domaine des électrons chauds, la masse dépend de l'énergie suivant la loi

$$m^*(\epsilon) = m_0^*(1 + 2\alpha\epsilon)^3 \quad (2,50)$$

où α est le facteur de non parabolicité figurant dans l'expression de la bande d'énergie qui est ici

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0^*} = \epsilon(1 + \alpha\epsilon) \quad (2,51)$$

La fonction $m^*(\epsilon)$ qui entre en ligne de compte dans (2,47) est très facilement obtenue à partir du calcul de la masse moyenne statique donnée par (2,50) et la caractéristique $\epsilon_S = f(E_S)$. Cette dépendance est d'ailleurs très bien approximée dans le cas présent par

$$m^*(\bar{\epsilon}) = m_0^*(1 + 6\alpha\bar{\epsilon}) \quad (2,52)$$

du fait que l'on a toujours $\alpha\epsilon \ll 1$. Dans le cas où le facteur de non parabolicité serait trop important (exemple, dans InAs), le calcul de la masse moyenne réelle par la méthode de Monte Carlo permettrait de tenir compte automatiquement des termes en $\bar{\epsilon}^2$ et $\bar{\epsilon}^3$.

Quand le matériau est polarisé suivant la direction $\langle 100 \rangle$, nous avons vu que les porteurs situés dans les quatre vallées dont l'axe principal est perpendiculaire à la direction du champ électrique sont plus fortement échauffés que ceux appartenant aux deux autres vallées. Il en résulte un phénomène de

repopulation qui tend à dépeupler les vallées chaudes en faveur des vallées froides. Toutefois, l'introduction d'une masse et de temps de relaxation dépendants de l'énergie nous permet de tenir compte de la variation de ces paramètres étant donné que l'on peut déterminer m^* , τ_p et τ_E à partir des résultats de simulation de Monte Carlo en régime statique qui tient compte automatiquement des effets de repopulation. A une énergie donnée la masse globale est celle obtenue à partir des masses calculées pour chaque vallée, pondérées par le nombre de porteurs situés dans chacune d'elles. Ceci permet de tenir compte des effets d'anisotropie, puisque l'on a des temps de relaxation différents suivant la direction du champ électrique appliqué.

II.3.2.2. Résultats concernant le silicium N.

Par la technique qui vient d'être exposée, nous pouvons déterminer l'évolution des temps de relaxation du moment et de l'énergie en fonction de l'amplitude du champ électrique. Ces résultats apparaissent sur les figures 2.55 et 2.56. Sur la figure 2.57, nous montrons l'évolution du rapport τ_E/τ_p avec le champ électrique. Dans les trois figures, le champ est dans la direction $\langle 111 \rangle$. Si la bande d'énergie était parabolique, le temps de relaxation du moment montrerait une décroissance en E^{-1} pour les champs les plus élevés. En fait comme la masse effective moyenne dépend de l'énergie, donc du champ électrique, la décroissance de $\tau_p(E)$ est sensiblement moins forte comme on peut le voir d'après la figure 2.55.

La figure 2.56 montre l'évolution du temps de relaxation de l'énergie. A l'inverse du temps de relaxation du moment, il tend à garder une valeur sensiblement constante dans le régime de champ fort après avoir décréu fortement dans le régime de mobilité ohmique. Ceci est dû au fait que l'énergie moyenne des porteurs évolue pratiquement linéairement en champ élevé. Il en résulte que le rapport τ_E/τ_p des deux temps de relaxation tend à augmenter fortement quand le champ s'accroît comme le montre la figure 2.57.

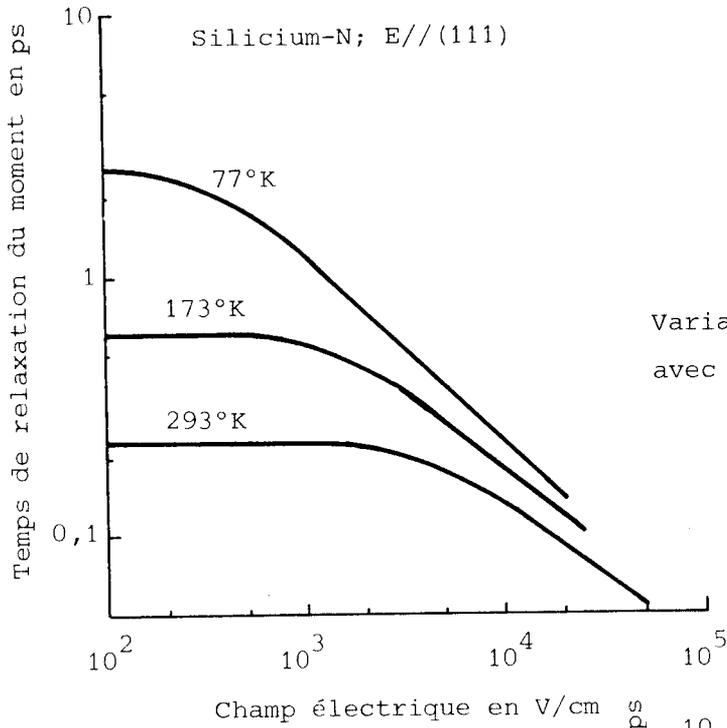


FIGURE 2,55

Variations du temps de relaxation du moment avec le champ électrique à trois températures.

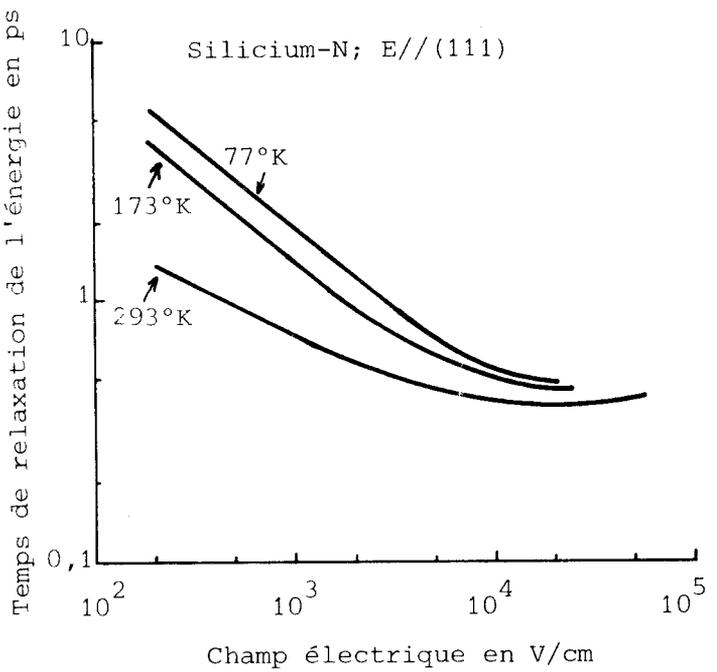


FIGURE 2,56

Variations du temps de relaxation de l'énergie avec le champ électrique à trois températures.

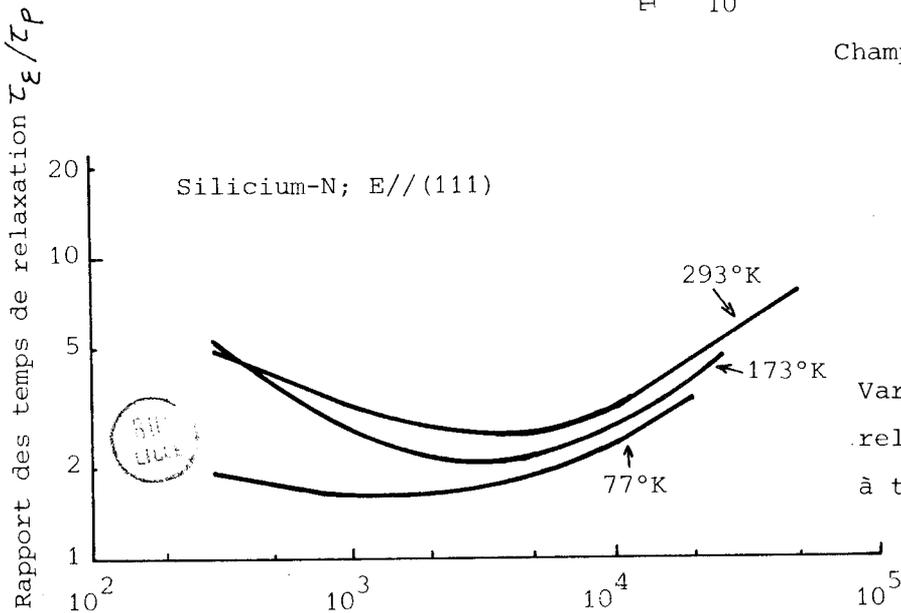


FIGURE 2,57

Variations du rapport des temps de relaxation avec le champ électrique à trois températures.

II.3.2.2.1. Observation des régimes de survitesse

Les équations (2,47) et (2,48) demeurent valables quel que soit le champ électrique appliqué. Si on les résoud pour un champ électrique ayant la forme d'un échelon débutant à $t = 0$ où le système est à l'équilibre thermodynamique on pourra observer le phénomène de survitesse. C'est ce que l'on peut voir sur les figures 2.58, 2.59 et 2.60 pour lesquelles nous avons reporté à chaque fois la vitesse de dérive et l'énergie moyenne en fonction du temps. Ceci est effectué à la température ambiante (figure 2.58), à $173 \text{ }^{\circ}\text{K}$ (figure 2.59) et à $77 \text{ }^{\circ}\text{K}$ (figure 2.60) pour un matériau pur et diverses valeurs du champ appliqué. Nous avons reporté sur les mêmes figures les résultats correspondants aux mêmes conditions obtenus directement par la méthode de Monte Carlo. On pourra noter dans chaque cas le bon accord existant entre les résultats fournis par chacune des deux méthodes.

II.3.2.2.2. Calcul de la mobilité complexe hyperfréquence.

En résolvant les équations (2,47) et (2,48) pour un champ électrique du type $E(t) = E_0 + E_1 \sin \omega t$, où E_0 composante continue peut prendre des valeurs allant de 0 à 50 kV/cm et où E_1 est pris petit devant E_0 , on peut calculer la mobilité complexe hyperfréquence petit signal. Globalement le champ est supposé uniforme. Le domaine des fréquences étudiées se situe entre 50 et 10000 GHz. La mobilité complexe $\mu^* = \mu' + j\mu''$ est obtenue par l'analyse en série de Fourier de la vitesse de dérive en fonction du temps sur une période entière du signal E_1 . Nous recalculons ainsi la mobilité dans les deux cas présentés au paragraphe précédent aux fins de comparaison (figures 2.61 et 2.62). Le relativement bon accord obtenu avec les résultats de la méthode de Monte Carlo justifie la qualité des résultats fournis par la méthode des temps de relaxation. La remarque ne manque pas d'intérêt dans la mesure où elle justifie aussi l'utilisation de la méthode des temps de relaxation en lieu et place d'une autre méthode beaucoup plus coûteuse (comme la simulation de Monte Carlo) pour l'étude de la dynamique

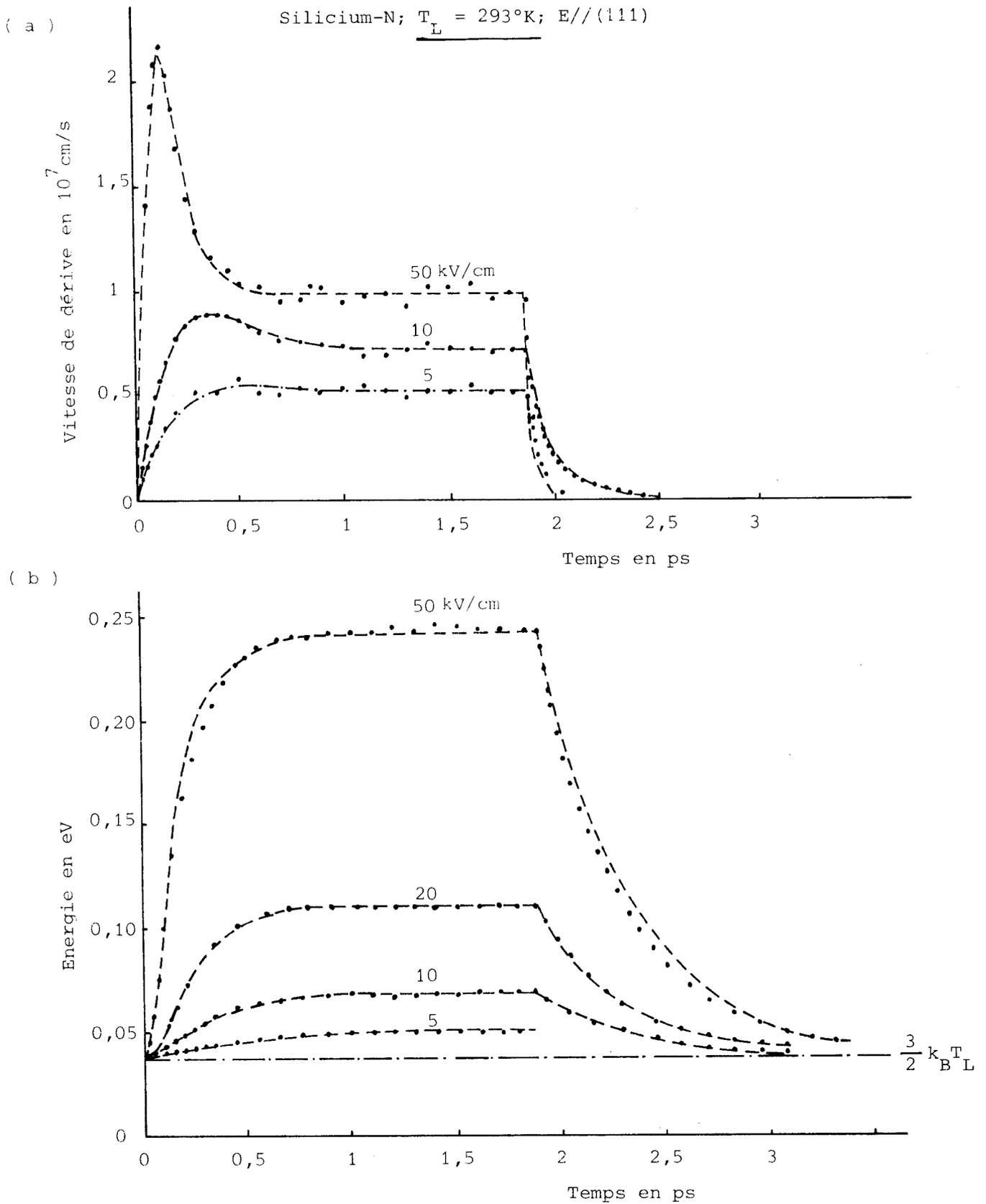


FIGURE 2,58

Réponses transitoires en vitesse (a) et énergie (b) à des impulsions de champ électrique. Les points sont les résultats Monte Carlo, les courbes interrompues sont données par les approximations.

Les nombres indiquent l'amplitude du champ



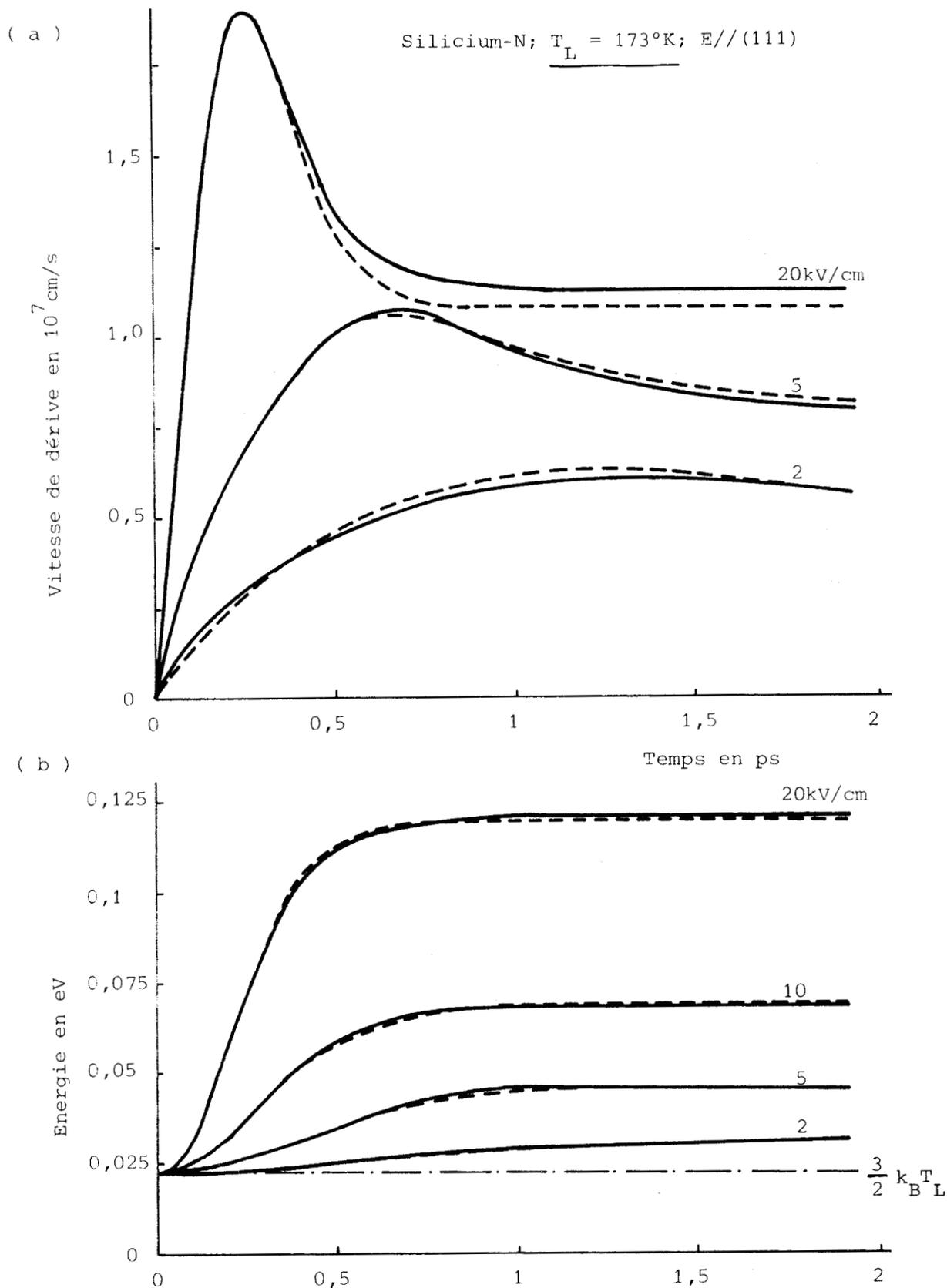


FIGURE 2,59

Réponses transitoires en vitesse (a) et énergie (b) à des impulsions de champ électrique. Les courbes pleines sont les résultats Monte Carlo, les courbes interrompues sont données par les approximations.

Les nombres indiquent l'amplitude du champ



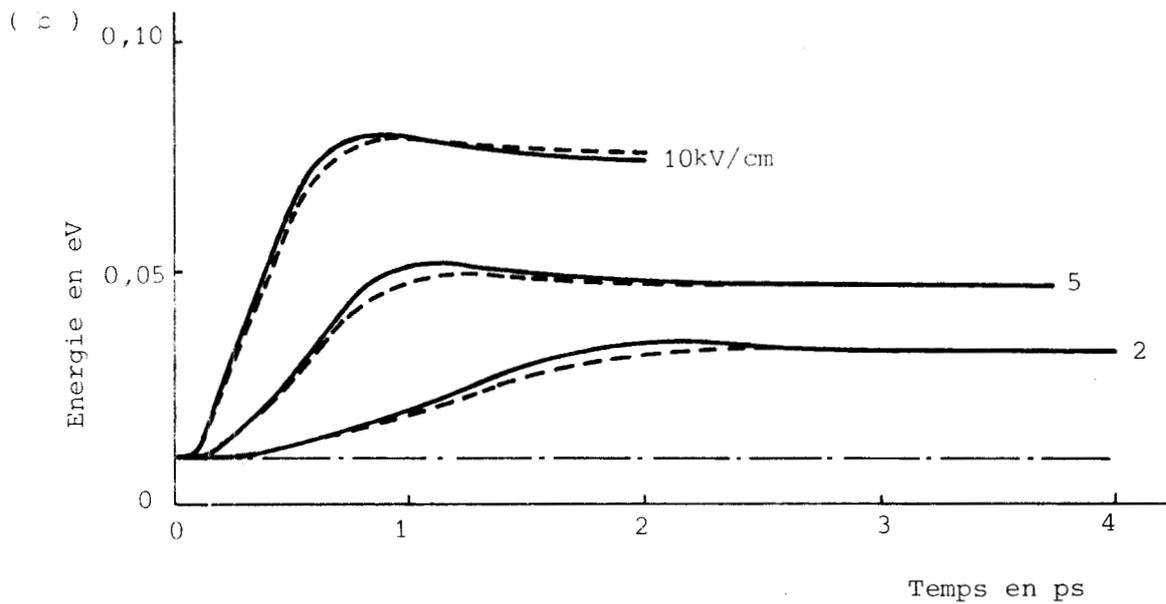
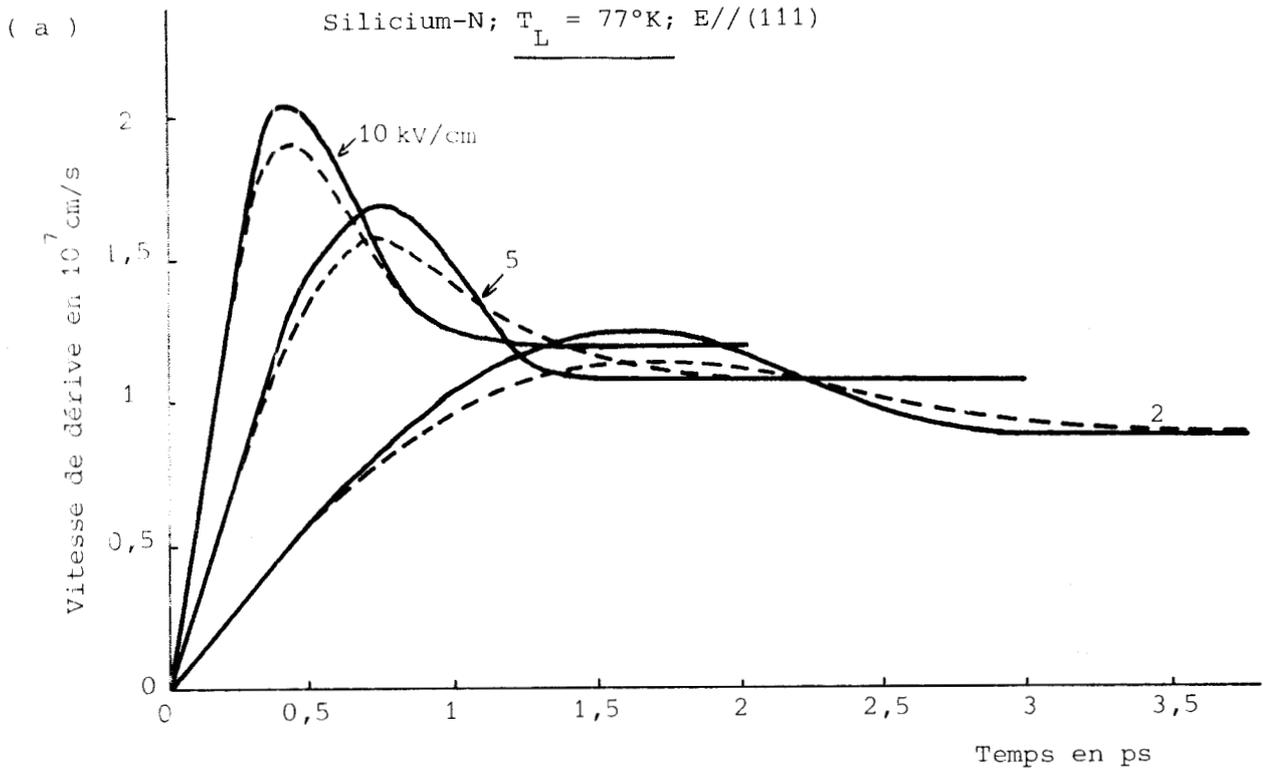


FIGURE 2,60

Réponses transitoires en vitesse (a) et énergie (b) à des impulsions de champ électrique. Les courbes pleines sont les résultats Monte Carlo, les courbes interrompues sont données par les approximations.

Les nombres indiquent l'amplitude du champ



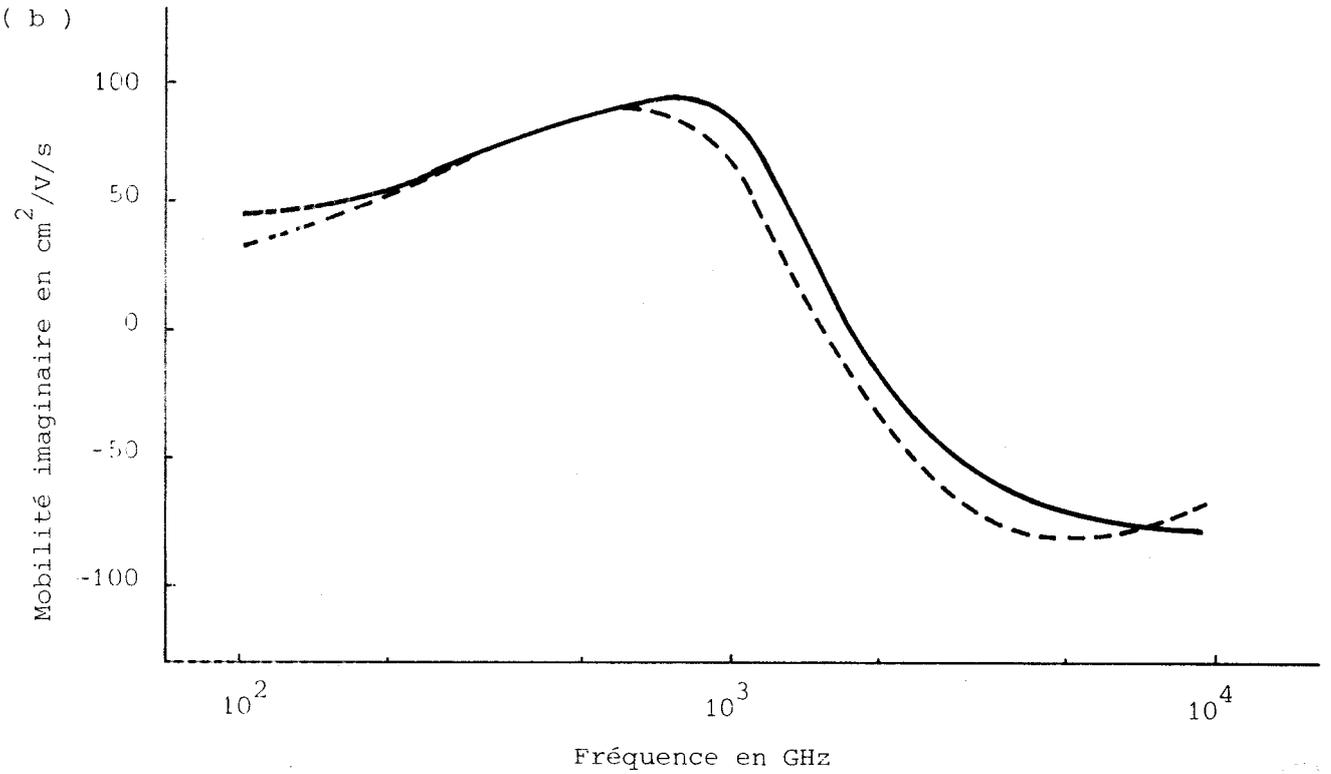
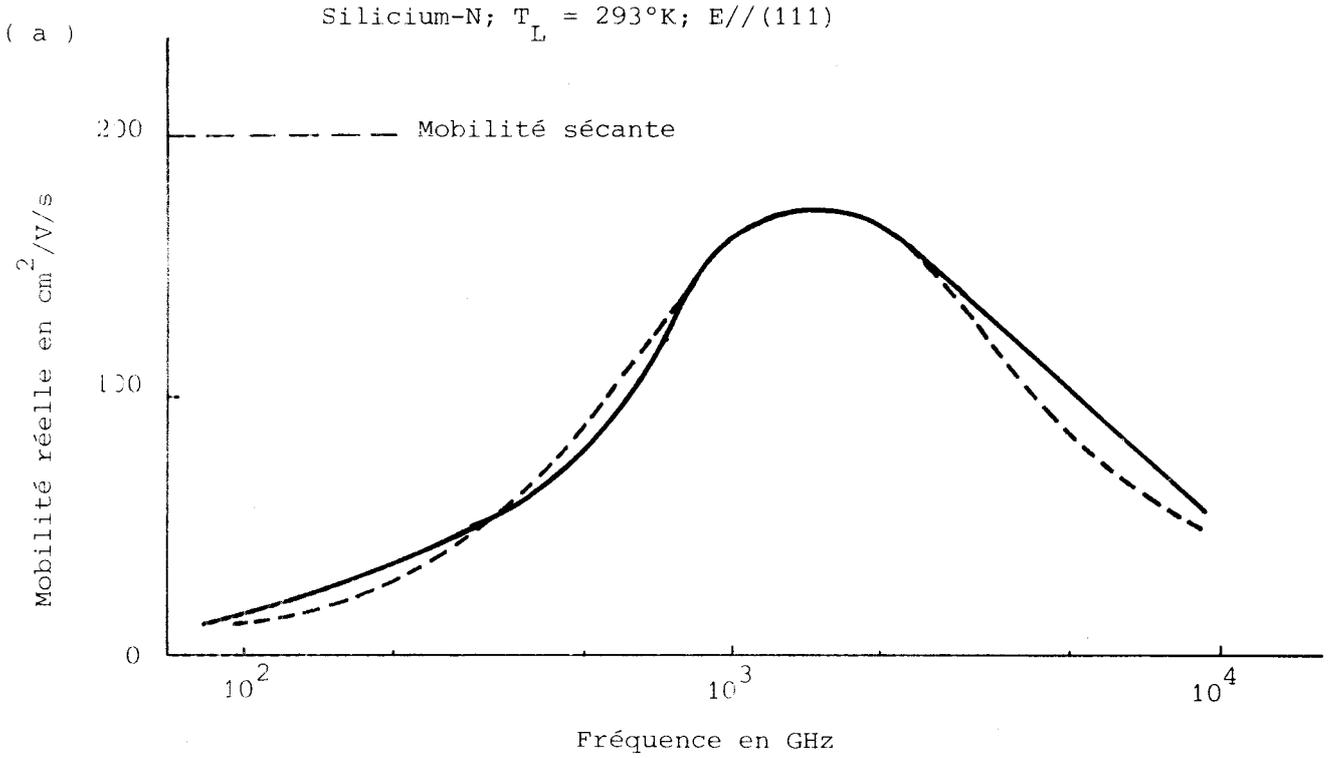


FIGURE 2,61

Variations de mobilité réelle (a) et de la mobilité imaginaire (b) avec la fréquence à $E_0 = 50 \text{ kV/cm}$ et $T_L = 293^\circ\text{K}$.

- : résultats Monte Carlo
- - - : résultats des approximations



Silicium-N; $T_L = 293^\circ\text{K}$; $E // (111)$

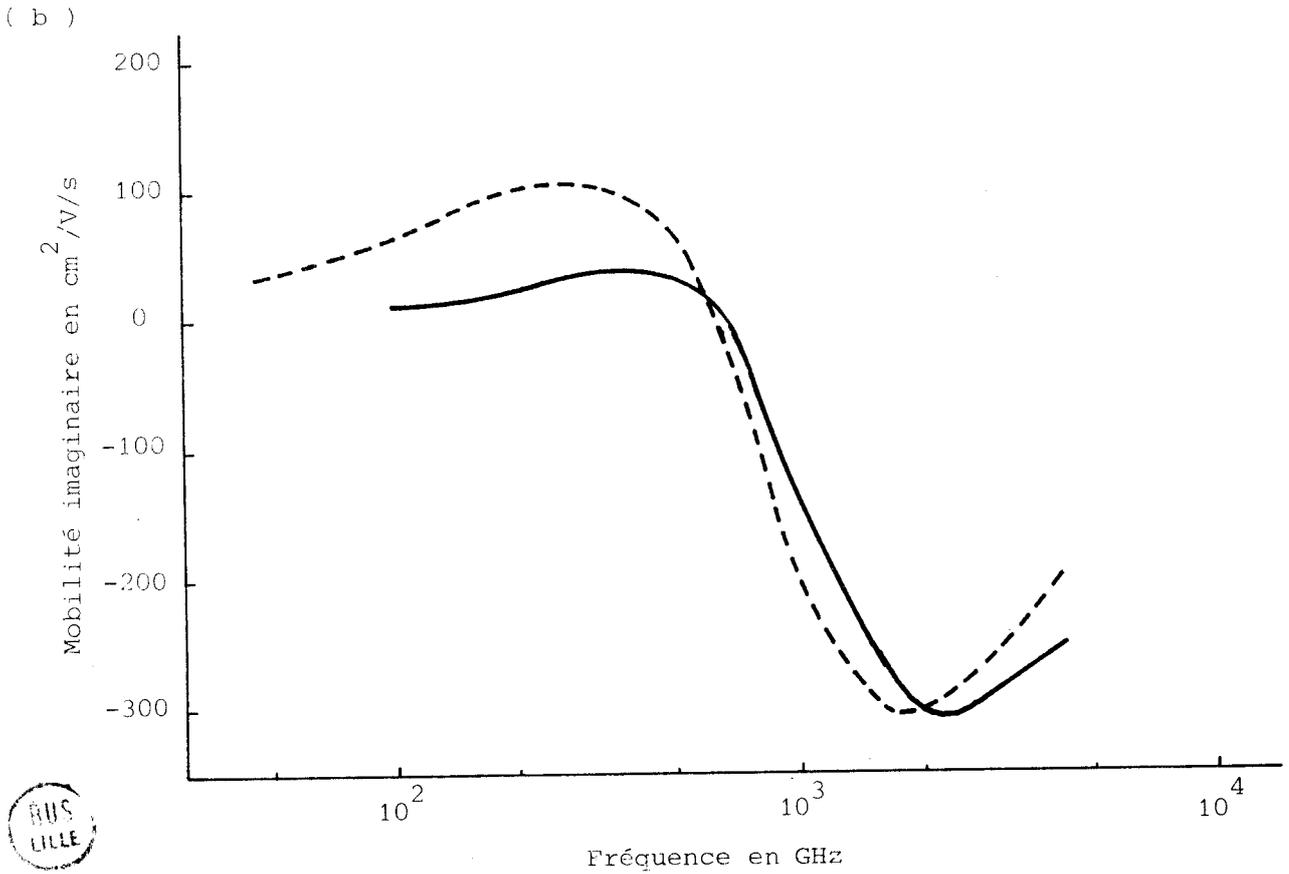
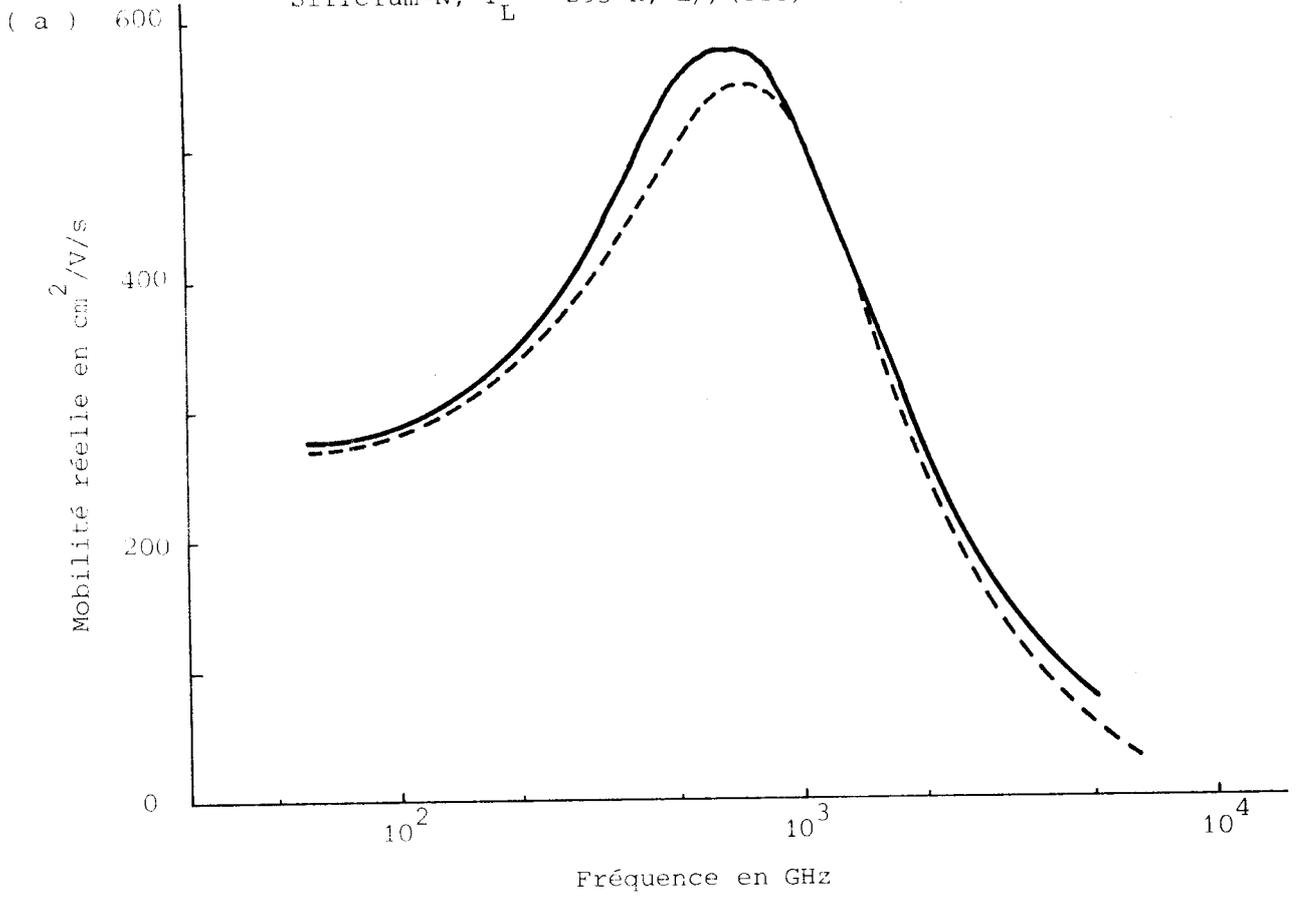


FIGURE 2,62

Variations de la mobilité réelle (a) et de la mobilité imaginaire (b) avec la fréquence à $E_0 = 10 \text{ kV/cm}$ et $T_L = 293^\circ\text{K}$.

— : résultats Monte Carlo
- - - : résultats des approximations

électronique dans un régime non stationnaire quelconque. A titre d'exemple nous montrons quelques courbes complémentaires de mobilité, calculée à 77 °K (figures 2.63 et 2.64), et à fréquence fixe en fonction de E_0 à 293 °K (figure 2.65).

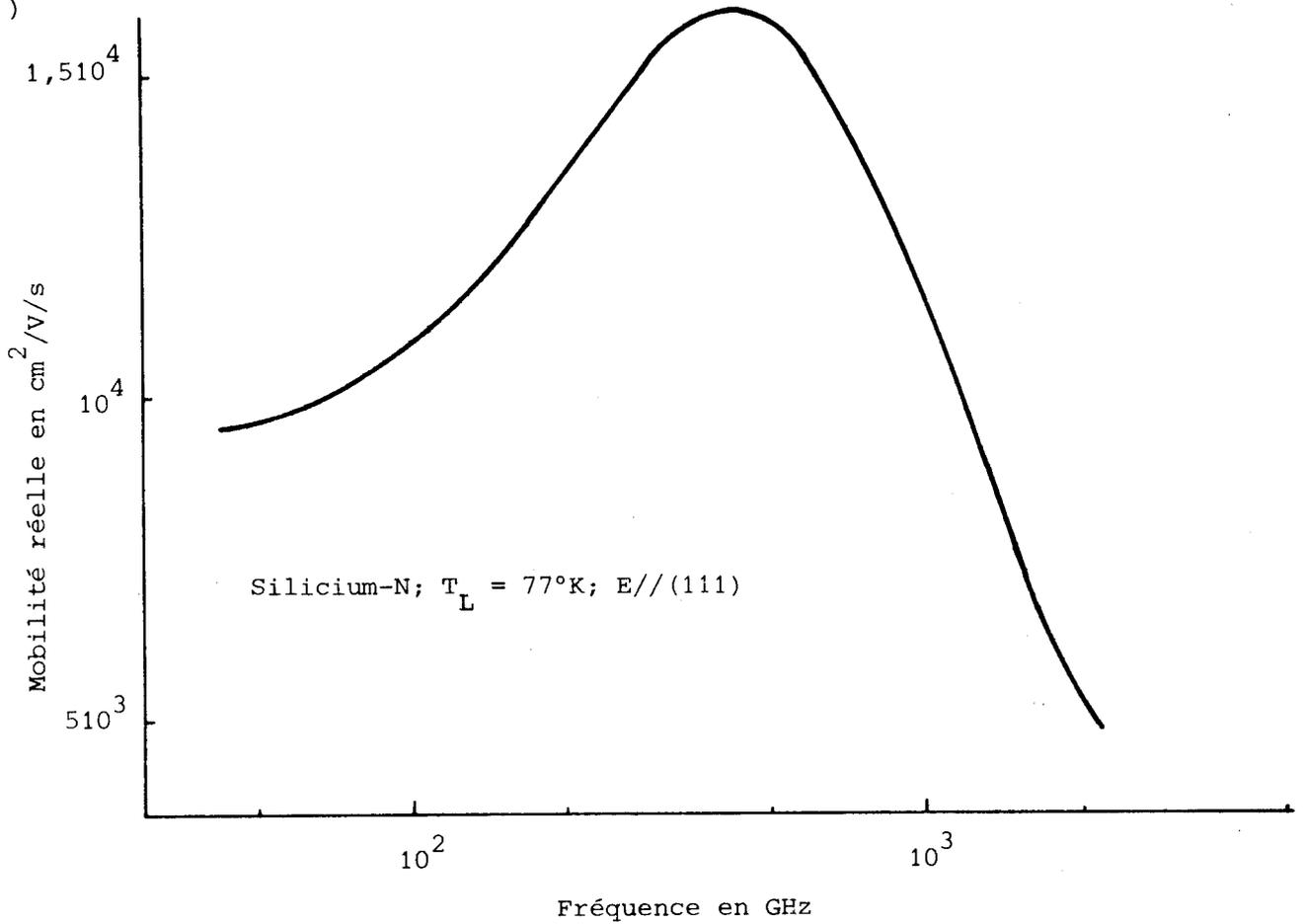
II.3.3. Justification de l'hypothèse des temps de relaxation dépendant de l'énergie seule.

Récemment, Nougier [72] a dégagé les hypothèses nécessaires pour que l'équation de transport de Boltzmann mène aux équations de relaxation où les temps de relaxation ne dépendraient plus que de l'énergie moyenne de la population de porteurs. Il montre en particulier que pour les interactions dont la probabilité de collision par unité de temps dépend du vecteur d'onde à la fois en grandeur et direction (c'est le cas des collisions sur phonons optiques polaires, des collisions sur phonons piezoélectriques, des collisions sur impuretés ionisées), il existe un terme supplémentaire dépendant du temps et irréductible qui s'ajoute à \overline{dp}/dt dans l'équation (2,34). Ce terme supplémentaire est absent pour les interactions isotropes (collisions intervallées, intravallées acoustiques). De plus la réduction du terme du "frottement" à la forme \overline{p}/τ_p nécessite quelques hypothèses par l'application du théorème des moyennes.

Réduire l'E.T.B. à l'équation de relaxation d'énergie nécessite d'introduire deux temps de relaxation d'énergie, dépendant bien sûr de la fonction de distribution transitoire, et qui ne sont pas a priori égaux. Il se trouve en fait, qu'en général, il n'est pas possible d'évaluer l'erreur totale introduite dans les calculs par l'ensemble de ces hypothèses. Ainsi, dans le cas du GaAs, on obtient un accord satisfaisant entre les résultats Monte Carlo et ceux obtenus par les temps de relaxation, bien que les interactions sur phonons optiques polaires soient dominantes dans la vallée centrale [73].

Nous avons signalé précédemment que pour utiliser les relations (2,43) et (2,44), il était nécessaire d'admettre que les temps de relaxation donnés en toute rigueur par les relations (2,39) et (2,41) ne dépendent que de l'énergie moyenne des porteurs. Pour qu'il en soit ainsi, il faut en toute rigueur que la

(a)



(b)

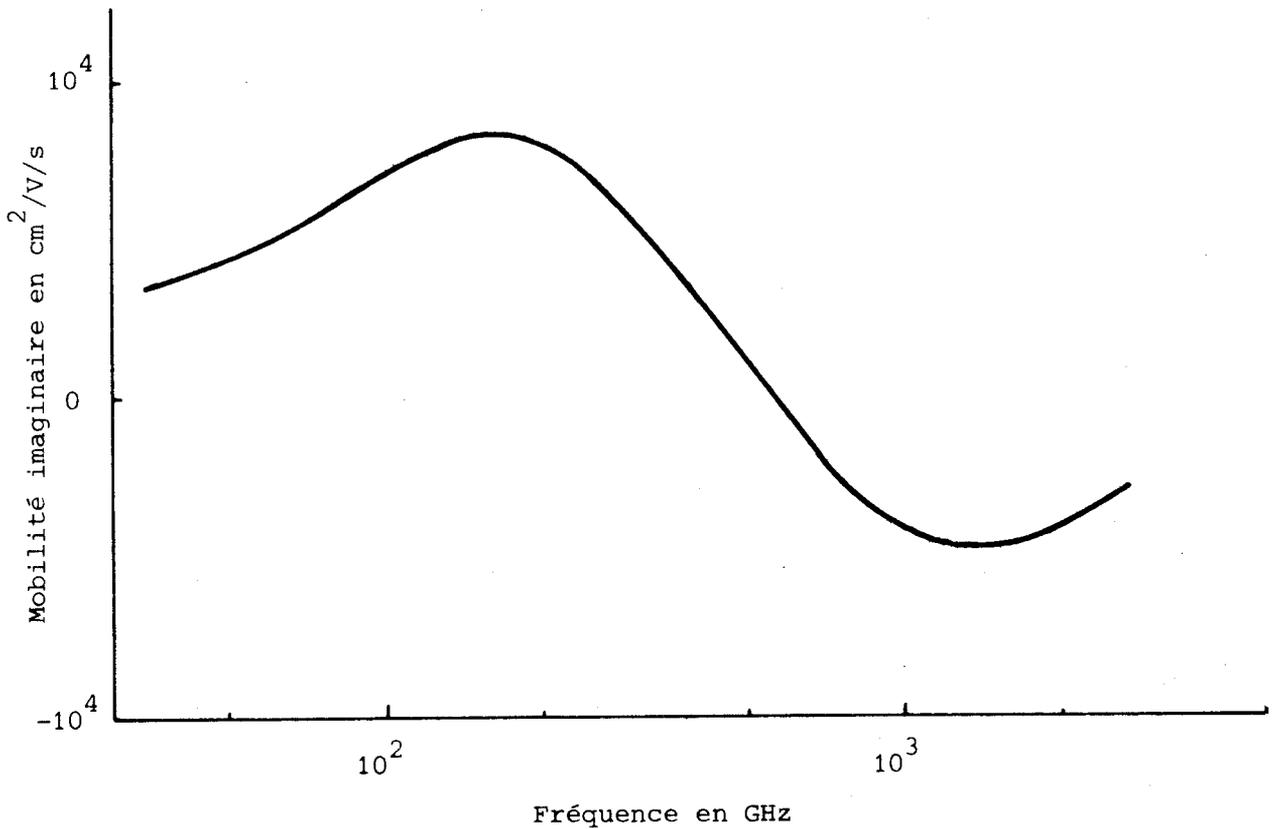


FIGURE 2,63

Variations de la mobilité réelle (a) et de la mobilité imaginaire (b) avec la fréquence calculée par les approximations à $E_0 = 2 \text{ kV/cm}$ et $T_L = 77^\circ\text{K}$.

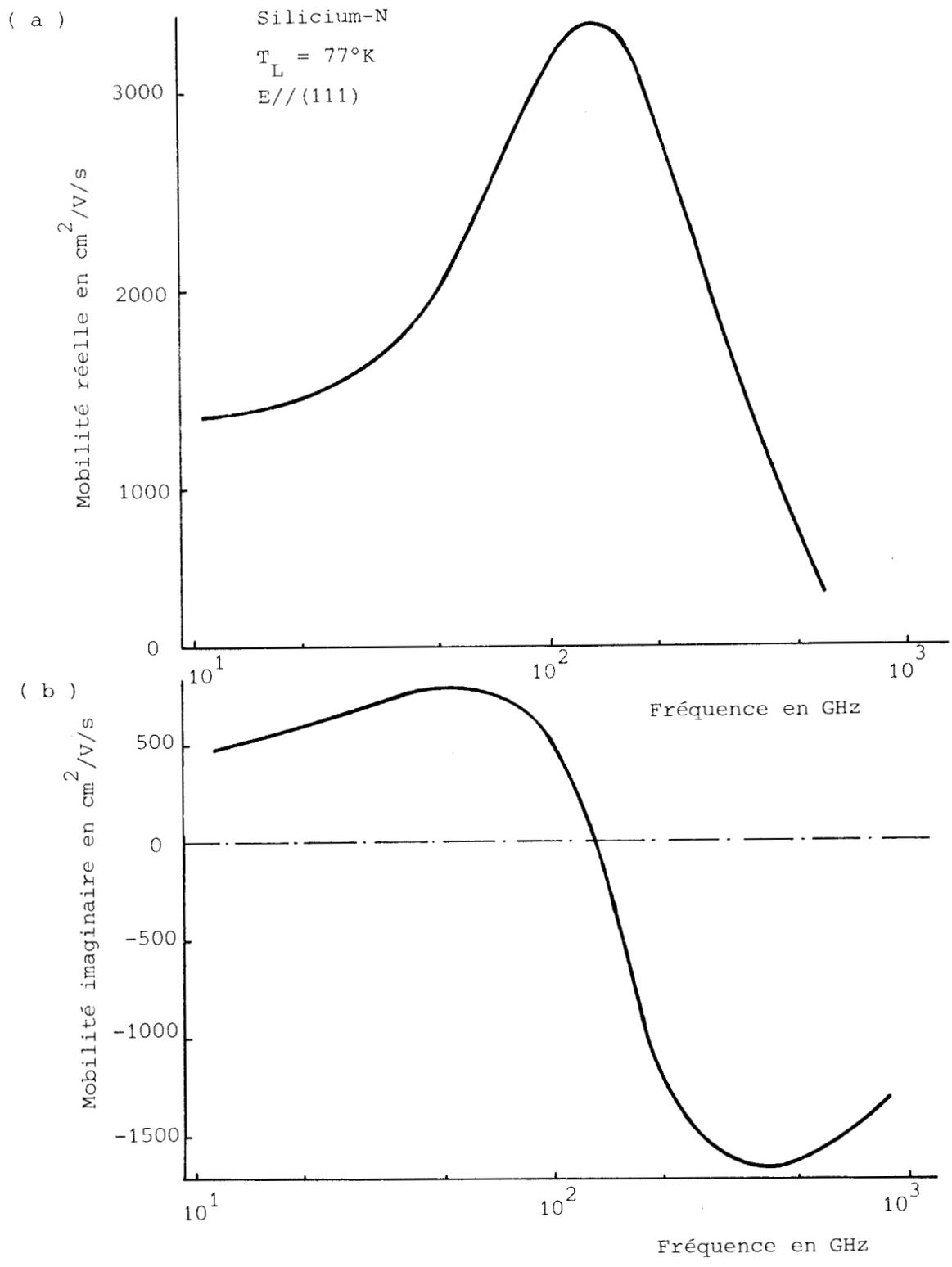
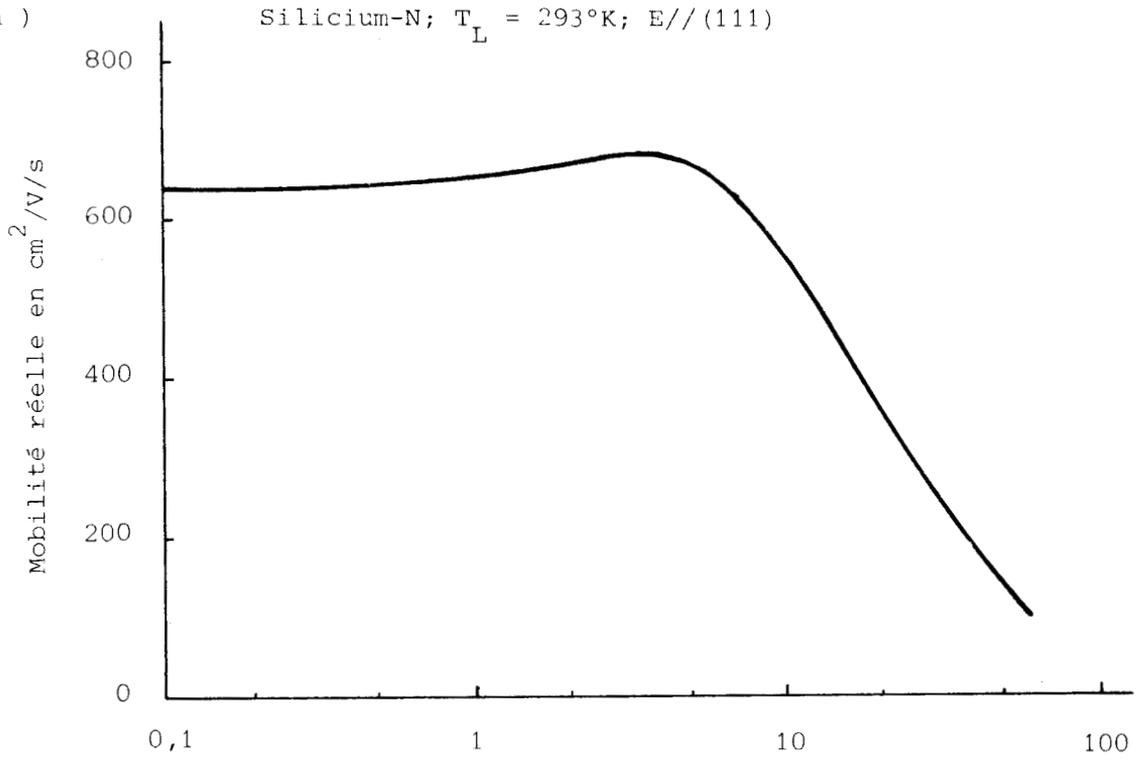


FIGURE 2,64

Variations de la mobilité réelle (a) et de la mobilité imaginaire (b) avec la fréquence calculée par les approximations à $E_0 = 10 \text{ kV/cm}$ et $T_L = 77^\circ\text{K}$.



(a)



(b)

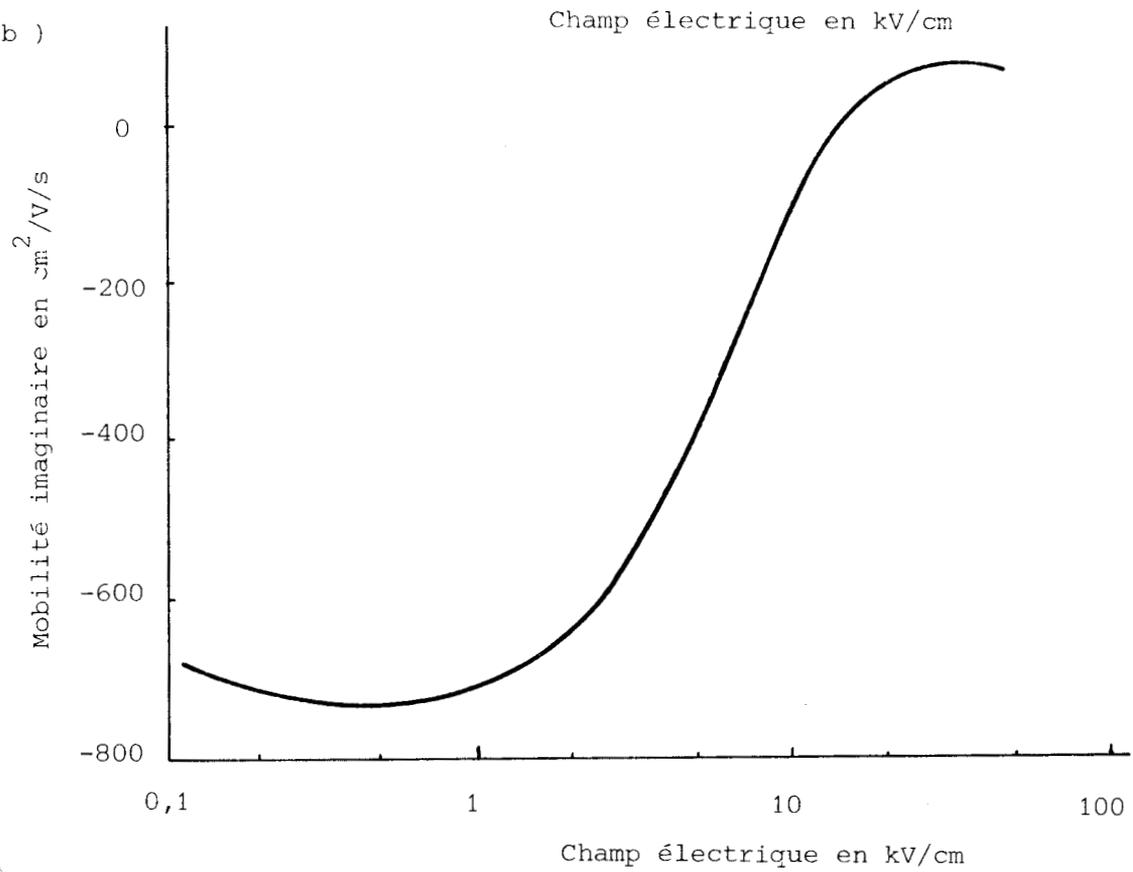


FIGURE 2,65

Variations de la mobilité réelle (a) et imaginaire (b) avec le champ électrique à la fréquence de 761 GHz et à $T_L = 293^\circ\text{K}$.



forme exacte de la fonction de distribution ne dépende que de l'énergie moyenne. Afin d'étudier le degré de validité de cette approximation on peut comparer la distribution d'énergie transitoire $f(\epsilon, t)$ correspondant à une énergie moyenne ϵ_0 avec la distribution stationnaire, correspondant au champ E_0 statique, donnant la même énergie moyenne ϵ_0 . Les résultats sont représentés sur les figures 2.66 et 2.67, respectivement à 293 °K et 77 °K, non pour $f(\epsilon, t)$ mais pour la densité d'énergie $n(\epsilon, t)$ ce qui revient au même. On pourra constater que ces densités sont différentes quantitativement (ce qui n'est pas surprenant) mais restent cependant voisines, et on peut espérer que les valeurs de τ_ϵ et τ_p , qui correspondent à une intégration de $f(\epsilon, t)$, resteront relativement insensibles à la forme exacte de la distribution. Il serait intéressant de vérifier ceci pour d'autres matériaux, en particulier pour GaAs où l'hypothèse des temps de relaxation fonctionne bien et pour In As où elle ne fonctionne pas.

En tout état de cause, et pour conclure, l'intérêt des temps de relaxation est de rendre aisé et économique l'étude de tous les régimes transitoires. Ils ne nécessitent pour être appliqués que la connaissance en régime stationnaire de la vitesse de dérive, de l'énergie moyenne et de la masse moyenne en fonction du champ électrique. La réponse à tout champ électrique $E(t)$ est aisément obtenue comme nous l'avons montré avec le calcul de la mobilité hyperfréquence et submillimétrique des porteurs. De plus cette hypothèse est aisément utilisable pour la modélisation de composants [74].

* *
*

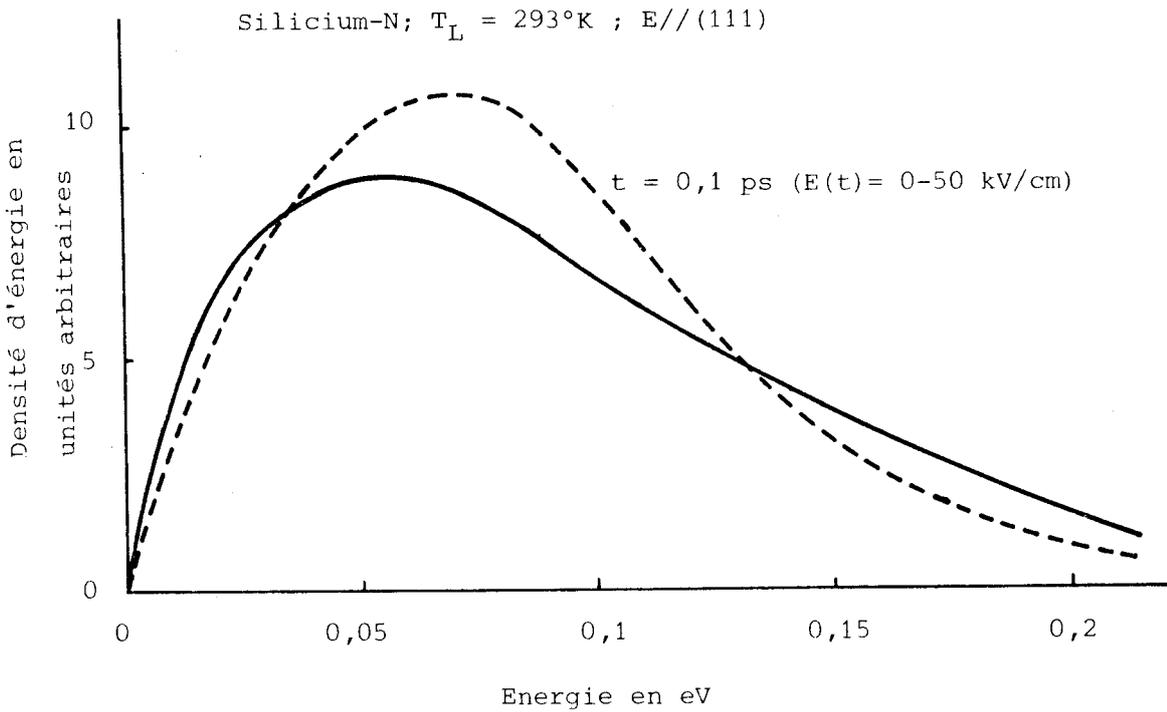


FIGURE 2,66

Comparaison des densités d'énergie statique et transitoire donnant la même énergie moyenne: $T_L = 293^\circ\text{K}$,
 $E_0 = 18 \text{ kV/cm}$ (Energie moyenne : $0,1 \text{ eV}$)

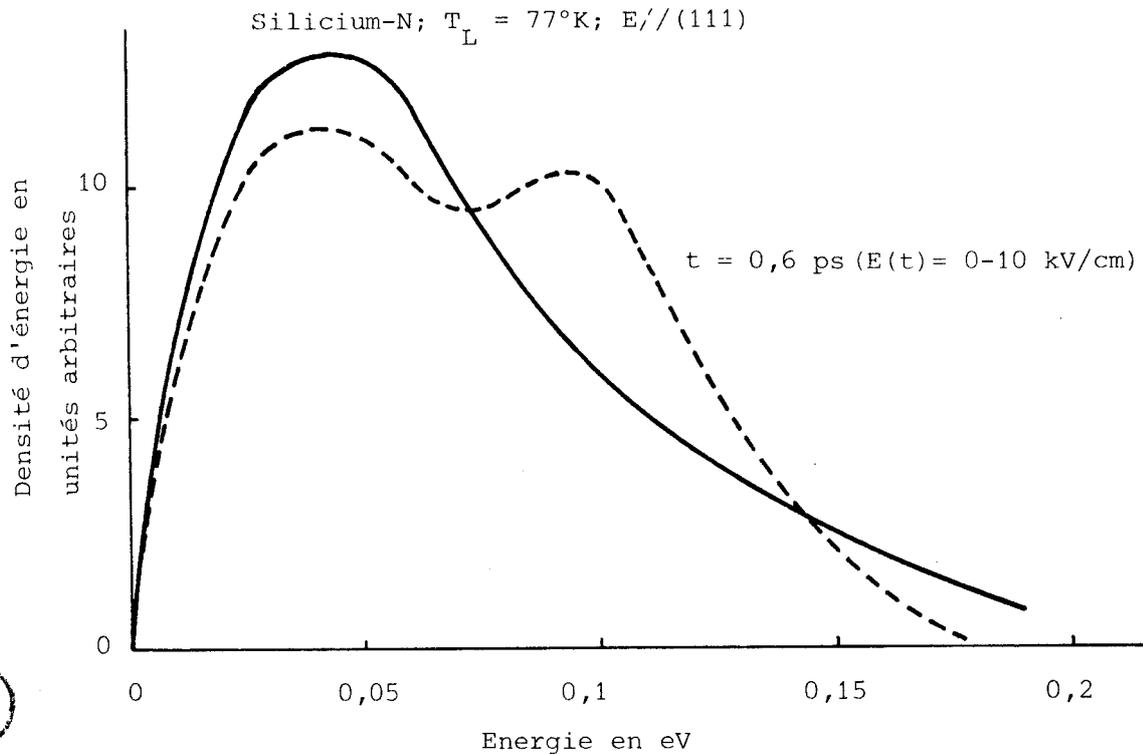


FIGURE 2,67

Comparaison des densités d'énergie statique et transitoire donnant la même énergie moyenne: $T_L = 77^\circ\text{K}$,
 $E_0 = 9,5 \text{ kV/cm}$ (Energie moyenne: $0,067 \text{ eV}$)



CONCLUSION

Dans ce chapitre nous avons abordé un certain nombre de problèmes relatifs au transport des porteurs dans le silicium en régime statiques et transitoire. Nous pensons avoir ainsi montré la puissance de la procédure de Monte Carlo dans l'étude détaillée de ces phénomènes. Les questions traitées peuvent concerner tout autant les problèmes de dynamiques fondamentaux (mise au point des modèles microscopiques, détermination des constantes de couplage électron-phonon) que les problèmes plus pratiques relatifs aux coefficients de diffusion statiques et à la mobilité hyperfréquence.

En ce qui concerne les phénomènes de transport en régime statique, nous avons cherché dans un premier temps, à caractériser les distributions des porteurs dans l'espace des phases, tout en nous intéressant aux paramètres du premier ordre (évolution avec la concentration en impuretés et la température). Ensuite, nous avons étudié les coefficients du second ordre en insistant sur l'équivalence des coefficients de diffusion d'étalement et de bruit. Nous les avons comparé à quelques résultats expérimentaux donnés par la technique du temps de vol et la technique du bruit radiométrique.

En ce qui concerne les régimes transitoires nous nous sommes intéressés aux phénomènes de survitesse et aux fonctions de distribution obtenues en régime non stationnaire puis à la mobilité hyperfréquence et submillimétrique. Enfin, nous avons étudié dans quelle mesure l'utilisation des temps de relaxation macroscopiques permettait de décrire tous les régimes de fonctionnement transitoires. Dans les chapitres qui suivent nous nous proposons d'appliquer la méthode de Monte Carlo à la simulation directe de composants.

* *
*

BIBLIOGRAPHIE DU CHAPITRE 2

- [1] J. BARDEEN, W. SHOCKLEY, *Physical Review*, Volume 80, p. 72, (1950).
- [2] D.L. RODE dans "*Semiconductors and semimetals*", Volume 10, p. 26, Academic Press (1975).
- [3] E.O. KANE, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Volume 1, p. 249, (1957).
- [4] H. EHRENREICH, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Volume 2, p. 131, (1957) ; idem, Volume 9, p. 129, (1959).
- [5] C. CANALI, C. JACOBONI, F. NAVA, G. OTTAVIANI, et A. ALBERIGI-QUARANTA, *Physical Review B*, Volume 12, p. 2265, (1975).
- [6] W.A. HARRISON, *Physical Review B*, Volume 104, p. 1281, (1956).
- [7] E.M. CONWELL dans "*High Field Transport in Semiconductors*", Solid-State Physics Supplement 9, p. 149, Academic Press, (1967).
- [8] E.M. CONWELL, V.F. WEISSKOPF, *Physical Review*, Volume 77, p. 388, (1950).
- [9] H. BROOKS, *Advances in Electronics and Electron Physics*, Volume 7, p. 85, (1955).
- [10] J.G. RUCH, W. FAWCETT, *Journal of Applied Physics*, Volume 41, p. 3843, (1970).
- [11] D.L. SCHARFETTER, H.K. GUMMEL, *IEEE Transactions on Electron Devices*, Volume 16, p. 64 (1969).
- [12] N.O. GRAM, M.H. JORGENSEN, N.I. MEYER, *Proceedings International Conference on Physics of Semiconductors*, Volume 1, p. 622, (1972).
- [13] J.P. NOUGIER, M. ROLLAND, *Physical Review B*, Volume 11, p. 1497, (1975).

- [14] J. NASH, J.W. HOLM-KENNEDY, *Physical Review B*, Volume 15, p. 3994, (1977).
- [15] G. HILL, P.N. ROBSON, W. FAWCETT, *Journal of Applied Physics*, Volume 50, p. 356, (1979).
- [16] R. FAUQUEMBERGUE, J. ZIMMERMANN, A. KASZYNSKI, E. CONSTANT, *Journal of Applied Physics*, février 1980.
- [17] J.P. NOUGIER, *Applied Physics Letters*, Volume 32, p. 671, (1978).
- [18] J.G. RUCH, G.S. KINO, *Physical Review*, Volume 174, p. 921, (1968).
- [19] T.W. SIGMON, J.F. GIBBONS, *Applied Physics Letters*, Volume 15, p. 320, (1969).
- [20] G. PERSKY, D.J. BARTELINK, *Journal of Applied Physics*, Volume 42, p. 4414, (1971).
- [21] C. CANALI, M. MARTINI, G. OTTAVIANI, K.R. ZANIO, *Physical Review B*, Volume 4, p. 422, (1971).
- [22] C. CANALI, C. JACOBONI, G. OTTAVIANI, A. ALBERIGI-QUARANTA, *Applied Physics Letters*, Volume 27, p. 278, (1975).
- [23] B.R. NAG, *Applied Physics Letters*, Volume 28, p. 550, (1976).
- [24] D. CHATTOPADHYAY, B.R. NAG, *Solid-State Communication*, Volume 22, p. 569, (1977).
- [25] J.P. NOUGIER, *Physica*, Volume 64, p. 209, (1973).
- [26] E. ERLBACH, J.B. GUNN, *Physical Review Letters*, Volume 8, p. 280, (1962).
- [27] E. ERLBACH, *Physical Review*, Volume 132, p. 1976, (1963).
- [28] J.P. NOUGIER, M. ROLLAND, *Physical Review B*, Volume 8, p. 5728, (1973).
- [29] Y.K. POZHELA, V.A. BAREIKIS, I.B. MATULENENE, *Soviet Physics Semiconductors*, Volume 2, p. 503, (1968).
- [30] W. BAECHTOLD, *IEEE Transactions on Electron Devices*, Volume 18, p. 1186, (1971).
- [31] M. ROLLAND, J.P. NOUGIER, *Proceedings 13th Conference on Physics of Semiconductors*, p.1227, (1976).
- [32] M. ROLLAND, *Thèse d'Etat*, Montpellier, (1975).
- [33] D. WOLF, "Noise in Physical Systems", Springer Series in Electrophysics, Volume 2, p. 72, (1978).

- [34] W. BAECHTOLD, *IEEE Transactions on Electron Devices*, Volume 19, p. 674, (1972).
- [35] A. CHADELAS, *Mémoire C.N.A.M., Lille*, (1968).
- [36] A. VAN DER ZIEL, "Noise, Sources, Characterization and Measurements", Prentice Hall Electrical Engineering Series, (1970).
- [37] S. BONFILS, *Thèse de Docteur-Ingénieur, Lille*, (1976).
- [38] B. BOITTIAUX, *Thèse d'Etat, Lille*, (1978).
- [39] J. VANBREMEERSCH, D. VANDERMOERE, "Technologie des composants N^+NN^+ ", Rapport interne, Lille, (1978).
- [40] B. BOITTIAUX, Y. BECQUELIN, J.M. JENDRZEJCZAK, E. CONSTANT, *Revue de Physique Appliquée*, Volume 12, p. 1663, (1977).
- [41] J. ZIMMERMANN, S. BONFILS, Y. LEROY, E. CONSTANT, *Applied Physics Letters*, Volume 30, p. 245, (1977).
- [42] W. SHOCKLEY, J.A. COPELAND, R.P. JAMES, *Quantum Theory of Atoms, Molecules and the Solid-State*, Academic Press, (1966).
- [43] J.G. RUCH, *IEEE Transactions on Electron Devices*, Volume 19, p. 652, (1972).
- [44] M. SHUR, *Electronics Letters*, Volume 12, p. 615, (1976).
- [45] A. MATULENIS, Y. POZHELA, A. REKLAITIS, *Soviet Physics Semiconductors*, Volume 10, p. 169, (1976) ; *ibid.*, *Physica Status Solidi A*, p. 43, (1976).
- [46] T.J. MALONEY, J. FREY, *Journal of Applied Physics*, Volume 48, p. 781, (1977).
- [47] G. HILL, P.N. ROBSON, A. MAJERFELD, W. FAWCETT, *Electronics Letters*, Volume 13, p. 235, (1977).
- [48] R.A. WARRINER, *Solid-State and Electron Devices*, Volume 1, p. 92, (1977).
- [49] S. KRATZER, J. FREY, *Journal of Applied Physics*, Volume 49, p. 4064, (1978).
- [50] H. KROEMER, *Solid-State Electronics*, Volume 21, p. 61, (1978).
- [51] H.A. HILLBRAND, *Journal of Applied Physics*, Volume 44, p. 1744, (1973).
- [52] P.A. LEBWOHL, *Journal of Applied Physics*, Volume 44, p. 1744, (1973).
- [53] P.J. PRICE, *IBM Journal of Research and Development*, Volume 17, p. 39, (1973).

- [54] T. IKOMA, K. SAKAI, Y. ADACHI, H. YANAI, *Japanese Journal of Applied Physics*, Volume 16, p. 1379, (1977).
- [55] J. ZIMMERMANN, Y. LEROY, E. CONSTANT, *Journal of Applied Physics*, Volume 49, p. 3378, (1978).
- [56] J. ZIMMERMANN, *Thèse de 3e cycle*, Lille, (1975).
- [57] J. VINDEVOGHEL, Y. LEROY, C. BRUNEEL, J. ZIMMERMANN, *Review of Scientific Instruments*, Volume 45, p. 920, (1974).
- [58] J. VINDEVOGHEL, M. VINDEVOGHEL, Y. LEROY, C. BRUNEEL, J. ZIMMERMANN, *International Symposium On High Field Transport in Semiconductors*, Modena Italie, Juillet 1973.
- [59] A.F. GIBSON, J.W. GRANVILLE, E.G.S. PAIGE, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Volume 19, p. 198, (1961).
- [60] M.T. VLAARDINGERBROEK, P.M. BOERS, G.A. ACKET, *Philips Research Report*, Volume 24, p. 379, (1969).
- [61] E. BONEK, H.W. PÖTZL, K. RICHTER, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Volume 31, p. 1151, (1970).
- [62] S. KANEDA, M. ABE, *Japanese Journal of Applied Physics*, Volume 10, p. 1396, (1971).
- [63] S.M. WU, E. BRIDGES, K.C. KAO, *International Journal of Electronics*, Volume 31, p. 233, (1971).
- [64] J.W. HOLM-KENNEDY, K.S. CHAMPLIN, *Journal of Applied Physics*, Volume 43, p. 1889, (1972).
- [65] E. BONEK, *Journal of Applied Physics*, Volume 43, p. 5101, (1972).
- [66] G.H. GLOVER, *Journal of Applied Physics*, Volume 44, p. 1295, (1973).
- [67] T. KOBAYASHI, Y. NISHIDA, K. FUJISAWA, *Japanese Journal of Applied Physics*, Volume 13, p. 1025, (1974).
- [68] A. PHILIPP, F. KUCHAR, K. SEEGER, *Physica Status Solidi B*, Volume 79, p. 115, (1977).
- [69] A. DARGYS, T. BANYS, *Physica Status Solidi B*, Volume 52, p. 699, (1972).
- [70] V. DIENYS, Z. KANCLERYS, *Physica Status Solidi B*, Volume 67, p. 317, (1975).
- [71] P.J. PRICE, *Solid-State Electronics*, Volume 21, p. 9, (1978).

- [72] J.P. NOUGIER, J.C. VAISSIERE, D. GASQUET, J. ZIMMERMANN, E. CONSTANT,
Publié dans Journal of Applied Physics, (1980).
- [73] A. KASZYNSKI, *Thèse de Docteur-Ingénieur*, Lille, 1979.
- [74] A. CARNEZ, A. CAPPY, A. KASZYNSKI, E. CONSTANT, G. SALMER,
Publié dans Journal of Applied Physics, (1980).

* *
*

CHAPITRE 3

SIMULATION DE COMPOSANTS UNIDIMENSIONNELS ET UNIPOLAIRES DU TYPE

$N^+ N N^+$

Etude des caractéristiques statiques et des propriétés de
bruit de fond.

INTRODUCTION.

Nous avons tout au long du chapitre précédent essayé de montrer ce que la méthode de Monte Carlo, appliquée à l'étude des phénomènes de porteurs chauds en effet de volume, peut apporter à la compréhension de la dynamique électronique microscopique dans les matériaux semiconducteurs. La méthode utilisée opère à l'échelle de la particule qui peut être soumise à un champ électrique quelconque variant aussi bien dans le temps que dans l'espace. Il est donc tout à fait tentant (mais pas nécessairement aisé) de l'appliquer à la simulation directe de composants.

Ces composants peuvent être uni ou bipolaires: on peut imaginer un programme composite simulant en même temps les électrons et les trous dans le même matériau. Ces composants peuvent être aussi uni, bi ou tridimensionnels et il est important de remarquer ici que le procédé de Monte Carlo permet d'étudier naturellement le mouvement des particules dans les trois directions de l'espace. Par ailleurs les équations de continuité (qui résultent directement du caractère indestructible des particules) sont également prises en compte automatiquement. Il en résulte que pour simuler la dynamique électronique au sein du composant il est seulement nécessaire mais suffisant de calculer le champ électrique agissant sur les particules à partir de l'équation de Poisson et des conditions aux limites dues à la taille finie des composants.

Ces conditions physiques doivent être imposées nécessairement en certains points: ce sont par exemple des conditions imposées au niveau des contacts ou des conditions au voisinage de surfaces.

Ces composants peuvent également travailler en régime de forte injection et présenter de fortes concentrations en porteurs dans des zones où le matériau est caractérisé par une concentration en impuretés faible: il peut donc exister des gradients de champ électrique particulièrement importants provoquant des phénomènes de dynamique non stationnaires. Par ailleurs, les interactions binaires

entre porteurs peuvent devenir prépondérantes. L'étude de composants présentant des hétérojonctions peut également être envisagée, de même que les phénomènes d'ionisation par choc. Un récent article de Price fait le point sur l'état actuel de la technique en ces domaines [1].

Il apparaît que seule l'étude microscopique permet d'appréhender rigoureusement ces phénomènes de dynamique électronique qui conditionnent le fonctionnement des composants utilisés dans le domaine des hyperfréquences, particulièrement aux fréquences submillimétriques, et déterminent les fréquences de coupure et les facteurs de bruit. Les grandeurs caractéristiques intéressantes peuvent concerner les profils de champ interne ainsi que les densités de courant et les vitesses des porteurs permettant d'obtenir les caractéristiques statiques et dynamiques du composant étudié. Elles peuvent aussi concerner les fluctuations quadratiques comme les phénomènes de bruit de diffusion et les spectres associés.

La simulation directe de composants pose cependant de multiples problèmes dont beaucoup dépassent ceux, d'ordre statistique, qui sont propres aux méthodes de Monte Carlo. On trouve donc dans la littérature beaucoup moins de publications concernant les composants que de publications concernant les matériaux en volume. Parmi celles-ci, les plus intéressantes concernent l'étude de la formation et du transit des domaines de Gunn dans des diodes au GaAs ou d'autres matériaux [2, 5] ou la simulation de transistors à effet de champ au GaAs [6, 8]. Toutefois ces travaux ne s'intéressent pas encore aux phénomènes liés aux fluctuations des porteurs (vitesses, positions, ...) ni aux phénomènes de bruit de diffusion.

Le propos de ce chapitre est d'approcher et de faire une première étude de ces problèmes [16, 17].

Nous ne nous restreindrons pas au seul calcul du bruit de composant unipolaires et unidimensionnels.

Les méthodes présentées constituent un ensemble complet de résultats analysant aussi bien les caractéristiques statiques que les caractéristiques de bruit. Un problème qui nous a semblé intéressant d'étudier, et auquel personne

ne s'est beaucoup intéressé jusqu'à présent, était de voir jusqu'à quelle limite la description classique de la dynamique électronique à la base de la simulation de nombreux composants (par là nous entendons les équations de l'électrocinétique classique faisant usage des concepts de mobilité et de coefficient de diffusion) demeure valide pour la modélisation de composants ultracourts tels que les composants balistiques envisagés récemment par l'équipe de Cornell [14] (c'est-à-dire des composants où les longueurs de transit sont inférieures à $1 \mu\text{m}$ et où les champs peuvent atteindre des valeurs supérieures à 100 kV/cm).

Les phénomènes de survitesse étudiés au cours du chapitre 2, résultant de l'application d'une impulsion temporelle de champ électrique ne donnent en fait qu'une idée assez vague des effets non stationnaires se produisant dans les dispositifs dans la mesure où ces études ignorent un certain nombre de phénomènes propres aux composants comme les effets de contact, d'injection et les effets de charge d'espace.

Dans la partie I, qui constitue une sorte de préambule à l'ensemble du chapitre, nous étudions l'évolution spatiale de la vitesse des porteurs lorsqu'ils sont soumis à un créneau spatial de champ électrique : on peut ainsi mettre en évidence le fait que la vitesse de diffusion et la vitesse de dérive se confondent dans ce que l'on peut appeler la vitesse physique moyenne.

Dans la partie II de ce chapitre, nous exposons une méthode d'intégration de l'équation de Poisson basée sur la simulation d'un seul porteur. Elle est appliquée à l'étude de structures unidimensionnelles et unipolaires N^+NN^+ . Pour le porteur qui transite dans le composant d'une électrode à l'autre, la densité de porteurs au point x est définie comme étant proportionnelle à la fraction du temps total passé par le porteur simulé dans un petit intervalle Δx centré sur x . Cette définition est similaire dans l'espace réel, à celle de la fonction de distribution du moment des porteurs dans l'espace réciproque. Les résultats obtenus sont comparés à ceux résultant de la résolution classique des équations de l'électrocinétique dans des composants identiques [9, 11]. En particulier nous nous intéresserons à la façon dont apparaissent les effets non-stationnaires : "sur-vitesse" ou "sous-vitesse", "sur-fluctuations" ou "sous-fluctuations" de vitesse.

La méthode monoporteur ne peut être utilisée que pour l'étude des caractéristiques stationnaires d'un composant (cartes moyennes de champ électrique, de densité de porteurs, ...). En conséquence, dans la partie III, nous présentons une autre méthode de résolution de l'équation de Poisson par la simulation d'un grand nombre de particules. Elle est appliquée au calcul du bruit de diffusion de composants. Dans cette méthode la densité de porteurs libres en x est donnée à chaque instant t par une grandeur proportionnelle au nombre de porteurs situés dans un petit intervalle Δx centré sur x . Le facteur de proportionnalité est donné par le principe de neutralité électrique du composant. Nous présentons deux modes possibles de calcul du bruit de diffusion. Le premier impose un courant total constant dans le composant et l'on observe les fluctuations de tension aux bornes. Le second impose une tension constante aux bornes du composant et l'on observe les fluctuations du courant. Dans les deux cas, le champ électrique interne est calculé de telle sorte que la continuité du courant total soit satisfaite. Afin de valider ces méthodes dans un cas simple, nous commençons par calculer le bruit thermique à l'équilibre dans des structures homogènes, en fonction de la concentration en impuretés du matériau. Ensuite, nous décrivons les premiers résultats obtenus dans le calcul du bruit d'électrons chauds dans des structures N^+NN^+ .

I. PREAMBULE. CONDITIONS DE PASSAGE DE PORTEURS LIBRES DANS DES CRÉNEAUX SPATIAUX DE CHAMP ÉLECTRIQUE. VITESSE DE DIFFUSION.

Le champ électrique auquel seront soumis les électrons est schématisé sur la figure 3.1. Les longueurs W_1 , W_2 et W sont choisies de telle sorte que la distribution d'énergie des porteurs soit sensiblement la même en $x=0$ et $x=W$ (pour cela, il faut que les longueurs W_1 et $W-W_2$ soient suffisamment importantes). Pour définir la densité de porteurs, nous divisons le milieu où ils se propagent en tranches d'égale épaisseur Δx perpendiculaires à l'axe Ox qui est aussi l'axe selon lequel les champs sont appliqués (le système est supposé homogène dans les deux autres directions). La densité en x est prise

comme proportionnelle au nombre de porteurs situés à l'instant considéré entre les abscisses x et $x+\Delta x$. De même, les valeurs moyennes que l'on peut déterminer en chaque abscisse x (en particulier la vitesse moyenne et l'énergie moyenne) sont obtenues en additionnant les valeurs instantanées correspondant à chaque porteur dans la tranche où il se situe à l'instant considéré

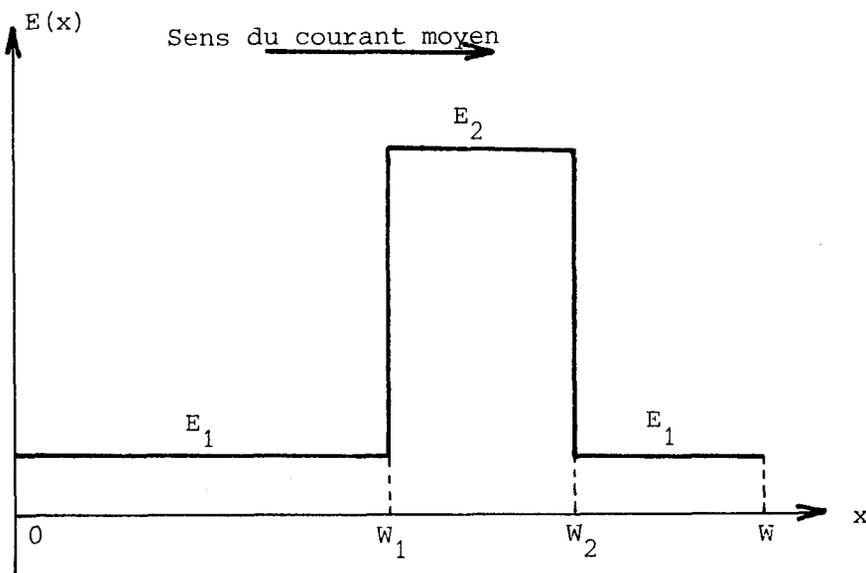


FIGURE 3,1

Forme du créneau spatial de champ électrique auquel sont soumis les porteurs. Les champs sont tous deux parallèles à la direction (111).

(l'énergie instantanée est donnée directement par la relation de dispersion $\epsilon(\vec{k})$, la vitesse instantanée par $v_x = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon}{\partial k_x}$)*. Ces définitions de moyennes sur l'ensemble peuvent, quand on ne s'intéresse qu'aux caractéristiques statiques, être également intégrées sur le temps, permettant ainsi d'améliorer la précision statistique.

* Signalons toutefois que l'on peut obtenir des résultats identiques que l'on considère soit un seul porteur traversant le créneau un grand nombre de fois soit un grand nombre de porteurs ne le traversant qu'une seule fois. Ceci résulte de la précaution qui a été prise de choisir W_1 et $W-W_2$ suffisamment grands.

Un premier type de résultat est montré sur la figure 3.2. Il concerne un créneau caractérisé par les valeurs suivantes de champ électrique 2 - 5 - 2kV/cm avec $W_1 = 0,4 \mu\text{m}$, $W_2 = 0,6 \mu\text{m}$ et $W = 0,8 \mu\text{m}$. On remarque l'augmentation exponentielle de la vitesse moyenne antérieurement à l'application du créneau puis la décroissance également exponentielle qui suit l'application du champ électrique. Les résultats numériques ainsi obtenus peuvent être comparés à ceux résultant [12] de la résolution de l'équation

$$J_0 = qn(x) v(E) + q D(E) \frac{dn}{dx} \quad (3,1)$$

assortie des conditions suivantes : $n(x)$ doit être continue en $x = W_1$ et $x = W_2$ et $n(0)$ a une valeur imposée. La vitesse de dérive et le coefficient de diffusion valent respectivement $v_d(E_1)$ et $D(E_1)$ pour x se situant dans les zones où le champ vaut E_1 et $v_d(E_2)$ et $D(E_2)$ dans celles où il vaut E_2 .

La résolution de l'équation (3,1) permet d'obtenir la densité $n(x)$ et la vitesse totale des porteurs à partir de

$$v_T(x) = \frac{J_0}{qn(x)} = v(E) + \frac{D(E)}{n(x)} \frac{dn}{dx} \quad (3,2)$$

Les valeurs de v_T ainsi obtenues et représentées sur la figure 3.2 sont très proches de celles fournies par la méthode de Monte Carlo. Le phénomène de croissance de la vitesse antérieurement au créneau de champ électrique se comprend facilement du point de vue qualitatif. Si on considère un porteur se trouvant un peu en avant du créneau, ce porteur pourra faire durant un très court instant une incursion dans le créneau du fait de son mouvement aléatoire. Cette incursion est trop courte pour l'échauffer, elle est suffisante pour l'accélérer un peu plus qu'il ne le serait s'il n'était soumis qu'à un champ électrique uniforme. Quand le porteur reviendra, à cause de son mouvement erratique, en avant du créneau de champ électrique, il pourra apporter une contribution de vitesse en léger excès qui sera le souvenir de son incursion dans le créneau. Plus le porteur se trouve près de la transition de champ en W_1 , plus la durée de l'incursion sera longue. A la limite le porteur est "happé" à l'intérieur du créneau. Ce phénomène a donc pour effet d'assurer la continuité de la vitesse moyenne en fonction de x . Au niveau de la densité $n(x)$ il en résulte une dimi-

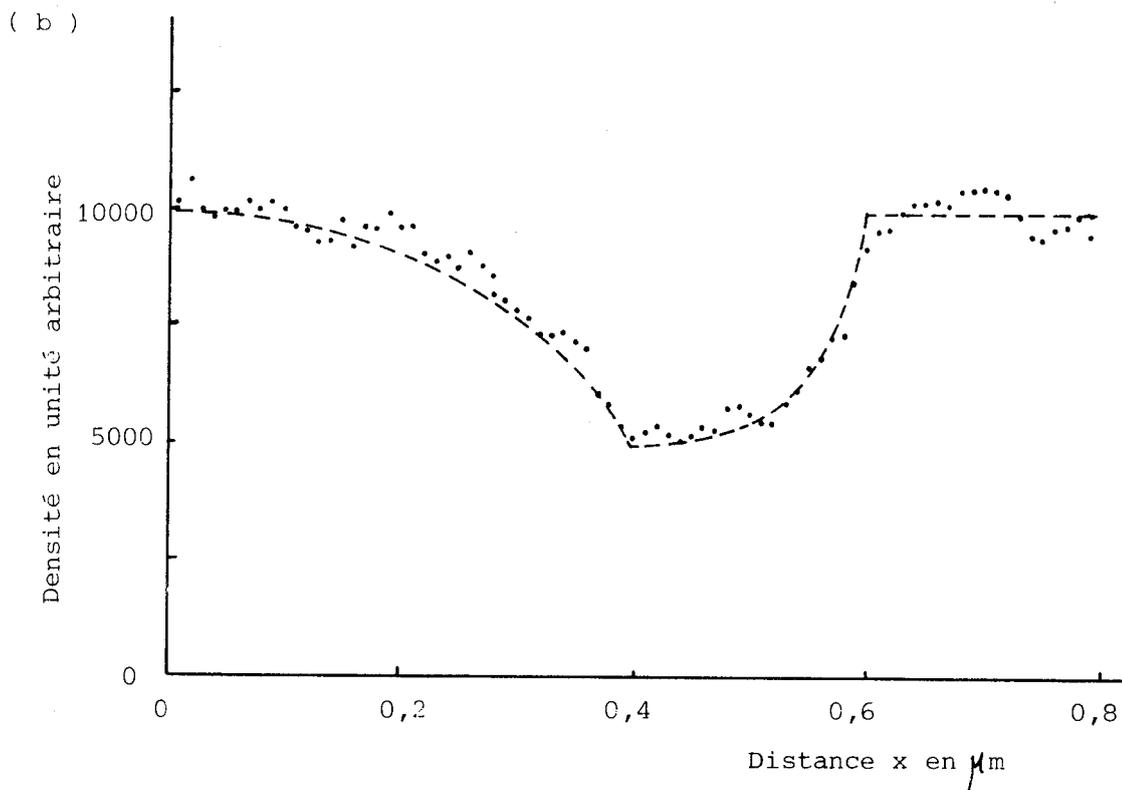
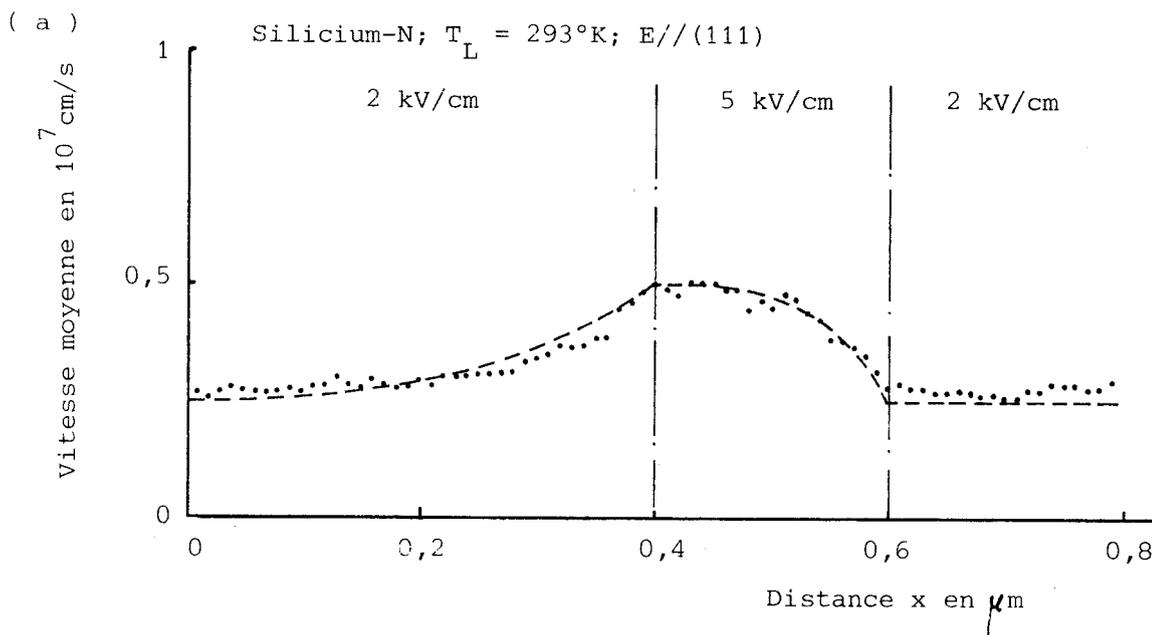


FIGURE 3,2

Evolutions de la vitesse (a) et de la densité de porteurs (b) dans un créneau spatial caractérisé par les champs 2-5-2 kV/cm. Les points sont les résultats de Monte Carlo et les courbes interrompues les résultats de l'électrocinétique:

-- entre $x=0$ et $x=0,4 \mu\text{m}$: $n(x) = \frac{J_0}{qv_1} - \left(\frac{J_0}{qv_1} - \frac{J_0}{qv_2} \right) \exp\left(\frac{x - 0,410^{-4}}{D_1/v_1} \right)$

-- entre $x=0,4 \mu\text{m}$ et $x=0,6 \mu\text{m}$: $n(x) = \frac{J_0}{qv_2} - \left(\frac{J_0}{qv_1} - \frac{J_0}{qv_2} \right) \exp\left(-\frac{x - 0,610^{-4}}{D_2/v_2} \right)$



Silicium-N; $T_L = 293^\circ\text{K}$; $E//(111)$

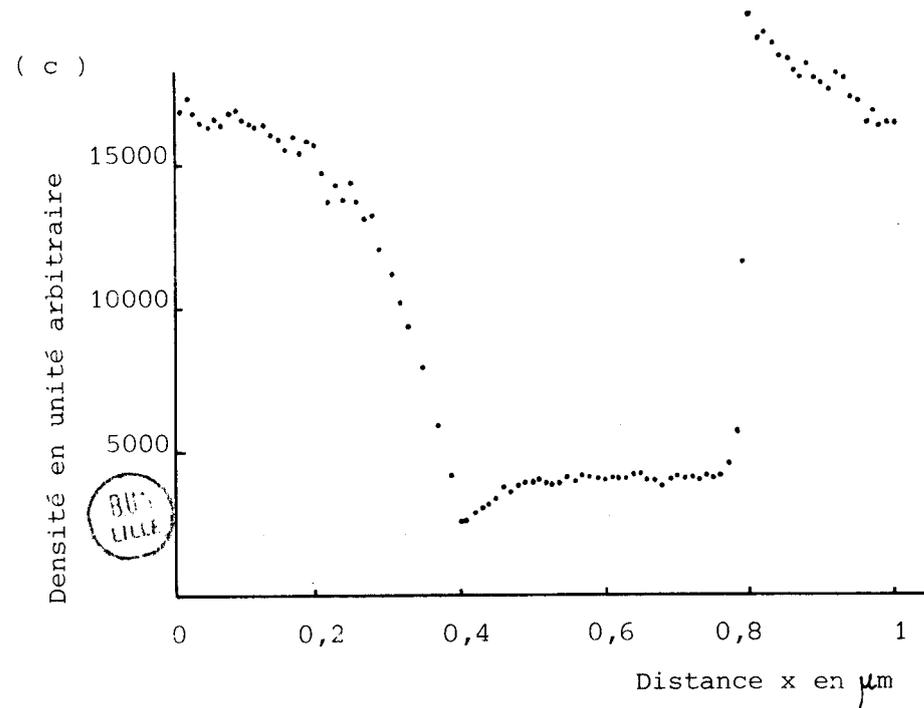
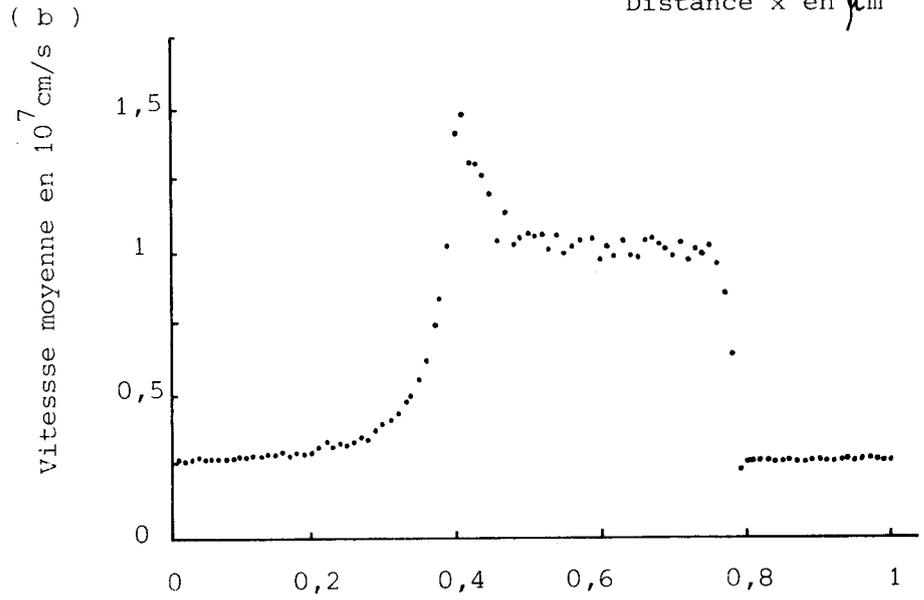
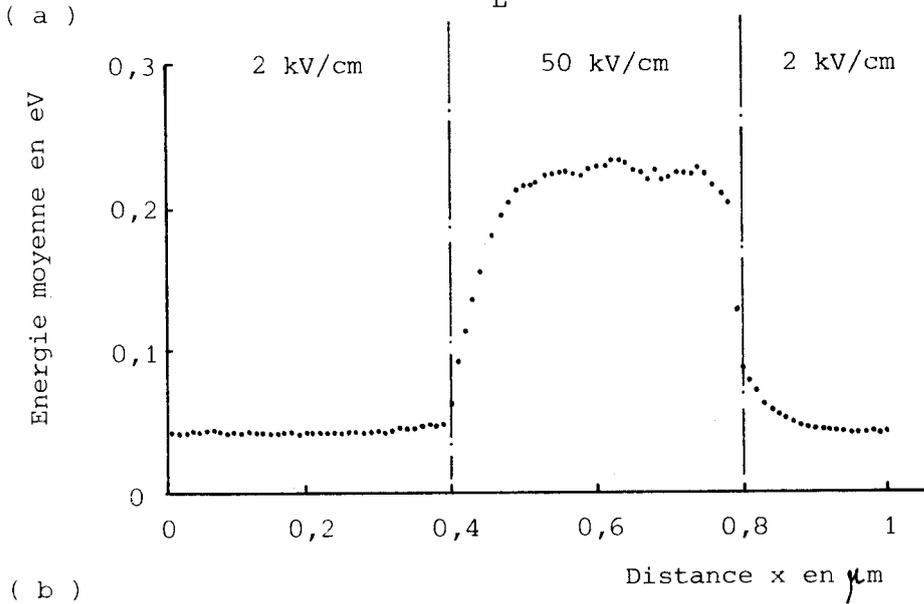


FIGURE 3,3

Evolutions de l'énergie (a), de la vitesse (b) et de la densité de porteurs (c) dans un créneau spatial caractérisé par les champs 2-50-2 kV/cm, obtenues par la simulation de Monte Carlo

BUS
LILLE

nution en avant du créneau. De l'autre côté, à la sortie du créneau spatial (en $x \approx W_2$), on observera le phénomène inverse avec une diminution progressive de la vitesse.

Nous montrons un autre cas typique dans la figure 3.3. Il concerne un créneau caractérisé par les valeurs de champ électrique $2 - 50 - 2$ kV/cm avec $W_1 = 0,4 \mu\text{m}$, $W_2 = 0,8 \mu\text{m}$ et $W = 1 \mu\text{m}$. Sur la figure 3.3a nous avons reporté l'énergie moyenne en fonction de la distance. Elle montre un double phénomène de relaxation d'énergie, échauffement à l'intérieur du créneau, refroidissement à l'extérieur. Dans les conditions présentes, les électrons doivent parcourir une distance de $0,2 \mu\text{m}$ pour s'échauffer et à peu près la même distance pour se refroidir. Ceci montre que les distances sur lesquelles les phénomènes non stationnaires peuvent se produire sont relativement importantes, même pour un matériau comme le silicium caractérisé par des temps de relaxation très courts. D'ailleurs la figure 3.3b montre que les phénomènes de survitesse obtenus sont loin d'être négligeables. Néanmoins, les effets liés à la diffusion subsistent. En effet, la densité de porteurs $n(x)$ reportée sur la figure 3.3c n'est pas uniforme et on peut noter un minimum à l'endroit où les porteurs sont en régime de survitesse. Par contre on notera une forte accumulation de porteurs lents à la sortie du créneau.

L'ensemble des résultats que nous venons de montrer nous mène à la conclusion suivante. Quelque soit la façon dont on comptabilise la vitesse moyenne, sur le temps ou sur l'ensemble des porteurs, en un point x (en additionnant les contributions individuelles dans chaque intervalle Δx centré sur x) la moyenne calculée tient compte de tous les phénomènes : dérive, diffusion et survitesse quand elle a lieu. C'est la raison pour laquelle nous n'appellerons plus que vitesse moyenne où vitesse de conduction l'ensemble de ces trois effets, la distinction entre ceux-ci se révélant inutile puisque la simulation les prend tous trois automatiquement en compte.

II. SIMULATION D'UN COMPOSANT UNIDIMENSIONNEL. METHODE MONO-PORTEUR. COMPARAISON AVEC LES RESULTATS DE L'ELECTROKINETIQUE CLASSIQUE.

II.1. GENERALITES ET PRINCIPE DE LA METHODE

Le profil de concentration d'impuretés des composants que nous nous proposons d'examiner est donné sur la figure 3.4. Les homojonctions sont supposées abruptes. Ceci est fait dans une simple volonté de simplification et pour exhalter au maximum les effets observés. En réalité, du fait de la méthode elle-même, il n'y a aucune difficulté à tenir compte de profils quelconques de concentration en impuretés même de formes compliquées. Ceux-ci sont introduits très simplement dans les programmes sous forme de tableaux.

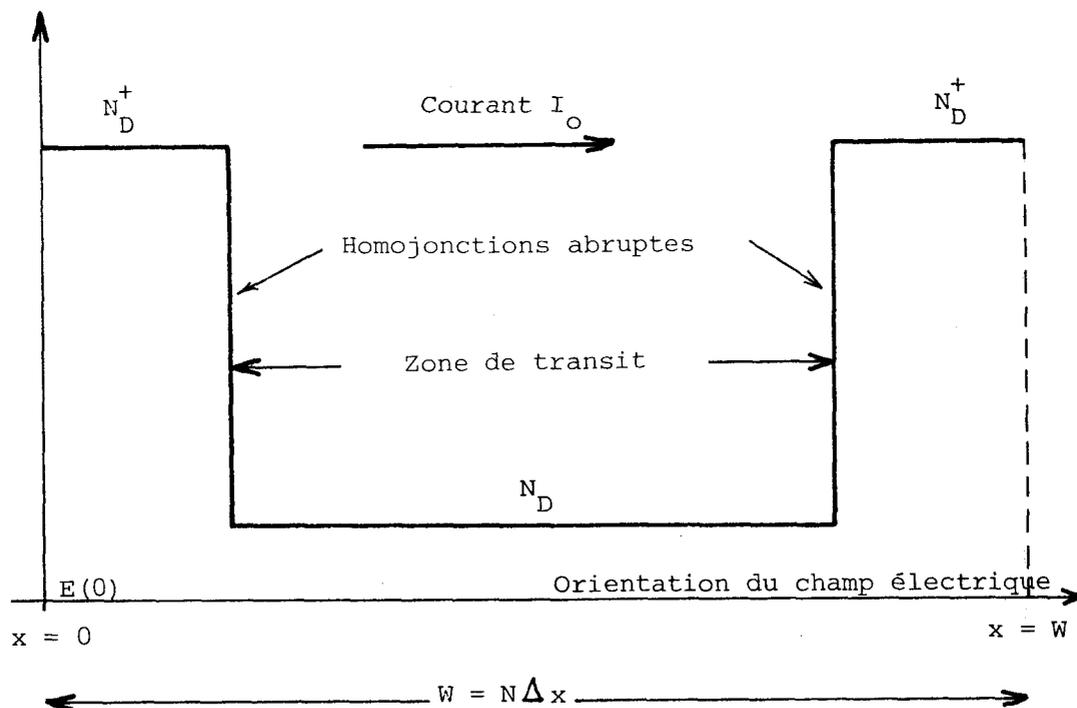


FIGURE 3,4

Schéma général des échantillons étudiés dans ce chapitre. Le composant est taillé dans la direction (111) qui est aussi l'orientation du champ électrique.

Ce que nous nous proposons maintenant est l'obtenir dans différentes conditions de polarisation les caractéristiques statiques et dynamiques de ces composants, tels que les profils de concentration de porteurs libres, de champ électrique, d'énergie, de vitesse des porteurs en tout point de l'échantillon par la simulation microscopique des particules, plutôt que par la résolution des équations classiques de l'électrodynamique (équation de continuité, équation des courants). Nous ne conservons pour le calcul du champ électrique dont la connaissance est nécessaire dans notre méthode de simulation, que l'équation de Poisson ou les équations qui en dérivent, comme la relation de conservation du courant total

$$qnv_T + \epsilon' \frac{\partial E}{\partial t} = c^{te} \quad (3,3)$$

La méthode que nous allons décrire ci-dessous ne permet que le calcul des valeurs moyennes des quantités déjà mentionnées. C'est au paragraphe III que nous verrons comment les valeurs instantanées de ces mêmes quantités peuvent être obtenues, permettant ainsi le calcul du bruit de diffusion. Les conditions aux limites du composant simulé sont fixées en $x = 0$ dans la région de forte concentration en impuretés, suffisamment loin des homojonctions pour être certain qu'en ce point le régime stationnaire est atteint. Nos calculs étant faits à la température ambiante de $300 \text{ }^{\circ}\text{K}$, nous admettons que les impuretés sont totalement ionisées. Nous négligeons de plus les phénomènes de génération-recombinaison. Enfin les conditions sont telles que l'on est certain que le champ interne est suffisamment petit pour que les phénomènes d'ionisation par choc soient négligeables. D'autre part, afin d'assurer la conservation du nombre de porteurs dans la structure nous supposons qu'un porteur qui franchit l'une des bornes du composant est automatiquement et instantanément réinjecté à l'autre borne. Ceci revient à admettre que les contacts situés en $x=0$ et $x=W$ sont parfaitement ohmiques. Dans ces conditions le nombre n_e de porteurs contenus dans le composant s'obtient facilement en écrivant que la charge totale contenue dans le composant doit être nulle soit :

$$n_e = S \int_0^W N_D(x) dx \quad (3,4)$$

W étant la longueur du composant et S sa surface. n_e restera constant et égal au nombre de centres ionisés.

Dans le cadre de ce travail, nous ne considérons et n'utiliserons que des modèles unidimensionnels. Le traitement unidimensionnel de la réaction de charge d'espace peut se justifier en supposant que $\sqrt{S} \gg W$ et qu'ainsi les effets de bord sont négligeables. Dans ce cas, les surfaces équipotentielles sont perpendiculaires à l'axe du composant le long duquel le champ de polarisation est appliqué. Or nous verrons dans la suite que de très petits nombres d'électrons peuvent suffire pour traduire la réalité avec une bonne précision. Pour ces populations très faibles la relation (3,4) montre qu'il correspondra des surfaces de composant extrêmement petites. On peut alors obtenir le résultat concernant un composant de surface plus habituelle en juxtaposant un grand nombre de solutions identiques et à condition toutefois d'effectuer les valeurs moyennes convenablement (ce seront des moyennes quadratiques pour celles qui concernent le bruit). C'est pour cette raison que nous admettrons que le calcul unidimensionnel de la charge d'espace est compatible avec un nombre de porteurs très limité c'est-à-dire lorsque $\sqrt{S} \approx W$.

La première méthode que nous proposons se base sur la simulation d'un seul porteur. Cette façon de procéder peut sembler paradoxale étant donné que nous nous occupons en pratique de structures comportant un nombre très élevé d'électrons. En fait ce que nous exposons est un artifice de calcul reposant sur une définition particulière de la densité électronique.

Nous supposons que l'intensité du champ électrique est fixée à la cathode en $x = 0$. A l'instant initial $t = 0$, un électron est injecté en $x = 0$ avec des valeurs initiales de vitesse et d'énergie tirées selon une certaine distribution : Maxwell-Boltzmann à l'équilibre thermique par exemple. Le porteur rendu libre est accéléré par le champ durant un court laps de temps δt et change de position. Le champ auquel sera soumis le porteur pour le δt suivant sera donné

par l'équation de Poisson. Pour ce faire nous découpons l'échantillon en tranches d'égale épaisseur Δx et nous définissons la densité au point x_i soit n_i comme une quantité proportionnelle au temps que le porteur séjourne entre x_i et $x_i + \Delta x$, soit Δt_i , divisé par le temps T où l'observation est effectuée. La figure 3.5 illustre le principe de calcul de cette densité. Il résulte de ces définitions que

$$n_i \Delta x = k \frac{\Delta t_i}{T} \quad (3,5)$$

En pratique, le facteur k s'obtient à partir de la neutralité électrique en écrivant que

$$\sum_{i=1}^N n_i \Delta x = \sum_{i=1}^N N_{D_i} \Delta x = \sum_{i=1}^N \frac{k}{T} \Delta t_i = k = \frac{n_e}{S} \quad (3,6)$$

N_{D_i} représente ici le nombre de centres ionisés dans la $i^{\text{ème}}$ tranche.

On voit donc que la densité $n(x)$ est déterminée à chaque instant par la connaissance des caractéristiques géométriques de l'échantillon (S, W, n_e) et par l'histogramme représentant l'évolution de la position du porteur dans l'intervalle de temps $0 \rightarrow T$. Le champ électrique est obtenu en tout point à partir de la résolution de l'équation de Poisson unidimensionnelle

$$E_i = E(0) + \frac{q}{\epsilon'} \sum_{j=1}^{j=i} (n_j - N_{D_j}) \Delta x \quad (3,7)$$

où q est la charge élémentaire et ϵ' la permittivité du matériau égale à $\epsilon_L = 11,7 \epsilon_0$.

Le champ qui vient d'être calculé à l'instant T sera appliqué au porteur durant l'intervalle de temps $T \rightarrow T + \delta t$.

Soumis à ce champ électrique qui varie sans cesse, le porteur suit une marche aléatoire dirigée en moyenne vers l'anode en $x = W$. Lorsque le porteur a atteint une abscisse $x > W$ (en $x < 0$), il est reinjecté en $x' = x - W$ (où $x' = x + W$) avec la même énergie et le même vecteur d'onde. Ceci revient à considérer que la structure étudiée possède une périodicité spatiale dans la direction de x avec la période W (aussi bien pour x négatif que positif). Si cette réinjection est effectuée suffisamment loin de la zone de transit, dans la zone de fort dopage, la fonction de distribution des porteurs $f(\vec{k})$ en $x = 0$ et $x = W$ seront identiques et correspondront au champ $E(0)$ appliqué. Ceci nous dispense de tirer de nouvelles valeurs d'énergie et de vitesse selon la distribution $f(k)$ et cette économie permet de gagner du temps calcul sans altérer le résultat final. Ainsi, des résultats identiques ont pu être obtenus en donnant aux régions dopées N_D^+ des longueurs différentes. Après une période transitoire sur laquelle nous reviendrons plus loin, un champ électrique moyen s'établit et se stabilise. Après un temps suffisamment long il tend en moyenne vers une solution stationnaire et n'évolue plus. En pratique le champ électrique interne se trouve stabilisé après que le porteur ait transité 50 à 250 fois à travers le composant.

II.2. CALCUL DES VALEURS MOYENNES.

Outre la concentration en porteurs et le champ électrique qui sont engendrés et moyennés au cours du temps durant la simulation, nous calculons les valeurs moyennes de l'énergie, de la vitesse, ainsi que la valeur quadratique de cette dernière. Ces moyennes sont calculées à partir des valeurs instantanées prises par ces quantités au cours du temps comme nous l'avons expliqué au paragraphe I, et sont ainsi définies en chaque point x_i du composant (voir figure 3.5).

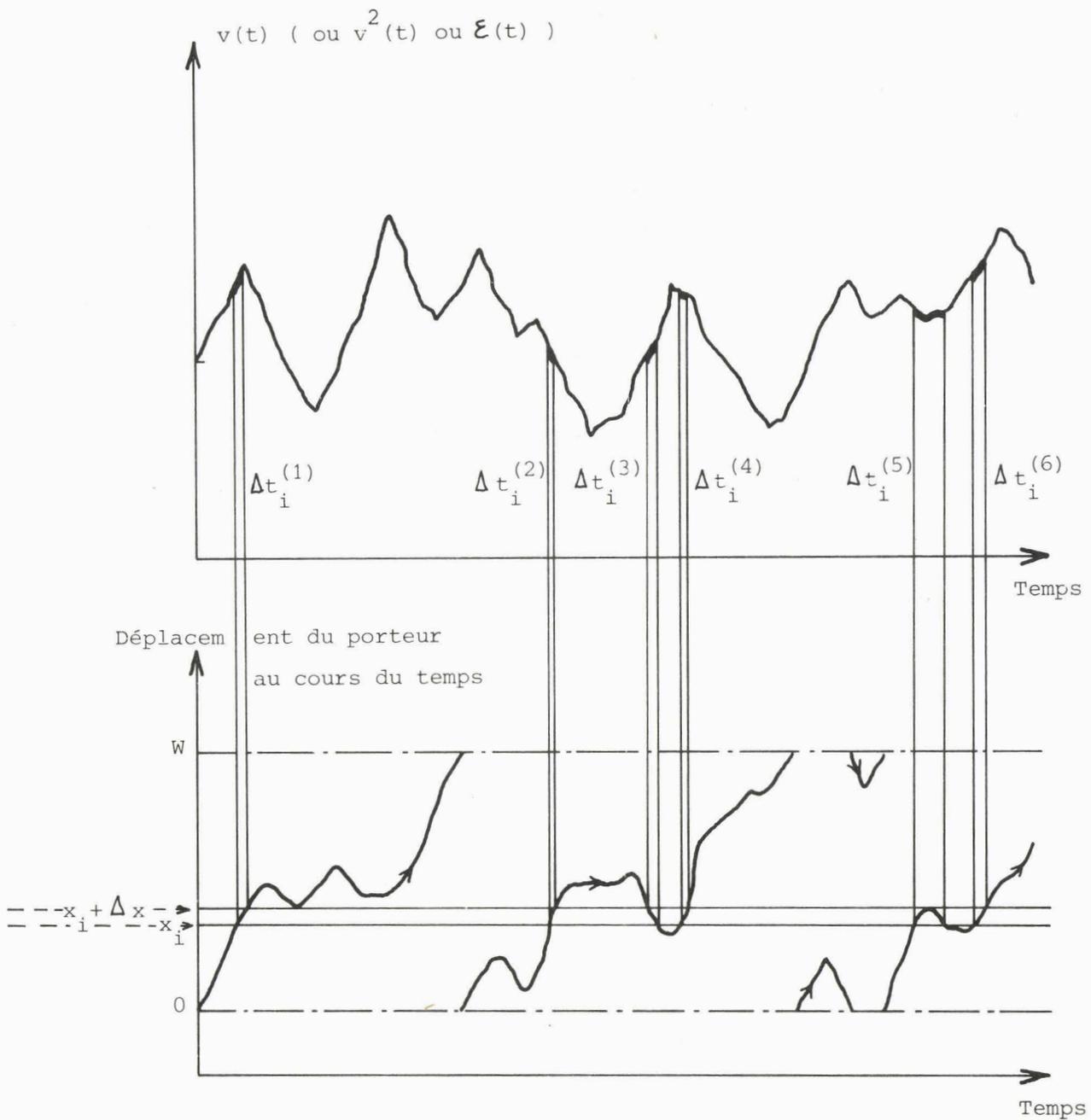


FIGURE 3,5

Illustration de la méthode monoporteur. Le porteur simulé transite entre 0 et W périodiquement. Les durées $\Delta t_i^{(j)}$ sont enregistrées à chaque fois que le porteur se situe entre x_i et $x_i + \Delta x$. La densité de porteurs est alors proportionnelle à $\Delta t_i = \sum_j \Delta t_i^{(j)}$. Les valeurs moyennes (vitesse, énergie, ...) sont obtenues en moyennant les valeurs prises par les variables observées durant ces intervalles de temps :

$$\text{(exemple) } v_i = \frac{v_i^{(1)} \Delta t_i^{(1)} + \dots + v_i^{(6)} \Delta t_i^{(6)}}{\Delta t_i^{(1)} + \dots + \Delta t_i^{(6)}}$$

II.3. ELIMINATION DU TRANSITOIRE.

La méthode mono-porteur que nous venons de décrire donne de bons résultats en ce qui concerne les caractéristiques statiques du composant étudié. Par contre, il apparaît un phénomène transitoire conduisant à des valeurs erronées de champ électrique durant la phase initiale de la simulation.

On peut évaluer l'amplitude de ce phénomène transitoire débutant à $t = 0$ en considérant les relations (3,5) et (3,7). Pour fixer les idées, considérons une structure de longueur $W = 1 \mu\text{m}$, de concentration en impuretés uniforme $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. A $t=0$ un électron est injecté en $x = 0$ et est supposé se trouver dans le premier intervalle Δx à $t = \delta t$. La relation (3,7) donne pour le champ en celui-ci

$$E_1 = E(0) + \frac{q}{\epsilon'} (n_1 - N_D) \Delta x \text{ avec } n_1 = \frac{N_D W}{\Delta x}$$

puisque dans ce cas particulier $k = N_D W$. On trouve alors

$$E_1 = E(0) + \frac{q}{\epsilon'} N_D W \left(1 - \frac{\Delta x}{W}\right) \approx E(0) + \frac{q}{\epsilon'} N_D W \quad (3,8)$$

car nous avons $\Delta x \ll W$. Telle sera la valeur du champ auquel sera soumis le porteur situé dans Δx durant le second pas δt . Un calcul simple permet d'évaluer le second terme de la relation (3,8) qui, avec les valeurs numériques choisies, s'élève à $1,6 \cdot 10^6 \text{ V/cm}$. Une telle valeur de champ électrique est tout à fait irréaliste, elle entraîne une perturbation considérable du mouvement de l'électron et mène à la divergence du calcul.

Nous avons donc remédié à cet inconvénient en pondérant convenablement la partie du champ électrique due à la réaction de charge d'espace par une fonction dépendant du temps. Nous avons choisi la fonction suivante

$$u(t) = 1 - \exp\left(\frac{-t}{\tau_{ns}}\right)$$

Cette façon de procéder revient à supposer qu'à $t = 0$ la densité de porteurs en tout point est égale à la densité d'impuretés, donnant donc un champ uniforme égal à $E(0)$. On passe progressivement au champ électrique donné par la relation exacte (3,7) avec la constante de temps τ_{ns} .

L'expérience montre que τ_{ns} peut être pris d'autant plus petit que N_D est petit. En général τ_{ns} est fixé à des valeurs situées entre 500 et 2000 pas élémentaires de simulation ($\delta t \approx 10^{-14}$ sec). Nous avons vérifié que la valeur τ_{ns} choisie n'influait pas la forme ni l'amplitude du champ électrique moyen finalement calculé. De plus le calcul des valeurs moyennes ne commence que pour $T \geq 5 \tau_{ns}$, c'est-à-dire à partir du moment où le système est bien stabilisé dans son régime permanent.

II.4. CALCUL DU SPECTRE DE BRUIT DE DIFFUSION.

Un des buts ultimes des méthodes présentées ici est d'obtenir des résultats concernant le bruit de diffusion, en particulier par l'intermédiaire du calcul du spectre de bruit en puissance $S_V(f)$ (ou $S_I(f)$). Or notre procédé de simulation nous permet non seulement de calculer les valeurs moyennes mais aussi de calculer les fluctuations quadratiques moyennes. Ainsi S_V peut se calculer par l'intermédiaire de l'intégrale de bruit de Shockley [13] qui s'écrit en fréquence basse

$$S_V(0) = 4k_B T_N(0) R(0) = 4q^2 S \int_0^W n(x) \langle \Delta v^2(x) \rangle \tau(x) |VZ|^2 dx \quad (3,9)$$

où $T_N(0)$ est la température équivalente de bruit du composant, $R(0)$ sa résistance différentielle en petit signal, $\tau(x)$ est le temps de corrélation des fluctuations de vitesse des porteurs situés à l'abscisse x et $|VZ|$ le module du champ d'impédance.

Quatre quantités sont nécessaires pour connaître $S_v(0)$: $n(x)$ et $\langle \Delta v^2(x) \rangle$ sont fournies directement par la simulation ; $\tau(x)$ et $|\nabla Z^2|$ ne le sont pas et semblent assez difficiles à déterminer de manière simple. C'est la raison pour laquelle nous avons préféré développer une autre méthode pour le calcul du bruit de diffusion. Les résultats donnés par cette première méthode nous serviront plutôt à montrer la possibilité d'existence de survitesse et de surfluctuation de vitesse dans des composants de courtes dimensions. Néanmoins la quantité $\Delta u^2(x) = \langle \Delta v^2(x) \rangle n(x)$ qui figure dans (3,9) représente en fait ce que les porteurs situés en x peuvent apporter au bruit total produit dans tout l'échantillon et dans tout le spectre de fréquence. A ce titre, cette quantité paraît intéressante à étudier dès maintenant.

II.5. RESULTATS.

Les résultats que nous présentons maintenant seront systématiquement comparés à ceux que l'on peut obtenir par la résolution des équations de l'électrocinétique classique alliant le principe de continuité du courant et l'équation de Poisson. Ces calculs sont alors effectués en supposant que la mobilité et le coefficient de diffusion sont des fonctions instantanées du champ électrique local. En d'autres termes, si à l'instant t et au point x , le champ est égal à E_0 , la mobilité des porteurs sera $\mu(E_0) = v_d(E_0)/E_0$, et le coefficient de diffusion $D(E_0)^*$.

Le but de cette comparaison est de voir dans quelles conditions et de quelle façon apparaissent les phénomènes non stationnaires dans les composants N^+NN^+ . Nous avons choisi un certain nombre d'exemples types que nous allons décrire maintenant. Dans chaque cas, la condition aux limites qui est imposée est donnée par la valeur du champ électrique en $x = 0$ dans la zone N^+ du composant. Pour décrire chaque type de comportement nous étudions les structures suivantes :

*les fonctions $v_d(E_0)$ et $D(E_0)$ utilisées sont déduites des résultats obtenus précédemment (chapitre 2 partie I) par la méthode de Monte Carlo appliquée à un semiconducteur uniforme en régime stationnaire.

1° une structure ayant $0,8 \mu\text{m}$ de longueur, dont la zone de transit a une longueur de $0,5 \mu\text{m}$. Le profil de concentration en impuretés varie de 10^{17} cm^{-3} à 10^{13} cm^{-3} . Les conditions de fonctionnement correspondent à un champ en tête $E(o)$ valant 1 kV/cm .

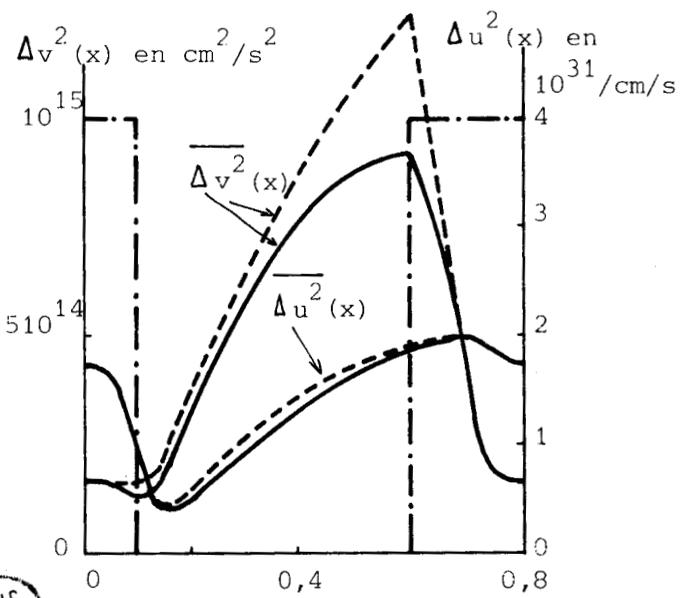
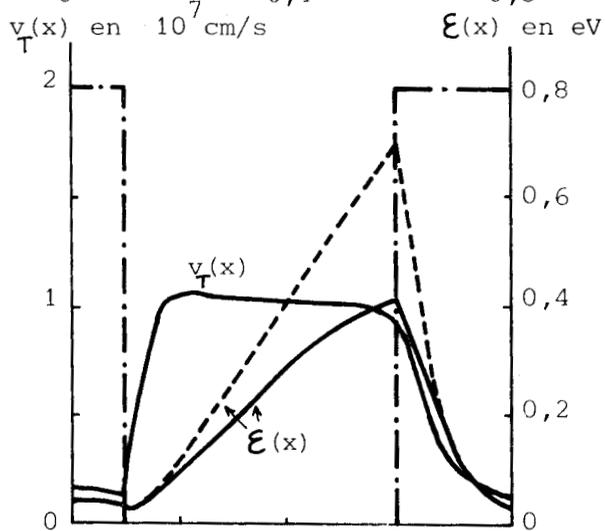
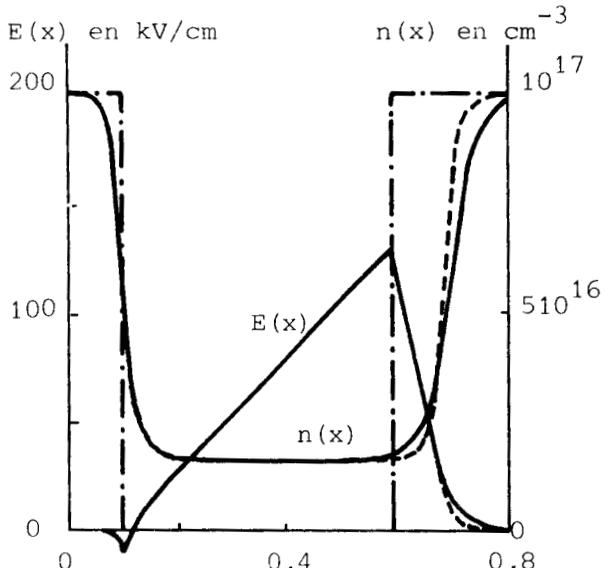
2° une seconde structure, ayant pour longueur totale $0,4 \mu\text{m}$ avec une zone de transit de $0,2 \mu\text{m}$ et un profil de concentration en impuretés variant de 10^{17} cm^{-3} à 10^{13} cm^{-3} , est décrite lorsque le champ en tête est fixé à 2 kV/cm .

3° enfin, pour montrer un cas où les phénomènes non stationnaires apparaissent de façon manifeste, nous étudions une structure de longueur totale $0,4 \mu\text{m}$ où la zone de transit est réduite à $0,1 \mu\text{m}$. Le contraste du profil de concentration en impuretés est porté à $4 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3} / 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ afin d'exhalter les effets non stationnaires. Pour le cas étudié le champ en tête est fixé à 2 kV/cm .

Le premier de ces trois cas concerne donc une structure de longueur totale $W = 0,8 \mu\text{m}$, dans laquelle la zone de transit a $0,5 \mu\text{m}$ de longueur. Dans la figure 3.6 nous montrons la densité de porteurs libres et le champ électrique. Le champ de polarisation à la cathode vaut ici $E(o) = 1 \text{ kV/cm}$. Il en résulte compte tenu du profil d'impuretés choisi une tension moyenne aux bornes de $V_0 = 3,9$ volts. On observe ici une configuration de champ électrique typique d'une structure N^+NN^+ en régime de haute injection. Nous avons également représenté les résultats donnés par l'électrocinétique classique.

On notera le bon accord obtenu entre les résultats de Monte Carlo et ceux de l'électrocinétique. Une seule différence, assez légère, est que la chute du champ électrique vers l'anode est plus rapide pour le second cas que pour le premier. Toutefois, compte tenu du bon accord obtenu, on peut supposer que les porteurs sont en régime quasi-stationnaire. Sur la figure 3.6b nous montrons l'évolution de l'énergie des porteurs et de leur vitesse moyenne avec la position. Si l'on compare les courbes concernant l'énergie, on notera un sensible phénomène de relaxation spatiale puisque l'énergie des porteurs ne s'ajuste pas avec les valeurs stationnaires*. Cependant on observera qu'il n'existe pas de zone

 * Rappelons que le profil d'énergie des porteurs d'après la théorie de l'électrocinétique s'obtient à partir du profil de champ électrique $E(x)$ et de la fonction $\epsilon(E)$ obtenue pour un semi-conducteur en volume.



Distance x en μ m

FIGURE 3,6

Les courbes pleines sont les résultats Monte Carlo. Les courbes interrompues sont les résultats de l'électrocinétique. Les traits mixtes figurent le profil de concentration d'impuretés.

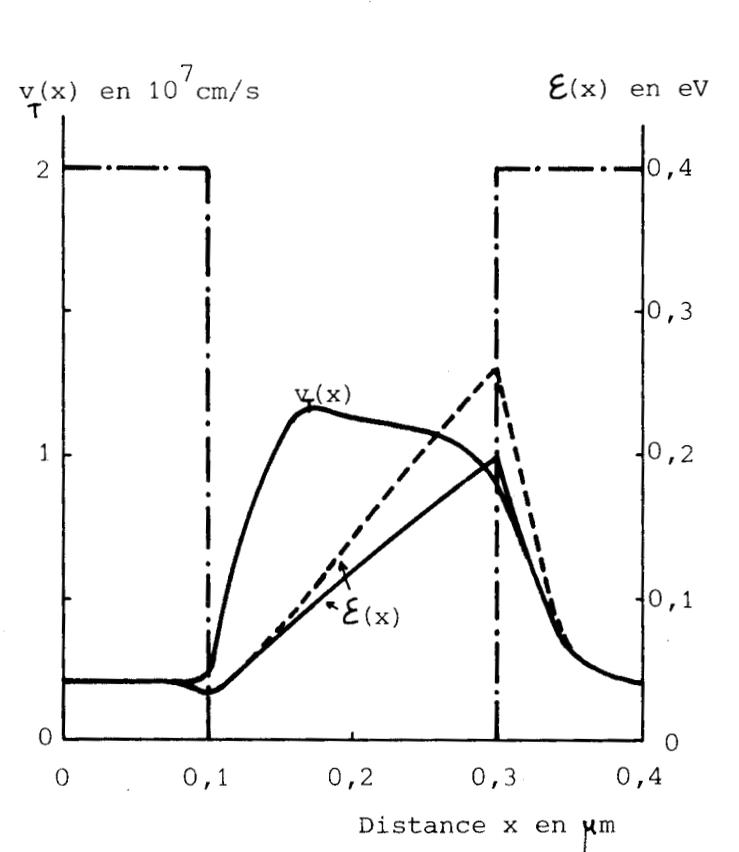
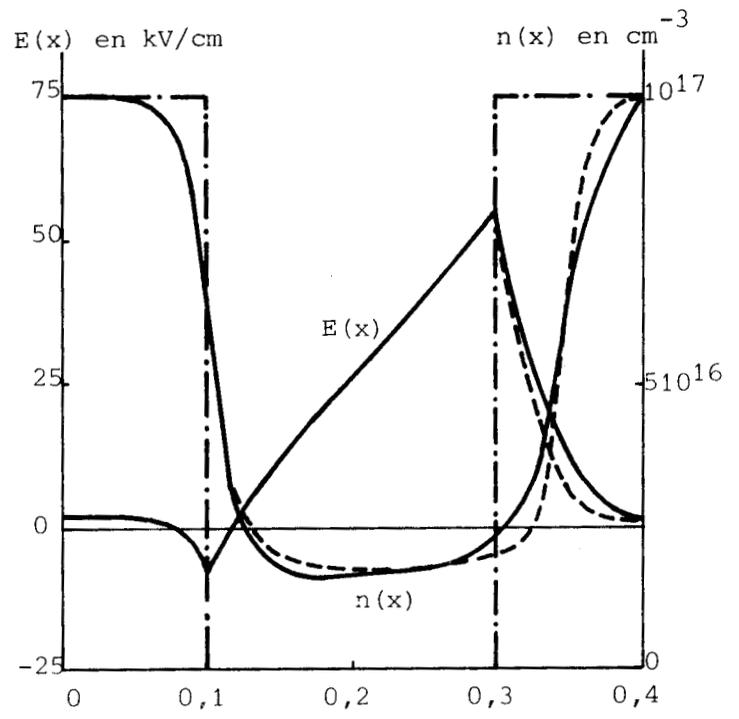


FIGURE 3,7

Les courbes pleines sont les résultats de Monte Carlo. Les courbes interrompues sont les résultats de l'électrocinétique. Les traits mixtes figurent le profil de concentration d'impuretés.



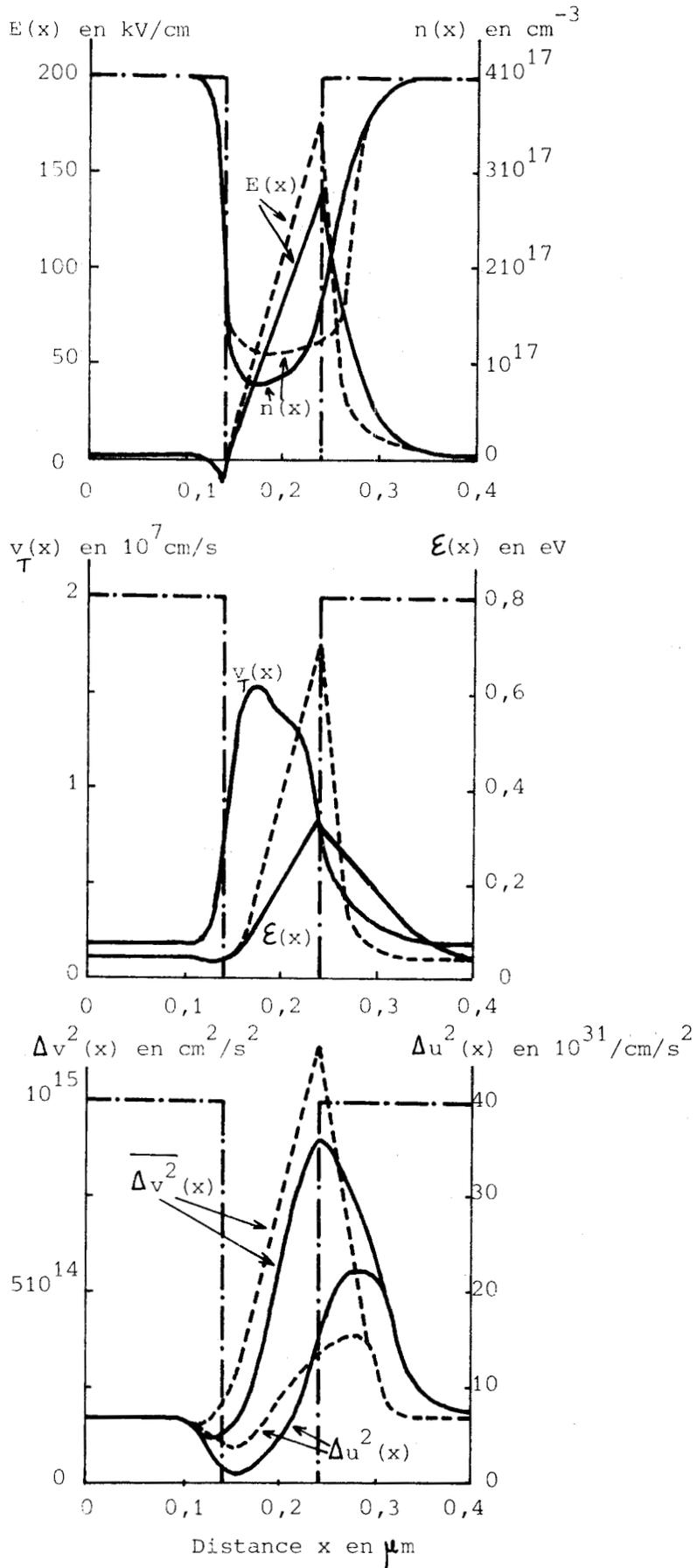


FIGURE 3,8

Les courbes pleines sont les résultats de Monte Carlo. Les courbes interrompues sont les résultats de l'électrocinétique. Les traits mixtes figurent le profil de concentration d'impuretés.



où la vitesse moyenne soit plus grande que 10^7 cm/sec (qui est la vitesse maximale que l'on peut obtenir dans le silicium en régime stationnaire). Enfin, dans la figure 3.6c nous avons représenté les fluctuations quadratiques moyennes de la vitesse $\langle \Delta v^2(x) \rangle = \langle v^2(x) \rangle - \langle v(x) \rangle^2$. De même nous avons présenté la quantité $\Delta u^2(x)$. Les profils de $\langle \Delta v^2(x) \rangle$ sont différents dans la mesure où les énergies dans la figure 3.6b diffèrent elles aussi. Par contre les différences existant au niveau du bruit propre $\Delta u^2(x)$, entre les deux types de résultats sont tout à fait négligeables.

Nous considérons maintenant la seconde structure de longueur $0,4 \mu\text{m}$, dont la zone de transit n'a plus que $0,2 \mu\text{m}$ de longueur. Les résultats correspondants sont montrés sur les figures 3.7a et 3.7b. Sur la figure 3.7b on peut observer que sur une grande partie de la zone de transit les porteurs se propagent à une vitesse sensiblement plus grande que leur vitesse de dérive limite.

On peut amplifier le phénomène en augmentant le niveau des zones N^+ et en raccourcissant la zone de transit. C'est ce qui a été fait sur les figures 3.8a 3.8b et 3.8c qui présentent un cas véritablement limite. La zone de transit n'a plus que $0,1 \mu\text{m}$ de longueur. Sur la figure 3.8a on note les grandes différences qui apparaissent entre les résultats Monte Carlo et les résultats électrocinétiques. Une grande partie des porteurs injectés qui devraient se trouver dans la zone de transit sont venus s'accumuler du côté de l'anode créant ainsi une large déplétion dans la zone de transit. Il en résulte une forte modification du champ électrique et bien que celui-ci présente des valeurs moins élevées que ce que prévoit la théorie électrocinétique, ces valeurs sont suffisantes pour assurer un transit des porteurs en régime de survitesse comme le montre à l'évidence la figure 3.8b. Notons ici que, comme dans le cas n° 2 à la position où la vitesse passe par son maximum correspond le minimum de densité de porteurs donnant une vitesse de diffusion nulle. Il en résulte que la vitesse en ce point est purement due à un effet de dérive.

On observe simultanément un effet de relaxation d'énergie particulièrement important. En effet, il apparait ici que les porteurs ont un temps de transit dans la zone N inférieur à 1 picoseconde. Cette échelle de temps est celle du temps de relaxation d'énergie des porteurs.

Il parait également intéressant d'étudier dans quelle mesure les différences profondes existant au niveau de l'énergie et de la vitesse entre les résultats électrocinétiques et les résultats de Monte Carlo se répercutent sur le terme Δu^2 . Les résultats sont représentés sur la figure 3.8c. On constate comme on pouvait le prévoir que les valeurs obtenues par l'une et l'autre technique sont très différentes. Il en résulte que le niveau de bruit en régime non stationnaire peut présenter des valeurs tout autres que celles que laisserait prévoir la théorie électrocinétique en régime stationnaire.

Par ailleurs, il est intéressant de noter que dans notre méthode de Monte Carlo, vitesse moyenne et densité de porteurs libres sont calculées indépendamment, et on peut noter qu'il y a conservation spatiale du courant $J(x) = qn(x)v(x) = J_0$ à moins de 2 % dans tous les cas présentés ici.

En conclusion, au cours de la première partie de ce chapitre, nous avons proposé une méthode de simulation de composants qui repose sur l'étude du mouvement aléatoire d'un seul porteur. Cette méthode peut généralement être utilisée avec des temps de calcul raisonnables.

La validité de la méthode a pu être vérifiée en comparant les résultats obtenus dans le cas de structures N^+NN^+ de dimensions suffisantes avec ceux fournis par la résolution des équations classiques de l'électrocinétique.

L'étude de structures de dimensions largement submicroniques nous a permis alors de montrer que des régimes non stationnaires caractérisent la dynamique électronique dans les composants "ballistiques" où se manifestent des phénomènes comme celui de survitesse, et où peut apparaître un bruit de diffusion local fort différent de celui qui peut être prévu par les théories classiques de simulation de composants.

Il apparait cependant que la méthode monoporteur que nous venons de proposer ne permet d'étudier commodément que les propriétés statiques d'un composant. Il est donc nécessaire, pour étudier les propriétés dynamiques en haute fréquence ou pour déterminer la fluctuation temporelle de la tension aux bornes ou du courant dans le dispositif, de mettre au point une méthode mieux adaptée. C'est ce que nous nous proposons de faire dans la suite de ce chapitre avec une méthode de simulation multipporteur.

III. SIMULATION D'UN COMPOSANT UNIDIMENSIONNEL. METHODE MULTIPORTEUR. CALCUL DU BRUIT DE DIFFUSION.

III.1. PRINCIPE DE BASE.

Le principe de la méthode de simulation que nous présentons maintenant est de calculer simultanément le mouvement d'un grand nombre de porteurs indépendants. L'objectif essentiel est d'observer les fluctuations liées au bruit de diffusion dans le composant. Nous envisageons deux façons différentes et complémentaires de déterminer ce bruit : on peut le faire soit par l'intermédiaire de la tension aux bornes quand le composant est polarisé à courant total constant, soit par l'intermédiaire du courant total traversant le composant quand il est polarisé à tension constante. Les deux cas sont bien entendu des cas idéaux.

Dans le premier cas, le courant total imposé à la structure est constant dans le temps et uniforme dans l'espace. Nous calculons et analysons la tension fluctuante apparaissant aux bornes du composant à chaque instant t à partir des valeurs connues des vitesses des porteurs et de leur position. Une analyse de Fourier permet de déduire le spectre de puissance de bruit en tension de l'échantillon $S_V(f)$. Le cas étudié peut être réalisé en plaçant un générateur de courant continu idéal en parallèle sur le composant et en observant les fluctuations de tension sur un oscilloscope d'impédance d'entrée infinie placé aux bornes du dispositif.

Dans le second cas, on suppose que la tension appliquée aux bornes du composant est constante dans le temps. On calcule alors le courant traversant la structure - ce courant doit être uniforme dans l'espace mais peut fluctuer en fonction du temps - à partir des vitesses de l'ensemble des porteurs simulés. Ce second cas est réalisé en pratique en plaçant un générateur de tension idéal aux bornes du composant et en observant le courant dans une très petite résistance placée en série dans le circuit. On peut alors, par transformée de Fourier, déterminer le spectre de puissance de bruit en courant dans le composant : $S_I(f)$. Il est évident que les deux spectres de bruit ainsi calculés (S_V et S_I) ne sont pas indépendants et sont reliés à l'impédance du système suivant la relation

$$S_V(f) = |Z(f)|^2 S_I(f) \quad (3,10)$$

où $Z(f)$ est l'impédance différentielle petit signal du composant et dépend de la fréquence f . L'avantage de calculer indépendamment les deux spectres d'un même composant est de démontrer que la méthode proposée est complète et peut donner indirectement comme résultat supplémentaire des informations sur l'impédance de la structure. Etudions donc maintenant plus en détail ces deux modes de calcul du bruit de diffusion.

III.2. CALCUL DU BRUIT EN TENSION.

Nous imposons comme condition que le courant dans la structure est indépendant du temps et de la position de manière à assurer en tout point la conservation du courant total. Cette condition s'écrit ici

$$J_o = J_{cond}(x,t) + J_{depl}(x,t) = q n(x,t)v_T(x,t) + \epsilon' \frac{\partial E(x,t)}{\partial t} \quad (3,11)$$

$J_0 = I_0/S$ est le courant de polarisation ; $n(x,t)$ représente la concentration de porteurs libres au point x à l'instant t , et $v_T(x,t)$ la vitesse moyenne correspondante. Le terme qnv_T que nous appelons le courant de conduction correspond au déplacement physique des particules dans le temps et dans l'espace. Il tient compte de l'effet de dérive et de l'effet de diffusion des porteurs mais aussi des effets de survitesse quand ils existent. En fait, étant donné que nous utilisons ici un modèle particulière, un porteur se trouvant dans le voisinage de x avec une composante longitudinale de vitesse $v_x(t)$ (le long de la direction \vec{Ox}) développe par son mouvement une densité de courant élémentaire qui vaut simplement $j_x(t) = qv_x(t)$. S'il y a $n_1(x,t)$ porteurs dans un intervalle Δx centré sur x au temps t , la densité de courant totale sera définie au point concerné par

$$j_x(t) = q \sum_{k=1}^{k=n_1(x)} v_{x_k}(t) \quad (3,12 a)$$

où la somme sur k porte sur les $n_1(x)$ porteurs. Cette densité peut aussi s'écrire

$$j_x(t) = qn_1(x,t)v_T(x,t) \quad (3,12 b)$$

où cette fois $v_T(x,t)$ est la valeur moyenne des vitesses des n_1 porteurs concernés : c'est là notre définition de la vitesse physique moyenne. La densité réelle des porteurs $n(x,t)$ vaudra maintenant

$$n(x,t) = \frac{n_1(x,t)}{S\Delta x} \quad (3,12 c)$$

Le principe de conservation du courant (3,11) peut s'exprimer en terme de différences finies. On peut ainsi calculer en chaque point du composant et à chaque instant l'amplitude du champ local par la relation de récurrence suivante

$$E(x,t+\delta t) = E(x,t) + \frac{\delta t}{\epsilon} \left[\frac{I_0}{S} - qn(x,t)v_T(x,t) \right] \quad (3,13)$$

où δt est le pas élémentaire de la simulation. Cette relation intégrée suivant x donne la valeur instantannée de la tension aux bornes du composant (voir les calculs en annexe 1)

$$V(t) = V(0) + \frac{I_0 W t}{\epsilon' S} - \frac{q}{\epsilon' S} \sum_{i=1}^{n_e} \int_0^t v_{x_i}(t') dt' \quad (3,14)$$

où n_e est le nombre total de porteurs simulés. La relation (3,14) permet le calcul des variations temporelles de la tension aux bornes du composant connaissant le courant appliqué I_0 et l'histoire des porteurs durant l'intervalle de temps $[0,t]$. Intégrée sur le temps, cette relation donne également la caractéristique statique $I_0 = f(V_0)$ du composant étudié. Le calcul du spectre de bruit est immédiat en utilisant le théorème de Wiener-Kintchine. La fluctuation de tension aux bornes $V(t) = V(t) - \bar{V}$ étant connue à chaque instant t , la fonction d'autocorrélation de cette quantité est facilement calculée

$$\phi_V(t) = \langle \delta V(u) \delta V(u+t) \rangle \quad (3,15)$$

où $\langle \quad \rangle$ désigne une moyenne sur le temps noté par u . Le spectre de bruit en découle immédiatement par

$$S_V(f) = 4 \int_0^{\infty} \phi_V(t) \cos 2\pi ft \, dt \quad (3,16)$$

Il est intéressant de connaître certaines grandeurs caractéristiques de ce bruit. Ce sont la puissance de bruit générée dans le spectre tout entier, c'est-à-dire

$$\langle \delta V^2 \rangle = \phi_V(0) \quad (3,17)$$

et le temps de corrélation τ_{N_V} qui correspond à la fréquence de coupure de ce bruit et qui est donné par

$$\tau_{N_V} = \int_0^{\infty} \phi_V(t) / \phi_V(0) \, dt \quad (3,18)$$

Par ailleurs, on peut également calculer la température de bruit équivalente T_N de l'échantillon si l'on connaît la résistance différentielle petit signal du composant

$$T_N(f) = \frac{S_V(f)}{4k_B R(f)} \quad (3,19)$$

En basse fréquence le spectre est blanc et $R(0)$ est donné par la pente de la caractéristique statique $I_0 = f(V_0)$ du composant. On peut donc facilement déterminer $T_N(0)$ connaissant la fonction $I_0 = f(V_0)$ et $S_V(0)$ en fonction de I_0 .

III.3. CALCUL DU BRUIT EN COURANT.

La condition imposée maintenant est que la tension appliquée aux bornes du composant est constante et indépendante du temps et il s'agit d'observer, c'est-à-dire de déterminer, les fluctuations du courant total traversant la structure. La propriété importante de $J(t)$ reste cependant d'être conservatif dans la structure et de vérifier la relation suivante

$$J(t) = \frac{I(t)}{S} = J_{\text{cond}}(x,t) + J_{\text{depl}}(x,t) = \frac{qn(x,t)v_T(x,t) + \epsilon' \frac{\delta E(x,t)}{\delta t}}{T} \quad (3,20)$$

dont les différents termes ont été définis dans le paragraphe précédent. Si de nouveau on développe l'expression du courant de déplacement au premier ordre on trouve une relation identique à (3,13), à ceci près que le courant $I(t)$ dépend du temps et doit être déterminé de telle sorte que la tension aux bornes n'évolue pas. On aura donc

$$E(x,t+\delta t) = E(x,t) + \frac{\delta t}{\epsilon'} \left[\frac{I(t)}{S} - qn(x,t)v_T(x,t) \right] \quad (3,21)$$

avec la condition supplémentaire

$$\int_0^W E(x,t+\delta t) dx = \int_0^W E(x,t) dx = V_0 \quad (3,22)$$

Intégrant sur x les deux membres de la relation (3,21) on trouve que

$$I(t) = \frac{qS}{W} \int_0^W n(x,t)v_T(x,t) dx \quad (3,23)$$

ce qui peut s'écrire sous la forme

$$I(t) = \frac{q}{W} u_T(t) \quad (3,24)$$

où $u_T(t)$ représente la somme des composantes des vitesses à l'instant t (suivant $O\vec{x}$) de l'ensemble des n_e porteurs présents dans le composant. Le champ électrique à chaque instant et en tout point est alors déterminé par la relation (3,21) dans laquelle $I(t)$ a été remplacé par son expression donnée en (3,24).

De la même façon que dans le paragraphe III.2, la fonction de corrélation du courant $I(t)$, $\Phi_I(t)$, est aisément calculable, donnant par une formulation identique à (3,16) le spectre de puissance de bruit en courant $S_I(f)$. Une température équivalente de bruit égale à celle donnée en (3,19) peut être également déterminée par la relation

$$T_N(f) = \frac{S_I(f)}{4k_B G(f)} \quad (3,25)$$

où, cette fois, $G(f)$ est la partie réelle de l'admittance différentielle petit signal.

III.4. ETUDE DU BRUIT THERMIQUE.

Une première possibilité qui nous est offerte pour vérifier la capacité de la technique présentée ici à calculer les propriétés du bruit de diffusion dans des composants est de voir dans quelle mesure et dans quelles conditions la méthode proposée permet de retrouver les caractéristiques du bruit thermique. En effet ces caractéristiques peuvent être facilement calculées par des relations classiques et il sera ainsi possible de comparer les résultats obtenus à ceux de notre méthode de simulation et de vérifier éventuellement la validité de notre

procédé. La condition la plus simple dans laquelle on peut effectuer cette étude est de considérer un échantillon de longueur W , de concentration en impuretés uniforme et de section constante S . Considérons successivement les deux modes possibles de calcul du bruit.

III.4.1. Calcul analytique du bruit thermique en tension et comparaison avec les résultats de la simulation.

Le schéma du composant que nous allons étudier ici est donné sur la figure 3.9.

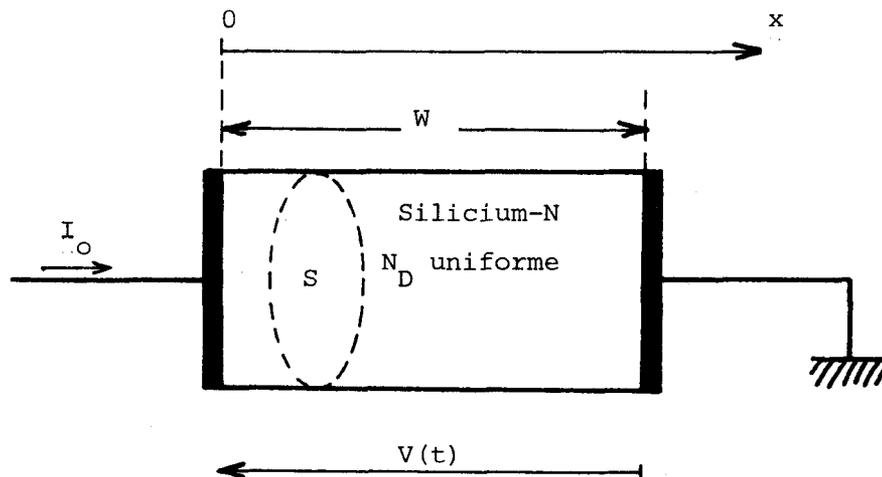


FIGURE 3,9

Schéma du composant dont nous étudions le bruit thermique à l'équilibre.

La densité de courant et le champ électrique interne en tout point de l'échantillon sont uniformes dans tout plan perpendiculaires à la direction \vec{Ox} du courant électrique et peuvent être calculés à partir de l'équation de conservation du courant et l'équation de Poisson. La détermination des spectres de bruit en tension peut se faire en utilisant la méthode du champ d'impédance. L'hypothèse de base que nous faisons est de supposer que les fluctuations locales de vitesse des porteurs et de champ électrique sont liées par la mobilité complexe du matériau

$$\frac{\Delta v(x)}{\Delta E(x)} = \mu^*(f) \quad (3,26)$$

qui est une quantité dépendant de la fréquence. Le calcul du spectre de bruit est détaillé dans l'annexe 2. Nous utilisons ici les résultats correspondants à un composant non polarisé. Dans ce cas les porteurs contenus dans la diode sont des porteurs en équilibre thermique à la température du réseau et leur mobilité complexe est très bien approximée par

$$\mu^*(f) = \frac{\mu_o}{1 + j2\pi f\tau_p} \quad (3,27)$$

Le spectre obtenu [15] est alors

$$S_V(f) = \frac{4k_B T R_o}{\left(1 - \frac{f^2}{f_o f_p}\right)^2 + \frac{f^2}{f_o^2}}$$

en notant par R_o la résistance de l'échantillon à fréquence nulle, par f_o la fréquence de relaxation diélectrique du matériau, par f_p la fréquence de relaxation du moment, et par μ_o la mobilité ohmique :

$$R_o = \frac{W}{qN_D\mu_o S} ; f_o = \frac{1}{2\pi\tau_o} = \frac{qN_D\mu_o}{2\pi\epsilon'} ; f_p = \frac{1}{2\pi\tau_p} \quad (3,29)$$

Nous avons représenté sur la figure 3.10 les variations de l'intensité spectrale $S_V(f)$ avec la fréquence pour différentes concentrations en impuretés N_D . On observe que l'augmentation de N_D entraîne en premier lieu une augmentation non proportionnelle de la fréquence de coupure, puis au-delà d'une certaine valeur de N_D donne lieu à un changement de comportement du spectre qui présente alors un maximum avant de décroître avec la fréquence.

Il est à remarquer ici que si nous avons négligé l'effet du temps de relaxation du moment dans l'expression de la mobilité différentielle l'intensité spectrale du bruit en tension aurait été donnée par la relation classique

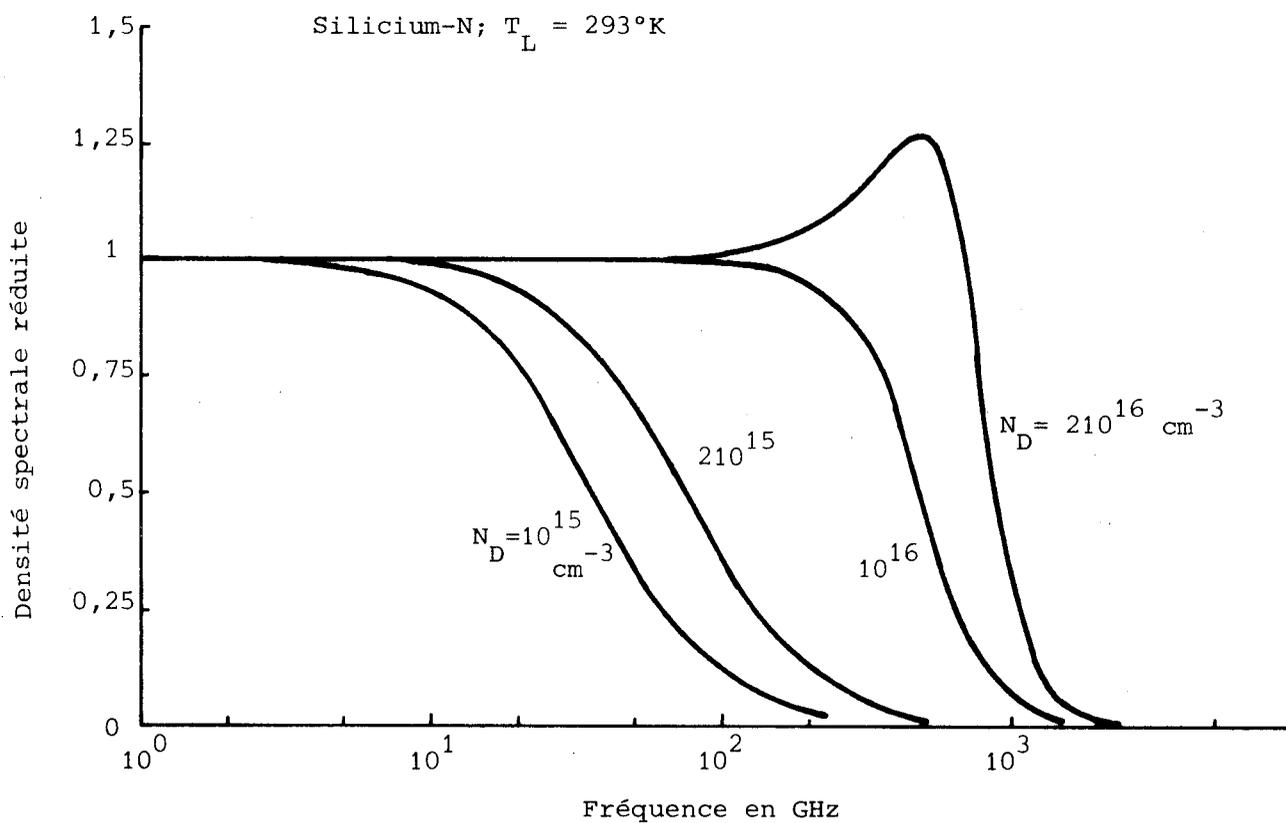


FIGURE 3,10

Les différentes allures du spectre de bruit en tension du composant étudié (figure 3.9) selon la concentration en impuretés N_D .



$$S_V(f) = \frac{4k_B T R_o}{1 + \left(\frac{f}{f_o}\right)^2} \quad (3,30)$$

qui ne présente en aucun cas le maximum caractéristique de la relaxation du moment.

Si la théorie permet le calcul direct de S_V (relation 3,28), nous avons vu que la simulation numérique du dispositif permet d'étudier l'évolution temporelle de la tension aux bornes de la diode. On peut en déduire facilement la fonction d'autocorrélation ϕ_V de $V(t)$ qui doit être la transformée de Fourier en cosinus du spectre donné en (3,28). La comparaison avec les résultats fournis par la théorie peut se faire sur ϕ_V à condition de calculer (par exemple par la méthode des résidus) la fonction de corrélation associée au spectre théorique donné en (3,28). Les expressions théoriques des fonctions de corrélation sont données dans l'annexe 2. Nous avons vu d'après la figure 3.10 que selon la concentration en impuretés du matériau le spectre théorique $S_V(f)$ peut présenter des allures différentes. Il en résulte que les fonctions de corrélation associées $\phi_V(t)$ peuvent avoir des allures fort différentes. Le diagramme de la figure 3.11 montre que pour des concentrations en impuretés faibles la fonction de corrélation a une allure exponentielle. Pour des concentrations en impuretés élevées, la fonction de corrélation a une allure périodique amortie. La concentration en impuretés situant la limite entre les deux formes de comportement vaut $N_D = 5,3 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-3}$ (voir annexe 2). Cette différence de comportement physique, lorsque N_D varie, peut donc être interprétée à partir du phénomène de relaxation du moment des porteurs dans le composant.

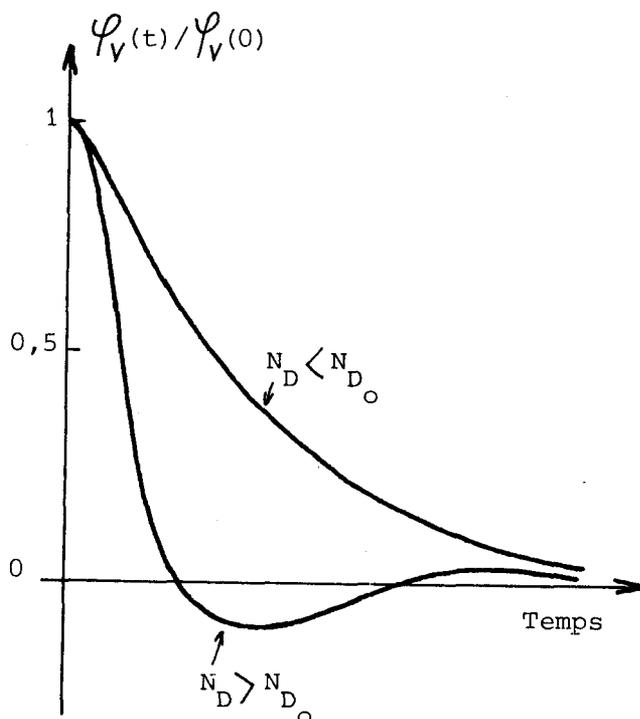


FIGURE 3,11

Differentes allures des fonctions de corrélation associées aux spectres de la figure 3.10

Afin de comparer ces résultats théoriques à ceux donnés par la méthode de Monte Carlo, il paraît important d'étudier au préalable la précision et la cohérence des résultats que l'on peut obtenir à partir des simulations. Deux questions en particulier peuvent se poser :

- premièrement, dans quelle mesure les résultats obtenus dépendent-ils de la valeur du pas spatial Δx choisi pour déterminer les fluctuations de champ électrique et celles de la tension aux bornes ?

- deuxièmement, dans quelle mesure les résultats obtenus dans nos simulations à l'aide d'un nombre de porteurs limité sont-ils significatifs et peuvent-ils être extrapolés à des éléments réels contenant un très grand nombre de porteurs* ?

* Cette question est loin d'être triviale dans la mesure où à un nombre n_e de porteurs très petit correspond une surface de composant S très faible et donc des fluctuations $V(t)$ très importantes qui peuvent produire des électrons chauds et un bruit de diffusion différent du bruit thermique.

La réponse à la première question est illustrée par la figure 3.12. Nous avons représenté les fonctions de corrélation calculées pour $N_D = 10^{16} \text{cm}^{-3}$ et $W = 0,1 \mu\text{m}$ avec respectivement $\Delta x = 0,01 \mu\text{m}$ et $\Delta x = 0,02 \mu\text{m}$. On remarquera que les résultats obtenus sont très voisins et ne semblent pas dépendre du pas choisi. Aux temps longs la fonction de corrélation est difficilement calculable compte tenu de l'incertitude statistique. D'une façon générale les valeurs de Δx que nous avons choisi sont toujours comprises entre $0,005 \mu\text{m}$ et $0,02 \mu\text{m}$. Ces valeurs correspondent aussi à des distances plus faibles que les longueurs de Debye pour le matériau considéré.

Pour répondre à la seconde question, notons tout d'abord que la fluctuation quadratique moyenne de la tension aux bornes est liée à N_D et n_e par la relation

$$\langle \delta V^2 \rangle = \Phi_V(0) = \int_0^\infty S_V(f) df = \frac{k_B T W^2 N_D}{\epsilon' n_e} = \frac{k_B T W}{\epsilon' S} \quad (3,31)$$

Cette relation montre que si le bruit simulé est thermique on doit trouver que $\langle \delta V^2 \rangle$ est proportionnel à $1/n_e$. Par ailleurs changer n_e ne revient en fait qu'à changer la surface S , et il est bien évident que la fonction de corrélation réduite $\Phi_V(t) / \Phi_V(0)$ doit rester inchangée. Il s'agit donc de vérifier que les résultats de nos simulations redonnent bien ces deux caractéristiques.

Nous montrons sur la figure 3.13 l'évolution de $\langle \delta V^2 \rangle$ avec n_e . On remarquera que pour un matériau ayant une concentration d'impuretés de 10^{15}cm^{-3} il suffit de 60 porteurs pour calculer correctement le bruit en tension à $300 \text{ }^\circ\text{K}$. A partir de cette valeur les points s'alignent sur la droite de pente -1 qui représente les valeurs théoriques. Le système est observé dans chaque cas suffisamment longtemps pour que les fonctions de corrélation soient stabilisées. Les fonctions de corrélation ont été calculées avec 10 et 60 porteurs pour la même valeur de N_D , et

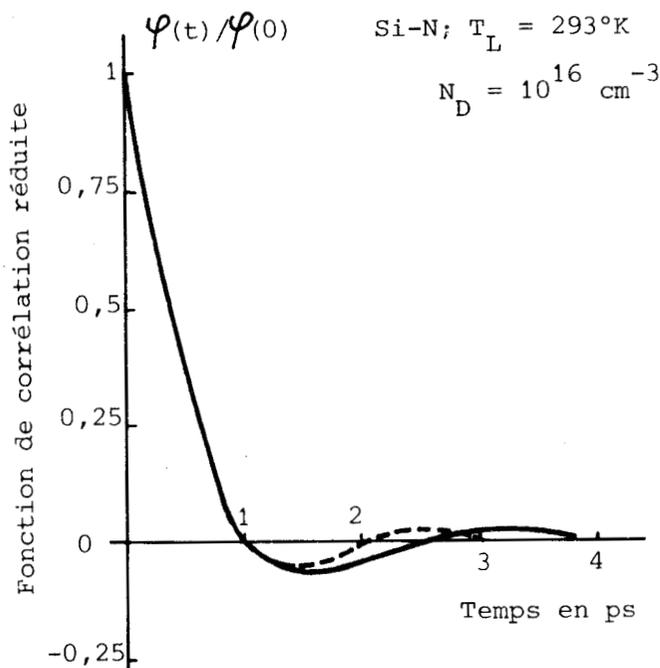


FIGURE 3,12

Influence du pas spatial Δx sur les fonctions de corrélation calculées par la méthode de Monte Carlo.

Courbe pleine: $\Delta x = 0,01 \mu\text{m}$

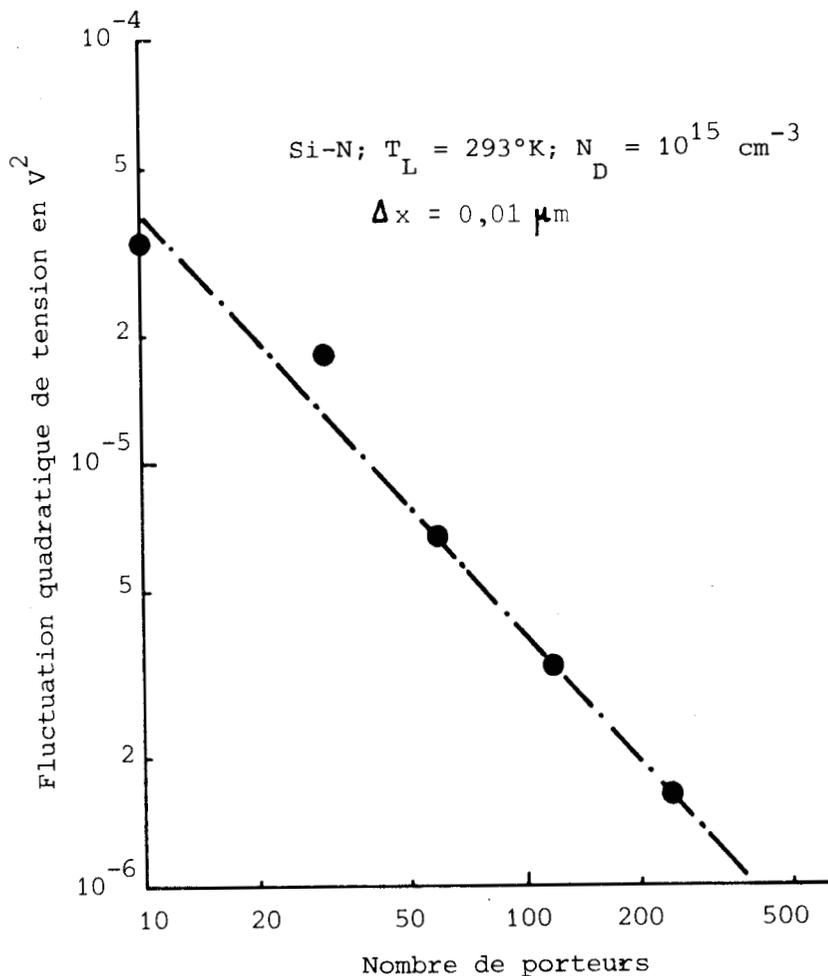
Courbe interrompues: $\Delta x = 0,02 \mu\text{m}$

FIGURE 3,13

Evolution de la fluctuation quadratique moyenne de la tension aux bornes avec le nombre de porteurs simulés.

Résultats Monte Carlo: ●

Courbe théorique en traits mixtes.



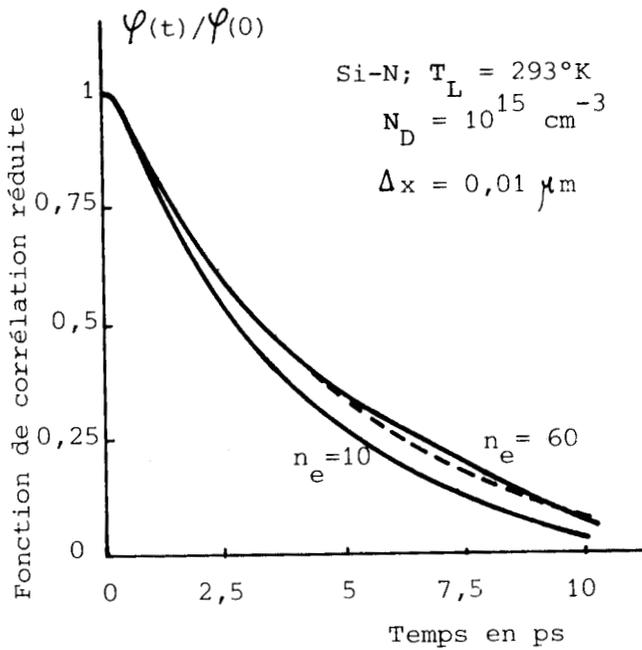
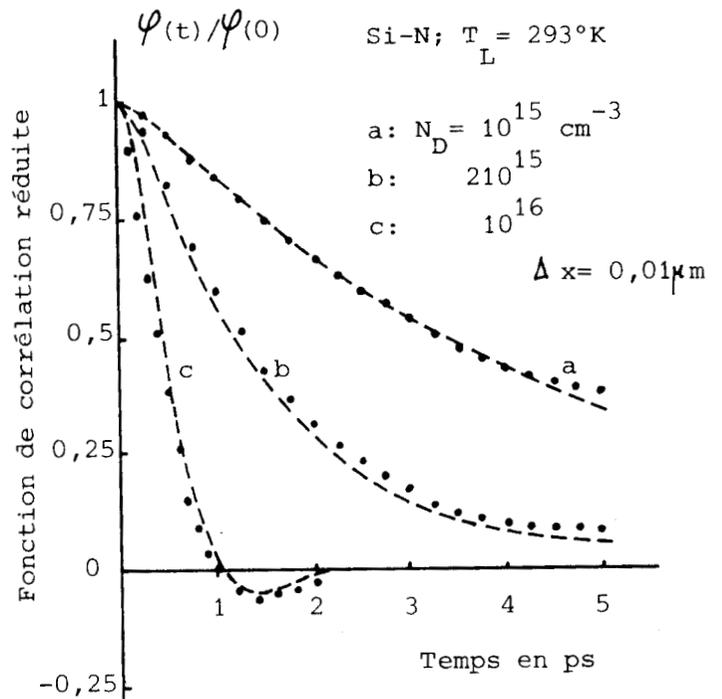


FIGURE 3,14

Influence du nombre de porteurs simulés sur la fonction de corrélation réduite. La courbe en traits interrompus figure la fonction de corrélation théorique.

FIGURE 3,15

Evolution de la fonction de corrélation de la tension aux bornes avec la concentration en impuretés du matériau. les points sont les résultats Monte Carlo; les courbes théoriques figurent en traits interrompus.



sont représentées figure 3.14. On constate que les résultats obtenus avec $n_e = 10$ et $n_e = 60$ sont très voisins et proches également des résultats théoriques représentés en pointillé.

Une comparaison plus complète entre les résultats provenant des simulations et ceux obtenus à partir de l'étude théorique du bruit thermique est effectuée sur la figure 3.15. Nous montrons les résultats acquis avec $N_D = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $N_D = 2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ et $N_D = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. On peut noter le très bon accord obtenu dans chaque cas avec les fonctions de corrélation théoriques.

III.4.2. Calcul du bruit thermique en courant.

Considérons le même échantillon que précédemment aux bornes duquel on maintient une tension constante. Pour le bruit thermique et dans les mêmes conditions que précédemment le spectre de bruit en courant s'écrit (voir annexe 2)

$$S_I(f) = \frac{4k_B T_L}{R_o \left[1 + \left(\frac{f}{f_p} \right)^2 \right]} \quad (3,32)$$

et la fluctuation quadratique moyenne du courant vaut

$$\langle \delta I^2 \rangle = \Phi_I(0) = \int_0^\infty S_I(f) df = \frac{q^2 k_B T_L n_e}{m^* W} = \frac{q^2 k_B T_L N_D S}{m^* W} \quad (3,33)$$

où m^* est la masse effective de conductivité dans la direction $\langle 111 \rangle$. On notera que la puissance de bruit totale dans tout le spectre $\langle \delta I^2 \rangle$ est maintenant proportionnelle à n_e , donc à la surface S . En vue de vérifier la relation de proportio-

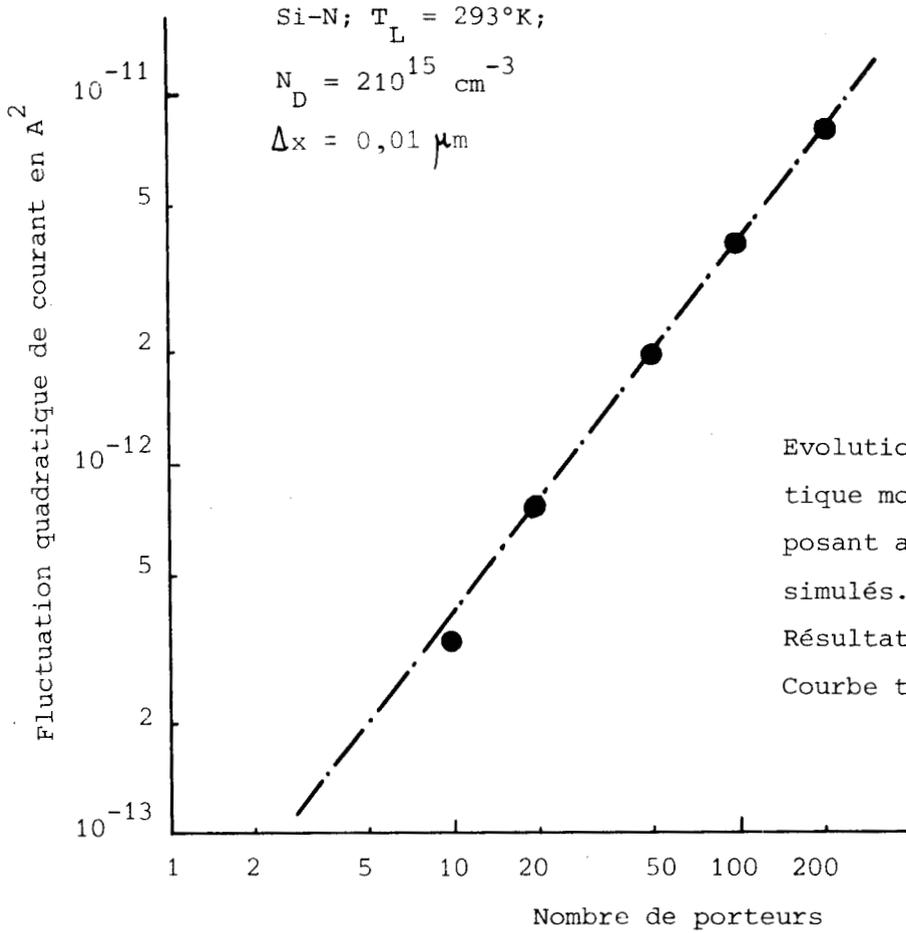


FIGURE 3,16

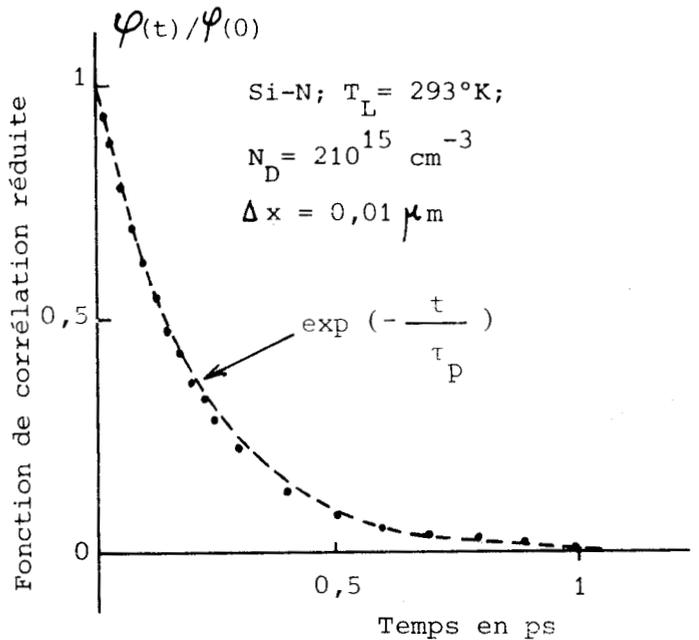
Evolution de la fluctuation quadratique moyenne du courant dans le composant avec le nombre de porteurs simulés.

Résultats Monte Carlo: ●

Courbe théorique en traits mixtes.

FIGURE 3,17

Evolution de la fonction de corrélation en courant. Les points sont les résultats Monte Carlo; la courbe théorique figure entrainés interrompus.



nalité entre $\langle \delta I^2 \rangle$ et n_e nous représentons sur la figure 3.16 l'évolution de $\langle \delta I^2 \rangle$ avec n_e dans le cas où $N_D = 2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. On remarque que lorsque n_e est plus grand que 20 les points obtenus à partir de la simulation s'alignent sur la droite théorique, donc que $\langle \delta I^2 \rangle$ varie proportionnellement avec n_e comme le prévoit la relation (3,33).

La figure 3.17 présente la fonction de corrélation réduite correspondante obtenue avec $n_e = 20$ porteurs. On peut constater que cette fonction est très proche d'une exponentielle décroissante avec la constante de temps τ_p , temps de relaxation moyen des porteurs, et non τ_o comme dans le cas du bruit en tension. Le temps de relaxation diélectrique τ_o n'influe pas sur le comportement spectral du bruit en courant. Le rapport existant entre $S_V(f)$ et $S_I(f)$ ne traduit que l'influence de l'impédance différentielle du composant puisque d'après le théorème de Langevin nous avons

$$S_V(f) = |Z(f)|^2 S_I(f) \quad (3,34)$$

III.5. ETUDE DU BRUIT THERMIQUE DE PORTEURS CHAUDS.

Nous présentons maintenant quelques résultats sur une structure dont la géométrie a été montrée sur la figure 3.4. Le profil de concentration en impuretés est indiqué sur la figure 3.18. Nous y avons aussi présenté les profils de champ électrique et de concentration en porteurs libres pour trois valeurs différentes de la tension de polarisation. Ces résultats sont présentés sur un composant de dopage relativement faible de manière à limiter le nombre de porteurs simulés à une valeur raisonnable (quelques centaines). Il en résulte que les gradients de champ électrique restent assez faibles, et que les effets de relaxation d'énergie sont eux aussi assez limités. Sur la figure 3.19 nous avons représenté la caractéristique courant-tension de cet échantillon et l'avons comparée à celle fournie par la résolution des équations électrocinétiques. On notera le bon accord quantitatif obtenu entre les résultats donnés par la simulation Monte Carlo et ceux donnés par la théorie électrocinétique.

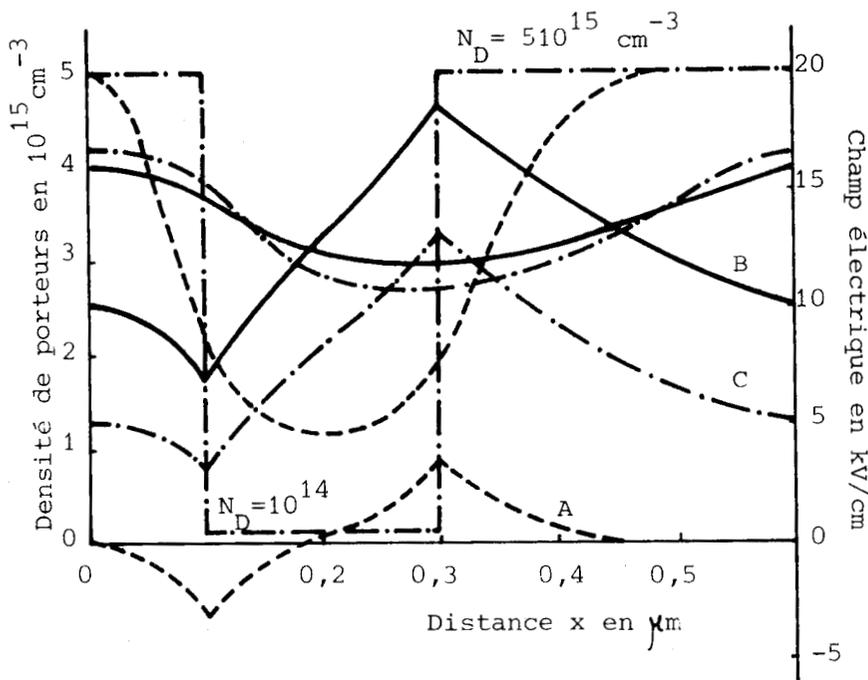


FIGURE 3,18

Profils du champ électrique et de la densité de porteurs calculés pour trois valeurs de tension de polarisation de l'échantillon.

FIGURE 3,19

Caractéristique statique $I_0(V_0)$ du même échantillon.

Résultats Monte Carlo: \diamond

Les résultats de l'électrocinétique sont donnés par la courbe pleine.

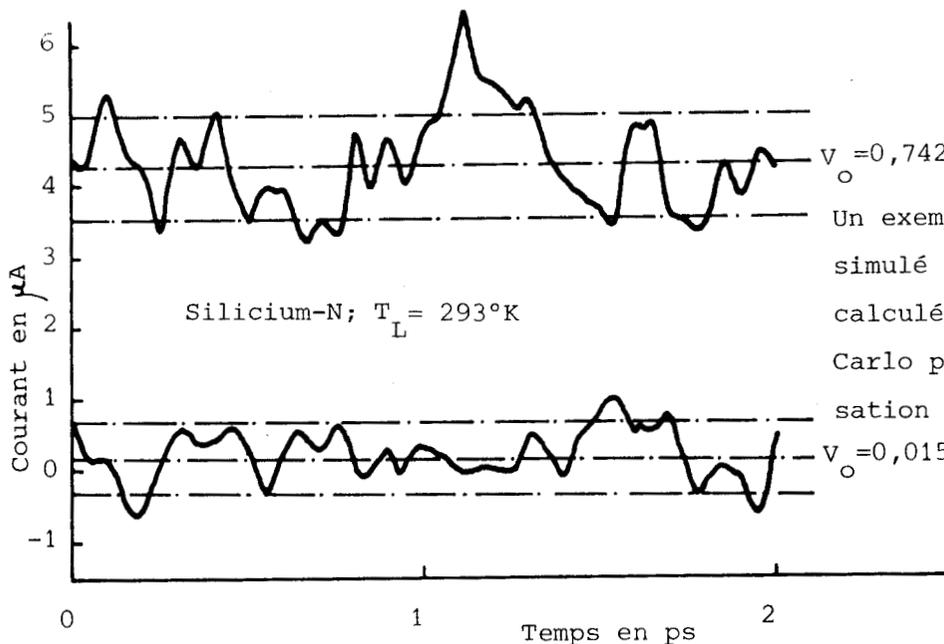
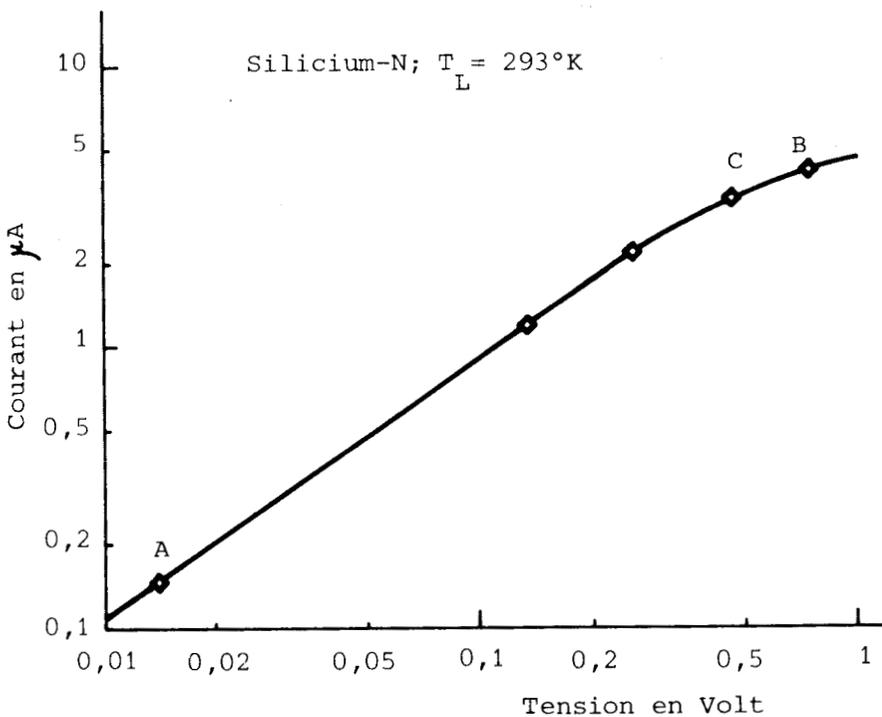


FIGURE 3,20

Un exemple d'histoire du courant simulé fluctuant dans l'échantillon calculé par la méthode de Monte-Carlo pour deux tensions de polarisation appliquée au composant.

BUS LILLE

Sur la figure 3.20 nous montrons une partie de l'histoire du courant $I(t)$ traversant le composant, lorsqu'il est polarisé à tension constante. La section présentée ici a une durée de 2 picosecondes et est extraite d'une histoire qui dure plus de 100 picosecondes.

On observera les fluctuations significatives du courant de part et d'autre de la valeur du courant moyen calculé à tension constante. Les deux cas présentés ici concernent le point A de la caractéristique (figure 3.19) correspondant au régime ohmique et le point B correspondant à une tension de 0,742 volt. Le courant moyen indiqué sur la figure a été intégré dans le temps sur l'histoire totale .

Sur la figure 3.21 nous montrons deux exemples des fonctions de corrélation du courant calculées aux points de polarisation B et C. On remarque le changement de signe très marqué de ces fonctions de corrélation. Les spectres correspondants sont tracés sur la figure 3.22. Ceux-ci présentent une forme caractéristique "en cloche" ainsi que peuvent le laisser prévoir les formes particulières des fonctions de corrélation. Concernant le bruit, quelques paramètres intéressants à connaître sont l'intensité spectrale en basse fréquence $S_I(0)$ et la température équivalente T . $S_I(0)$ est lié au temps de corrélation τ_{N_I} et aux fluctuations quadratiques N_I par N_I

$$S_I(0) = \langle \delta I^2 \rangle \tau_{N_I} \tag{3,35}$$

où τ_{N_I} a pour valeur

$$\tau_{N_I} = \int_0^\infty \phi_I(t) / \phi_I(0) dt \tag{3,36}$$

$S_I(0)$ dépend bien entendu du courant de polarisation. La température équivalente de bruit T_N peut également être calculée par la relation

$$T_N(V;f) = \frac{S_I(V;f)}{4k_B G(V;f)} \tag{3,37}$$

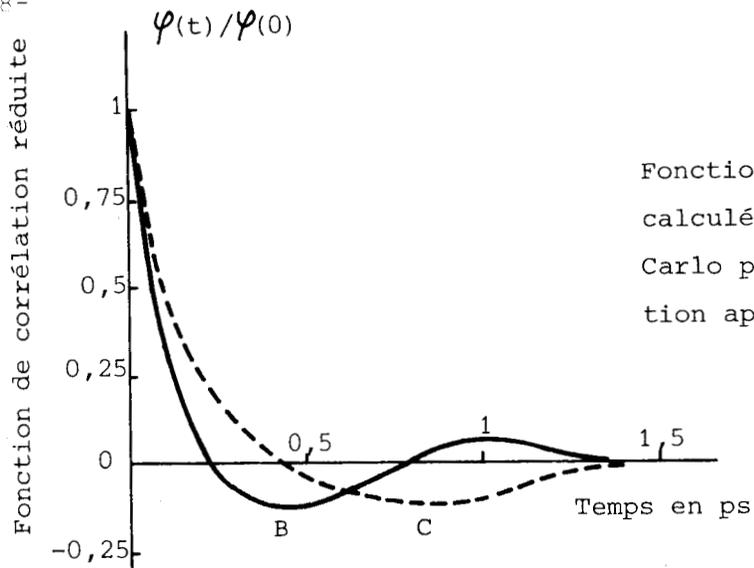


FIGURE 3,21

Fonctions de corrélation du courant calculées par la simulation de Monte Carlo pour deux tensions de polarisation appliquées à l'échantillon.

FIGURE 3,22

Spectres de bruit en courant correspondant aux fonctions de corrélation de la figure 3.21.

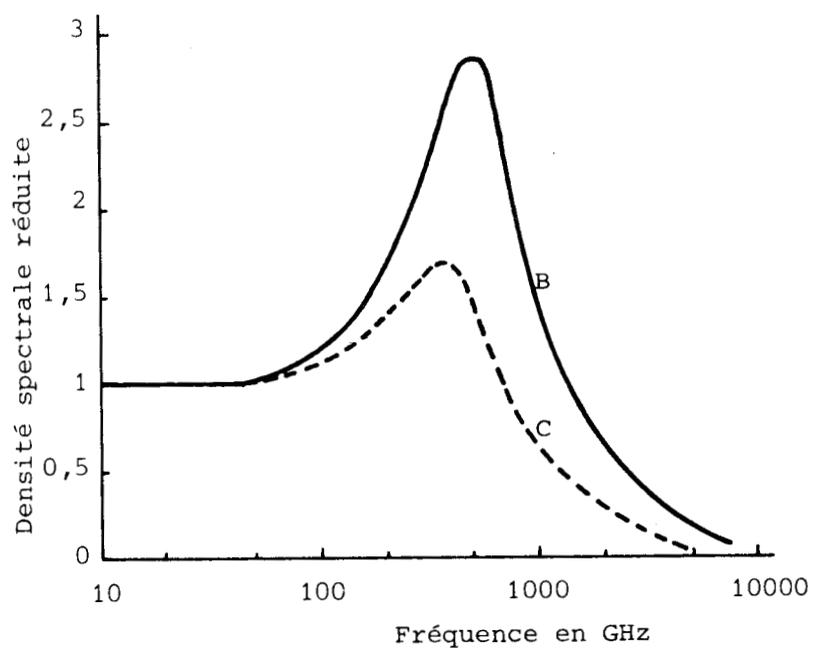
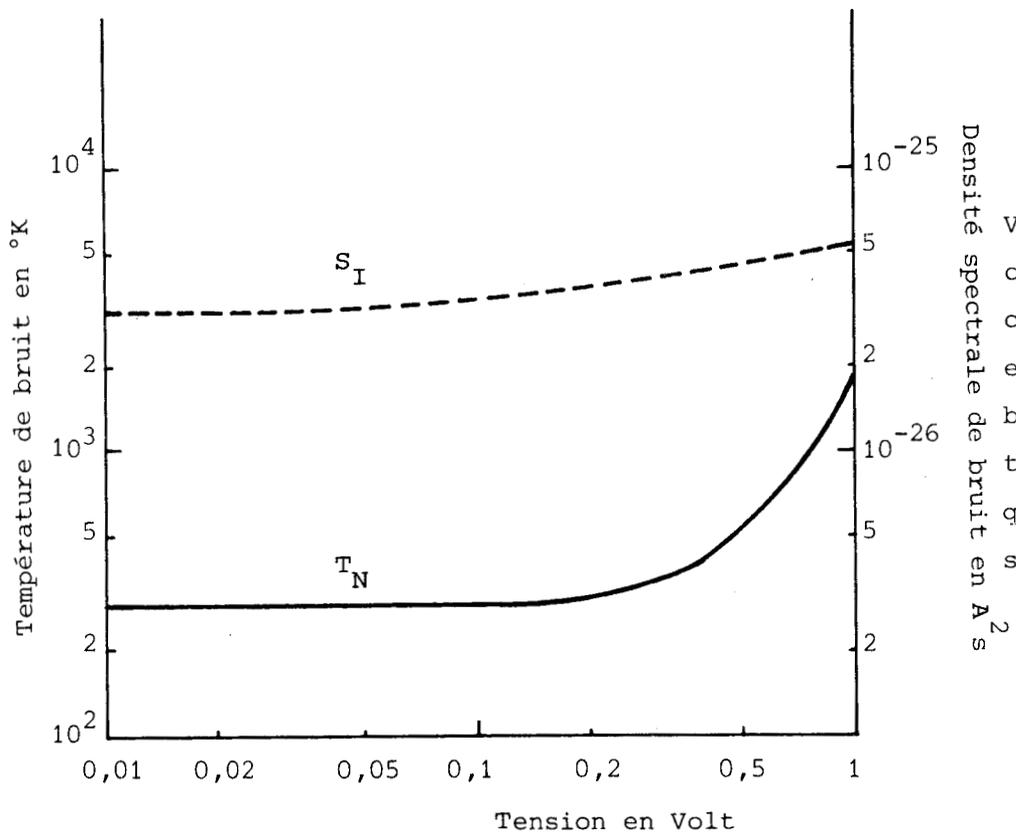


FIGURE 3,23



Variations de la puissance spectrale de bruit en courant à basse fréquence et de la température de bruit équivalente en fonction de la tension appliquée aux bornes du composant de la figure 3,18.



où $G(V;f)$ est la conductance petit signal du composant qui dépend du point de polarisation et de la fréquence. En basse fréquence G est donnée simplement par la pente de la caractéristique statique du composant. Nous présentons sur la figure 3.23 les deux paramètres $S_I(0)$ et $T_N(f=0)$ en fonction de la tension de polarisation appliquée au composant de la figure 3.18.

La quantité T_N peut être en principe mesurée expérimentalement pourvu que l'on dispose d'un échantillon correspondant au cas étudié dans la simulation.

On peut se poser la question de savoir ce qui conditionne la dépendance en fréquence des spectres présentés ici figure 3.22. En fait, on peut compter trois phénomènes dont les effets superposés induisent des spectres de formes compliquées:

- tout d'abord, existe l'effet de relaxation diélectrique qui joue un rôle, sur le spectre en courant, quand on polarise l'échantillon
- ensuite, il y a l'effet de la fréquence de coupure de la mobilité des porteurs. Il n'est pas nécessairement le même en tout point de l'échantillon et son analyse est certainement difficile
- enfin, existe l'effet du temps de transit des porteurs qui se traduit par une dépendance périodique du spectre de bruit avec la fréquence.

L'étude détaillée de ces différents effets sur les spectres obtenus par simulation est sans doute à la portée de la méthode présentée ici. Elle nécessiterait des temps de calcul très importants. Par ailleurs, il est peu probable qu'un tel travail mène à des conclusions très nettes en ce qui concerne la physique des phénomènes. Nous avons préféré montrer dans le cadre de ce travail que le calcul complet du bruit de diffusion dans des composants N^+NN^+ est possible par la méthode de Monte Carlo et qu'en particulier on peut accéder à la température équivalente de bruit de l'échantillon qui est un des paramètres les plus fondamentaux pour le calcul des performances de bruit de dispositifs semiconducteurs.

CONCLUSION

Au cours de ce chapitre nous nous sommes efforcés d'étudier dans quelle mesure la simulation de type Monte Carlo peut être utilisée pour le calcul et l'étude des propriétés de bruit de composants réels.

Deux méthodes possibles permettant de tenir compte de la réaction de charge d'espace ont été présentées et développées en détail.

Une première possibilité consiste à intégrer l'équation de Poisson en ne simulant que le mouvement d'un seul électron. Cette méthode permet de calculer les caractéristiques statiques des composants et nous l'avons utilisée pour étudier les limites de validité des équations classiques de l'électrocinétique.

Une deuxième façon de tenir compte de la réaction de charge d'espace consiste à simuler plusieurs porteurs simultanément. Nous pouvons calculer soit le spectre de bruit en tension à courant constant, soit le spectre de bruit en courant à tension constante. La méthode proposée a été vérifiée tout d'abord par le calcul du bruit thermique de structures homogènes et a permis de mettre en évidence l'influence du temps de relaxation du moment des porteurs sur le comportement spectral de ce bruit. Ensuite nous nous sommes intéressés à des structures N^+NN^+ et nous avons montré que le calcul des fonctions de corrélation et de la température de bruit pouvait être mené à terme.

A la lumière des résultats obtenus, la méthode de Monte Carlo pourrait constituer une méthode d'étude particulièrement puissante de toutes les propriétés des composants. En effet, elle nous permet de tenir compte en pratique de tous les effets se produisant dans un composant et de calculer aussi bien les propriétés statiques et dynamiques que les phénomènes de bruit. Seuls les possibilités et les coûts des calculateurs actuels limite l'utilisation intensive d'une telle méthode et explique le caractère sans doute encore quelque peu incomplet des études effectuées dans ce chapitre.

RÉFÉRENCES DU CHAPITRE 3

- [1] P.J. PRICE, dans *"Semiconductors and Semimetals"*, Volume 14, Academic Press (1979).
- [2] P.A. LEBWOHL, P.J. PRICE, *Applied Physics Letters*, Volume 19, p. 530 (1971).
- [3] M. ABE, S. YANAGISAWA, O. WADA, H. TAKANASHI, *Japanese Journal of Applied Physics*, Volume 14, p. 70 (1975).
- [4] G. AERS, A.D. BOARDMAN, E.D. ISAAC, *Physica Status Solidi A*, Volume 36, p. 357 (1976).
- [5] R.A. WARRINER, *Solid -State and Electron Devices*, Volume 1, p. 97 (1977).
- [6] R.W. HOCKNEY, R.A. WARRINER, M. REISER, *Electronics Letters*, Volume 10, p. 484 (1974).
- [7] R.A. WARRINER, *Solid-State and Electron Devices*, Volume 1, p. 105 (1977).
- [8] C. MOGLESTUE, *"Solid-State and Electron Devices*, Volume 3, p. 133 (1979).
- [9] B. BOITTIAUX, *Thèse d'Etat*, Lille (1978).
- [10] J. ZIMMERMANN, S. BONFILS, Y. LEROY, E. CONSTANT, *Applied Physics Letters*, Volume 30, p. 245 (1977).
- [11] B. BOITTIAUX, Y. BECQUELIN, J.M. JENDRZEJCZAK, E. CONSTANT, *Revue de Physique Appliquée*, Volume 12, p.1663 (1977).
- [12] G. BACCARANI, C. JACOBONI, A.M. MAZZONE, *Solid-State Electronics*, volume 20, p. 5 (1977).
- [13] W. SHOCKLEY, J.A. COPELAND, R.P. JAMES, *Quantum Theory of Atoms Molecules and the Solid-State*, Academic Press (1966).
- [14] M.S. SHUR, L.F. EASTMAN, à paraître dans *IEEE Trans. on Electron Devices*.
- [15] J.P. NOUGIER, *Cours de D.E.A. sur le bruit de fond*, Université de Montpellier, (1975).
- [16] J. ZIMMERMANN, Y. LEROY, A. KASZYNSKI, B. CARNEZ, *Springer Series in Electrophysics*, Volume 2, p. 101 (1978).
- [17] J. ZIMMERMANN, E. CONSTANT, *Solid-State Electronics* (sous presse).

CHAPITRE 4

POSSIBILITES NOUVELLES DES METHODES DE MONTE CARLO.

Etude prospective de quelques futures applications.

INTRODUCTION

Dans l'introduction générale et au cours des trois chapitres précédents, nous avons tâché de montrer que la méthode de Monte Carlo peut répondre, parfois assez aisément, non seulement à nombre de questions concernant la dynamique électronique dans les matériaux semiconducteurs mais peut permettre aussi d'explorer cette dynamique au niveau microscopique (interactions électron-phonon, masses effectives).

Cette méthode présente de plus l'intérêt de pouvoir étudier des problèmes plus complexes comme la simulation de composants et fournir des résultats intéressants à l'échelle macroscopique. Jusqu'à présent, nous n'avons abordé que la simulation de composants unidimensionnels, mais la simulation bidimensionnelle de composants est tout à fait possible au seul prix d'une certaine complication due à la nécessité de tenir compte de l'équation de Poisson à deux dimensions.

Cependant, malgré l'important développement qu'a connu la méthode de Monte Carlo durant ces dernières années, un certain nombre de problèmes liés à la dynamique microscopique restent encore assez peu ou pas explorés. Parmi les domaines que l'on peut considérer comme des possibilités d'avenir pour cette méthode les plus intéressants sont sans doute les suivants:

- en premier lieu nous pouvons citer l'étude des effets de surface, c'est-à-dire l'étude des propriétés de transport de porteurs en mouvement au voisinage immédiat d'une surface séparant le milieu semiconducteur et un autre milieu où les porteurs ne peuvent pas se propager (air, oxyde SiO_2 par exemple). Cette étude peut en particulier être effectuée lorsque les porteurs sont soumis simultanément à l'influence d'un champ de dérive parallèle à la surface et à un champ répulsif ou attractif perpendiculaire au précédent et qui peut résulter de la polarisation appliquée à la grille d'un transistor à effet de champ à grille isolée (MOSFET) ou non (FET).

- en second lieu, nous pouvons citer l'étude de l'interaction entre porteurs due aux attractions binaires coulombiennes existant entre ceux-ci lorsqu'ils sont en densité suffisante. Ce phénomène est à distinguer de la réaction de charge d'espace qui ne tient compte que du champ moyen agissant sur les porteurs,

- en troisième lieu, citons la simulation du phénomène d'ionisation par choc qui pourrait être introduit comme un phénomène de collision supplémentaire. De cette façon, il doit être possible de simuler, par exemple, une diode à avalanche au niveau microscopique en tenant compte exactement de tous les détails liés au transit et à la génération de porteurs dans la zone d'émission de champ,

- enfin, indiquons la possibilité de simuler en même temps par la méthode de Monte Carlo le mouvement des électrons et des trous de composants bipolaires et d'étudier ainsi des éléments du type des diodes ATT dont les dimensions sont souvent largement submicroniques.

Dans ce chapitre nous ne faisons qu'évoquer les trois derniers points. Nous approfondirons un peu plus le premier en étudiant l'influence de la surface sur la mobilité tangentielle des porteurs, en tenant compte également de l'accumulation de porteurs en surface permettant ainsi de faire une première approche de la simulation bidimensionnelle des propriétés électriques des MOSFET en régime d'inversion de porteurs chauds.

I. ETUDE DES EFFETS DE SURFACE

Dans ce qui suit nous étudions deux manifestations particulières des effets de surface :

- a) La diminution de la mobilité des porteurs au voisinage d'une surface. Cet effet résulte de ce que les porteurs se déplaçant au voisinage de celle-ci, dans leur mouvement aléatoire, sont réfléchis à l'intérieur du volume du semi-conducteur en subissant à chaque fois une collision tendant à redistribuer aléatoirement leur vitesse, et diminuant ainsi leur vitesse moyenne.
- b) L'accumulation de charges sur une surface quand on applique sur celle-ci un champ électrique ayant tendance à attirer les porteurs (accumulation avec inversion), simulant ainsi des phénomènes de conduction analogues à ceux existant dans un transistor à effet de champ à grille isolée. Les porteurs subissent en même temps les effets décrits en a), mais créent aussi un phénomène de charge d'espace et de conduction en surface typique des porteurs en régime d'inversion.

I.1. EFFET D'UNE SURFACE SUR LA MOBILITE DES PORTEURS.

Historiquement Fuchs [13] fut le premier à présenter une théorie quantitative permettant de tenir compte des phénomènes de conduction au voisinage d'une surface et l'appliqua à l'étude de films métalliques fins. Concernant l'interaction du porteur avec la surface, deux modèles de collision ont été considérés :

- a) la collision est spéculaire : la surface se comporte comme un miroir parfait vis à vis du vecteur vitesse du porteur assimilé à un rayon lumineux au voisinage du point d'impact. La collision considérée comme élastique provoque seulement le changement de signe de la composante de vitesse perpendiculaire à la surface.
- b) La collision est diffuse : à l'instant de la collision et au point d'impact le vecteur vitesse est réfléchi à l'intérieur du cristal de façon parfaitement aléatoire, énergétiquement la collision étant considérée comme élastique.

Fuchs exprime ces deux extrêmes en introduisant une condition aux limites : la partie non symétrique f_1 de la distribution des porteurs se situant à la surface est telle que (Oy est la direction perpendiculaire à la surface)

$$f_1(v_y) = (1-p)f_1(-v_y) \text{ en } y = 0$$

la limite $p = 0$ correspond à une collision spéculaire parfaite alors que la limite $p=1$ correspond à une collision diffuse parfaite. Le paramètre p est un paramètre phénoménologique choisi de telle sorte que les résultats théoriques et les résultats expérimentaux soient dans le meilleur accord possible. Un article de synthèse sur ce sujet est dû à Greene [14].

En réalité la situation est un peu plus compliquée car l'éventualité qu'une collision en surface soit spéculaire ou diffuse dépend de la façon dont se présente la vitesse du porteur par rapport à la surface. Ainsi un porteur dont la trajectoire arrive à la surface avec une incidence rasante a de très fortes chances d'être réfléchi spéculairement. Par contre un porteur arrivant en incidence proche de la normale a de fortes chances d'être réfléchi de façon diffuse. L'angle d'incidence joue donc un rôle sur la valeur de p . La qualité de la surface joue aussi un rôle sur la valeur p , une surface unie favorisant les collisions spéculaires [15]. La prise en compte de ces phénomènes en régime de porteurs chauds dans les semiconducteurs n'est pas aisée. Par contre, dans une simulation de Monte Carlo ceci ne présente pas de difficultés particulières une fois que le mécanisme de collision de surface est choisi.

En pratique nous opérons de la façon suivante. Nous considérons un film d'épaisseur W constitué du matériau semiconducteur étudié. Les faces du film sont supposées parfaites et dans le cas présent sont des surfaces $\langle 100 \rangle$. Nous supposons que le champ électrique auquel sont soumis les porteurs est appliqué parallèlement aux faces du film selon une des directions $\langle 100 \rangle$ qui est repérée par $O\vec{x}$. La direction $O\vec{y}$ perpendiculaire à $O\vec{x}$ est également une direction $\langle 100 \rangle$ et est perpendiculaire aux faces du film (figure 4.1).

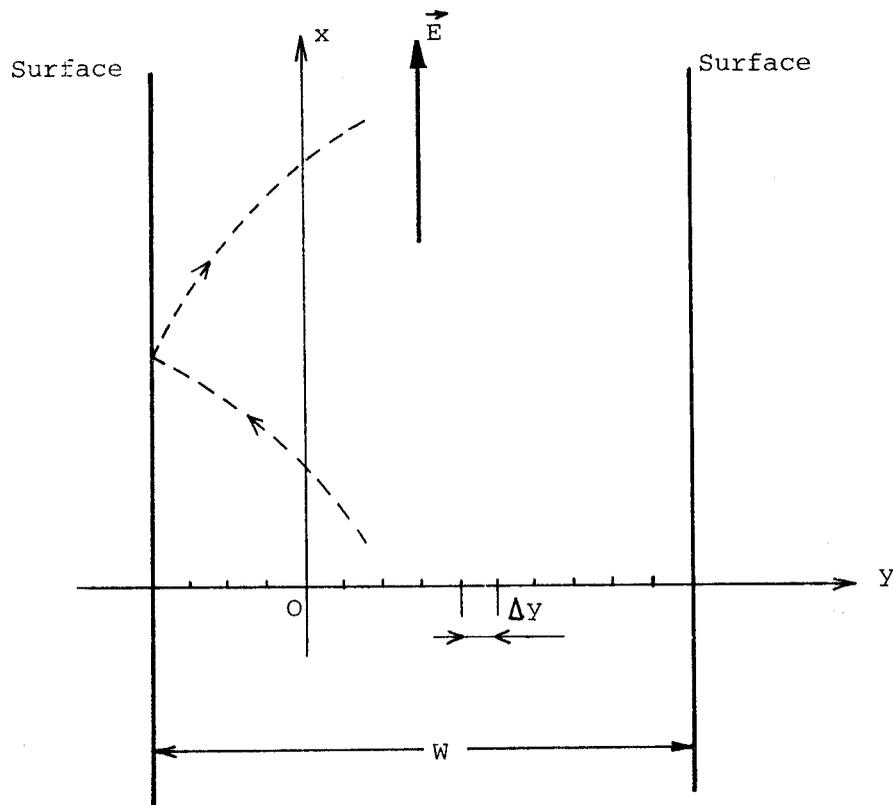


FIGURE 4,1

Le champ électrique E qui est le seul à être appliqué dans le cas présent est supposé homogène dans tout le film. Nous étudions l'évolution de la vitesse de dérive des porteurs soumis au champ E en fonction de l'éloignement par rapport aux surfaces externes du film. Pour cela nous divisons le film en tranches d'égalles épaisseurs Δy parallèles aux faces du film. La vitesse de dérive en chaque tranche est obtenue en moyennant les valeurs instantanées de la vitesse du porteur à chaque fois que celui-ci se situe dans la tranche à laquelle on s'intéresse. Lorsque le porteur atteint l'une ou l'autre des deux surfaces on suppose qu'il est réfléchi de façon diffuse vers l'intérieur du film. On comprend dès lors pourquoi l'interaction du porteur avec les surfaces aura pour résultat de provoquer une diminution de la vitesse de dérive des porteurs. Par contre si l'on se place en un point suffisamment éloigné de la surface on devra observer une vitesse de dérive égale à celle des porteurs en volume.

Nous montrons quelques résultats sur la figure 4.2. Nous avons envisagé des films d'épaisseurs diverses et nous avons représenté la décroissance de la vitesse de dérive en fonction de la distance à la surface pour deux valeurs de champ \vec{E} appliqué. De cette figure deux constatations peuvent être faites:

- premièrement, la vitesse de dérive au centre du film est d'autant plus petite que celui-ci est étroit. Les résultats présentés ici concernent une moitié du film, étant donnée la symétrie du problème, le centre étant indiqué à chaque fois par une flèche;

- deuxièmement, la décroissance de la vitesse de dérive au voisinage de la surface semble être à peu près indépendante de l'épaisseur du film. En effet, on constate que les résultats obtenus pour $W = 0,01 \mu\text{m}$, $W = 0,02 \mu\text{m}$ et $W = 0,04 \mu\text{m}$ sont sensiblement identiques à l'incertitude statistique près.

Par une démarche similaire, nous pouvons nous intéresser à l'influence de la surface sur le phénomène de survitesse. Parce que nous disposons un grand nombre de porteurs froids (vitesse moyenne nulle, énergie moyenne égale à celle du réseau) sur la ligne $x = 0$ avec une distribution uniforme selon Oy . La vitesse moyenne est calculée à chaque instant à partir des vitesses instantanées de l'ensemble des porteurs qui sont dans la tranche à laquelle on s'intéresse. Un résultat est présenté sur la figure 4.3 dans le cas d'un film d'épaisseur $W = 0,04 \mu\text{m}$. On constate, d'une part, que l'on retrouve au centre du film un phénomène de survitesse proche de celui que l'on peut obtenir dans un matériau en volume, d'autre part, la proximité de la surface peut affecter assez fortement les valeurs du maximum de vitesse ainsi que le temps nécessaire aux porteurs pour atteindre leur régime d'équilibre (les distances y indiquées sur la figure 4.3 représentent la distance séparant les porteurs de la surface).

I.2. ETUDE DES PARAMETRES DE TRANSPORT DE PORTEURS CHAUDS EN REGIME D'INVERSION.

Nous considérons une structure métal-isolant-semiconducteur telle que celle de la figure 4.4. Nous supposons que le semiconducteur est du type P. Il contient à l'équilibre thermodynamique N_A trous et n_1^2/N_A électrons mobiles par unité de volume. Si nous portons le métal à un potentiel positif par rapport au semiconducteur, au champ créé dans l'oxyde correspond un champ dans le semiconducteur qui

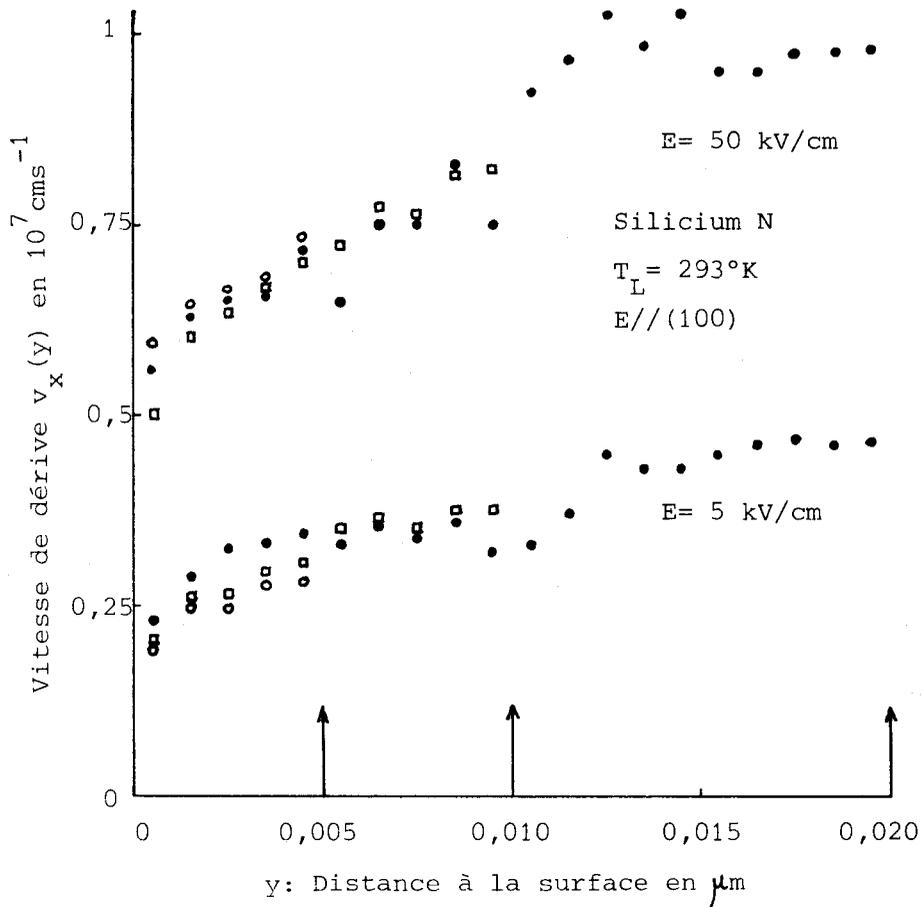


FIGURE 4,2

Diminution de la vitesse de dérive à proximité de la surface pour trois films d'épaisseur différente.

- $W = 0,04 \mu\text{m}$; □ $W = 0,02 \mu\text{m}$; ○ $W = 0,01 \mu\text{m}$

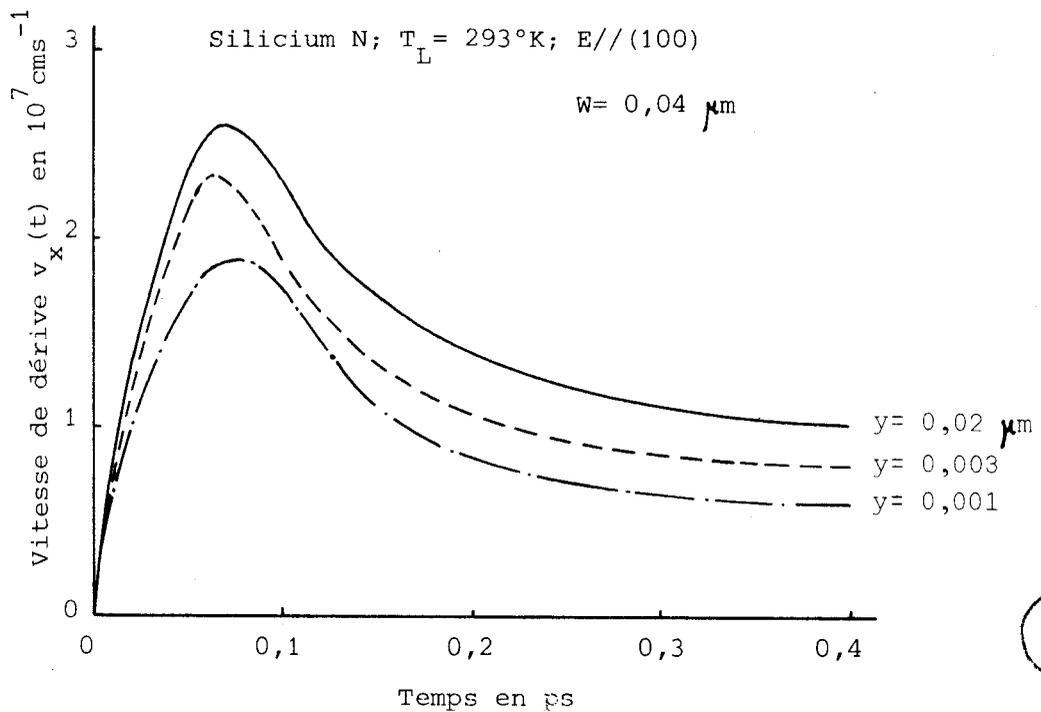


FIGURE 4,3

Evolution de l'effet de survitesse ($E(t) = 0-100 \text{ kV/cm}$) avec y , proximité de la surface. — $y = 0,02 \mu\text{m}$; - - - $y = 0,003 \mu\text{m}$; — . — $y = 0,001 \mu\text{m}$. La courbe correspondant à $y = 0,02 \mu\text{m}$ est identique (à 3% près) à celle obtenue dans le matériau en volume en absence de surface.



va repousser les trous vers l'intérieur du volume du semiconducteur. Par contre les électrons mobiles vont s'accumuler à la surface séparant l'isolant du semiconducteur. Si le potentiel appliqué au métal est tel que la densité d'électrons au voisinage de la surface est égale ou supérieure à la densité de trous, on dit que les porteurs sont en régime d'inversion. Pour les tensions appliquées très supérieures au potentiel de seuil d'inversion, le semiconducteur peut être complètement déplété de ses trous mobiles. Si l'on applique aux porteurs accumulés ou inversés un champ électrique parallèle à la surface, ceux-ci se mettront en mouvement tout en restant en contact étroit avec l'interface isolant-semiconducteur. La dynamique est alors plus compliquée que celle correspondant au volume puisqu'elle doit tenir compte de l'effet de la surface, de la présence d'un champ E_y perpendiculaire à la vitesse moyenne des électrons et des imperfections liées à la présence de l'isolant.

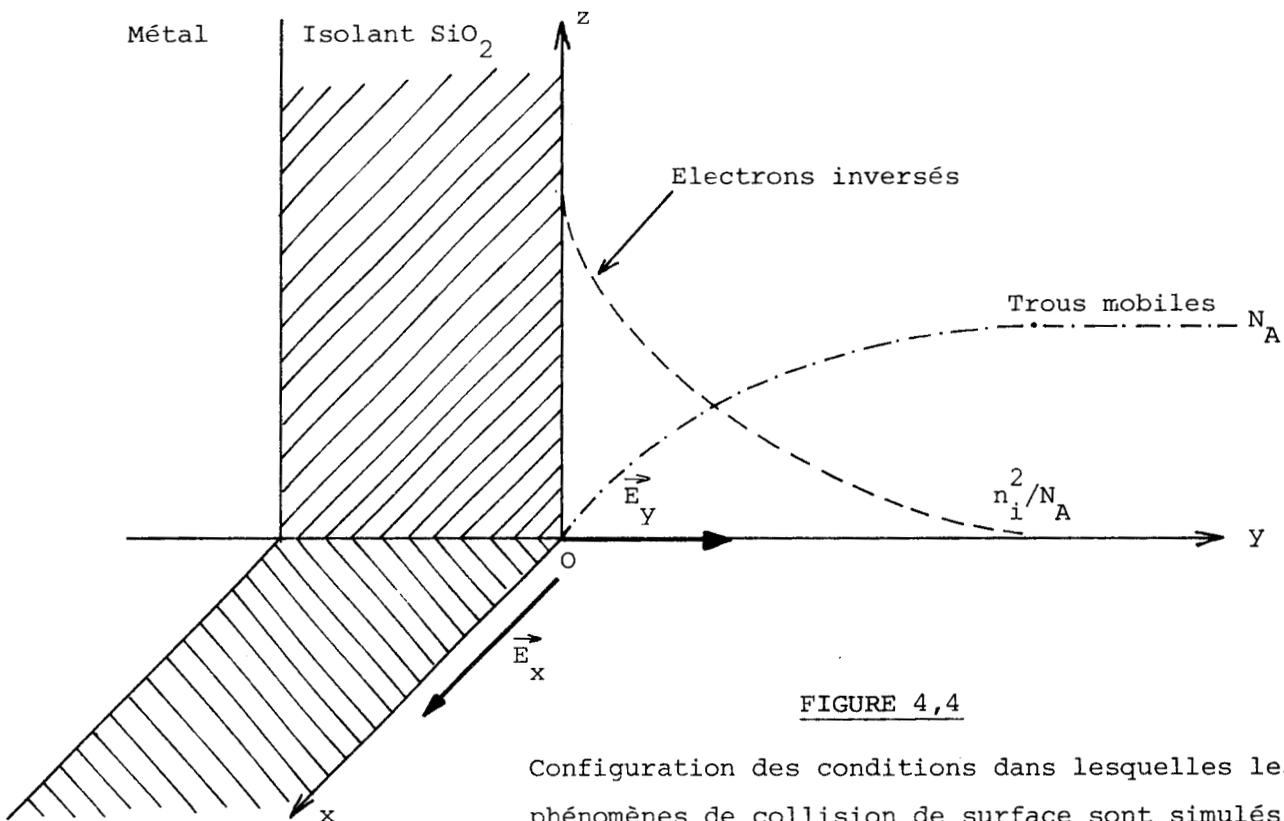


FIGURE 4,4

Configuration des conditions dans lesquelles les phénomènes de collision de surface sont simulés par la méthode de Monte Carlo (la surface réfléchissante est le plan xOz).

La situation qui vient d'être décrite est typiquement celle qui se présente dans un transistor à effet de champ à grille isolée quand on polarise positivement la grille. Le champ en surface dû à la polarisation de grille peut être de plusieurs centaines de kV/cm. Les porteurs sont alors mis en mouvement sous l'effet du champ électrique résultant de la polarisation drain-source.

Du point de vue de la physique, en régime d'inversion, les bandes d'énergie peuvent être suffisamment courbées au voisinage de la surface pour que le fond de la bande de conduction se trouve aux alentours ou plus bas que le niveau de Fermi. Les porteurs restent alors enfermés dans un puits de potentiel dans la direction y perpendiculaire à la surface, la largeur du puits étant plus petite que la longueur d'onde associée aux électrons. Les niveaux d'énergie des porteurs se regroupent en sous-bandes discrètes, l'énergie correspondant à l'agitation thermique selon y étant quantifiée. Les bandes d'énergie peuvent être représentées par des expressions du type

$$E(\vec{k}) = E_i + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_x} + \frac{k_z^2}{m_z} \right)$$

où E_i ne prend que des valeurs discrètes [16]. On peut consulter au sujet des couches d'inversion quantifiées les articles de synthèse de Ferry et Hess [17, 18].

Il existe des essais de simulation par la méthode de Monte Carlo du mouvement bidimensionnel des porteurs en régime d'inversion tenant compte d'un ou plusieurs sous-niveaux d'énergie ainsi que de l'influence des imperfections de l'oxyde et de l'interface [19, 20]. Néanmoins, malgré la complexité du modèle utilisé, la comparaison théorie-expérience n'est guère satisfaisante.

Pour cette raison nous avons cherché à réaliser la simulation de porteurs en contact avec la surface et en régime d'inversion en négligeant toutefois la quantification suivant Oy ^{→★}. Nous avons complété le modèle présenté en I.1., en tenant compte des effets de charge d'espace dans la direction y perpendiculaire à la surface, en admettant que le champ E_x parallèle à la surface reste uniforme.

★ Il est évident que cette hypothèse sera d'autant mieux vérifiée que la température du réseau est élevée et que les porteurs sont plus énergétiques.

La prise en compte du phénomène de charge d'espace n'est faite que pour calculer E_y par l'intermédiaire de l'équation de Poisson à une seule dimension. Le traitement effectué ici n'est donc que pseudo bidimensionnel, et les résultats présentés ne concernent en fait qu'une tranche du composant découpée parallèlement à la direction Oy .

Nous présentons ici quelques résultats de simulation obtenus pour des composants du type TEC à grille isolée tels que ceux étudiés expérimentalement par Coen et Muller [21]. Les vitesses de dérive ont été calculées parallèlement à l'axe du canal en fonction du champ électrique longitudinal. Nous avons effectué ces calculs dans les deux cas limites d'une collision soit totalement spéculaire soit totalement diffuse. Les vitesses de dérive ainsi calculées ont été comparées aux résultats expérimentaux des auteurs cités plus haut [21]. Remarquons qu'à la différence du cas étudié au paragraphe I.1., le calcul de E_y est effectué en prenant des intervalles ou pas Δy qui se resserrent au voisinage de la surface car la densité électronique y croît dans d'énormes proportions. En fait, la quasi totalité des porteurs simulés se trouve dans une zone de charge d'espace dont l'épaisseur n'excède guère 200\AA .

Les résultats apparaissent sur la figure 4.5 pour un champ de surface $E_S = 160 \text{ kV/cm}$, la surface étant orientée suivant la direction $\langle 100 \rangle$. On observera que sur un large domaine de champ électrique les résultats théoriques obtenus sur les deux hypothèses limites de collision encadrent les résultats expérimentaux, tendant ainsi à montrer que les collisions réelles s'effectuent à la fois comme des collisions spéculaires et des collisions diffuses. Le modèle de simulation proposé rend compte de la valeur de la mobilité ohmique, mais fournit une vitesse de saturation plus élevée que celle trouvée expérimentalement.

Les résultats obtenus par la méthode de simulation concernant le cas où le champ de surface $E_S = 470 \text{ kV/cm}$ apparaissent dans la figure 4.6. Ici aussi et plus encore que dans le cas $E_S = 160 \text{ kV/cm}$ la vitesse calculée sature beaucoup moins vite et à une valeur nettement plus élevée que celle donnée par l'expérimentation. En fait les résultats théoriques présentés ici sont acquis en supposant une structure de surface parfaite ce qui n'est certainement pas le cas dans la réalité. D'autres mécanismes d'interaction dus au phénomène de conduction en

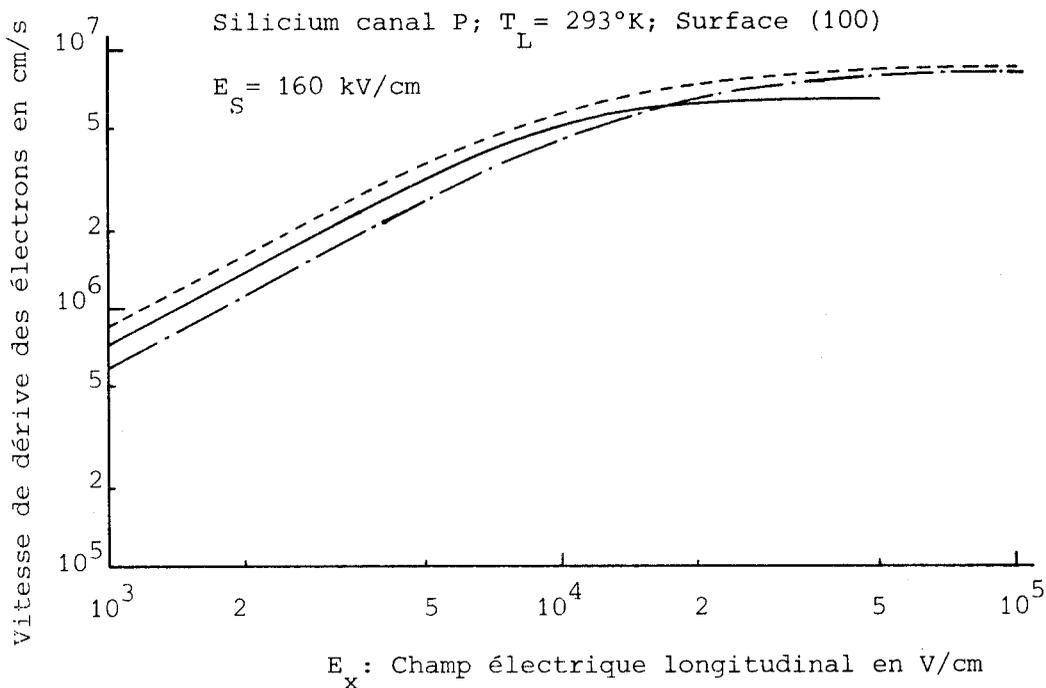


FIGURE 4,5

Vitesse de dérive des électrons en régime d'inversion en fonction du champ longitudinal parallèle à la surface. $E_S = 160 \text{ kV/cm}$. - - - - collisions spéculaires; - . - collisions diffuses; ——— courbe expérimentale d'après Coen et Muller[21].

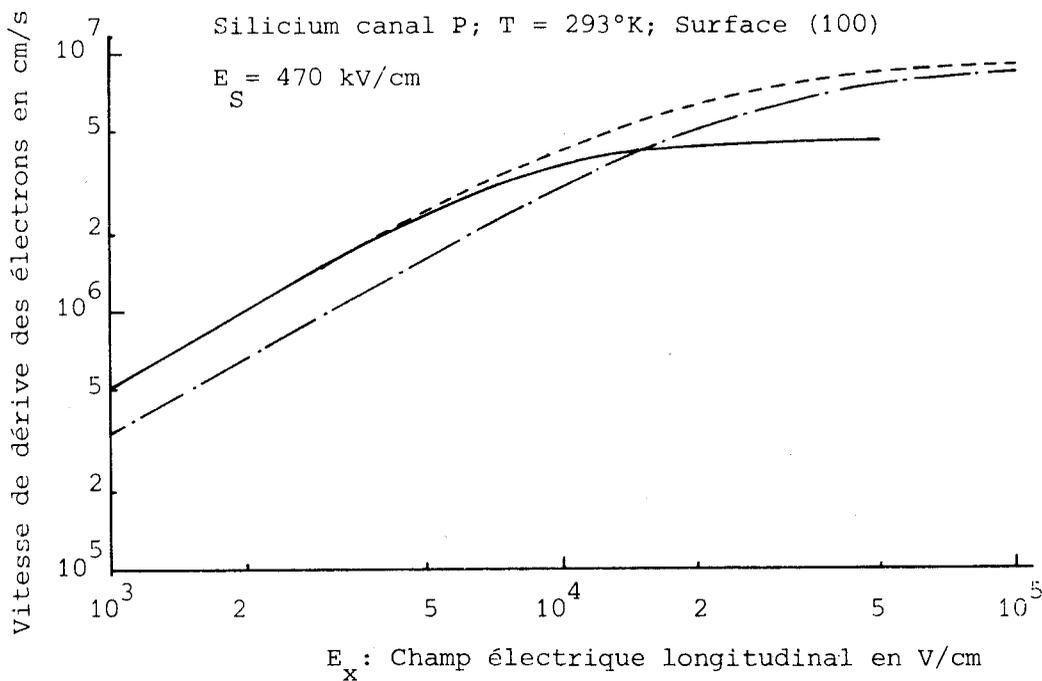


FIGURE 4,6

Vitesse de dérive des électrons en régime d'inversion en fonction du champ longitudinal parallèle à la surface. $E_S = 470 \text{ kV/cm}$. - - - - collisions spéculaires; - . - collisions diffuses; ——— Courbe expérimentale d'après Coen et Muller[21].

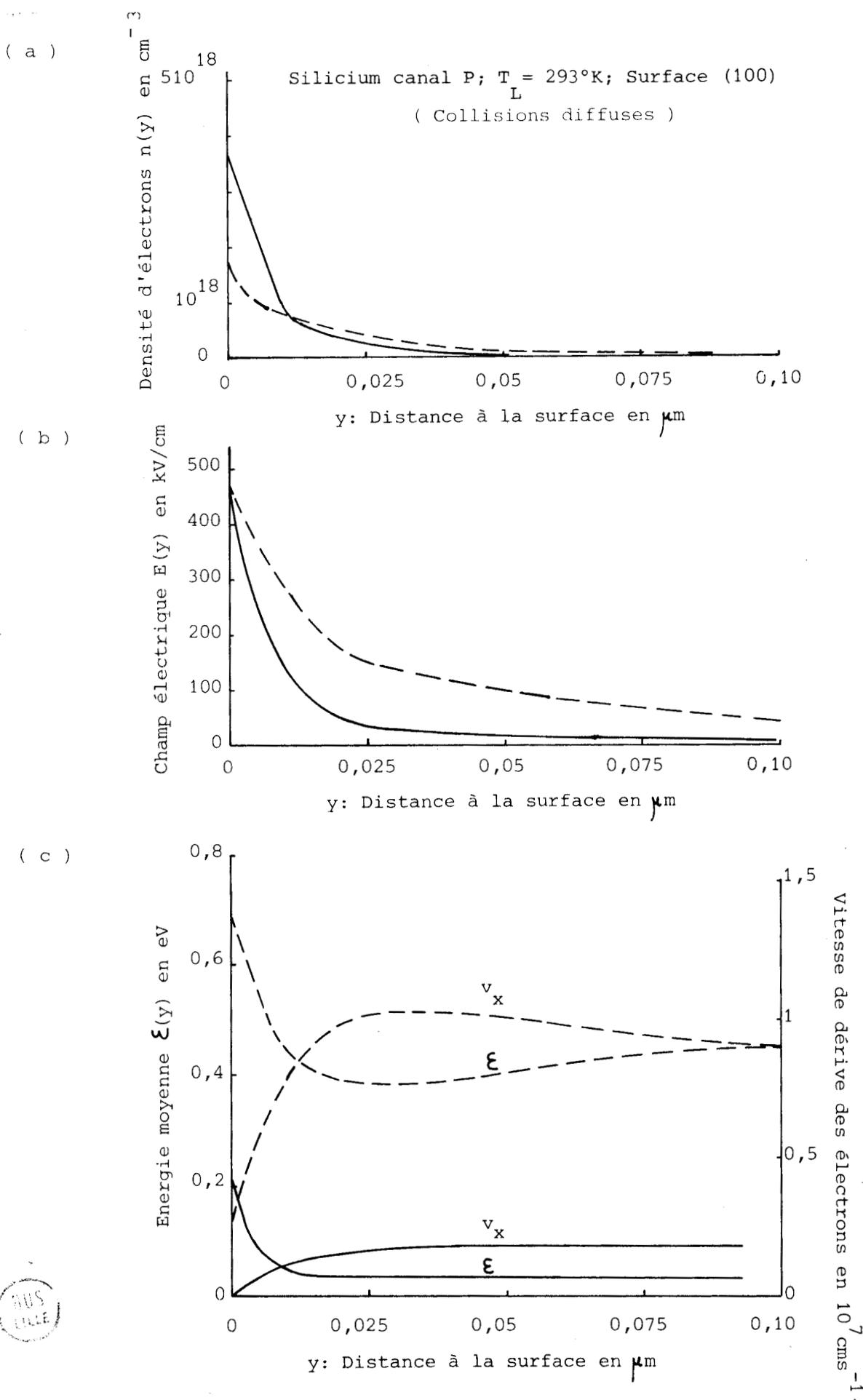


FIGURE 4,7

Evolution de quelques grandeurs avec la distance à la surface. En (a) densité d'électrons inversés, en (b) champ électrique transversal, en (c) énergie moyenne et vitesse de dérive longitudinale. Toutes les courbes sont obtenues avec $E_S = 470 \text{ kV/cm}$. Les traits pleins sont pour $E_x = 2 \text{ kV/cm}$, les traits pointillés sont pour $E_x = 100 \text{ kV/cm}$.

surface (comme les collisions sur charges-oxyde) devraient modifier les résultats de façon plus ou moins forte si l'on en tenait compte dans notre modèle et pourraient peut-être expliquer la forte saturation observée expérimentalement. De plus, les collisions sur la surface elles-mêmes pourraient être quelque peu différentes de celles que nous avons simulées ici en ce sens qu'elles pourraient ne pas être instantanées, le porteur étant en quelque sorte piégé à la surface durant la collision donnant alors une contribution très faible à la vitesse de dérive durant un certain temps. Ce phénomène aurait pour effet de provoquer une diminution de la mobilité. Il faut par ailleurs signaler que les caractéristiques expérimentales $v(E)$ mesurées par Coen et Muller sont entièrement extrapolées pour les champs électriques supérieurs à 20 kV/cm. Le phénomène de saturation de vitesse très marqué qu'ils ont trouvé n'est donc pas réellement une évidence expérimentale.

Nous avons reporté sur la figure 4.7 les profils de concentration en porteurs et de champ électrique obtenus par la simulation de Monte Carlo dans le cas où les porteurs transitent en régime de mobilité et dans le cas où ils transitent à leur vitesse limite. Les résultats reportés correspondent à une même valeur du champ appliqué dans l'oxyde et dans le semiconducteur à l'interface. On observe qu'à champ E_x très fort les porteurs ont tendance à s'étendre plus loin à l'intérieur du semiconducteur que lorsqu'ils sont en régime de mobilité. Cet effet semble lié à l'augmentation de l'agitation thermique des porteurs qui est beaucoup plus grande en régime de champ fort. Il en résulte que le profil de champ électrique selon la direction y peut être lui aussi profondément modifié.

Nous avons reporté également sur la figure 4.7 les profils d'énergie et de vitesse (selon \vec{Ox}) des porteurs en fonction de la profondeur y dans les mêmes conditions de polarisation que précédemment. Si l'on examine le profil d'énergie on remarque que les porteurs en surface sont légèrement échauffés par rapport à l'énergie moyenne de l'ensemble des porteurs tandis que ceux qui se trouvent légèrement en retrait de la surface sont un peu moins chauds. Par contre on note une diminution régulière de la vitesse de dérive quand on se rapproche de la surface.

Un prolongement des études qui viennent d'être présentées ici serait de prendre en compte plus complètement et de façon plus réaliste les charges présentes dans l'oxyde. Il faut en outre signaler la possibilité de simuler le fonctionnement d'un transistor à effet de champ à grille isolée par une méthode bidimensionnelle plus rigoureuse. Pour ce faire on devrait résoudre l'équation de Poisson à deux dimensions avec les conditions aux limites adéquates concernant les potentiels à la source et au drain et les champs de surface sur la grille. On pourrait alors obtenir des résultats intéressants sur les effets purement bidimensionnels de la conduction des porteurs en régime d'inversion.

II. L'INTERACTION ELECTRON-ELECTRON.

Un second phénomène physique important intervient souvent de façon essentielle sur les caractéristiques électroniques des semiconducteurs: il s'agit de l'interaction coulombienne entre porteurs.

Si l'on considère une population de porteurs (qui peuvent être à priori d'un seul ou de deux types) formant un milieu de densité suffisamment élevée, deux porteurs de cet ensemble peuvent être suffisamment proches l'un de l'autre pour que le champ coulombien développé suivant l'axe liant ces deux porteurs soit du même ordre de grandeur que le champ externe appliqué. Il en résultera une perturbation du mouvement des porteurs, même si par suite du caractère parfaitement stochastique de leur mouvement la résultante moyenne du champ coulombien doit être nulle.

De façon classique, on peut tenir compte de cette interaction dans la résolution de l'équation de transport de Boltzmann [3] via le calcul de la section efficace de collision. Le terme qui en résulte est non linéaire par rapport à la fonction de distribution $f(\vec{k})$ des porteurs et rend malaisée la résolution de l'équation tenant compte de cette interaction. Néanmoins il existe des travaux dans lesquels on a fait intervenir cette interaction soit par l'hypothèse d'une distribution symétrique du type $\exp(-\epsilon/k_B T_L)$ [4] soit par une résolution itérative de l'équation de Boltzmann avec quelques hypothèses simplificatrices sans grandes conséquences sur la validité des résultats [5]. Il a par ailleurs été montré que cette interaction intervient déjà de façon significative à 77° K et au-dessous lorsque la concentration en porteurs est supérieure à 10^{15} cm^{-3} dans le silicium type N. Elle joue alors un rôle important dans le phénomène d'anisotropie de la population des vallées quand le matériau est polarisé suivant les directions $\langle 100 \rangle$ ou $\langle 110 \rangle$ [4].

Indépendamment il a été supposé que, pour un matériau dont la concentration en porteurs est suffisamment élevée pour que les collisions interporteurs soient prépondérantes par rapport aux autres mécanismes de collision sur le réseau, on pouvait approximer la distribution du moment des porteurs par une maxwellienne déplacée [6, 7].

Depuis lors diverses possibilités de tenir compte de cette interaction dans une simulation de Monte Carlo ont été proposées. La première qui a été proposée [8] considère la probabilité par unité de temps que le porteur subisse une collision de ce type comme constante indépendante de l'état réel du porteur, la distribution des états accessibles par le porteur après la collision étant donnée par une distribution maxwellienne déplacée. Curby et Ferry [9] utilisent une modélisation plus fine en introduisant une probabilité de collision dépendant de l'énergie du porteur et l'ont appliquée à InSb et InAs. Ceci leur permet d'expliquer qualitativement des résultats expérimentaux de taux de génération de porteurs par ionisation par choc mesurés en fonction du champ électrique ainsi que de montrer la diminution de la mobilité des porteurs lorsque l'interaction interporteurs intervient fortement. La méthode préconisée par Matulionis [1, 10] consiste à simuler le mouvement simultané de deux électrons. Par tirage au hasard de vecteurs d'onde dans le second histogramme suivant la distribution convenable, on teste la probabilité de collision mutuelle du premier électron (associée aux autres probabilités concernant les collisions sur le réseau). Si le hasard indique qu'une collision mutuelle interporteur a lieu, elle est simulée en admettant un potentiel d'interaction coulombien écranté permettant de tenir partiellement compte du fait que cette collision binaire s'effectue au sein d'un nuage électronique. On peut considérer ces diverses techniques comme réellement du type Monte Carlo puisqu'elles sont d'ordre statistique et basées sur des tirages de nombres au hasard.

L'étude de l'interaction porteur-porteur peut-être effectuée au moyen d'une approche toute différente que nous avons déjà commencée d'entreprendre. Elle repose sur l'avantage que présente une méthode particulière de donner à chaque instant les positions exactes des particules d'un ensemble. On peut donc au moins théoriquement tenir compte des interactions mutuelles et du fait que chaque particule est en interaction coulombienne avec toutes les autres. De façon plus
précise

les N-1 particules produisent à chaque instant au point où se situe la Nième un champ résultant qui sera la somme de tous les champs binaires dus à chacune des particules. Ce champ résultant se superpose au champ extérieur appliqué et pendant un court laps de temps modifie le mouvement de la particule considérée. Le processus est appliqué aux N particules de l'ensemble. Chaque champ mutuel pouvant être représenté par trois composantes dans un repère quelconque, il faut calculer à chaque pas 3N(N-1) composantes de champ électrique pour une population de N porteurs. Malheureusement cette façon de faire mène à une somme de calcul prohibitive, il est donc nécessaire de faire à ce niveau quelques hypothèses simplificatrices.

1 Une première façon de procéder consiste à admettre que la loi de décroissance du champ électrique étant en $1/r^2$ seules les quelques particules se trouvant au voisinage immédiat de la particule considérée auront une influence significative. La distance moyenne caractéristique r_0 à considérer pour fixer la limite peut être la distance d'écran liée à la densité moyenne de porteurs par

$$r_0 = \left(\frac{nq^2}{\epsilon' k_B T_L} \right)^{1/2}$$

On peut donc ne considérer que les porteurs se trouvant dans une sphère de rayon $2r_0$ pour calculer le champ coulombien résultant qui dérive alors d'un potentiel écranté ayant la distance r_0 comme paramètre d'écran. Malheureusement une telle méthode nécessite le calcul complet des distances mutuelles entre les électrons pour savoir si deux porteurs donnés sont en interaction de façon significative ou non. De ce fait l'économie réalisée est assez illusoire.

2 Une autre méthode permettant de diminuer artificiellement le nombre de particules d'essai peut être essayée : c'est la méthode des images analogue à celle utilisée depuis longtemps en dynamique moléculaire.

Supposons un petit volume cubique contenant N électrons. Si la densité moyenne de porteurs est n , le côté du cube vaudra

$$a = (N/n)^{1/3}$$

On augmente artificieusement le nombre de porteurs présents en reproduisant pour translation spatiale le motif des N porteurs vrais suivant les trois directions de l'espace. On peut par exemple considérer les six cubes adjacents par une face au cube de base produisant ainsi $7N$ porteurs au total à partir de N porteurs initiaux. On peut, dans un autre cas, considérer les vingt-six cubes adjacents par une face ou une arête, donnant ainsi $27N$ porteurs. Comme on ne calcule dans ce cas les composantes de champ coulombien que pour les N porteurs de base on peut limiter le nombre de calculs dans une limite raisonnable. On peut par exemple considérer 10 électrons dans le volume de base* et les six cubes adjacents par une face au cube de base.

En appliquant la seconde de ces méthodes, nous avons obtenu quelques résultats préliminaires concernant l'évolution de la vitesse de dérive et de l'énergie moyenne avec le champ électrique pour un matériau ayant une concentration en porteurs de $1,8 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (voir figure 4.8). Nous avons vérifié en particulier qu'à champ nul, l'énergie moyenne des porteurs reste égale à l'énergie de réseau $(3/2)k_B T_L$ et que de ce fait, la prise en compte de l'effet du champ coulombien n'introduit pas d'erreur numérique supplémentaire. Toutefois l'introduction de cette interaction résulte en un allongement du temps calcul d'un facteur 10, ce qui, néanmoins, n'implique à temps de calcul égal, qu'une dégradation de la précision statistique d'un facteur 3.

Une étude plus complète reste cependant nécessaire avant de se prononcer sur la valeur de la méthode proposée dont les premiers résultats ne sont donnés ici qu'à titre d'illustration.**

* Les N porteurs réels sont assujettis à rester dans le cube de base par des conditions de périodicité sur leur mouvement selon les trois directions de l'espace.
 ** En particulier l'effet des impuretés ionisées a été négligé jusqu'à présent pour mieux mettre en lumière celui de l'interaction entre les électrons.

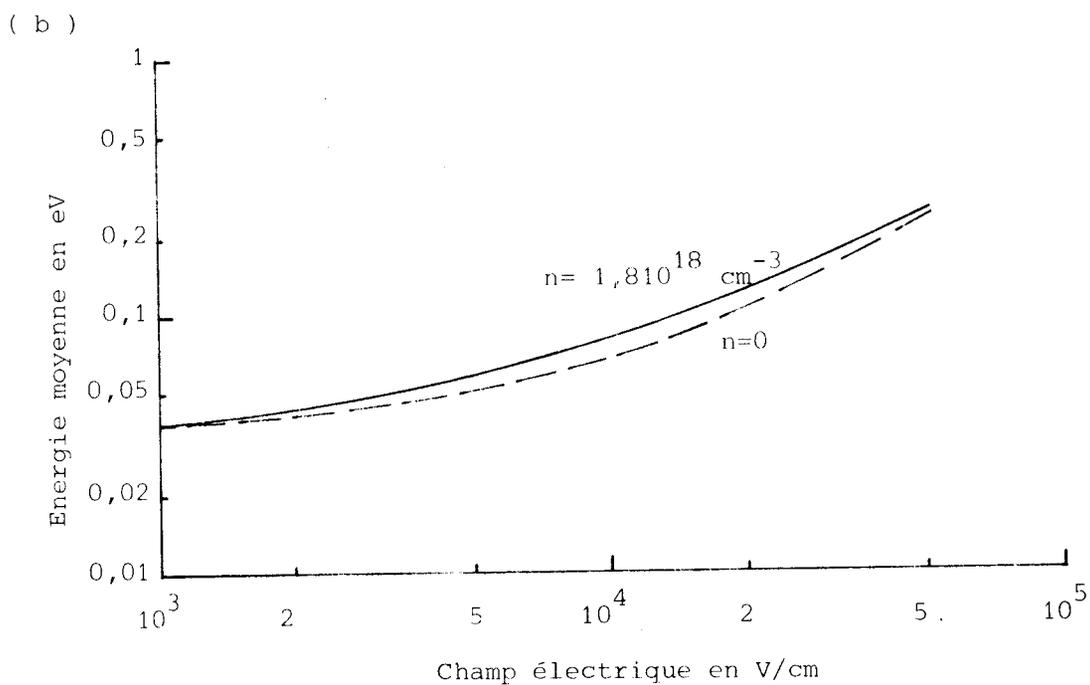
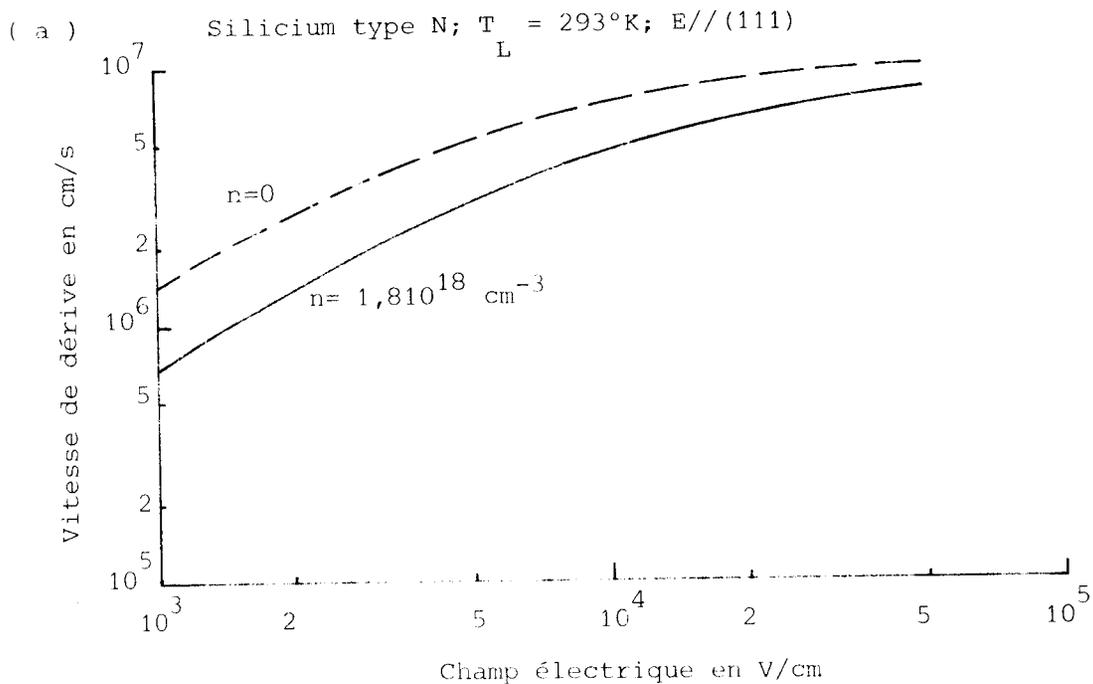


FIGURE 4,8

Influence de l'interaction électron-électron sur la vitesse de dérive des porteurs en (a) et sur leur énergie moyenne en (b).



Un autre aspect, lié aux interactions interélectroniques, est que si la concentration en porteurs dans le matériau est si élevée que l'on doive le considérer comme dégénéré, la définition habituelle du taux de collision par unité de temps $\lambda(\vec{k})$ que nous avons donné au cours du chapitre 1 et sur laquelle s'appuie tout notre travail (et la totalité des études de Monte Carlo disponibles dans la littérature) n'est plus valable. En effet on ne peut plus écrire dans ces conditions que $f(\vec{k}) \ll 1$ et l'on doit tenir compte du principe d'exclusion de Pauli en remplaçant $S(\vec{k}, \vec{k}')$ par $S(\vec{k}, \vec{k}')(1-f(\vec{k}'))$. Pour qu'une transition de \vec{k} à \vec{k}' soit possible, il faut que l'état \vec{k}' soit vacant, ce qui n'est pas toujours le cas dans un matériau dégénéré. Cette idée a été mise en oeuvre par Bosi et Jacoboni [12]. Leur approximation est d'effectuer une simulation de Monte Carlo standard (dans GaAs à 77 °K et $N_D = 5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$), utilisant les collisions fictives, dans laquelle une collision réelle peut devenir fictive si l'état \vec{k}' de l'électron après collision est déjà occupé par un autre électron (cette probabilité d'occupation est testée sur la distribution $f(\vec{k})$ fournie par la simulation elle-même grâce à un tirage au sort). Ce calcul permet de retrouver la distribution de Fermi-Dirac caractéristique d'un matériau dégénéré.

III. LE PHENOMENE D'IONISATION PAR CHOC.

Un des paramètres physiques essentiels qui conditionnent le fonctionnement de certains composants, tels ceux utilisant le phénomène d'ionisation par choc est le taux de génération de porteurs au sein de la zone active dont la détermination se fait habituellement à partir de la connaissance des variations des taux d'ionisation des électrons et des trous en fonction du champ électrique.

Cependant dans un composant très court nous avons observé que l'énergie des porteurs n'avait pas toujours le temps d'atteindre sa valeur stationnaire. Il en résulte que le taux de génération dans ce type de composant ne peut pas être considéré comme une simple fonction du champ électrique local, et une étude plus approfondie du mécanisme d'ionisation par choc sera nécessaire dans ce cas.

Une telle étude doit pouvoir se faire de façon plus rigoureuse grâce à la méthode de Monte Carlo. Dans une première phase, on peut ne s'intéresser qu'à la production de paires électron-trou par un seul type de porteur et par unité de longueur. Pour ce faire, on considérerait un électron accéléré dans un champ électrique uniforme ou non uniforme. L'électron, libre de se mouvoir, s'échaufferait, et soumis aux interactions du réseau, sa distribution d'énergie s'étalerait dans le domaine des énergies élevées jusqu'à atteindre l'énergie d'ionisation. En utilisant les théories de Shockley [22] ou de Baraff [23] on pourrait calculer une probabilité d'ionisation et tirer au sort l'éventualité d'une ionisation par choc. L'état de l'électron incident après le choc est décrit par des formules assez semblables à celles qui concernent l'interaction électron-impureté, tenant compte de la perte d'énergie cinétique liée à l'ionisation. Il doit être possible dans ces conditions de déterminer le nombre d'électrons créés par l'électron incident dans un parcours unité dans la direction du champ électrique et d'obtenir ainsi les valeurs pratiques du taux d'ionisation dans des structures réelles.

IV. LA SIMULATION BIPOLAIRE.

Elle consiste à simuler simultanément le mouvement des électrons et des trous du même matériau semi conducteur. En principe possédant les techniques permettant de simuler séparément les électrons d'une part, les trous de l'autre, il est possible sans difficultés particulières d'étudier au cours du temps les évolutions de chaque type de porteurs chacun caractérisé par sa dynamique microscopique (collision porteurs-réseau, masses effectives dans la bande de conduction et dans la bande de valence) et de définir comme nous l'avons déjà fait au cours du chapitre 3 des densités de porteurs permettant de tenir compte des effets de charge d'espace où interviendra la densité de charge

$$q(n - p - N_D + N_A)$$

* La section efficace de collision entre l'électron de conduction et l'électron de valence peut être obtenue par une formule identique à celle donnée en [9].

Une application possible de ces principes peut être la simulation d'une jonction PN. Ces études peuvent encore être affinées si l'on tient compte du phénomène de génération-recombinaison de porteurs. La prise en compte d'une durée de vie ne pose pas de problèmes de principe : il suffit de tirer au sort selon la probabilité de disparition et de création des porteurs. Toutefois on ne doit pas oublier que la méthode de Monte Carlo ne permet d'étudier un mécanisme que sur quelques centaines de picosecondes seulement, alors que les durées de vie des porteurs sont ici de l'ordre de la milliseconde ou de la microseconde.

Des simulations d'éléments comportants des jonctions PN peuvent être menées à terme dès lors que les conditions aux limites et les conditions de fonctionnement de tels éléments sont spécifiées. On sait que l'étude analytique de jonctions dans lesquelles apparaissent des champs électriques très importants induisant de grandes vitesses de dérive contrebalancées par de grandes vitesses de diffusion dues à des gradients de concentration importants est difficile à effectuer. Le nombre d'équations différentielles à résoudre simultanément à la fois pour les électrons et les trous est important et leur résolution numérique nécessite très souvent des temps de calcul très élevés. Par contre le traitement de ces problèmes par une méthode de Monte Carlo ne présente pas de difficultés particulières. Au lieu d'étudier N_T électrons, il suffit d'étudier N_e électrons et N_p trous (N_e et N_p sont du même ordre de grandeur que N_T) sans que les temps de calcul soient considérablement allongés. En fait on ne devrait avoir que la simple addition des temps de calcul pour les électrons et les trous.

Une autre application intéressante de l'étude de structures bipolaires paraît être la simulation sur ordinateur de l'expérience de temps de vol. En effet, des études récentes [2] ont montré que la technique utilisée pour la création des paires électron-trou dans ces expérimentations peut avoir des conséquences importantes sur les caractéristiques de transport des porteurs et sur la valeur de vitesse de dérive qui est effectivement mesurée. Les porteurs, créés par des faisceaux électroniques ou des faisceaux laser, peuvent être très chauds au moment de la création des paires (énergies plus grandes que 1eV) et de ce fait le mouvement de dérive qu'ils subissent de la part du champ existant dans le matériau peut être faussé et induire des valeurs de vitesse de dérive erronées. De même

les phénomènes de charge d'espace au moment de la séparation des deux types de porteurs sont encore mal connus. La simulation bipolaire par la méthode de Monte Carlo devrait permettre d'apporter quelques éclaircissements sur ces diverses questions.

Pour conclure, nous dirons que les multiples possibilités de la méthode de Monte Carlo bipolaire seront surtout utilisées à l'étude de composants largement submicroniques dans lesquels les effets de porteurs chauds se manifestent sur des distances qui sont du même ordre de grandeur que le libre parcours moyen et en des temps qui sont du même ordre de grandeur que le temps de libre parcours des porteurs entre deux collisions.

CONCLUSION

Au cours de ce chapitre nous avons essayé d'exposer un certain nombre de problèmes auxquels les méthodes de Monte Carlo de simulation microscopique pourraient apporter des solutions intéressantes. Essentiellement nous avons évoqué quatre grands secteurs:

- l'étude de la dynamique électronique au voisinage d'une surface,
- la prise en compte de l'interaction entre porteurs via les influences coulombiennes à courte distance,
- la simulation du phénomène d'ionisation par choc,
- la possibilité de simulation bipolaire.

L'ensemble de ces idées a été développé dans un souci de montrer qu'une simulation de composants réels bipolaires ou unipolaires par la méthode de Monte Carlo est désormais possible en tenant compte de tous ces effets. L'avantage essentiel de cette façon de procéder est que l'étude des régimes non-stationnaires est particulièrement aisée. Les quelques essais effectués jusqu'à maintenant et décrits au cours de ce **chapitre** semblent encourageants et nous incitent à persévérer dans cette voie.

* *
*

BIBLIOGRAPHIE DU CHAPITRE 4

- [1] P.J. PRICE, dans "*Semiconductors et Semimetals*", volume 14, p. 249
Academic Press, (1979).
- [2] G. HILL, *Thèse de Doctorat*, Sheffield University, (1979).
- [3] E.M. CONWELL, "*High Field Transport in Semiconductors*", Academic Press,
(1967).
- [4] M. ASCHE, B.L. BOICHENKO, V.M. BONDAR, O.G. SARBEI, *Physica Status
Solidi B*, Volume 44, p.173, (1972).
- [5] J.G. NASH, J.W. HOIM-KENNEDY, *Physical review B*, Volume 16, p. 2834,
(1977).
- [6] H.FROELICH, B.PARANJAPE , *Proceedings of the Physical Society*, Volume
69 B, p.21, (1956).
- [7] R. STRATTON, *Proceedings of the Royal Society of London*, Volume 242 A,
p. 335, (1957).
- [8] L. BACHELLI-MONTEFUSCO, C. JACOBONI, *Solid-State Communications*, Volume 10,
p. 71, (1972).
- [9] R.C. CURBY, D.K. FERRY, *Physica Status Solidi A*, Volume 15, p. 319, (1973).

- [10] A. MATULIONIS, J. POZHEIA, A. REKIAITIS, *Solid State Communications*, Volume 14, p. 1133, (1975).
- [11] P.A. LEBWOHL, P.J. PRICE, *Solid State Communications*, Volume 9, p. 1221, (1971).
- [12] S. BOSI, C. JACOBONI, *Journal of Physics C*, Volume 9, p. 315, (1976).
- [13] K. FUCHS, *Proceedings of the Cambridge Physical Society*, Volume 34, p. 100 (1938).
- [14] R.F. GREENE, *Surface Science*, Volume 2, p. 101, (1964).
- [15] J.E. PARROTT, *Proceedings of the Physical Society*, Volume 85, p. 1143, (1965).
- [16] F. STERN, W.E. HOWARD, *Physical Review*, Volume 163, p. 816, (1967).
- [17] D.K. FERRY, *Solid State Electronics*, Volume 21, p. 115 (1978).
- [18] K. HESS, *Solid State Electronics*, Volume 21, p. 123 (1978).
- [19] P.K. BASU, *Solid State Communications*, Volume 27, p. 657, (1978).
- [20] P.K. BASU, *Surface Science*, Volume 73, p. 156, (1978).
- [21] R.W. COEN, R.S. MULIER, *Solid State Electronics*, Volume 23, p. 35, (1980).
- [22] W. SHOCKLEY, *Solid State Electronics*, Volume 2, p. 36, (1961).
- [23] G.A. BARAFF, *Physical Review*, Volume 128, p. 2507, (1962).

CONCLUSION

Parvenus au terme de notre exposé, nous allons essayer de résumer le travail qui a été accompli, tout en mettant en avant les points particuliers qui nous semblent importants et originaux.

L'ensemble de ce travail concernait l'application de la méthode de simulation de Monte Carlo à l'étude de la dynamique électronique dans les semiconducteurs. Notre choix s'est porté sur le Silicium de type N et quoique ce matériau ait déjà été bien étudié auparavant par de nombreux auteurs, il nous a semblé particulièrement intéressant de l'adopter pour effectuer la mise au point d'une méthodologie assez complète en vue de la simulation de composants par la méthode de Monte Carlo. Depuis lors, certains aspects de cette méthodologie ont été appliqués à l'étude d'autres matériaux par d'autres chercheurs dans notre laboratoire.

Nous avons divisé notre exposé en quatre chapitres.

Dans le premier chapitre nous avons présenté la méthode de Monte Carlo dans le cadre assez général des techniques d'étude théoriques de la dynamique électronique en régime de porteurs chauds. Nous avons d'abord décrit la méthode de Monte Carlo habituelle utilisant la technique des collisions fictives, puis nous avons présenté celle que nous avons mise au point dans notre laboratoire, qui procède par discrétisation régulière du temps, et que nous utilisons depuis plusieurs années. Nous pensons que cette variante de la méthode de Monte Carlo est particulièrement apte à prendre en compte les conditions de fonctionnement des composants semiconducteurs qui souvent peuvent être fort éloignées de ce qu'elles sont dans le matériau en volume en régime statique. Nous avons essayé de montrer que les deux méthodes exposées dans ce chapitre sont équivalentes.

L'application de notre méthode de simulation au cas du matériau en volume soumis à un champ uniforme statique ou variable dans le temps a été développée au long du chapitre 2.

Dans une première partie qui concerne les effets de porteurs chauds en régime statique, nous nous sommes particulièrement intéressés aux coefficients de diffusion qui ont été calculés et étudiés (par leur évolution temporelle ou fréquentielle) en fonction de l'amplitude et de la direction du champ électrique. Nous avons consacré une attention spéciale au problème de l'équivalence du coef-

ficient de diffusion par étalement de paquet et du coefficient de diffusion de bruit.

Dans une seconde partie, nous avons étudié les effets de relaxation dus à un champ électrique variable dans le temps, et nous avons montré comment les effets non stationnaires ainsi mis en évidence peuvent être retrouvés grâce à l'application des équations de relaxation du moment et de l'énergie introduisant des temps de relaxation dépendant de la seule énergie moyenne de l'ensemble des porteurs.

Dans le troisième chapitre, nous avons abordé la simulation de composants réels semiconducteurs. Nous avons proposé deux techniques permettant de tenir compte du phénomène dynamique de charge d'espace. L'une, s'appuyant sur la simulation d'un seul porteur, nous a permis de spécifier les conditions dans lesquelles des phénomènes non stationnaires apparaissent dans les composants $N^+N^-N^+$. L'autre, s'appuyant sur la simulation d'un grand nombre de porteurs, nous a permis d'étudier les phénomènes de bruit de diffusion dans ces mêmes composants.

Enfin dans le quatrième et dernier chapitre, nous avons évoqué et mis en pratique quelques idées concernant les applications futures de la méthode de simulation présentée dans cette thèse. Nous nous sommes particulièrement intéressés aux effets de transport en surface tels que ceux qui existent dans les transistors à effet de champ MOS. Nous avons également évoqué la possibilité de tenir compte de l'interaction électron-électron, la simulation possible du phénomène d'ionisation par choc, et la simulation de composants bipolaires.

Deux raisons essentielles nous incitent à penser que les méthodes présentées dans ce mémoire trouveront sans doute dans l'avenir des applications de plus en plus nombreuses. La première est que les ordinateurs actuels deviennent de jour en jour plus puissants et permettront donc d'appliquer ces méthodes plus facilement et d'en améliorer le degré de confiance. La seconde raison, qui nous semble encore plus importante, est que les progrès de la technologie de fabrication des composants électroniques entraînera la réalisation d'éléments de dimensions de plus en plus submicroniques qui pourront être étudiés à partir des méthodes développées dans ce travail.

ANNEXE 1

Calcul de l'expression de la tension aux bornes d'un composant donnée par la relation (3,14).

Nous partons de la relation (3,13) que nous intégrons terme à terme sur x . L'intégrale du champ électrique donnant la valeur instantannée de la tension aux bornes nous obtenons

$$V(t+\delta t) = V(t) + \frac{\delta t}{\epsilon'} \left[\frac{I_0 W}{S} - q \sum_{j=1}^{j=N} n(x_j, t) v_T(x_j, t) \Delta x \right]$$

soit encore en écrivant que $n(x_j, t) = \frac{n_1(x_j, t)}{S \Delta x}$

$$V(t+\delta t) = V(t) + \frac{\delta t}{\epsilon'} \left[\frac{I_0 W}{S} - \frac{q}{S} \sum_{j=1}^{j=N} n_1(x_j, t) v_T(x_j, t) \right]$$

En vertu des relations (3,12 a) et (3,12 b) $\sum n_1 v_T$ est égal à la somme des vitesses des n_e porteurs contenus dans le composant, donc

$$V(t+\delta t) = V(t) + \frac{\delta t}{\epsilon'} \left[\frac{I_0 W}{S} - \frac{q}{S} \sum_{i=1}^{n_e} v_{x_i}(t) \right]$$

Exprimant que $\frac{dV}{dt}$ est la limite quand δt tend vers 0 de $\frac{V(t+\delta t) - V(t)}{\delta t}$

on trouve :

$$\frac{dV}{dt} = \frac{I \omega}{\mathcal{E}'S} - \frac{q}{\mathcal{E}'S} \sum_{i=1}^{n_e} v_{x_i}(t)$$

relation qui une fois intégrée sur le temps donne la relation (3,14).

* *
*

ANNEXE 2

Calcul des spectres de bruit en tension $S_V(f)$ et en courant $S_I(f)$ donnés par les relations (3,28) et (3,32) et des fonctions de corrélation associées.

Nous donnons le schéma de calcul de l'expression générale du spectre de bruit pour un courant de polarisation quelconque I_0 traversant l'échantillon dont les caractéristiques sont données dans la figure 3.9. Nous étudions ici le régime à injection nulle, ce qui revient à supposer que le champ statique E_0 existant dans le composant est uniforme et que la conduction s'effectue par les porteurs thermiques.

Equations de base.

On écrit la loi de conservation du courant total et l'équation de Poisson :

$$J = qnv + \epsilon' \frac{\partial E}{\partial t} \quad (A1)$$

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{q}{\epsilon'} (n - N_D) \quad (A2)$$

Supposant le composant polarisé par un courant I_0 , nous résolvons les équations (A1) et (A2) de la façon habituelle en écrivant

$$J = J_0 + \Delta J \exp(j\omega t) \quad (A3)$$

$$E = E_0 + \Delta E \exp(j\omega t) \quad (A4)$$

$$v = v_0 + \Delta v \exp(j\omega t) \quad (A5)$$

avec les conditions $|\Delta J| \ll J_0$, $|\Delta E| \ll E_0$ et $|\Delta v| \ll v_0$ et la relation supplémentaire

$$\Delta v = \mu^*(\omega) \Delta E \quad (A6)$$

Il est sous-entendu dans ces calculs que ΔJ , ΔE , Δv sont des quantités complexes ne dépendant que de x . J_0 , E_0 , v_0 sont des quantités réelles constantes dans notre cas. Substituant (A2 - A6) dans (A1) et séparant les termes d'ordre 0 et d'ordre 1, on trouve

$$J_0 = q(N_D + \frac{\epsilon'}{q} \frac{dE_0}{dx}) v_0 \quad (A7) \text{ à l'ordre } 0$$

$$\Delta J = [q(N_D + \frac{\epsilon'}{q} \frac{dE_0}{dx}) \mu^* + j\omega\epsilon'] \Delta E + \epsilon' v_0 \frac{d\Delta E}{dx} \quad (A8)$$

à l'ordre 1. Cette dernière relation est une équation différentielle du premier ordre permettant le calcul de ΔE en tout point.

Calcul du champ d'impédance.

Nous devons calculer le module au carré du champ d'impédance $\nabla Z(f,x)$ qui intervient dans l'expression de l'intégrale de bruit de Shockley (relation 3,9)

Si l'on introduit en un point x du composant un élément de courant $\Delta I = S\Delta J$, le champ ΔE développé en un autre point x' permet de définir le champ d'impédance

$$\nabla Z(f,x) = \frac{\partial Z(f,x)}{\partial x} = - \frac{1}{\Delta I} \int_x^W \frac{\partial \Delta E(x,x')}{\partial x} dx' \quad (A9)$$

pour $x \leq x' \leq W$.

$\Delta E(x, x')$ est donné par la résolution de l'équation (A8)

$$\Delta E(x, x') = \frac{\Delta J}{qN_D \mu^* + j\omega \epsilon'} + K(x) \exp(-\gamma x') \quad (A10)$$

$K(x)$ est déterminé par la condition $\Delta E(x, x) = 0$ (l'effet de l'élément de courant ΔI est nul là où on l'introduit) γ est la constante de propagation

$$\gamma = \alpha + j\beta = \frac{1}{\epsilon' v_0} (qN_D \mu^* + j\omega \epsilon') \quad (A11)$$

Appliquant la relation (A9) on trouve immédiatement

$$VZ(f, x) = \frac{1}{S(qN_D \mu^* + j\omega \epsilon')} [1 - \exp \gamma(x-W)] \quad (A12)$$

Calcul du spectre de bruit en tension $S_V(f)$.

Appliquée au cas unidimensionnel, l'intégrale de bruit de Shockley s'écrit

$$S_V(f) = 4q^2 S \int_0^W n(x) D(E(x), f) |VZ(f, x)|^2 dx \quad (A13)$$

Après substitution de (A12) dans (A13) puis intégration sur x , on arrive sans difficultés à l'expression algébrique générale de $S_V(f)$. Nous nous intéressons ici au régime ohmique et en particulier à l'expression du spectre quand le champ interne E_0 tend vers 0. Dans ce cas γ tend vers l'infini et $\exp \gamma(x-W)$ vers 0 (puisque $v_0 \rightarrow 0$). La mobilité ohmique μ^* peut s'écrire

$$\mu^* = \frac{\mu_0}{1+j\omega\tau_p} \quad (A14)$$

où μ_0 est la mobilité ohmique à fréquence nulle. On obtient alors

$$|\nabla Z(f)|^2 = \frac{1+4\pi^2 f^2 \tau_p^2}{S^2 q^2 N_D^2 \mu_0 [(1-4\pi^2 f^2 \tau_0 \tau_p)^2 + 4\pi^2 f^2 \tau_0^2]} \quad (A15)$$

où τ_0 est le temps de relaxation diélectrique du matériau ($\tau_0 = \frac{\epsilon'}{qN_D\mu_0}$)

De plus, en régime ohmique, le coefficient de diffusion est très bien approximé par la relation

$$D(f) = \frac{D_0}{1+4\pi^2 f^2 \tau_p^2} \quad (A16)$$

Ayant d'après nos hypothèses $n = N_D$, et substituant (A15) et (A16) dans (A13) on trouve la formule (3,28) dans les notations données en (3,29) et en ayant utilisé la relation d'Einstein à champ faible

$$\frac{D_0}{\mu_0} = \frac{k_B T_L}{q} \quad (A17)$$

Calcul du spectre de bruit au courant $S_I(f)$.

On applique le théorème de Langevin

$$S_I(f) = \frac{S_V(f)}{|Z(f)|^2}$$

avec $Z(f) = \int_0^W VZ(f,x)dx$

A polarisation nulle on trouve

$$Z(f) = \frac{W(1+j2\pi f\tau_p)}{S_q N_D \mu_o [1+j2\pi f\tau_o (1+j2\pi f\tau_p)]} \quad (A18)$$

d'où $S_I(f) = \frac{4k_B T_L S_q N_D \tau_o}{W(1+4\pi^2 f^2 \tau_p^2)}$

qui donne le spectre (3,32) dans les notations données en (3,29).

Fonction de corrélation associée au spectre de bruit thermique $S_V(f)$

Nous posons $a = f_o/f_p$.

1 Si $a < \frac{1}{4}$

$$\phi_V(t) = \frac{k_B T_L R_o a \sqrt{2}}{\tau_o \sqrt{1-4a}} \left[\frac{\exp(-\frac{t}{\tau'_p})}{\sqrt{1-2a-\sqrt{1-4a}}} - \frac{\exp(-\frac{t}{\tau''_p})}{\sqrt{1-2a+\sqrt{1-4a}}} \right]$$

avec $\tau'_p = \frac{\tau_p \sqrt{2}}{\sqrt{1-2a-\sqrt{1-4a}}}$ et $\tau''_p = \frac{\tau_p \sqrt{2}}{\sqrt{1-2a+\sqrt{1-4a}}}$

2 Si $a > \frac{1}{4}$

$$\phi_v(t) = \frac{2k_{BTL} R \sqrt{a}}{\tau_o \sqrt{4a-1}} \exp\left(-\frac{\omega_p t}{2}\right) \cos\left[\theta - \frac{\omega_p t}{2} \sqrt{4a-1}\right]$$

avec

$$\theta = \text{Arc cos} \frac{\sqrt{4a-1}}{2\sqrt{a}} \text{ et } \omega_p = \frac{1}{\tau_p}$$

