

THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNIQUES DE LILLE FLANDRES ARTOIS

pour obtenir le titre de

Docteur de 3ème Cycle

par

François PERRI

SUR UN NOUVEAU MODELE DE L'INTERACTION ELECTRON-IMPURETE DANS LES SEMICONDUCTEURS



Soutenue le 21 Mars 1986 devant la Commission d'Examen

Membres du Jury :

E.	CONSTANT,	Président
J.	ZIMMERMANN,	Rapporteur
G.	SALMER,	Examineur
R.	FAUQUEMBERGUE,	Examineur
S.	CRISTOLOVEANU,	Examineur
T.	VAN DE ROER,	Invité

Cette étude a été effectuée au Centre Hyperfréquences et Semiconducteurs de l'Université des Sciences et Techniques de Lille Flandres Artois, dirigé par Monsieur le Professeur SALMER. Je suis très reconnaissant à Monsieur le Professeur E. CONSTANT d'avoir accepté de présider la commission d'examen et de juger mon travail.

Monsieur G. SALMER me fait l'honneur de juger mes travaux. Je lui en suis vivement reconnaissant.

Les nombreuses discussions que j'ai eues avec Monsieur R. FAUQUEMBERGUE, Professeur à l'université de Lille I m'ont apporté un appui considérable. Il me fait l'honneur d'assister à mon jury et je l'en remercie très chaleureusement.

Mes remerciements vont également à Monsieur T. VAN DE ROER, Professeur à l'Université Technique d'Eindhoven et Monsieur S. CRISTOLOVEANU Chargé de Recherche CNRS à l'ENSERG de Grenoble, pour l'intérêt qu'ils ont bien voulu porter à mon travail et pour leur participation à la commission d'examen.

Je tiens à remercier Monsieur J. ZIMMERMANN, du Centre Hyperfréquences et Semiconducteurs de Lille, qui a assuré la direction de cette étude, pour son aide constante et efficace à la réalisation de ce travail.

Mes plus vifs remerciements vont à Monsieur M. PERNISEK pour ses remarquables qualités humaines et l'aide précieuse qu'il m'a apportée pour la réalisation de ce travail, ainsi qu'à Monsieur J.L. TOBEL pour son aimable contribution à ce travail.

Je ne saurais oublier l'aimable collaboration du personnel du Centre Interuniversitaire du Traitement de l'Information.

Qu'il me soit permis d'associer à ces remerciements Messieurs F. HELIODORE, J.L. NIERUCHALSKI, M. BENJELLOUN, M. SCHORTGEN, Y. WU .

J'exprime ma reconnaissance à Madame J. CHARVET qui a assuré la dactylographie de ce manuscrit, et Monsieur J.P. DEHORTER pour l'impression de ce manuscrit.

Enfin j'exprime ma reconnaissance à tous mes camarades pour la sympathie qu'ils m'ont toujours témoignée.

CHAPITRE I

L'INTERACTION ELECTRON IMPURETE DANS LES SEMICONDUCTEURS

I.1. SOLUTION DE L'EQUATION DE TRANSPORT DE BOLTZMANN	3
I.2. L'APPROXIMATION DE BORN	5
I.2.1. L'APPROXIMATION DE CONWELL-WEISSKOPF.....	5
I.2.2. L'APPROXIMATION DE DINGLE-BROOKS-HERRING.....	8
I.2.3. LIMITATIONS FONDAMENTALES DE CES APPROXIMATIONS...	13
I.3. LA METHODE DE MONTE-CARLO	15
I.3.1. PRINCIPE DE LA METHODE	15
I.3.2. LES PARAMETRES PHYSIQUES DE L'ARSENIURE DE GALLIUM	18

CHAPITRE II

UN NOUVEAU MODELE DE L'INTERACTION ELECTRON-IMPURETE

Préambule	22
Remarque	22
II.1. UN MODELE PUREMENT DETERMINISTE	24
II.1.1. PRINCIPE	24
II.1.2. CARACTERISATION DE L'ETAT ELECTRONIQUE	25
II.1.3. INTRODUCTION DES EFFETS D'ECRAN	25
II.1.4. INCONVENIENT	26
II.2. UN NOUVEAU MODELE	27
II.2.1. DETERMINATION DES TEMPS D'INTERACTION.....	27
II.2.1.1. Formalisme	27
II.2.2. DETERMINATION DE L'ETAT ELECTRONIQUE APRES L'INTERACTION.....	32
II.2.2.1. Calcul du paramètre d'impact	34
II.2.2.2. Calcul de l'angle de déviation	36
II.2.2.3. Caractérisation de l'interaction.....	40
- distribution des angles de réorientation $p(\theta)$	40
- probabilité d'interaction par unité de temps $\lambda(\varepsilon)$	42

II.2.3. INTRODUCTION DES EFFETS D'ECRAN	42
II.2.3.1. Approximation du potentiel interrompu....	42
Inconvénients	49
II.2.3.2. Approximation du potentiel pseudo-écranté	49
déduction d'une loi empirique $b_0(n_0)$	54
II.2.3.3. Approximation du potentiel écranté	54
Comparaison graphique des trois formes	
de potentiel	63
II.2.4. CAS D'UN DOPAGE NON-HOMOGENE	63
II.2.4.1. Présentation de la structure de base	63
II.2.4.2. Principe de la méthode	66
II.3. POLARISATION DU CHAMP ELECTRIQUE.....	68

CHAPITRE III

EXPLOITATION DES MODELES ET RESULTATS

III.1. ETUDE DE LA VITESSE DE DERIVE EN CHAMP FORT.....	70
III.1.1. EXPLOITATION AVEC LES MODELES DU POTENTIEL PSEUDO-ECRANTE	72
III.1.2. COMMENTAIRES SUR L'ALLURE GENERALE DE v_d (E)..	72
III.1.3. COMMENTAIRES SUR L'ALLURE GENERALE DE ϵ (E)...	74
III.2. ETUDE DE LA MOBILITE ET DE LA VITESSE DE DERIVE DANS UNE HOMOJONCTION.....	74
III.2.1. PRESENTATION DE LA STRUCTURE	76
III.2.2. ETUDE EN CHAMP PARALLELE $E_{//}$	77
III.2.2.1. Résultats à la température ambiante...	77
III.2.2.2. Résultats à 77°K.....	87
III.2.2.2.1. Etude à champ faible	87
III.2.2.2.2. Adjonction d'une barrière à l'interface n^+n	87
III.2.3. REMARQUE	91
a) Influence directe des ions	91
b) Influence des ions par la diffusion	95

III.2.4. ETUDE A CHAMP FORT	97
III.2.5. ETUDE EN CHAMP PERPENDICULAIRE E \perp	99
III.2.5.1. Principe de l'étude	99
III.2.5.2. Discussion	100

CHAPITRE IV

ETUDE DU MODELE DE L'INTERACTION ELECTRON-IMPURETE

DANS UNE STRUCTURE DE TRANSISTOR A EFFET DE CHAMP PLANAIRE

IV.1. PRESENTATION DE LA STRUCTURE	106
IV.2. LES CONDITIONS DE LA SIMULATION	107
IV.3. EXPLOITATION ET QUELQUES RESULTATS	109
IV.4. DISCUSSION GENERALE	120
CONCLUSION GENERALE	121
BIBLIOGRAPHIE	123
ANNEXE 1	125
ANNEXE 2	126

NOMENCLATURE DES NOTATIONS UTILISEES

- $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$: fonction de distribution des électrons
 e : charge de l'électron
 \vec{E} : champ électrique
 \hbar : constante de Planck
 \vec{k} : vecteur d'onde de l'électron à l'instant t
 \vec{k}' : vecteur d'onde de l'électron à l'instant t'
 $S(\vec{k}, \vec{k}')$: probabilité par unité de temps pour qu'un porteur subisse
une collision l'amenant de l'état \vec{k} à l'état \vec{k}' à d^3k' près.
 $\tau(\vec{k})$: temps de relaxation
 N_i : densité d'impuretés
 $V(\vec{r})$: potentiel d'impuretés
 $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$
 $V(\vec{q})$: Transformée de Fourier de $V(\vec{r})$
 Z : nombre de charges
 ϵ_0 : permittivité statique
 m^* : masse effective de l'électron
 $\epsilon(\vec{k})$: énergie de l'électron ayant un vecteur d'onde \vec{k}
 k_B : constante de Boltzmann
 T : température du réseau
 μ : mobilité
 $n(r)$: concentration locale d'électrons
 E_F : énergie de Fermi
 $F_{1/2}$: fonction de Fermi
 Δ : Laplacien
 n_0 : concentration électronique moyenne
 β : paramètre d'écran
 r : distance de l'ion à l'électron
 b : paramètre d'impact
 N_A : concentration en impuretés type "accepteur"
 N_D : concentration en impuretés type "donneur"
 \vec{v} : vitesse de l'électron
 $\lambda(\vec{k})$: taux de collision par unité de temps
 τ_i : instant d'interaction électron-impureté
 θ : angle de déviation radial relatif à l'interaction sur impureté
 ψ : angle de déviation azimutal relatif à l'interaction sur impureté
 α : coefficient de non parabolicité
 \vec{v}' : vitesse après l'interaction sur impureté.

INTRODUCTION

Dans le domaine de la compréhension physique des phénomènes de conduction électronique dans les semiconducteurs, parmi toutes les causes possibles limitant la mobilité des porteurs, l'interaction avec les impuretés joue un rôle très particulier. En effet, c'est une des seules limitations que l'on puisse maîtriser technologiquement par des structures adéquates, contrairement aux autres types d'interactions qui eux sont inhérents au fait que les porteurs se déplacent dans un milieu matériel qui est le cristal.

Une bonne part de l'optimisation des composants à semiconducteurs repose sur la nécessité de soustraire les porteurs actifs à l'influence néfaste des impuretés ionisées afin d'augmenter leur mobilité. Ainsi, dans une hétérojonction, l'utilisation d'un espace non dopé (spacer) permet de réaliser cela tout en maintenant une densité de porteurs importante dans le canal semiconducteur.

Le problème spécifique qui se pose est que le potentiel d'interaction, d'origine coulombienne, est de longue portée et peut donc se faire sentir à des distances assez grandes (plusieurs centaines d'Angstroms). A l'échelle actuelle des composants de la microélectronique (un cas typique est le MESFET), les quantités qui caractérisent les propriétés de transport (concentration d'impuretés et concentration électroniques par exemple) peuvent largement évoluer sur les distances qui caractérisent la portée d'un potentiel coulombien. Un cas typique est le TEC AsGa constitué d'une couche active fortement dopée ($\sim 3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) et mince sur un substrat ou une couche tampon peu dopée. Lorsque le composant est pincé par la tension de grille, la zone active est quasiment désertée par les porteurs libres mais ceux-ci restent au voisinage de l'interface entre couche active et couche tampon. Dans les modèles habituels simulant ce type de composant (qu'ils soient de type Monte-Carlo, particuliers ou les équations de l'électrocinétique), les porteurs sont supposés se déplacer dans le matériau peu dopé et avoir de ce fait une plus haute mobi-

lité. En réalité, le potentiel d'interaction coulombien étant de longue portée, son influence ne se limite pas à la seule couche active, mais au contraire peut conserver une importance notable dans la couche tampon au voisinage de la couche active, là où se situent les électrons au pincement.

Le but du présent travail est de mettre au point un nouveau modèle d'interaction avec les impuretés ionisées qui tienne compte de l'inhomogénéité spatiale des impuretés et aussi dans une certaine mesure de l'inhomogénéité spatiale des électrons. Ce modèle est établi à l'aide de la méthode de Monte Carlo et s'adresse en priorité aux simulations de composants telles que celles faites dans notre laboratoire [1, 2, 3, 4].

Dans le premier chapitre, nous donnons quelques rappels sur les approximations usuelles qui permettent de traiter l'interaction électron-impureté. Dans le second chapitre, nous décrivons en détail le modèle d'interaction que nous avons élaboré. Dans le troisième chapitre, nous exposons l'ensemble des résultats acquis et dans le quatrième nous appliquons notre modèle à l'étude d'un transistor à effet de champ planar.

CHAPITRE I

L'INTERACTION ELECTRON IMPURETE

DANS LES SEMICONDUCTEURS

CHAPITRE I

L'INTERACTION ELECTRON-IMPURETES DANS LES SEMICONDUCTEURS

Ce chapitre contient les rappels nécessaires qui sont essentiels au lecteur pour replacer le problème dans son contexte. Il donnera donc un court résumé sur l'aspect physique fondamental de l'interaction électron-impuretés. Une mise au point beaucoup plus détaillée sur ce sujet peut être trouvée dans [5].

I.1. SOLUTION DE L'EQUATION DE TRANSPORT DE BOLTZMANN

La résolution du problème de transport de charges dans les semiconducteurs consiste à déterminer la fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ des porteurs en présence de champ électrique E . L'évolution de f est régie par l'Equation de Transport de Boltzmann (ETB) :

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} \text{ collisions} \quad (1.1)$$

qui, pour un système stationnaire homogène non-dégénéré, se met sous la forme :

$$\frac{e\vec{E}}{\hbar} \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} = \frac{v}{8\pi^3} \int [S(\vec{k}', \vec{k}) f(\vec{k}') - S(\vec{k}, \vec{k}') f(\vec{k})] d^3 k' \quad (1.2)$$

où f ne dépend plus que du vecteur d'onde \vec{k} , et V est le volume du cristal. $S(\vec{k}, \vec{k}') d^3 k'$ représente la probabilité par unité de temps qu'un porteur subisse une collision l'amenant de l'état \vec{k} à l'état \vec{k}' à $d^3 k'$ près.

Si la collision est élastique, (1.2) se mettra sous la forme :

$$\frac{e\vec{E}}{\hbar} \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} = - \frac{f(\vec{k}) - f_0}{\tau(\vec{k})} \quad , \quad (1.3)$$

où f_0 est la distribution en absence de champ électrique et $\tau(\vec{k})$ temps de relaxation, vaut :

$$\tau(\vec{k}) = \left[\frac{V}{8\pi^3} \int S(\vec{k}, \vec{k}') (1 - \cos\theta) d^3 k' \right]^{-1} \quad (1.4)$$

où θ est l'angle formé par \vec{k} et \vec{k}' . Une moyenne convenablement effectuée sur $\tau(\vec{k})$ permet de calculer directement l'expression de la mobilité.

Lorsque l'interaction est inélastique le temps de relaxation $\tau(\vec{k})$ ne peut être défini, et le calcul de la mobilité doit passer par la détermination - toujours numérique - de $f(\vec{k})$ en résolvant l'équation (1.2) [6].

S'agissant de la contribution à la mobilité de l'effet des impuretés ionisées, celle-ci est facilement calculable car cette interaction est essentiellement élastique. Reste alors le problème de connaître le $S(\vec{k}, \vec{k}')$ correspondant.

I.2. L'APPROXIMATION DE BORN

$S(\vec{k}, \vec{k}')$ peut s'exprimer simplement lorsque le potentiel de collision figurant dans le Hamiltonien du système est assez faible pour pouvoir se contenter du terme de premier ordre dans le calcul de la probabilité de transition correspondante. On aboutit alors à la règle d'or de Fermi [6] :

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{N_i e^2}{V} |V(\vec{q})|^2 \delta[\epsilon(\vec{k} + \vec{q}) - \epsilon(\vec{k})] \quad (1.5)$$

où N_i est la densité d'impuretés. La fonction de Dirac sur l'énergie traduit l'élasticité de la collision. $V(\vec{q})$ est la transformée de Fourier spatiale du potentiel d'interaction $V(\vec{r})$:

$$V(\vec{q}) = \int V(\vec{r}) \cdot \exp(-i\vec{q}\vec{r}) d^3r \quad (1.6)$$

Le calcul du temps de relaxation repose alors sur l'hypothèse que l'on fait en écrivant l'expression du potentiel $V(\vec{r})$.

I.2.1. L'APPROXIMATION DE CONWELL-WEISSKOPF

Le potentiel s'écrit sous la forme d'un potentiel binaire coulombien nu :

$$V(\vec{r}) = Ze / (4\pi \epsilon_0 r), \quad (1.7)$$

où Z est le nombre de charges positives ou négatives de l'ion impuretés et ϵ_0 la permittivité statique du milieu ($\epsilon_0 = \epsilon_r \epsilon_{\text{vide}} = 8,84 \cdot 10^{-12} \epsilon_r \text{ F/m}$). A partir de (1.6), on déduit :

$$V(\vec{q}) = Z e / (\epsilon_0 q^2) \quad (1.8)$$

A l'aide de (1.5) et (1.4), le temps de relaxation se met sous la forme :

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \frac{N_i Z^2 e^4}{16\sqrt{2} \pi \epsilon_0^2 m^{1/2}} \epsilon(\vec{k})^{-3/2} \int_{-1}^{+1} \frac{dz}{1-z} \quad (1.9)$$

où $z = \cos \theta$. Dans la dernière intégrale apparaît une divergence au point $z = 1$ qui est levée si on admet qu'il existe un angle de déviation minimum θ_m correspondant au passage d'un porteur à exacte mi-distance entre deux impuretés voisines. On montre que :

$$\text{tg} \frac{\theta_m}{2} = \frac{Z e^2 N_i^{1/3}}{4\pi \epsilon_0 \epsilon(\vec{k})} \quad (1.10)$$

pour un électron d'énergie $\epsilon(\vec{k})$. Dans ce cas $\cos \theta_m = x_m$ remplace la borne + 1. On trouve ainsi :

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \frac{e^4 N_j}{16\pi\sqrt{2}\epsilon_0^2 m^{*1/2}} \epsilon(\vec{k})^{-3/2} \ln\left(\frac{2}{1-x_m}\right) \quad (1.11)$$

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \frac{e^4 N_j}{16\pi\sqrt{2}\epsilon_0^2 m^{*1/2}} \epsilon(\vec{k})^{-3/2} \ln\left(1 + \frac{16\pi^2 \epsilon_0^2 \epsilon^2(\vec{k})}{Z^2 e^4 N_j^{2/3}}\right) \quad (1.12)$$

La mobilité se calcule à partir de (1.12) par :

$$\mu = \frac{e}{m^*} \cdot \frac{m^*}{3k^2} \int_0^\infty \tau(k) \frac{\partial \epsilon}{\partial k} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial k}\right) k^2 dk \quad \Bigg/ \quad \int_0^\infty f_0 k^2 dk \quad (1.13)$$

où $k = |\vec{k}|$, ce qui donne [7] :

$$\mu = \frac{128\sqrt{2}\pi\epsilon_0^2 (k_B T)^{3/2}}{m^{*1/2} N_j Z^2 e^3} \cdot \left[\ln\left(1 + \frac{144\pi^2 \epsilon_0^2 (k_B T)^2}{Z^2 e^4 N_j^{2/3}}\right) \right]^{-1} \quad (1.14)$$

Deux critiques essentielles ont été formulées contre l'approximation de Conwell-Weisskopf : d'une part sur la façon dont un angle minimum de collision est introduit, d'autre part sur le fait que

cette approximation néglige l'effet des porteurs libres dans lesquels baignent les ions et qui influent sur l'interaction elle-même en écrantant le potentiel coulombien qui décroît plus vite aux grandes distances qu'un potentiel coulombien nu. L'approximation de Dingle-Brooks-Herring lève ces deux limitations.

I .2.2. L'APPROXIMATION DE DINGLE-BROOKS-HERRING

On ne considère ici que l'écrantage dû aux porteurs de conduction eux-mêmes. La concentration locale $n(\vec{r})$ au voisinage d'une impureté est donnée par la statistique de Fermi-Dirac par :

$$n(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2} \hbar^3} \left(\frac{m^* k_B T}{\pi} \right)^{3/2} F_{1/2} \left(\frac{E_F + e V(\vec{r})}{k_B T} \right) \quad (1.15)$$

où E_F est l'énergie de Fermi et $V(\vec{r})$ est le potentiel créé par l'impureté dans son voisinage. $F_{1/2}$ est l'intégrale de Fermi d'ordre $j = 1/2$ qui a la forme :

$$F_j(z_0) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^\infty \frac{z^j dz}{1 + \exp(z - z_0)} \quad (1.16)$$

Le potentiel vrai $V(\vec{r})$ est lui-même donné par l'équation de Poisson :

$$\Delta V(\vec{r}) = \frac{e}{\epsilon_0} (n(\vec{r}) - n_0) \quad (1.17)$$

où n_0 , concentration électronique moyenne, est obtenue en faisant $V(\vec{r}) = 0$ dans l'équation (1.15).

Dans la limite où on peut considérer $e.V(\vec{r})$ comme faible vis-à-vis de E_F , on peut développer (1.15) au premier ordre et linéariser l'équation (1.17). Avec les conditions aux limites adéquates:

$$\left. \begin{aligned} V(\vec{r}) &= \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r} && \text{quand } |\vec{r}| \rightarrow 0 \\ V(\vec{r}) &= 0 && \text{quand } |\vec{r}| \rightarrow \infty \end{aligned} \right\} \quad (1.18)$$

On obtient le potentiel coulombien écranté sous la forme :

$$V(r) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r} e^{-\beta r} \quad (1.19)$$

où β , appelé facteur d'écran (inverse de la distance d'écran) est donné par [7] :

$$\beta^2 = \frac{n_0 e^2}{\epsilon_0 k_B T} \cdot \frac{F_{-1/2} \left(\frac{E_F}{k_B T} \right)}{F_{1/2} \left(\frac{E_F}{k_B T} \right)} \quad (1.20)$$

On retrouve la limite classique d'une population décrite par la statistique de Maxwell-Boltzmann lorsque E_F est suffisamment loin dans la bande interdite, auquel cas $E_F/k_B T \rightarrow -\infty$, et le rapport $F_{-1/2}/F_{1/2}$ tend vers 1. On a alors :

$$\beta^2 = \frac{n_0 e^2}{\epsilon_0 k_B T} \quad (1.21)$$

C'est l'expression qui correspond à un système non-dégénéré. Le potentiel coulombien écranté (1.19) (associé à (1.20)) s'appliquera d'autant mieux à l'approximation de Born que $4k^2/\beta^2 \gg 1$. Ceci se traduit en disant que la concentration n_0 ne doit pas être trop élevée à des températures pas trop basses. Par exemple pour AsGa à température ambiante on trouve $4k^2/\beta^2 \sim 3,3 \cdot 10^{24}/n_0$ en unités MKS. Cette condition est donc facilement réalisée dans l'usage courant [6].

Le temps de relaxation associé se calcule tout d'abord en prenant la transformée de Fourier de $V(\vec{r})$ soit :

$$|V(\vec{q})| = \frac{Ze}{\epsilon_0(\vec{q}^2 + \beta^2)} \quad (1.22)$$

En utilisant (1.5), puis (1.4), on trouve :

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \frac{N_j Z e^4}{16 \sqrt{2} \pi \epsilon_0^2 m^{*1/2}} \epsilon(\vec{k})^{-3/2} \left(\ln(1+b) - \frac{b}{1+b} \right), \quad (1.23)$$

où

$$b = \frac{4 k^2}{\beta^2} = \frac{8 m^* \epsilon_0(\vec{k})}{\hbar^2 \beta^2} \quad (1.24)$$

L'équation (1.13) permet d'exprimer la mobilité. On trouve, en posant

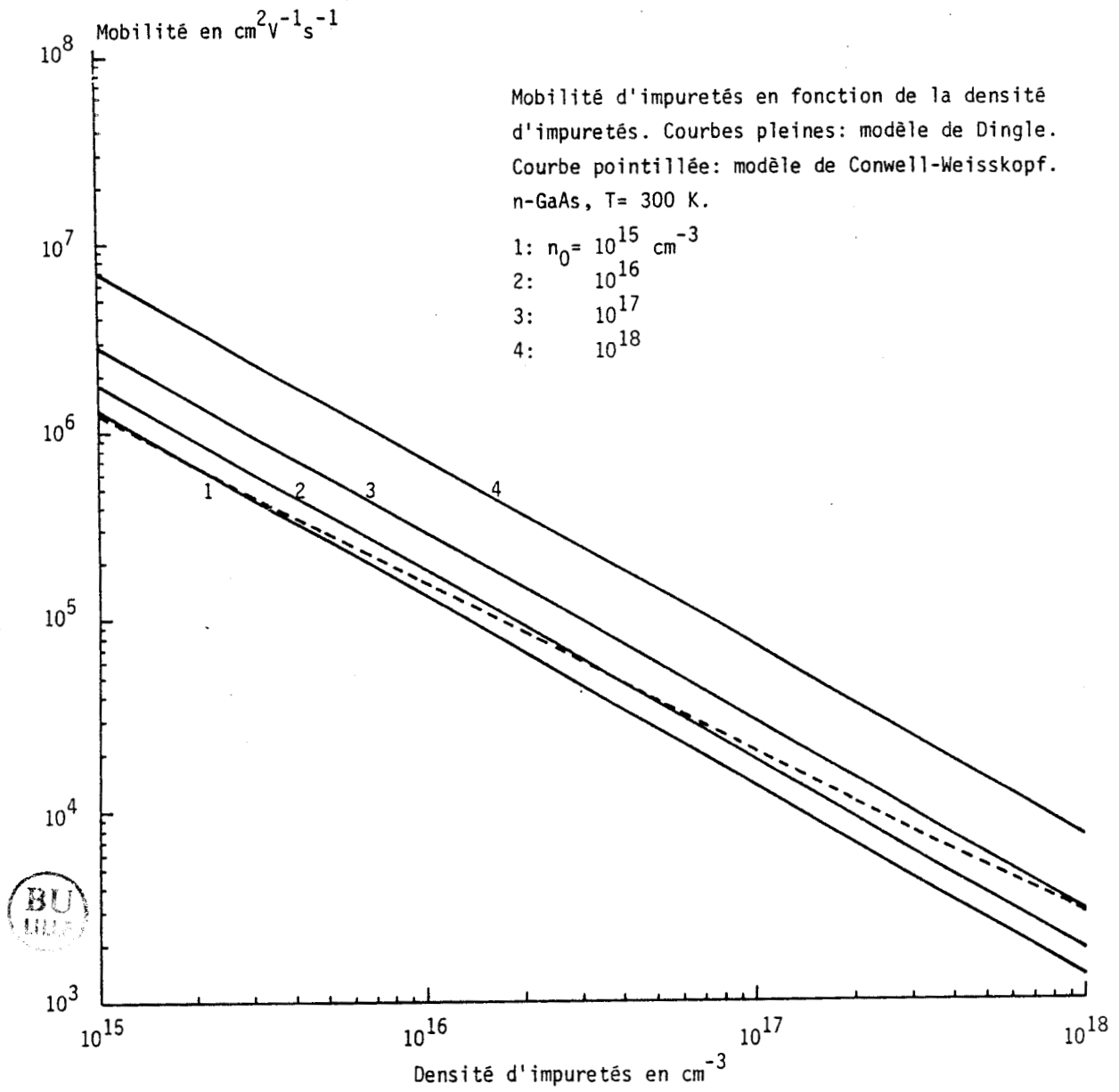
$$b_1 = 24 m^* \epsilon_0 (k_B T)^2 / (n_0 e^2 \hbar^2):$$

$$\mu = \frac{128 \sqrt{2} \pi \epsilon_0^2 (k_B T)^{3/2}}{m^{*1/2} N_i Z^2 e^3} \left(\ln(1+b_1) - b_1/(1+b_1) \right)^{-1} \quad (1.25)$$

(1.14) et (1.25) ne diffèrent donc que par le terme logarithmique, le préfacteur étant le même. Toutefois dans (1.25) n_0 et N_i peuvent être considérés comme variables indépendantes, ce qui n'était pas le cas dans (1.14). Il en ressort que cette formule est certainement mieux adaptée à l'utilisation dans les composants où en général dans les conditions d'utilisation ordinaires, la concentration de porteurs n'est pas égale à la concentration en impuretés. (1.25) constitue l'approximation de Dingle [7].

L'approximation de Brooks-Herring tient compte du phénomène d'écrantage de l'impureté considérée par les autres impuretés avoisinantes [8,9]. Dans un matériau compensé on remplace la concentration n_0 dans (1.21) par :

FIGURE 1.



$$n'_o = n_o + (n_o + N_A) \left(1 - \frac{n_o + N_A}{N_D}\right) \quad (1.26)$$

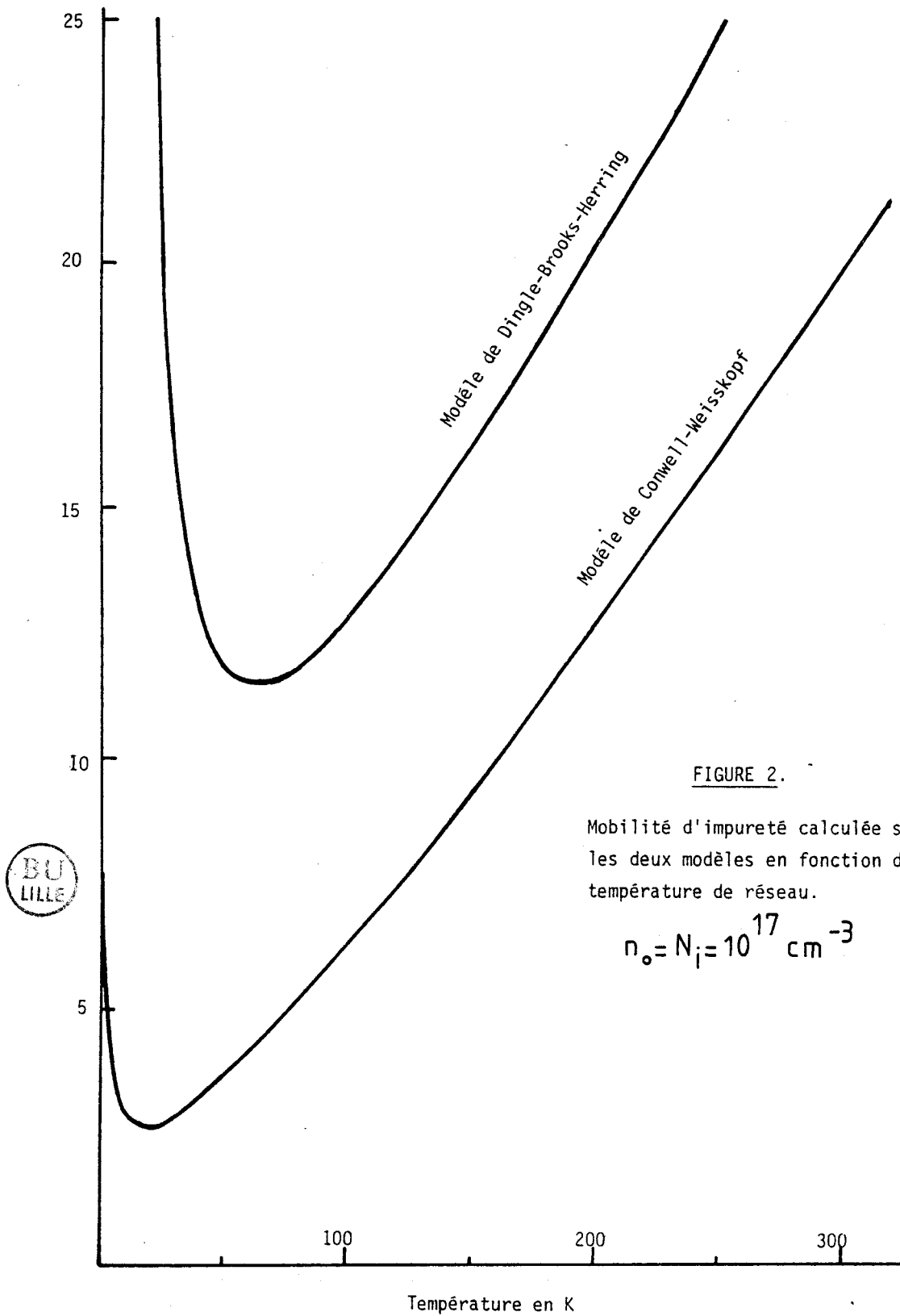
où N_A et N_D sont les concentrations en accepteurs et donneurs. L'approximation inclut alors le phénomène de disparition des porteurs et des ions en basse température. Les deux approximations dues à Dingle et Conwell-Weisskopf sont représentées dans la figure 1 pour la mobilité électronique dans AsGa à la température de 300 K, tracée en fonction de N_i pour diverses valeurs de n_o . On remarque que l'approximation de Conwell-Weisskopf fournit une seule courbe qui traverse à N_i croissant le réseau de courbes fourni par l'approximation de Dingle.

Il est également intéressant de comparer le comportement des deux formules en fonction de la température. Ainsi, la figure 2 représente la variation de la mobilité d'impureté pour AsGa lorsque $n_o = N_i = 10^{17} \text{cm}^{-3}$. Les deux courbes ont des allures très similaires mais sont assez fortement décalées l'une par rapport à l'autre, surtout à basse température.

A ce niveau, il est intéressant de signaler qu'un modèle un peu plus élaboré proposé par RIDLEY [17] permet de faire la connexion entre les modèles de Conwell-Weisskopf et de Dingle. Ce modèle a été utilisé par VAN DE ROER [18] pour des calculs de vitesse de dérive en champ fort dans l'arséniure de gallium.

I.2.3. LIMITATIONS FONDAMENTALES DE CES APPROXIMATIONS

Les deux approximations qui viennent d'être évoquées souffrent d'un certain nombre de limitations que l'on peut classer en deux catégories. La première catégorie concerne des effets fondamen-



taux tels que la polarisation du champ coulombien due à l'électron incident, les effets d'écran dus aux électrons de valence, le problème de l'écrantage non-linéaire,... qui jouent un rôle surtout à densité d'impuretés très élevée ou à basse température. Ces différentes limitations sont traitées de façon assez détaillée dans [5], et nous n'y reviendrons pas. La seconde catégorie nous concernera tout au long de cet exposé : la limitation tient au fait que dans tous les calculs effectués jusqu'à présent, aussi bien n_0 que N_i sont considérés comme uniformes dans tout l'espace. En fait, la relation fondamentale (équation 1.5) repose sur cette hypothèse. Si la densité d'impureté N_i et à fortiori n_0 ne sont pas uniformes, la sommation sur les ions menant à (1.5) n'est plus possible puisque les quantités considérées dépendent de la position de l'électron à chaque instant. Toutefois cette difficulté peut être surmontée si l'on connaît la fonction d'onde enveloppe de l'électron. Ceci se fait actuellement dans le cas des électrons à deux dimensions [10] où les porteurs piégés dans un puits de potentiel ont une fonction d'onde facilement calculable, permettant un calcul aisé et rapide de la mobilité. Cette remarque vaut aussi pour le modèle de RIDLEY [17].

I.3. LA METHODE DE MONTE-CARLO

Ce chapitre se termine par quelques rappels succincts sur la méthode de Monte-Carlo.

I.3.1. PRINCIPE DE LA METHODE

La résolution analytique de l'Equation de Transport de Boltzmann (éq. 1.2) est très difficile eu égard à la complexité analytique due aux termes $S(\vec{k}, \vec{k}')$ dans l'intégrale de collision. Pour obtenir une solution simple, il est nécessaire de faire beaucoup

d'hypothèses simplificatrices mettant en jeu la validité des solutions obtenues. L'ETB est donc résolue en général par des méthodes numériques à l'aide du calculateur. Parmi celles-ci, la méthode de Monte-Carlo figure en bonne place.

La raison du succès de cette méthode tient en grande partie à sa simplicité et sa souplesse d'utilisation. Elle permet entre autres la simulation de composants réalistes complets incluant les conditions aux limites adéquates [11].

Le principe de cette méthode consiste à simuler numériquement et suivre le mouvement stochastique du vecteur d'onde \vec{k} représentatif de l'état du porteur dans l'espace réciproque, tenant compte à chaque instant d'une part de l'effet déterministe du champ électrique qui peut dépendre aussi bien de la position que du temps

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{e}{\hbar} \vec{E}(\vec{r}, t), \quad (1.27)$$

de l'effet des collisions d'autre part.

La connaissance de la structure de bande $\epsilon(\vec{k})$ permet de connaître à chaque instant la vitesse et la position du porteur dans l'espace direct, car :

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{d\epsilon}{d\vec{k}}, \quad \text{et} \quad (1.28)$$

$$\vec{r} = \vec{r}_0 + \int_0^t \vec{v}(t') dt' \quad (1.29)$$

si le porteur a une position d'origine \vec{r}_0 . Par ailleurs, la vitesse moyenne dans la direction du champ électrique se calcule aisément comme la valeur moyenne de la projection de v donnée par (1.28) dans la direction du champ électrique. A ce stade, indiquons que les valeurs moyennes peuvent en général se définir sur un ensemble de porteurs et non pas seulement comme des moyennes sur le temps.

Les collisions subies par le ou les porteurs se caractérisent par des densités de probabilités par unité de temps $S(\vec{k}, \vec{k}')$. Donc :

$$\lambda(\vec{k}) = \frac{V}{8\pi^3} \int S(\vec{k}, \vec{k}') d^3 k' \quad (1.30)$$

représente la probabilité par unité de temps qu'un porteur dans un état \vec{k} subisse une collision qui l'amènera dans un état quelconque autre que \vec{k} . $S(\vec{k}, \vec{k}')$, défini pour chaque type de collision, contient toute l'information nécessaire pour déterminer l'état final après l'interaction.

En pratique, l'échelle de temps est discrétisée en pas temporels élémentaires δt tels que :

$$P(\vec{k}) = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha}(\vec{k}) \delta t < 1 \quad (1.31)$$

où l'entier α porte sur toutes les collisions susceptibles de se produire quand le porteur est dans l'état \vec{k} . Avec un tel concept, $1-P(\vec{k})$ représente la probabilité qu'une accélération de durée δt (éq. 1.27)

n'est suivie d'aucune collision. C'est un nombre pseudo-aléatoire tiré entre 0 et 1 qui décide de l'éventualité et de la qualité de l'interaction qui aura effectivement lieu. Deux nombres aléatoires supplémentaires permettent de déterminer précisément l'état du porteur après collision, en accord avec les principes de conservation de l'énergie et du moment totaux du système porteur-centre collisionnel.

La figure 3 présente le résultat brut donné par la méthode. Quoique cette figure concerne le silicium, elle montre comment l'évolution du porteur est suivie simultanément dans l'espace des vecteurs d'onde et dans l'espace direct.

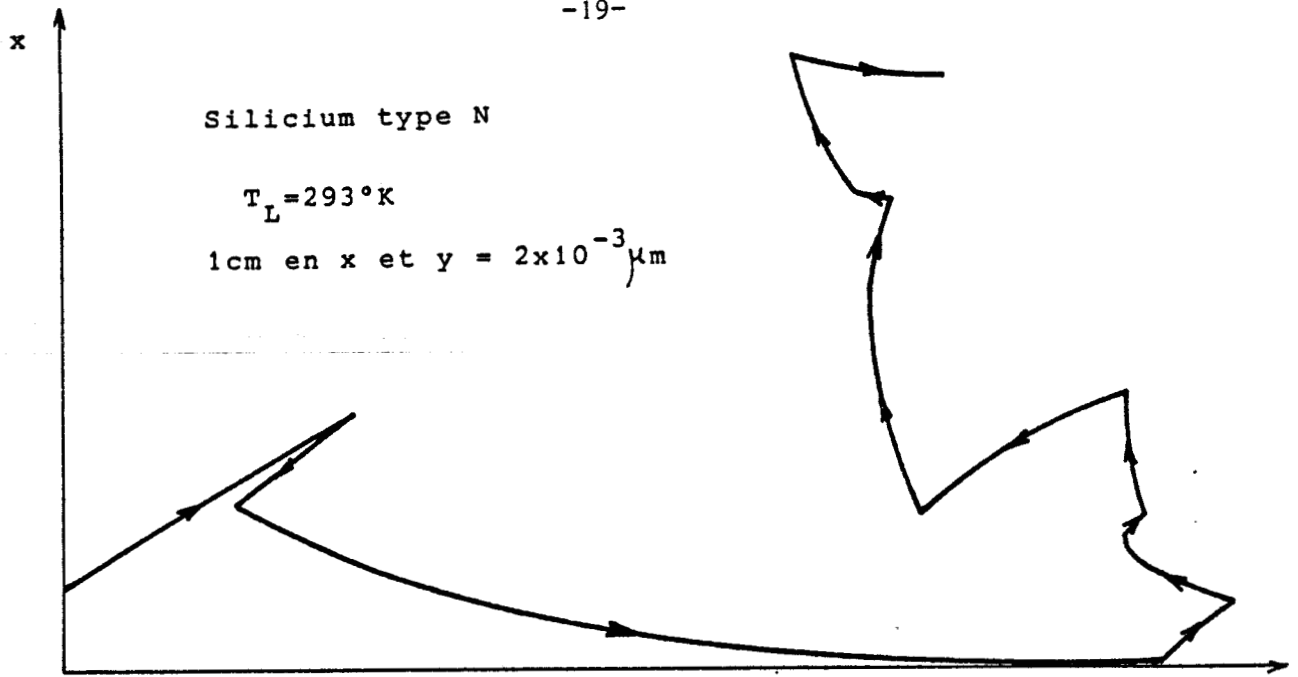
1.3.2. LES PARAMETRES PHYSIQUES DE L'ARSENIURE DE GALLIUM

Essentiellement, les paramètres utilisés dans nos programmes simulant AsGa sont ceux publiés par LITTLEJOHN et al. il y a quelques années [12].

Les bandes d'énergie de conduction suivent l'ordre Γ -L-X, et sont supposées de la forme (Fig. 4) :

$$E(1+dE) = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_0^*} \quad (1.32)$$

L'ensemble des paramètres utilisés sont regroupés dans le tableau 1. Nous présentons en figure 5, la probabilité de collision par unité de temps relative à l'interaction sur impureté [14].



Direction du champ E: y

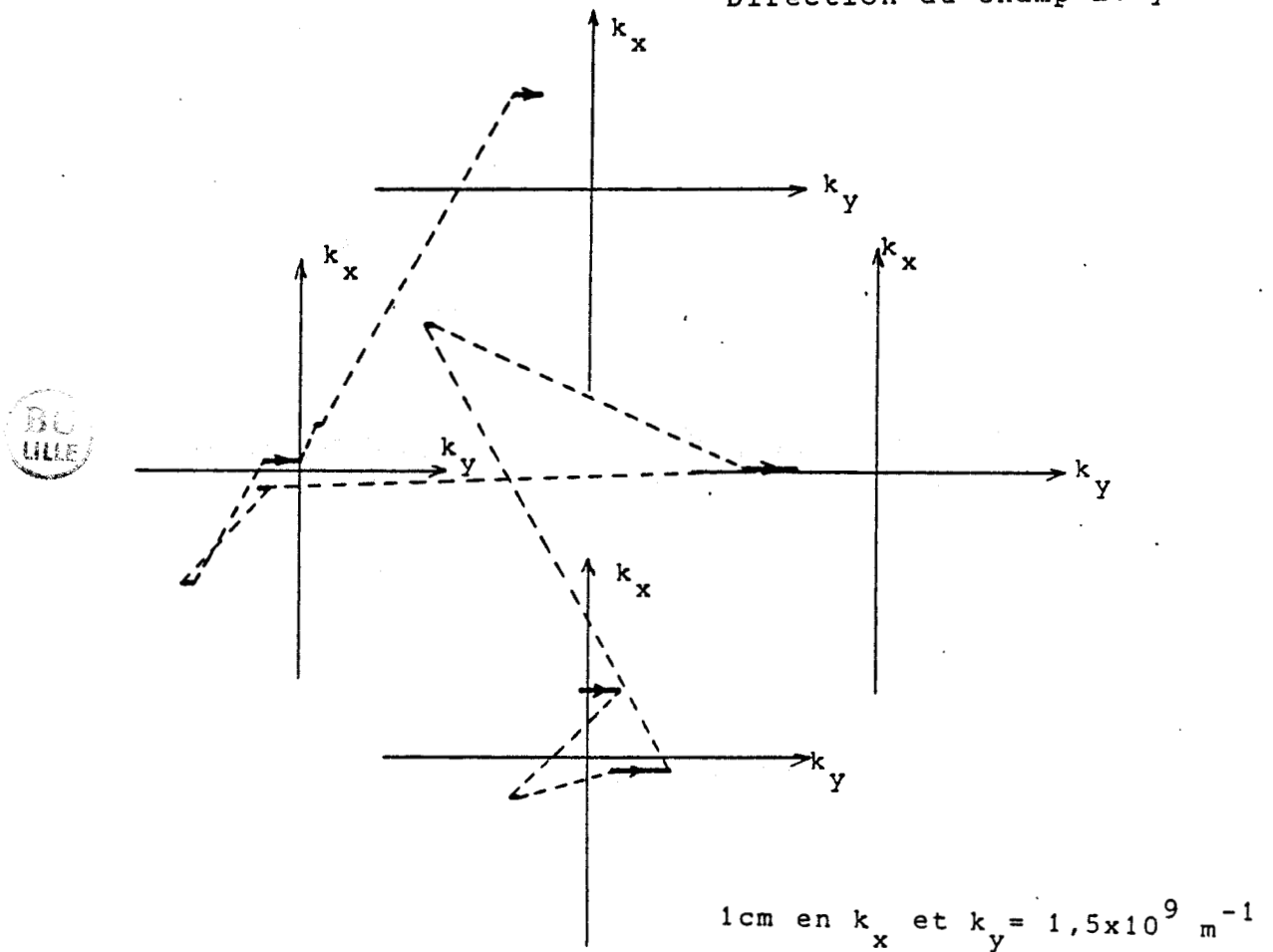


FIGURE 3.

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

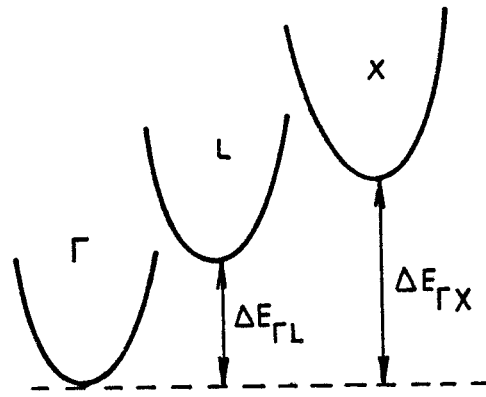


Fig. 4 : Bandes d'énergie de conduction relative à l'AsGa

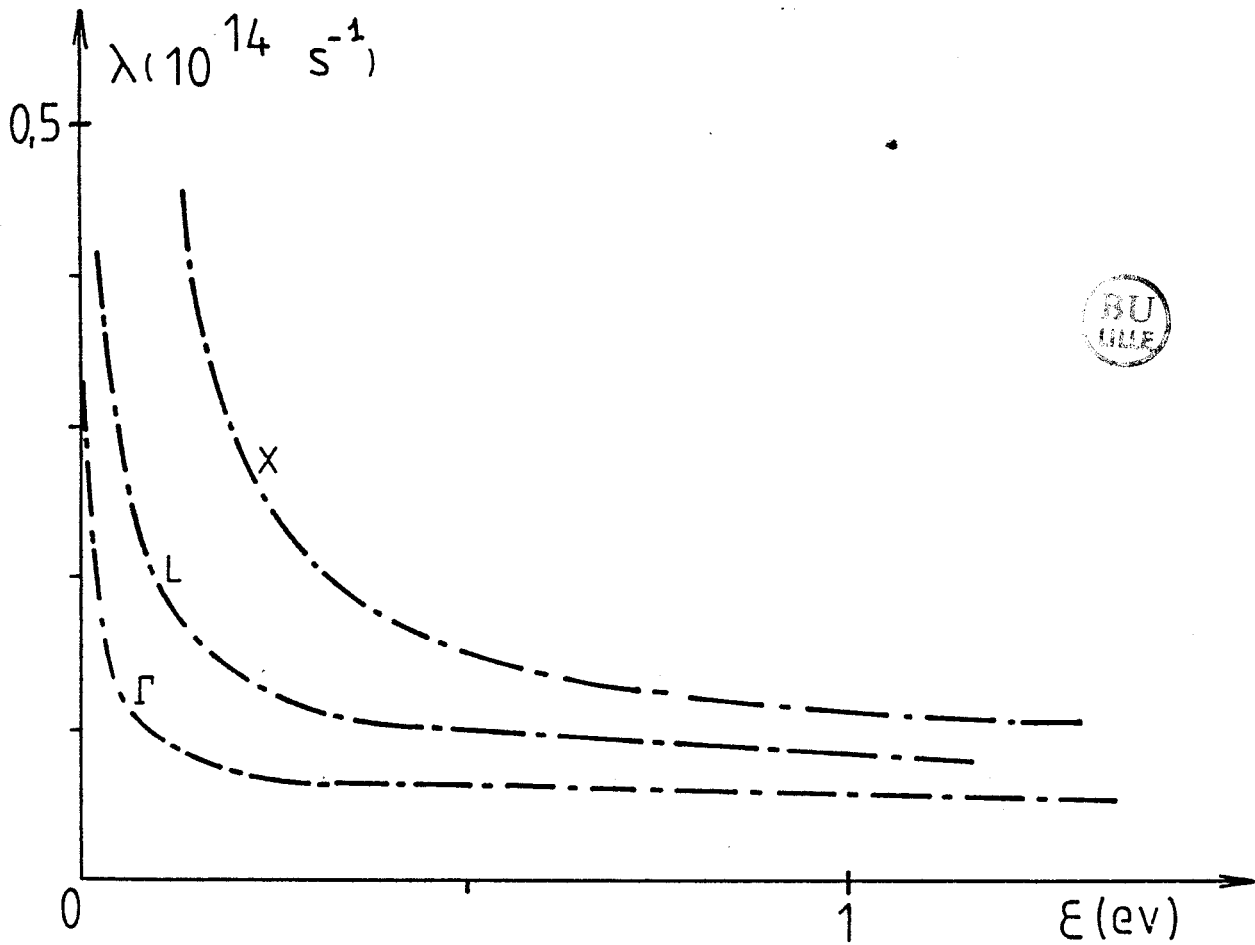


Fig. 5 : Probabilité de collision par unité de temps relative à l'interaction sur impureté.

TABLEAU 1.

paramètres relatifs au matériau

densité	5.36 g/cm ³	vitesse du son	5.24 10 ⁵ cm/s
constante piézoélectrique	0.052	permittivité diélectrique ϵ_{∞}	=10.92
phonon LO	0.03536 eV	permittivité diélectrique ϵ_s	=12.90

paramètres relatifs à la structure de bande

	$\Gamma(0,0,0)$	L(1,1,1)	X(1,0,0)
masse effective m_o^*/m_o	0.067	0.222	0.58
coefficient de non parabolicité	0.610 eV ⁻¹	0.461 eV ⁻¹	0.204 eV ⁻¹
gap par rapport à la bande de valence	1.439 eV	1.769 eV	1.961 eV
potentiel de déformation acoustique	7 eV	9.2 eV	9.27 eV
potentiel de déformation optique	0	3.10 ⁸ eV/cm	0
phonon optique	0	0.0343 eV	0
potentiel de déformation intervallée			
Γ	0	10 ⁹ eV/cm	10 ⁹ eV/cm
L	10 ⁹ eV/cm	10 ⁹ eV/cm	5.10 ⁸ eV/cm
X	10 ⁹ eV/cm	5.10 ⁸ eV/cm	7.10 ⁸ eV/cm
phonon intervallée			
Γ	0	0.0278 eV	0.0299 eV
L	0.0278 eV	0.0290 eV	0.0293 eV
X	0.0299 eV	0.0293 eV	0.0299 eV
nombre de vallées équivalentes	1	4	3

CHAPITRE II

UN NOUVEAU MODELE

DE L'INTERACTION ELECTRON-IMPURETE

CHAPITRE II

UN NOUVEAU MODELE DE L'INTERACTION ELECTRON-IMPURETE

PREAMBULE :

Notre objectif consiste à bâtir un modèle spécifique de l'interaction électron-impureté permettant de pallier la restriction des théories usuelles décrites au chapitre I, paragraphe I.2.3. Pour caractériser cette interaction, deux procédures sont envisageables :

- une analyse et une résolution purement théorique
- une simulation du type Monte-Carlo.

La première exige la résolution de l'équation de transport de Boltzmann, or, sa complexité nous oblige à y renoncer. C'est la raison pour laquelle nous nous sommes orientés vers une simulation numérique.

Le modèle que nous allons établir est adapté à l'AsGa, mais son application peut être étendue à tout type de semi-conducteur homogène ou hétérogène dès lors que l'on y introduit les paramètres relatifs au matériau considéré.

Remarque :

Dorénavant, nous distinguerons deux types d'interactions qui influent sur le comportement de l'électron :

- l'effet du champ électrique appliqué à l'extérieur du

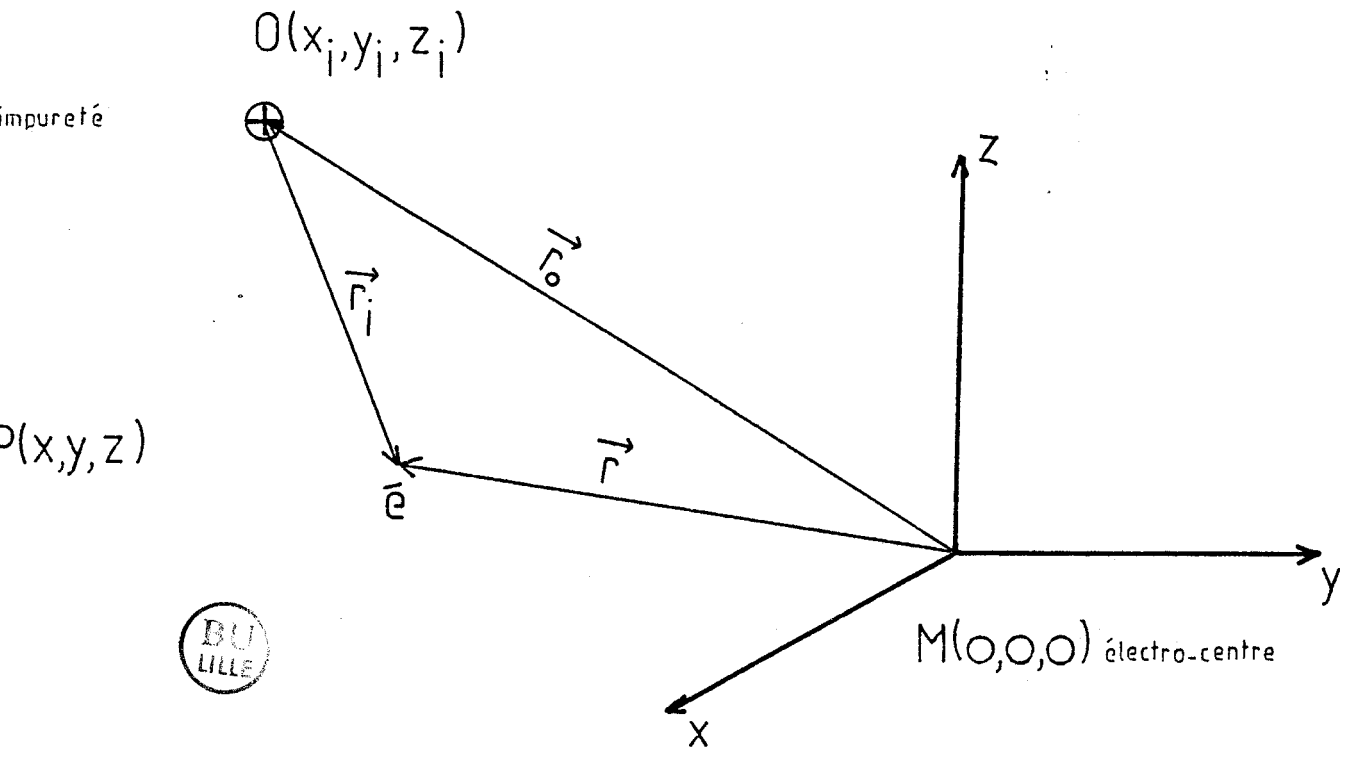


Figure 6

Repérage de la position des impuretés par rapport à une origine fixe M.

matériau et l'ensemble de toutes les interactions sur le réseau (à l'exclusion de celles sur impuretés). La contribution de cette catégorie d'interactions sur le mouvement de l'électron est évaluée par [14].

- l'interaction électron-impureté, ou collision sur impureté.

II.1. UN MODELE PUREMENT DETERMINISTE

C'est le tout premier modèle que nous avons essayé d'élaborer. Son avantage réside dans la simplicité de son principe qui engendre une mise en oeuvre aisée.

II.1.1. PRINCIPE

Il s'agit de reconstituer l'environnement atomique que perçoit un électron lorsqu'il évolue au sein d'un cristal de semi-conducteur. Pour cela, on dispose aléatoirement N impuretés dans un volume V de matériau. La concentration d'impuretés N_i vaut :

$$N_i = \frac{N}{V} \quad (2.1)$$

La position des impuretés étant figée, nous connaissons leurs coordonnées \vec{r}_0 par rapport à une origine fixe appelée électro-centre (Fig. 6). Le champ électrostatique $\vec{\mathcal{E}}_i$ développé par une impureté en un point quelconque $P(x, y, z)$ de l'espace est défini par :

$$\vec{\mathcal{E}}_i = \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{r}_i}{|\vec{r}_i|^3} \quad (2.2)$$

Si nous supposons que chaque impureté agit individuellement sur l'électron, alors le champ électrostatique $\vec{\mathcal{E}}$ résultant de l'effet des N impuretés équivaut à :

$$\vec{\mathcal{E}} = \sum_{i=1}^{i=N} \vec{\mathcal{E}}_i \quad (2.3)$$

II.1.2. CARACTERISATION DE L'ETAT ELECTRONIQUE

A la fin du vol libre, l'électron caractérisé par son vecteur d'onde $\vec{k}(t)$ subit une interaction sur impureté à l'instant $t + \Delta t$. Son nouveau vecteur d'onde sera :

$$\vec{k}(t + \Delta t) = \vec{k}(t) + \frac{q}{\hbar} (\vec{\mathcal{E}} + \vec{E}) \cdot \Delta t \quad (2.4)$$

où \vec{E} représente le champ électrique extérieur appliqué au semi-conducteur.

II.1.3. INTRODUCTION DES EFFETS D'ECRAN

L'implantation de l'écrantage est réalisé en modifiant le champ électrostatique afférant aux impuretés comme suit :

$$\vec{E}_i = \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^{-\beta|\vec{r}_i|}}{|\vec{r}_i|^3} \cdot \vec{r}_i \quad (2.5)$$

où β désigne le paramètre d'écran défini en (I.2.1.)

II.1.4. INCONVENIENTS

- (i) La nécessité de mémoriser les positions des N impuretés conduit à des temps de calcul numérique prohibitifs.
- (ii) Le potentiel coulombien qu'il soit écranté ou pas, provoque un échauffement important des électrons. Ainsi les porteurs simulés ont tendance à transférer vers les vallées satellites sans raison apparente, même en absence de champ électrique externe. Afin de pourvoir à ce défaut nous avons exclus toute possibilité de recombinaison électron-ion en interdisant aux porteurs de s'approcher à moins d'une distance d_0 des impuretés. Cette distance d_0 est déduite d'une énergie d'activation supposée de $e_0 = 50_{\text{mev}}$ par la relation

$$e_0 = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 d_0} \quad (2.6)$$

Malgré cette précaution, nous n'avons pu empêcher l'échauffement des porteurs. Par ailleurs, il s'est avéré que les temps calcul nécessaires à la détermination du champ coulombien total \vec{E} sont considérables dès que le nombre d'ions pris en compte dépasse la centaine. Ces deux facteurs nous ont contraint d'abandonner cette méthode en dépit de sa simplicité et son intérêt physique.

II.2. UN NOUVEAU MODELE

Dans le modèle proposé ici, c'est celui que nous avons exploité dans ce travail, nous renonçons à probabiliser l'interaction par l'intermédiaire de l'approximation de Born et abandonnons le concept de taux de collision par unité de temps. La méthode de Monte-Carlo permettant de connaître l'état de la particule mobile à chaque instant, c'est la distance b du centre ionisé le plus proche de la particule qui est calculée en admettant qu'un facteur d'écran β que l'on peut relier à la densité macroscopique n_0 des porteurs détermine le rayon d'action du potentiel mutuel coulombien. A l'instar des modèles de Conwell-Weisskopf et Dingle-Brooks-Herring, notre modèle repose sur l'hypothèse d'un potentiel à deux corps.

II.2.1. DETERMINATION DES TEMPS D'INTERACTION

II.2.1.1. Formalisme

Considérons un électron se déplaçant dans un cristal contenant des ions fixes. Si la densité d'ions est N_i , la distance moyenne entre les ions sera :

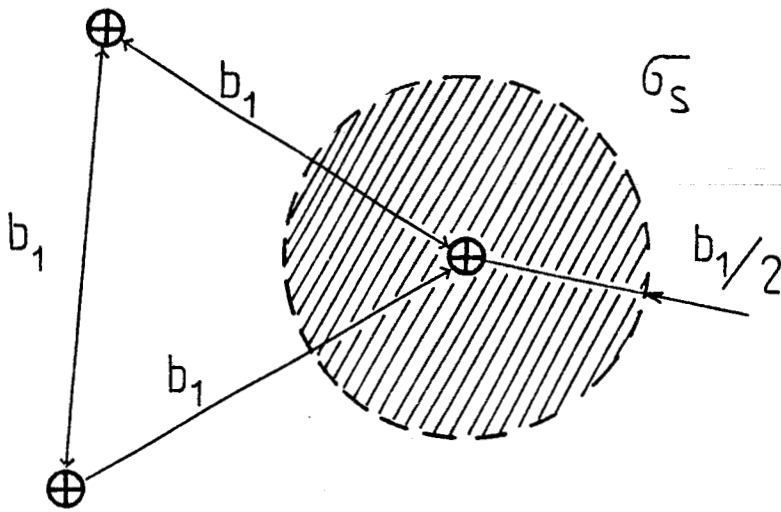


Figure 7.

La section efficace de collision (surface hachurée) est définie de façon qu'elle ne contienne qu'une impureté.

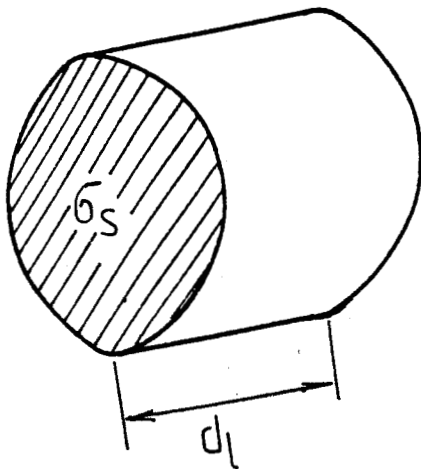


Figure 8.

Volume élémentaire dV .

$$b_1 = N_i^{-1/3} \quad (2.7)$$

Au cours de son mouvement l'électron passera de façon stochastique du voisinage d'un ion au voisinage d'un autre. Soit τ_i le temps s'écoulant durant ce passage. Considérons l'électron effectuant un déplacement dl le long de sa trajectoire, on a :

$$dl = v \cdot dt, \quad (2.8)$$

et durant dt l'électron aura vu dn ions dans son voisinage.

Nous supposons qu'une seule impureté agit sur le comportement de l'électron au moment de chaque interaction.

Cette hypothèse est vérifiée si nous restreignons la section efficace de collision à :

$$\sigma_s = \frac{\pi b_1^2}{4}, \quad (2.9)$$

de telle sorte qu'elle ne contienne qu'une impureté (Fig. 7).

Dans la mesure où dt est un infiniment petit, on peut considérer que le déplacement dl est rectiligne et définir un volume élémentaire dV par (Fig. 8) :

$$dV = \sigma_s \cdot dl = \sigma_s \cdot v \cdot dt \quad (2.10)$$

Le nombre d'ions présents dans ce volume équivaut à :

$$dn = N_j \cdot dV = \frac{\pi b_1^2}{4} \cdot v \cdot dt \cdot N_j \quad (2.11)$$

$$dn = \frac{\pi}{4} \cdot b_1^2 \cdot v \cdot dt \cdot \frac{1}{b_1^3} \quad (2.12)$$

et le nombre d'ions vu par l'électron par unité de temps vaut :

$$\frac{dn}{dt} = \frac{\pi}{4} \cdot \frac{v}{b_1} \quad (2.13)$$

Sachant que durant τ_i , l'électron ne doit voir qu'un seul ion, alors :

$$\int_0^{\tau_i} dt = \frac{4}{\pi} \cdot \frac{b_1}{v} \int_{n(0)}^{n(\tau_i)} dn \quad (2.14)$$

$\underbrace{n(0)}_{= 1 \text{ ion}}$

soit : $\tau_i = \frac{4}{\pi} \cdot \frac{b_1}{v} \quad (2.15)$

ou encore : $\tau_i = \frac{4}{\pi N_j^{1/3} v} \quad (2.16)$

On voit donc que c'est la distribution de v , variable vitesse aléatoire qui détermine la distribution des temps d'interaction τ_i . Dans le processus de simulation, la valeur de v étant connue à chaque instant, on peut calculer les τ_i au cours de celle-ci.

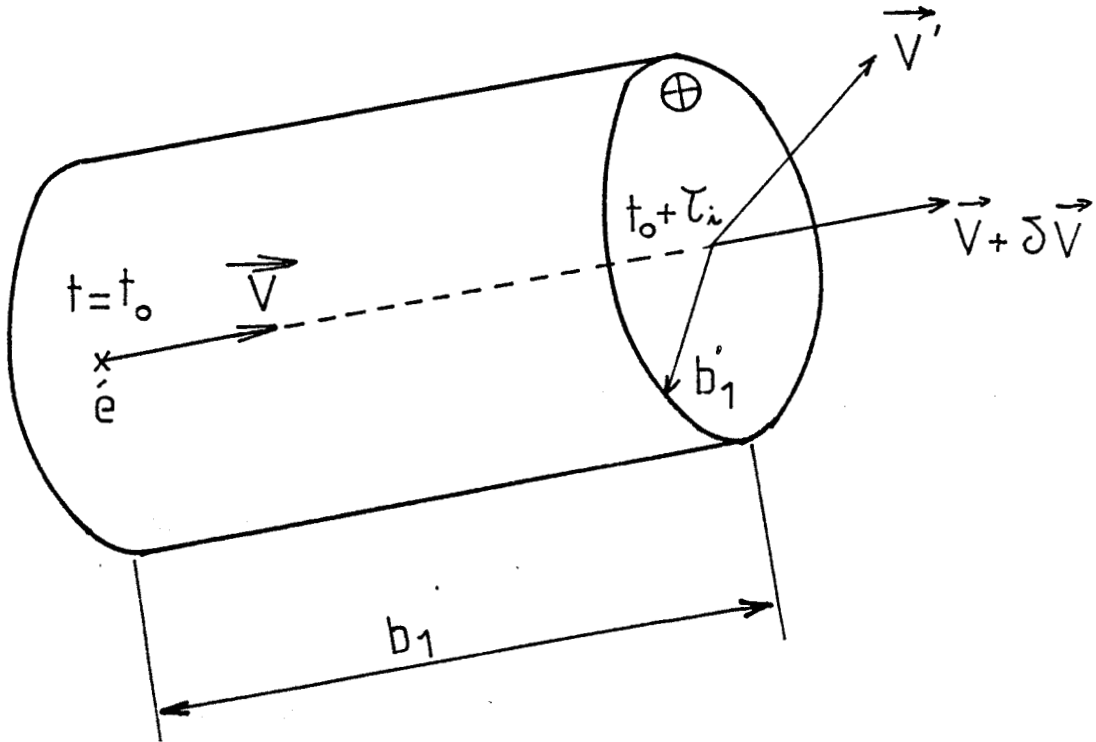


Figure 9

Caractérisation de l'état électronique après l'interaction sur impuretés (dans l'hypothèse où la trajectoire est très peu modifiée entre deux interactions sur impuretés successives).

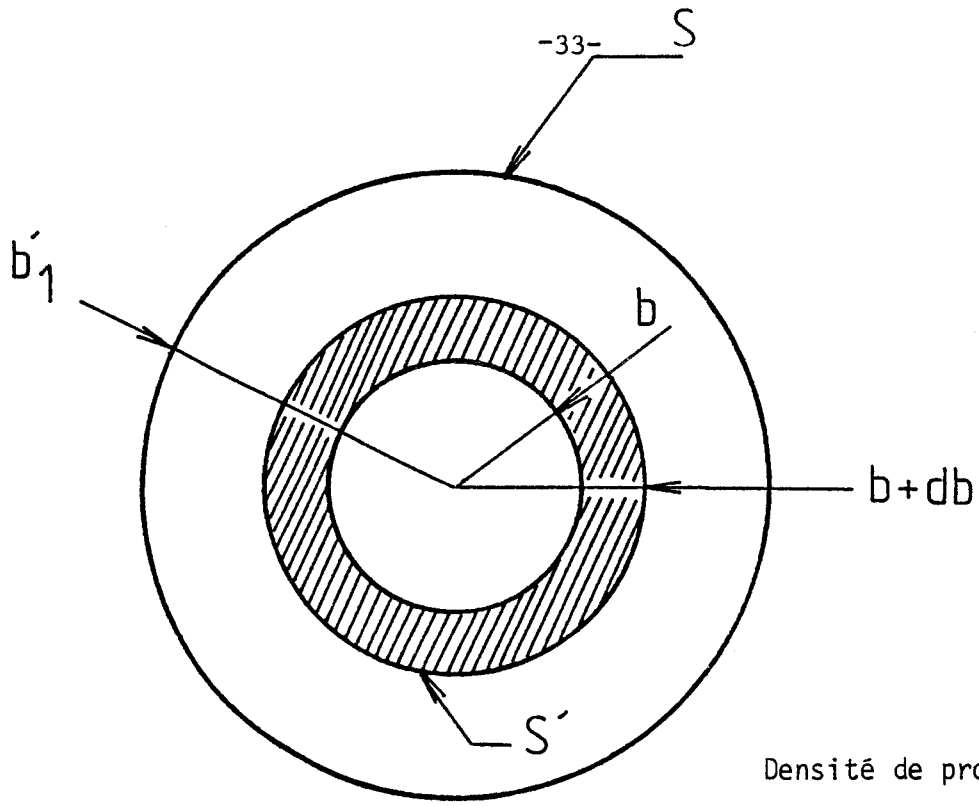
Dans la limite où la trajectoire est peu modifiée durant l'intervalle de temps τ_i , cette valeur donne une bonne approximation de l'intervalle de temps s'écoulant réellement entre deux interactions électron-impureté successives. C'est donc là une première approximation. Une seconde approximation est que dans (2.11) b_1 est considérée comme fixe alors qu'en réalité, ses valeurs sont distribuées. Cette approximation a été testée dans un de nos programmes avec une loi de Poisson ; elle s'est révélée sans effets détectables au niveau du calcul de la mobilité.

II.2.2. DETERMINATION DE L'ETAT ELECTRONIQUE APRES L'INTERACTION

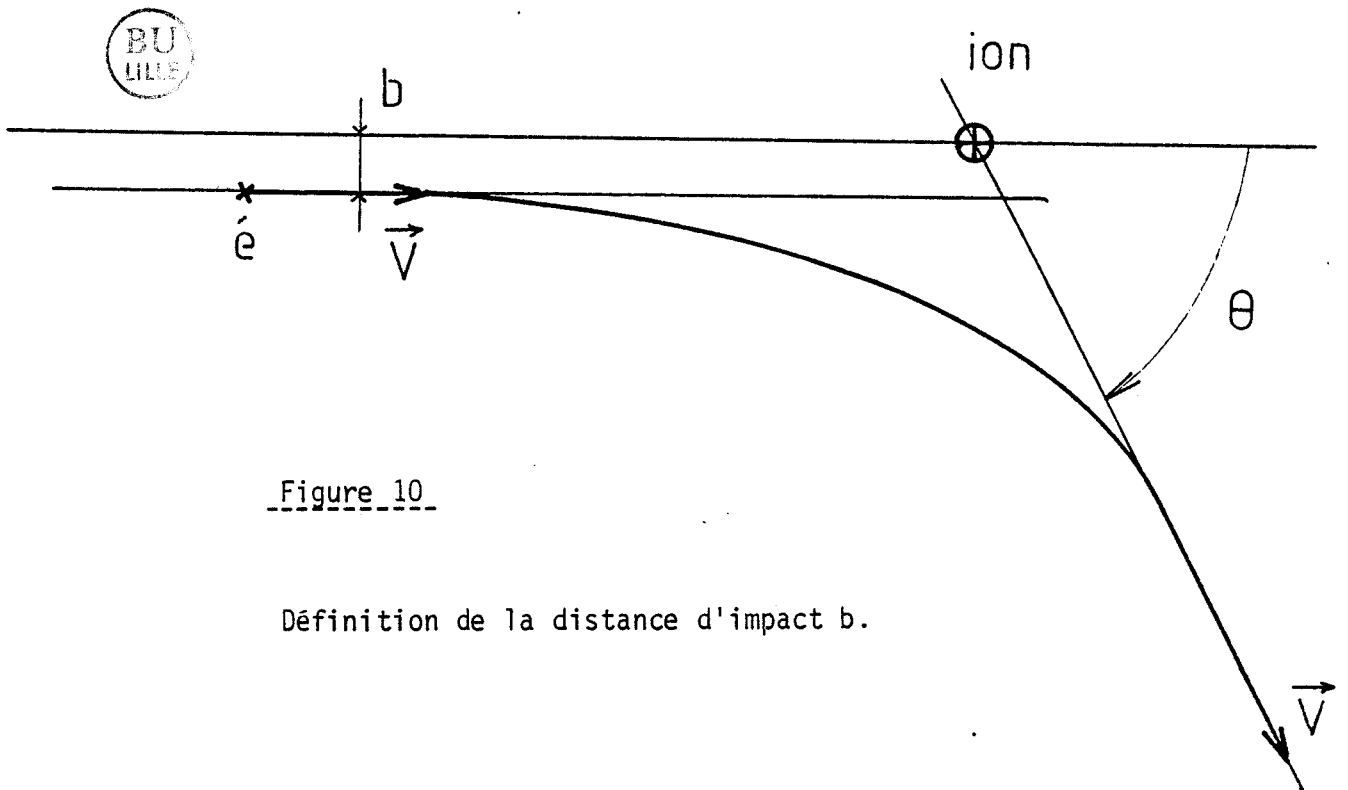
A un instant t_0 , l'électron sort d'une interaction électron-impureté avec une vitesse v . L'interaction suivante aura lieu à $t_0 + \tau_i$ où τ_i est donné par (2.16). Durant le parcours effectué durant τ_i il pourra survenir d'autres interactions (électron-phonon entre autres). De toute façon, à $t_0 + \tau_i$ l'état de l'électron est connu et l'interaction avec la nouvelle impureté va pouvoir être effectuée (Fig. 9).

Nous dirons que la position de l'ion à $t_0 + \tau_i$ est dans un plan orthogonal à la trajectoire de l'électron et passant par la position de celui-ci. Il reste donc à définir la distance de l'ion à l'électron et sa position azimutale autour de ce dernier. Nous savons que dans le volume b_1^3 il n'y a en moyenne qu'un seul ion. Donc celui-ci se trouvera à une distance maximum b'_1 de l'électron telle que :

$$\pi b_1^2 b'_1 = b_1^3 \quad , \quad (2.17)$$



$$p(b) \cdot db = \frac{S'}{S}$$



soit :
$$b_1' = b_1 / \sqrt{\pi} \quad (2.18)$$

II.2.2.1. Calcul du paramètre d'impact

Si on suppose que la collision sur impureté est instantanée, on s'intéresse à la trajectoire asymptotique et on peut confondre la distance de l'ion à l'électron avec le paramètre d'impact b .

Soit b la distance de l'ion à l'électron et $p(b)$ la densité de probabilité de b , on a (Fig.10) :

$$dn = p(b).db = N_i^{2/3} \left(\pi (b+db)^2 - \pi b^2 \right), \quad (2.19)$$

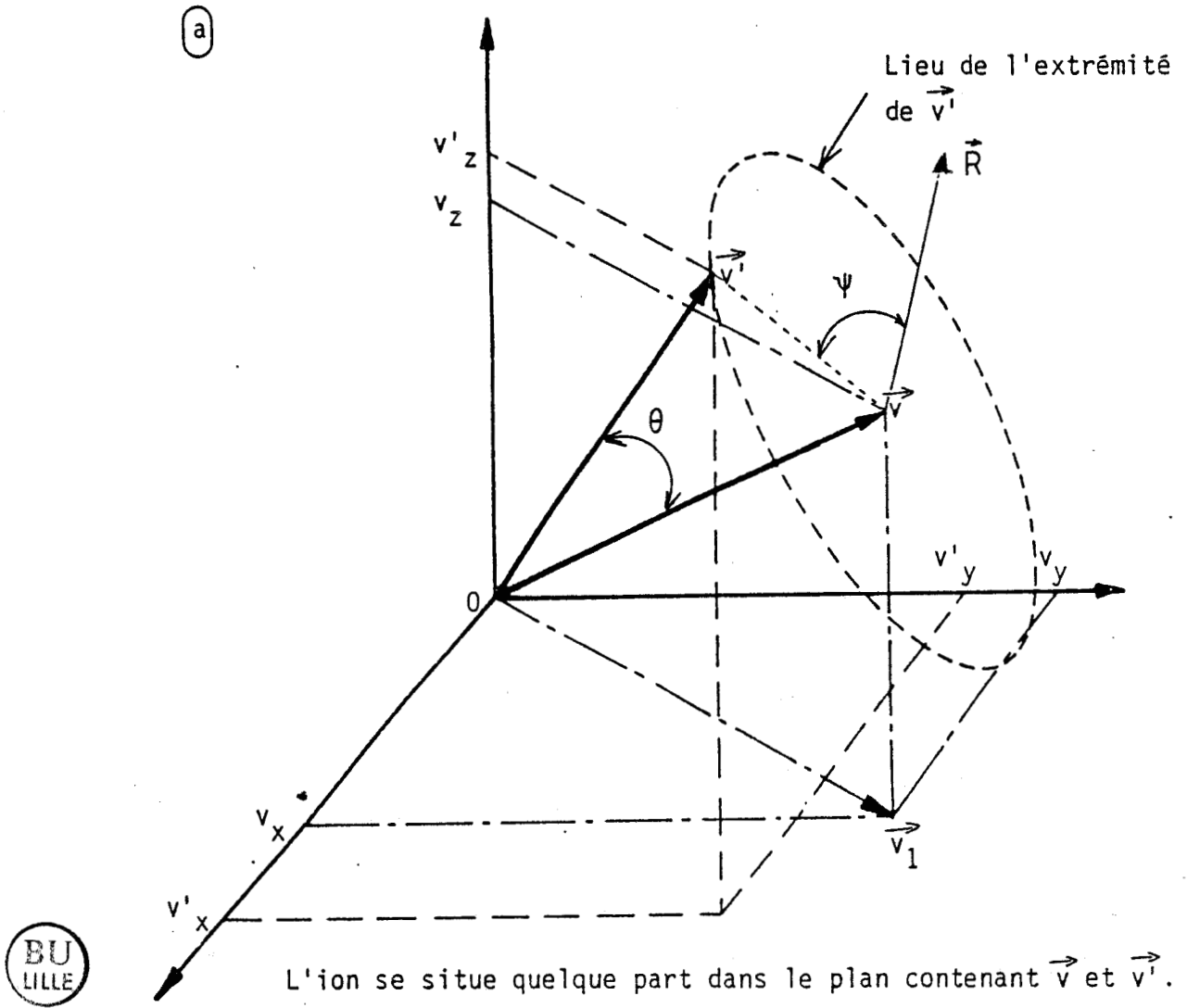
où dn est le nombre d'ions dont le paramètre d'impact est compris entre b et $b + db$. De (2.19), il vient :

$$p(b) db = N_i^{2/3} \cdot 2\pi \cdot b \cdot db, \quad (2.20)$$

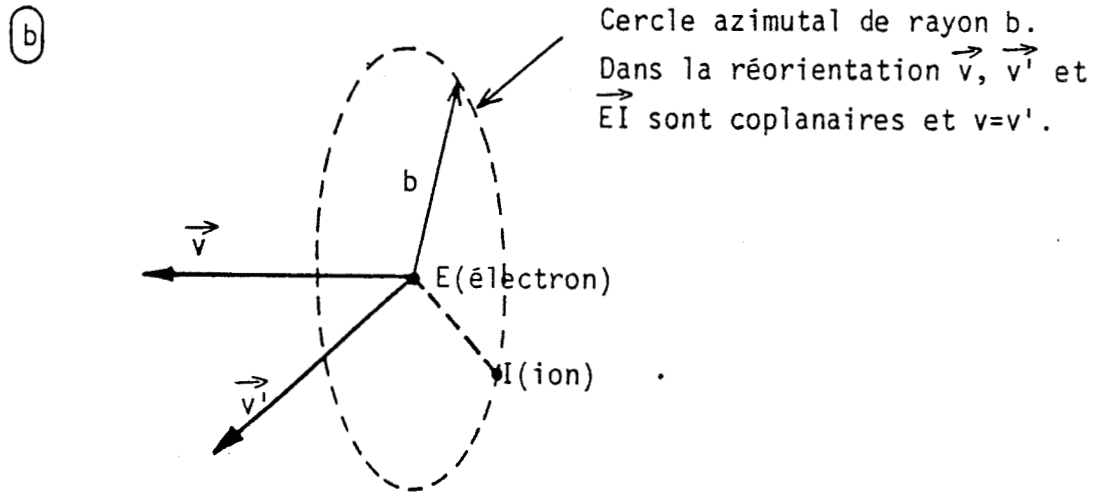
soit :
$$p(b) = 2 \cdot \pi \frac{b}{b_1'^2} = 2 \cdot \frac{b}{b_1'^2} \quad (2.21)$$

Cette densité est normée puisque $b < b_1'$

Figure 11



où v_x, v_y, v_z représentent les composantes du vecteur vitesse \vec{v} avant l'interaction, θ l'angle de déviation relatif à l'interaction sur impureté, Ψ l'angle azimutal repéré par rapport à une direction fixe \vec{R} .



Pour avoir la vraie valeur de b , on choisit un nombre aléatoire s , $0 < s < 1$, et on écrit :

$$s = \int_0^b p(b') db' \quad (2.22)$$

On trouve :

$$b = b(s) = b'_1 \cdot \sqrt{s} = b_1 \sqrt{s} / \pi \quad (2.23)$$

II.2.2.2. Calcul de l'angle de déviation

Si on s'intéresse à un matériau de dopage homogène, la position azimutale ψ de l'ion sur le cercle de rayon b est aléatoire entre 0 et 2π . Tirant un nombre pseudo-aléatoire r , $0 < r < 1$, on aura (Fig. 11) :

$$\psi = 2\pi r \quad (2.24)$$

Le problème du dopage non homogène sera évoqué dans un prochain paragraphe.

La détermination de l'angle de collision θ formé par les vecteurs vitesse de l'électron avant et après la collision dépend de l'hypothèse qui est faite sur le potentiel mutuel entre l'électron et l'ion.

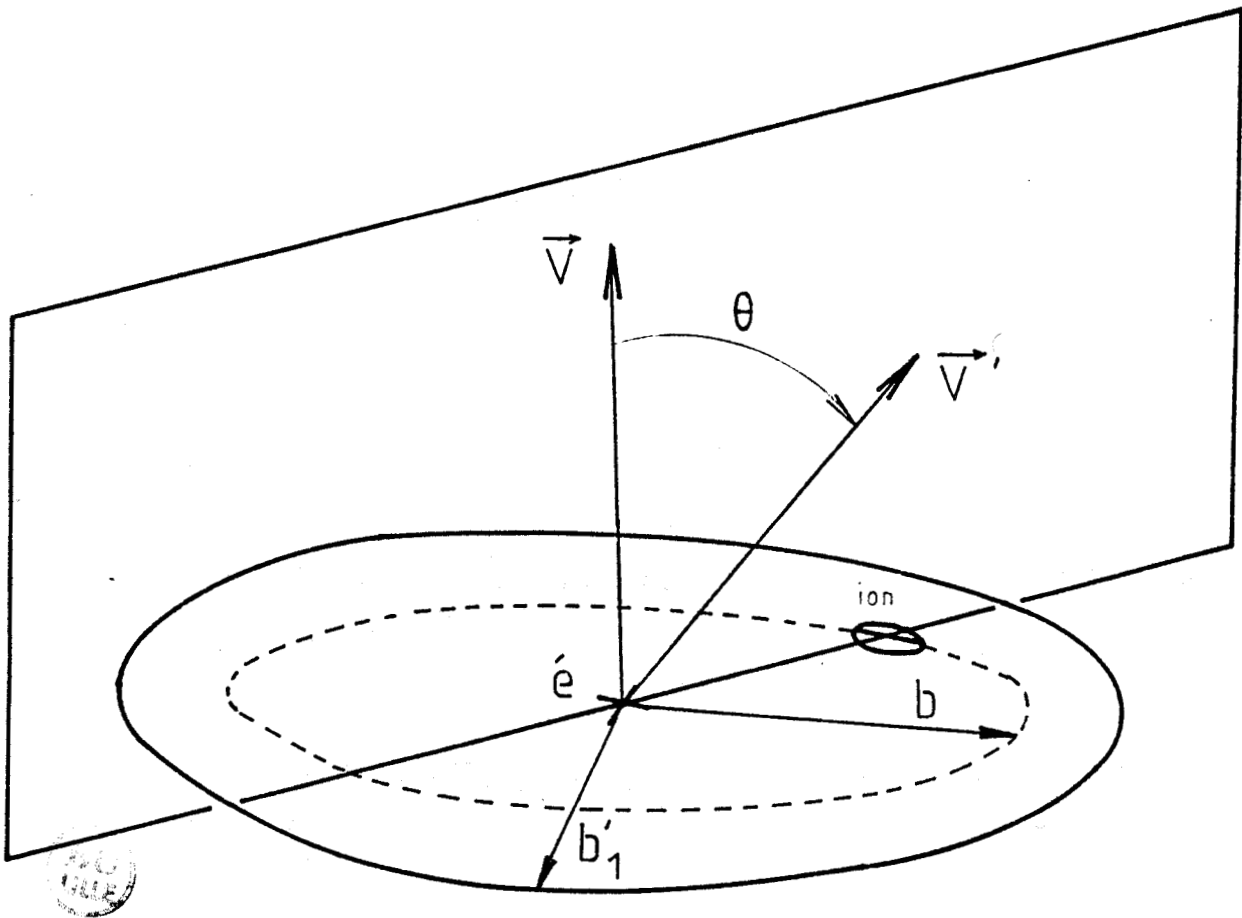


Figure 12.

La déviation de la trajectoire se fait dans un plan contenant l'électron, l'ion et le vecteur vitesse \vec{v} .

Dans le cas d'un potentiel coulombien pur dont la forme est $V(\vec{r}) = K/|\vec{r}|$, en explicitant le Lagrangien du système électron-impureté, on aboutit à l'expression de l'angle de déviation θ donné par : [15,16]

$$\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 b E(\vec{k})}, \quad (2.25)$$

où $\epsilon(\vec{k})$ est l'énergie de l'électron au moment de l'interaction supposée élastique.

La déviation de la trajectoire, caractéristique d'un mouvement à force centrale, se fera dans un plan contenant le vecteur vitesse, l'ion et l'électron (Fig. 12).

Dans le cas de bandes de conduction non-paraboliques (éq. 1.32) comme pour AsGa, on peut généraliser (2.25) en montrant que :

$$\cos \theta = \frac{64\pi^2 \epsilon_0^2 b^2 \epsilon_1^2 - e^4}{64\pi^2 \epsilon_0^2 b^2 \epsilon_1^2 + e^4}, \quad (2.26)$$

avec :

$$\epsilon_1(k) = \epsilon \cdot \frac{1 + \alpha \epsilon}{(1 + 2\alpha \epsilon)^2} \quad (2.27)$$

α : coefficient de non parabolicité.

Dans le repère lié au champ électrique, la nouvelle vitesse v' après collision sera calculée par :

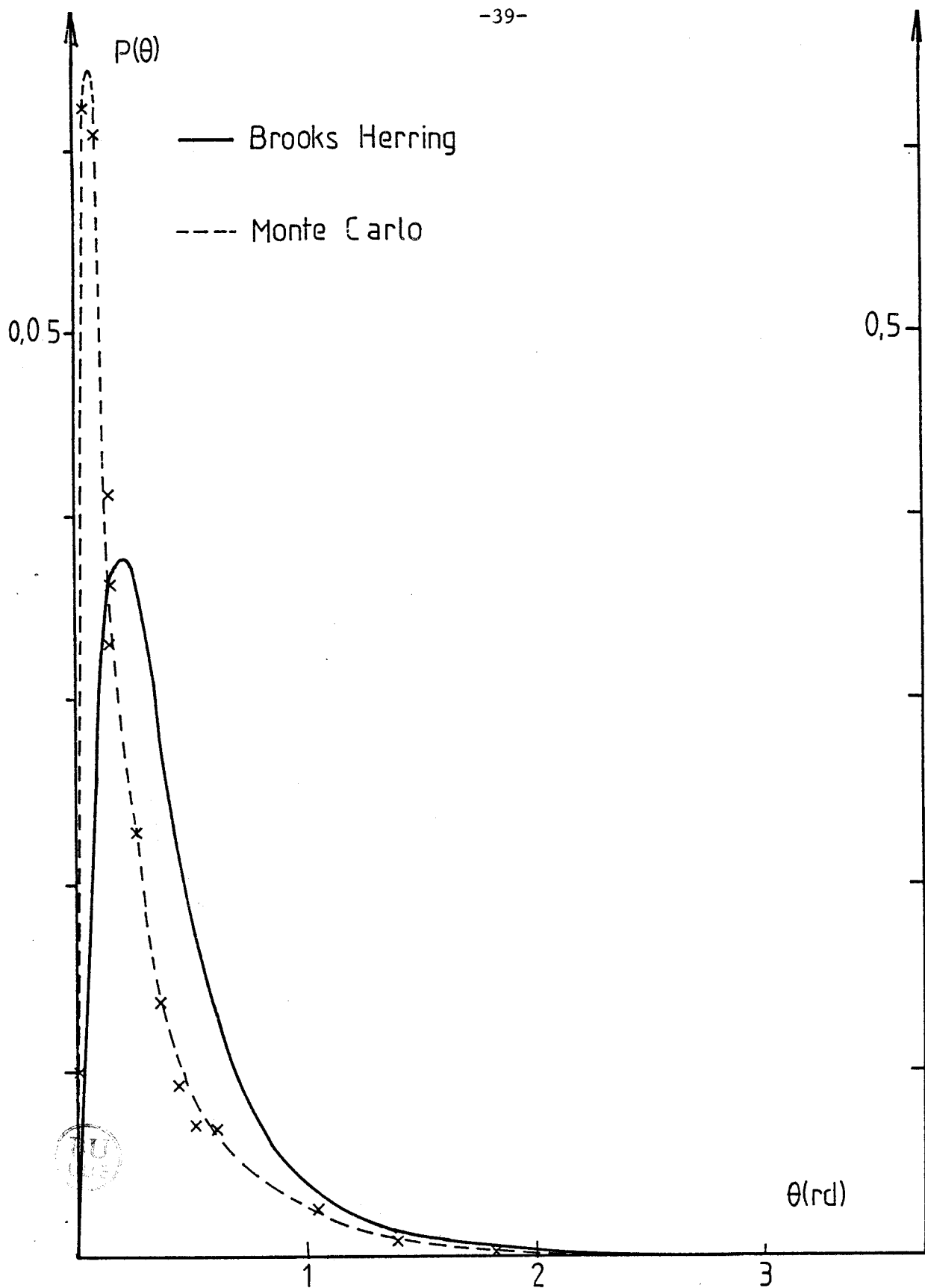


Figure 13

Distribution des angles de réorientation relatifs à l'interaction sur impuretés.

$$\left. \begin{aligned} v'_x &= v_x \cos \theta + v_x \cdot v_z \sin \theta \cdot \cos \Psi / v_1 - v_y |v| \sin \theta \cdot \sin \Psi / v_1 \\ v'_y &= v_y \cos \theta + v_y \cdot v_z \sin \theta \cdot \cos \Psi / v_1 + v_x |v| \sin \theta \cdot \sin \Psi / v_1 \\ v'_z &= v_z \cos \theta - v_1 \sin \theta \cos \Psi \end{aligned} \right\} \quad (2.27a)$$

où $v_1 = (v_x^2 + v_y^2)^{1/2}$ (voir Fig. 11)

II.2.2.3. Caractérisation de l'interaction électron-impureté.

- Distribution des angles de réorientation $p(\theta)$

L'allure de $p(\theta)$ obtenue par simulation numérique présentée en Fig. 13 est très voisine de celle de Brook-Herring dont l'équation est la suivante :

$$P(\theta) = \frac{\int_0^{\infty} n(\epsilon) \cdot S_{BH}(\theta) d\epsilon}{\int_0^{\infty} n(\epsilon) d\epsilon} \quad (2.28a)$$

où $S_{BH}(\theta) = A \cdot \frac{\sin \theta}{(\epsilon(1+\alpha\epsilon)(1-\cos\theta) \frac{4m^*}{\hbar^2} + \beta^2)^2}$ (2.28b)

et $n(\epsilon)$ représente la densité d'état d'énergie dans le cas de bandes non paraboliques, et A une constante de normalisation.

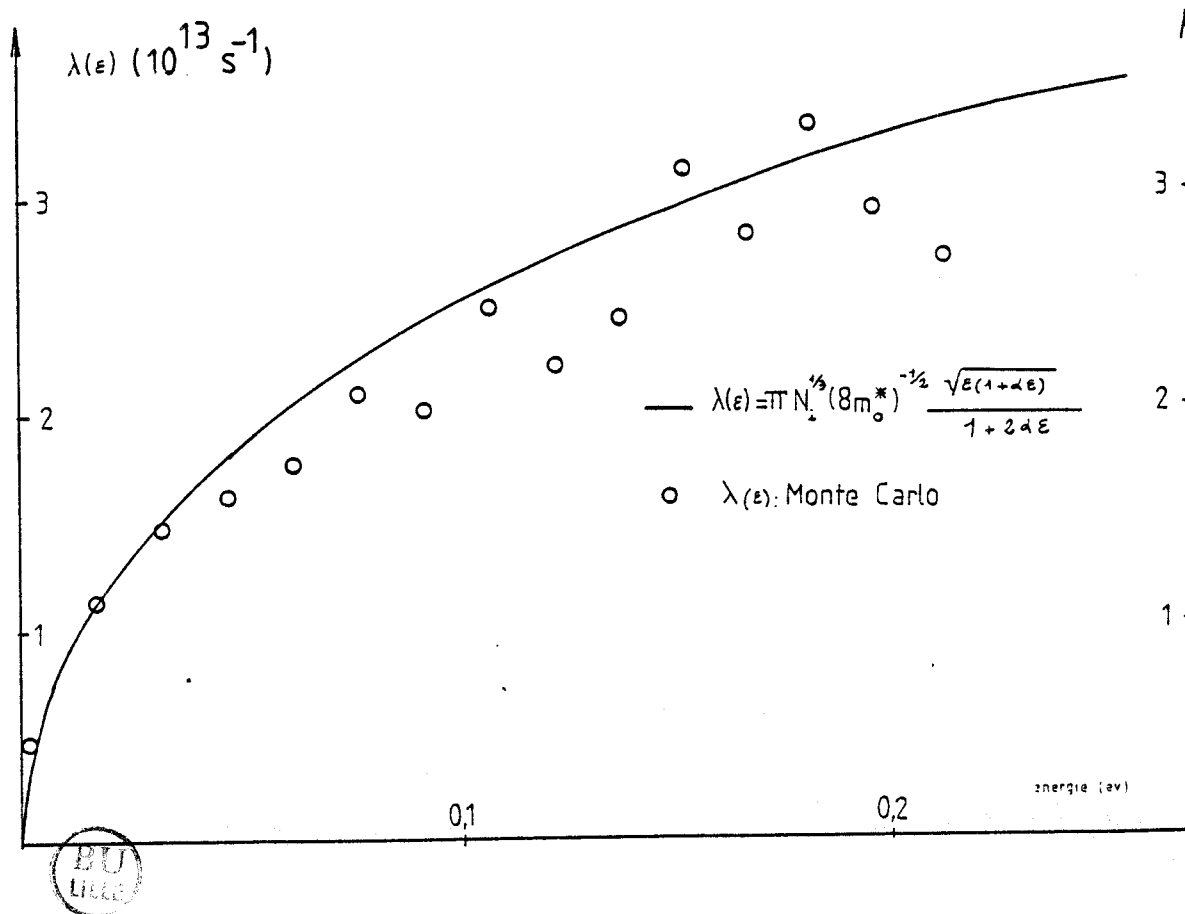


Figure 14

Probabilité de collision par unité de temps en fonction de l'énergie, relative à l'interaction sur impureté.

- Probabilité d'interaction par unité de temps $\lambda(\epsilon)$

Cette probabilité d'interaction obtenue par simulation numérique est illustrée en Fig. 14. L'équation analytique est obtenue en explicitant dans (2.16) la vitesse en fonction de l'énergie, ce qui donne :

$$\lambda(\epsilon) = \pi N_i^{1/3} (8m_o^*)^{-1/2} \frac{\sqrt{\epsilon(1+d\epsilon)}}{1+2d\epsilon} \quad (2.28c)$$

II.2.3. INTRODUCTION DES EFFETS D'ECRAN

Au cours de ce travail; nous avons été amenés à étudier trois approximations différentes permettant de prendre en compte les phénomènes d'écran modifiant le potentiel coulombien, dûs aux autres électrons entourant les ions. Nous les décrivons maintenant.

II.2.3.1. Approximation du potentiel interrompu

Nous appelons maintenant b_o la distance de coupure du potentiel. Dans cette première approximation, on admet que le potentiel coulombien se met sous la forme (Fig. 15) :

$$V(\vec{r}) = (e/4\pi\epsilon_o r) \cdot (1 - u(r - b_o)) \quad (2.29)$$

où $u(x)$ est la fonction de Heaviside, c'est à dire

$$u(x) = 0 \quad \text{si} \quad x < 0,$$

$$u(x) = 1 \quad \text{si} \quad x > 0$$

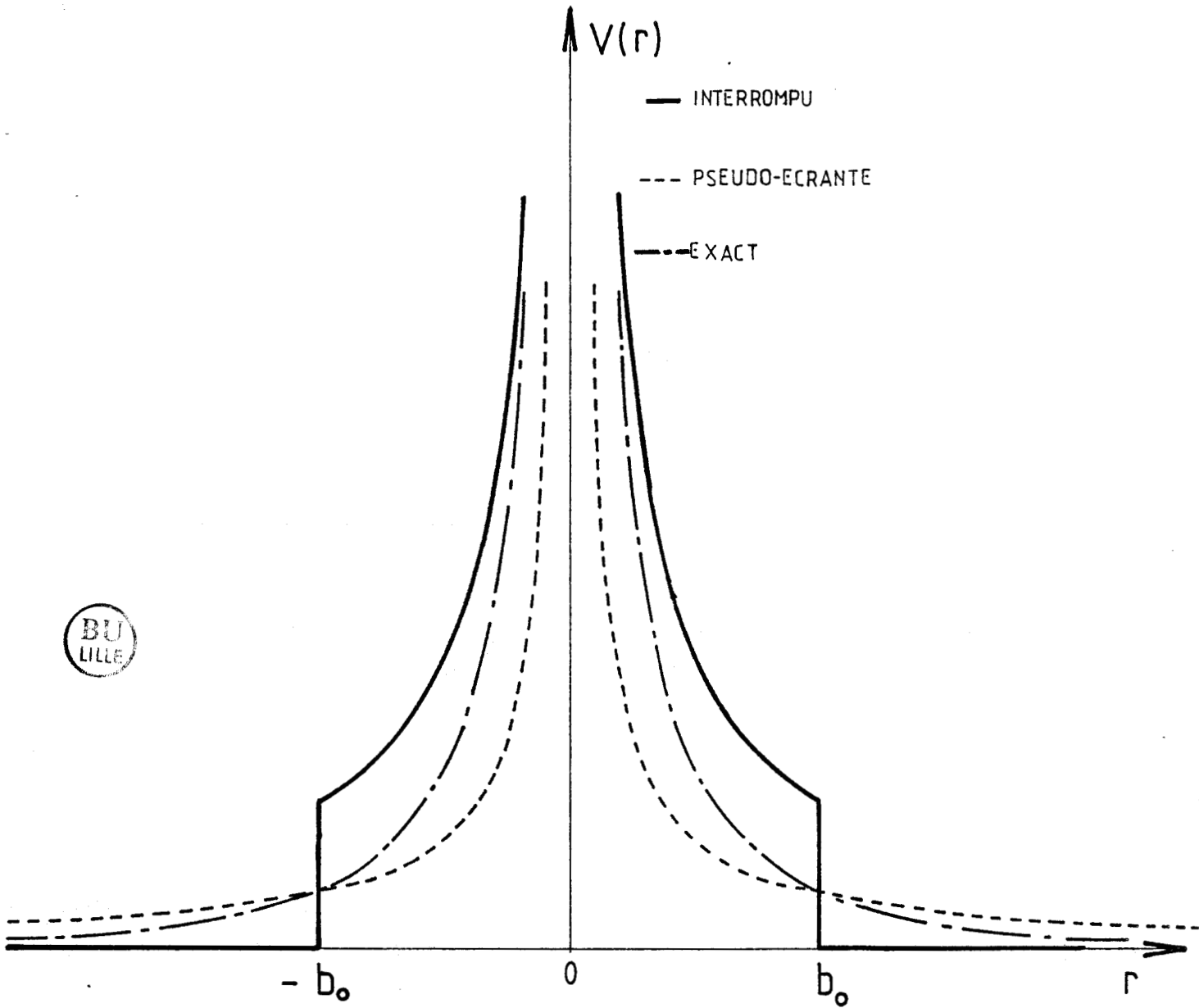


Figure 15

Comparaison des trois formes de potentiel d'impureté. ($K = \frac{Z e}{4\pi\epsilon_0}$)

- interrompu : $V(r) = \frac{K}{r}$
- pseudo-écranté : $V(r) = \frac{K}{r} \cdot e^{-\frac{r}{b_0}}$ ici $b = b_0$
- · - exact : $V(r) = \frac{K}{r} \cdot e^{-\frac{r}{b_0}}$

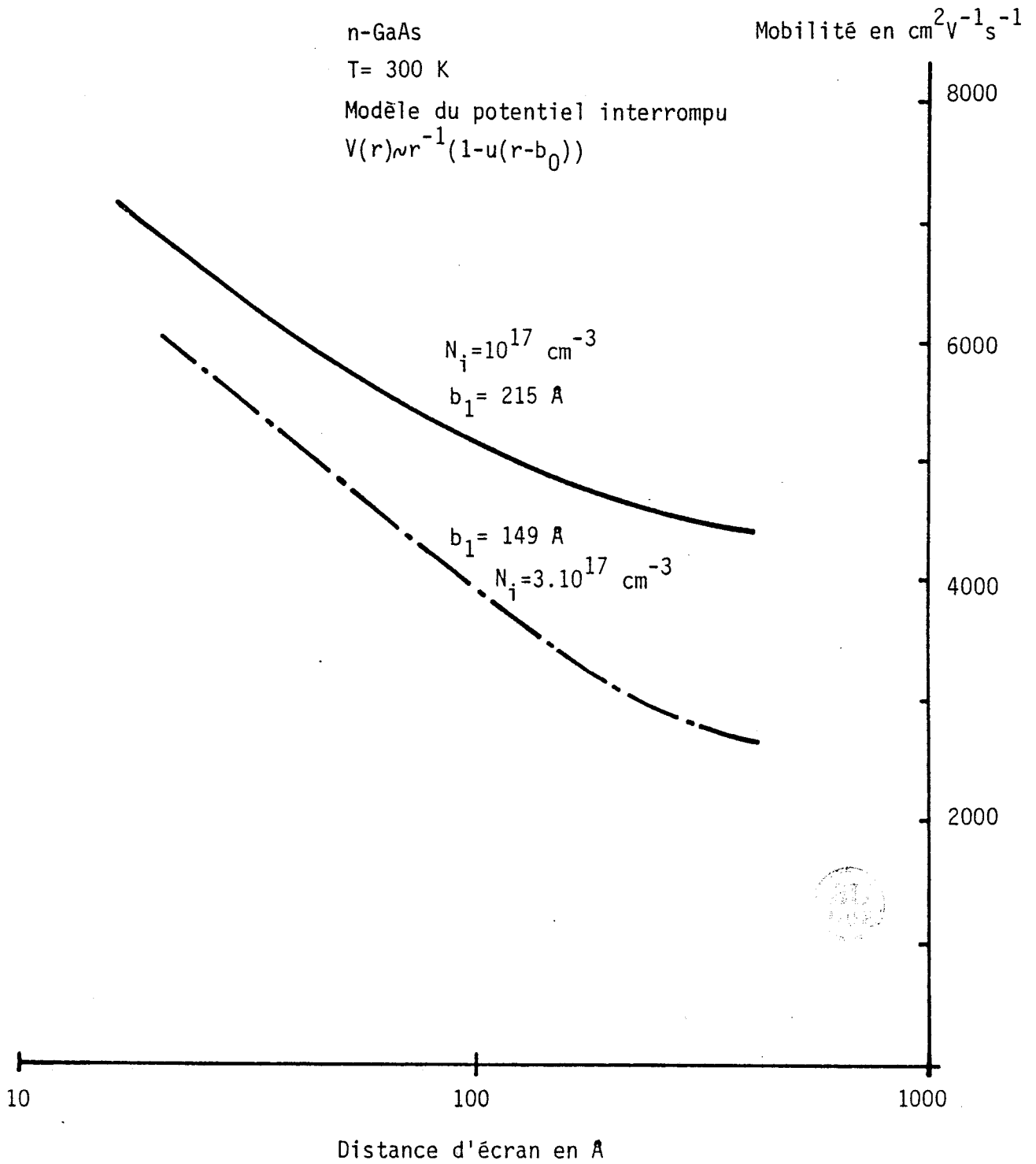
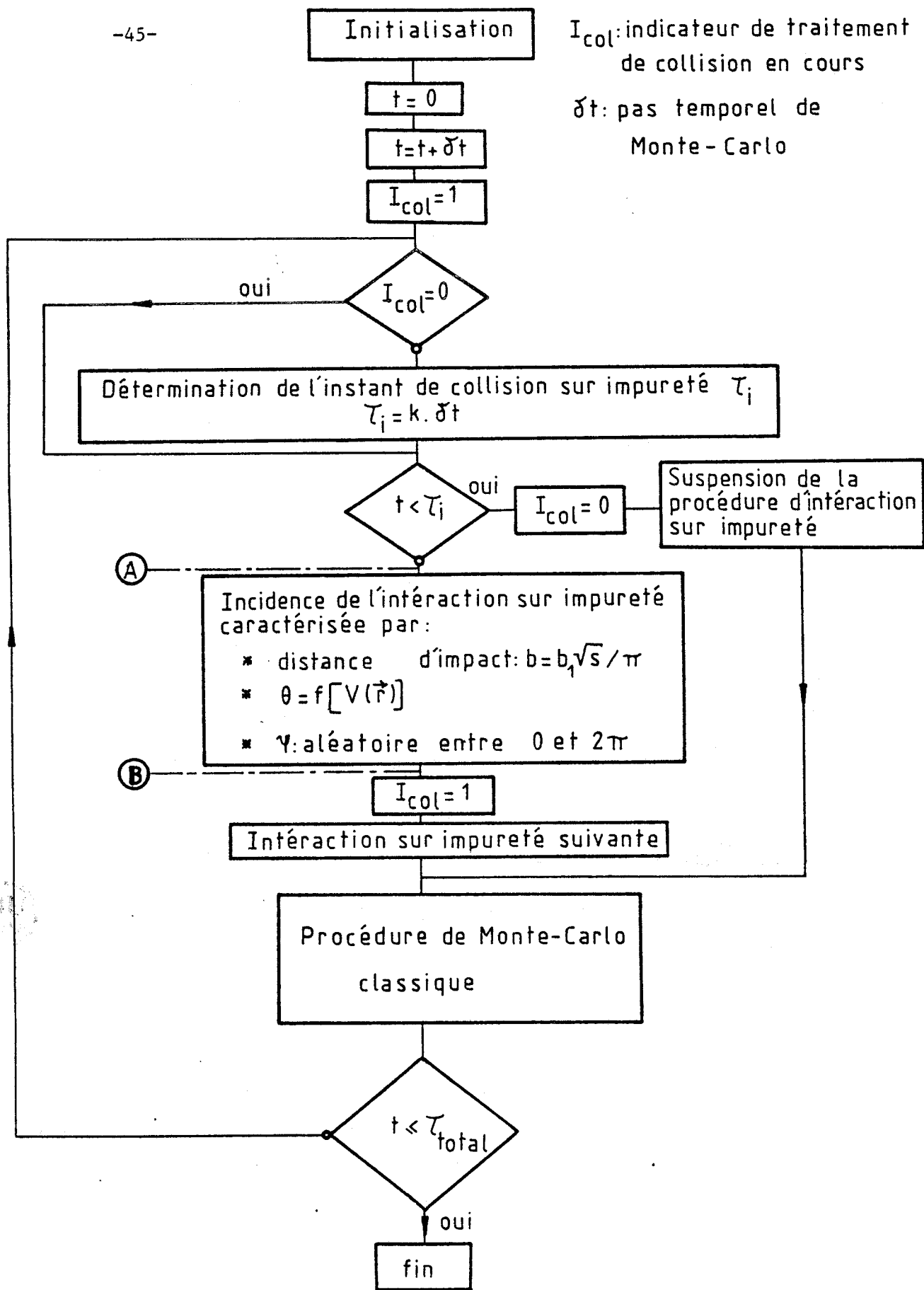


Figure 16

Mobilité calculée en fonction de la distance d'écran b_0 .



I_{col} : indicateur de traitement de collision en cours

δt : pas temporel de Monte-Carlo

Figure 17

Organigramme du programme de simulation traitant l'interaction électron-impureté.

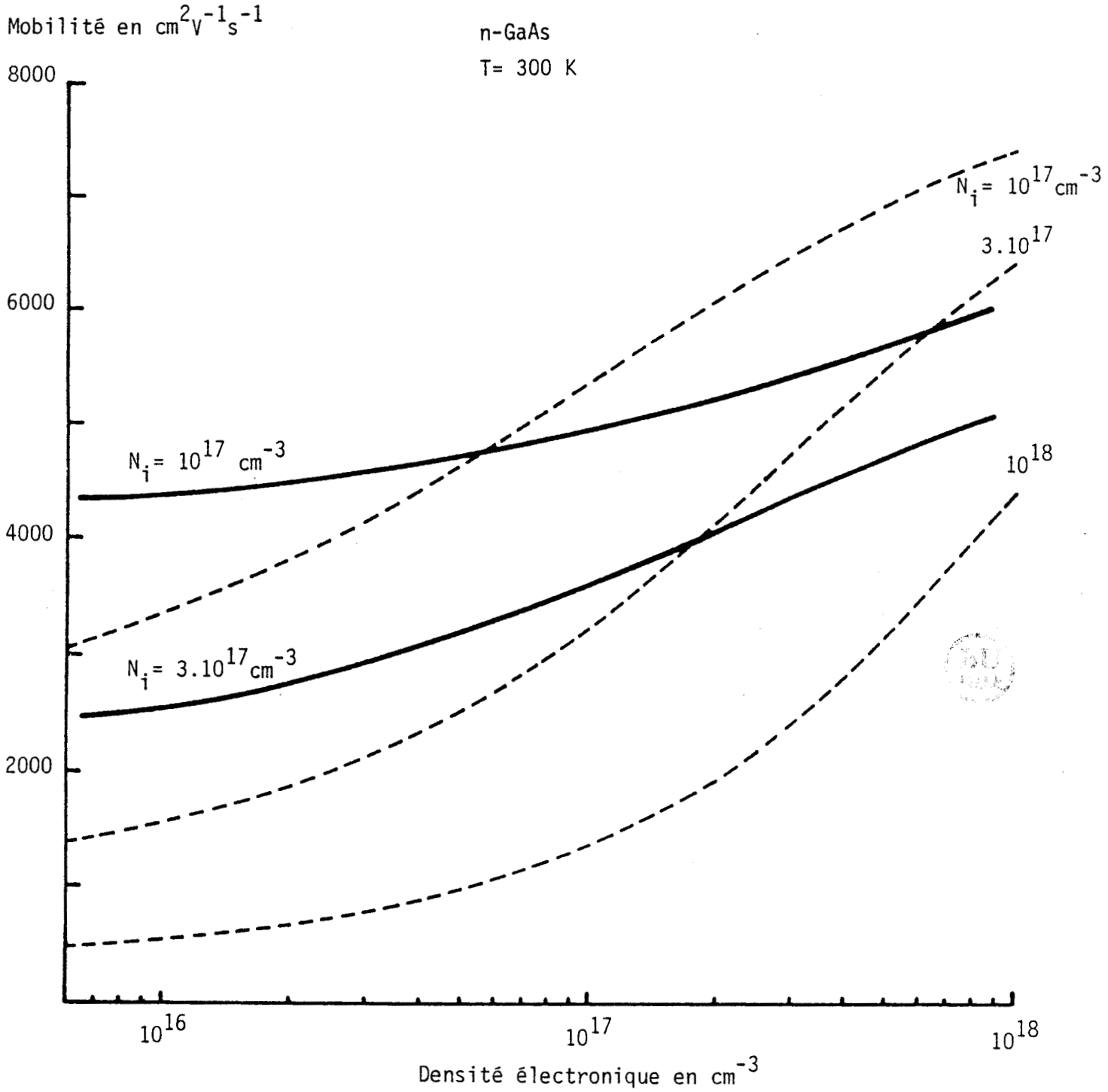


Figure 18

Mobilité en fonction de la densité électronique n_0 .

En pointillé, on représente les résultats donnés par la formule de Dingle.

Distance d'écran en Å

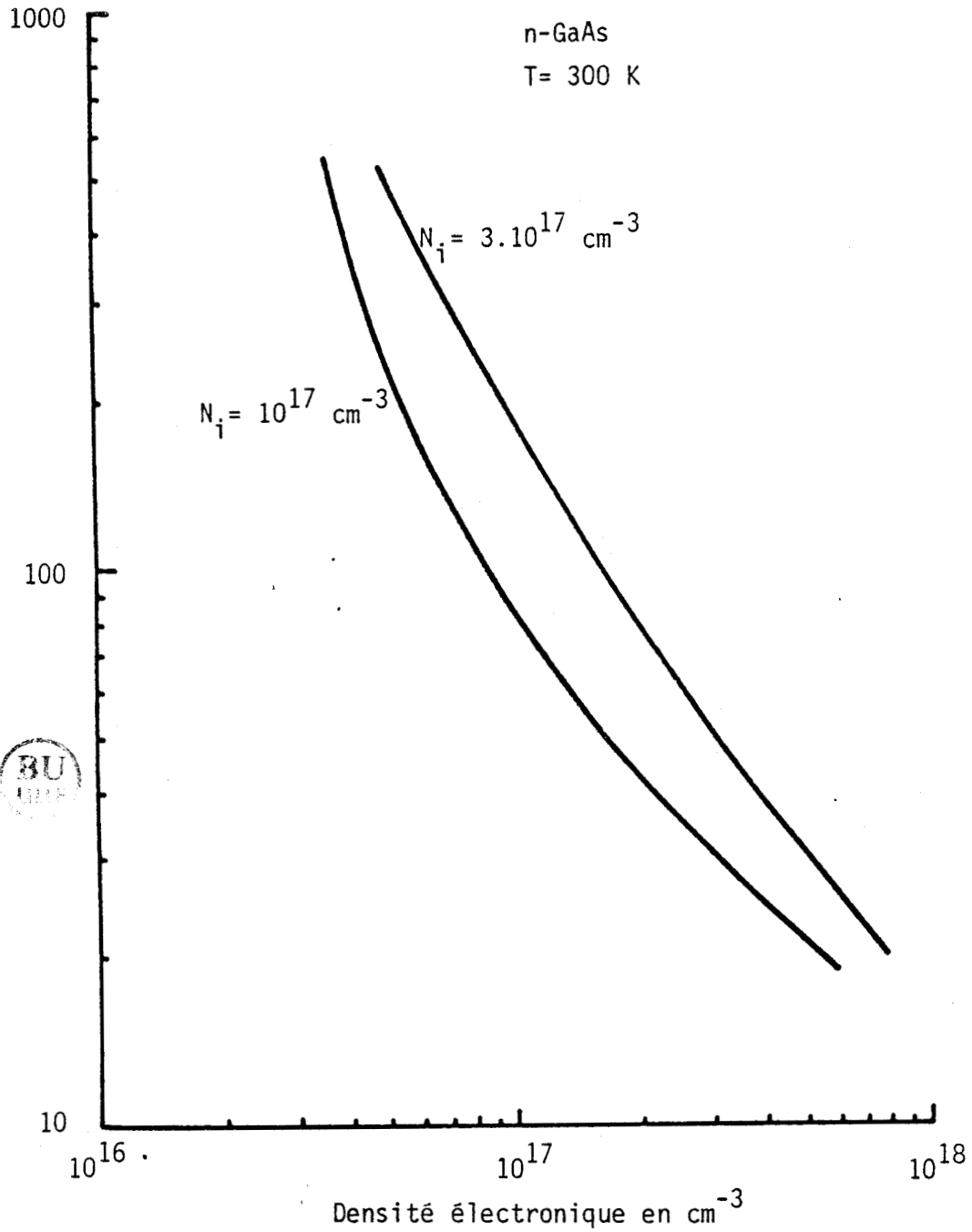


Figure 19

Distance d'écran en fonction de la densité électronique telle que déterminée à partir des figures 16 et 18 .

Ceci veut dire que si $b > b_0$, l'ion n'a aucun effet sur l'électron qui ne subit aucune déflexion. Si $b < b_0$, l'ion agit sur l'électron par un potentiel coulombien nu et les formules du paragraphe précédent s'appliquent directement.

La figure 16 montre des résultats ainsi obtenus dans AsGa à la température ambiante. La figure montre la variation de la mobilité ohmique avec la distance de coupure b_0 pour deux valeurs de densité d'impuretés N_i .

On remarque que la mobilité diminue lorsque la distance d'écran augmente, respectivement avec l'accroissement de la densité d'électrons libres. L'effet d'écrantage attendu est qualitativement obtenu.

Ces résultats proviennent d'une simulation numérique, dont l'organigramme du programme est présenté en figure 17. La forme du potentiel $V(r)$ est celle de l'égalité (2.29). Si on transforme les courbes de la figure 16 en utilisant la correspondance de l'éq. (1.21) en faisant $\beta = 1/b_0$, on obtient les courbes de la figure 18 que l'on peut comparer aux résultats "exacts" obtenus dans l'approximation de Dingle [13].

Il est évident que la comparaison des résultats "exacts" de la figure 18 et des résultats obtenus par le modèle du potentiel interrompu permet de spécifier la relation qui doit exister entre b_0 et n_0 pour que le modèle du potentiel interrompu fournisse des résultats identiques à ceux du modèle de Dingle-Brooks-Herring. Ce faisant, on suppose que les résultats du modèle de D-B-H sont universellement valables. Les courbes b_0 en fonction de n_0 forment en fait un réseau dont le paramètre supplémentaire est N_i . De telles courbes, obtenues à partir des figures 16 et 18, sont montrées dans la figure 19. Elles représentent la relation graphique existant entre la distance d'écran b_0 et la densité d'électrons libres n_0 . En effet, puisque nous ne connaissons pas de relation analytique liant b_0 à n_0 , nous ne pouvons en déduire qu'une relation graphique en comparant à mobilité égale, les abscisses des courbes représentées en figures 18 et 19.

Inconvénients

La mobilité obtenue dans le cas de faible écrantage ($b_0 \sim 1000 \text{ \AA}$) est trop basse. En effet les résultats fournis par [14] donnent $\mu_0 = 5400 \text{ cm}^2/\text{v/s}$ et $\mu_0 = 4800 \text{ cm}^2/\text{v/s}$ respectivement pour $N_D = 10^{17}$ et $3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

II.2.3.2. Approximation du potentiel pseudo-écranté

Le vrai potentiel coulombien écranté a été défini au cours du Chapitre I. Dans l'hypothèse d'un potentiel faible, il a la forme

$$V(\vec{r}) = \frac{Z e}{4 \pi \epsilon_0 r} \cdot e^{-\beta r}, \quad (2.30)$$

où β est relié à la densité moyenne de porteurs n_0 par

$$\beta^2 = \frac{n_0 e^2}{\epsilon_0 k_B T} \quad (2.31)$$

L'approximation du potentiel pseudo-écranté consiste à dire que le potentiel (2.30) peut être simplifié et écrit sous la forme :

$$V(\vec{r}) = \frac{Z e}{4 \pi \epsilon_0 r} \cdot e^{-\beta b}, \quad (2.32)$$

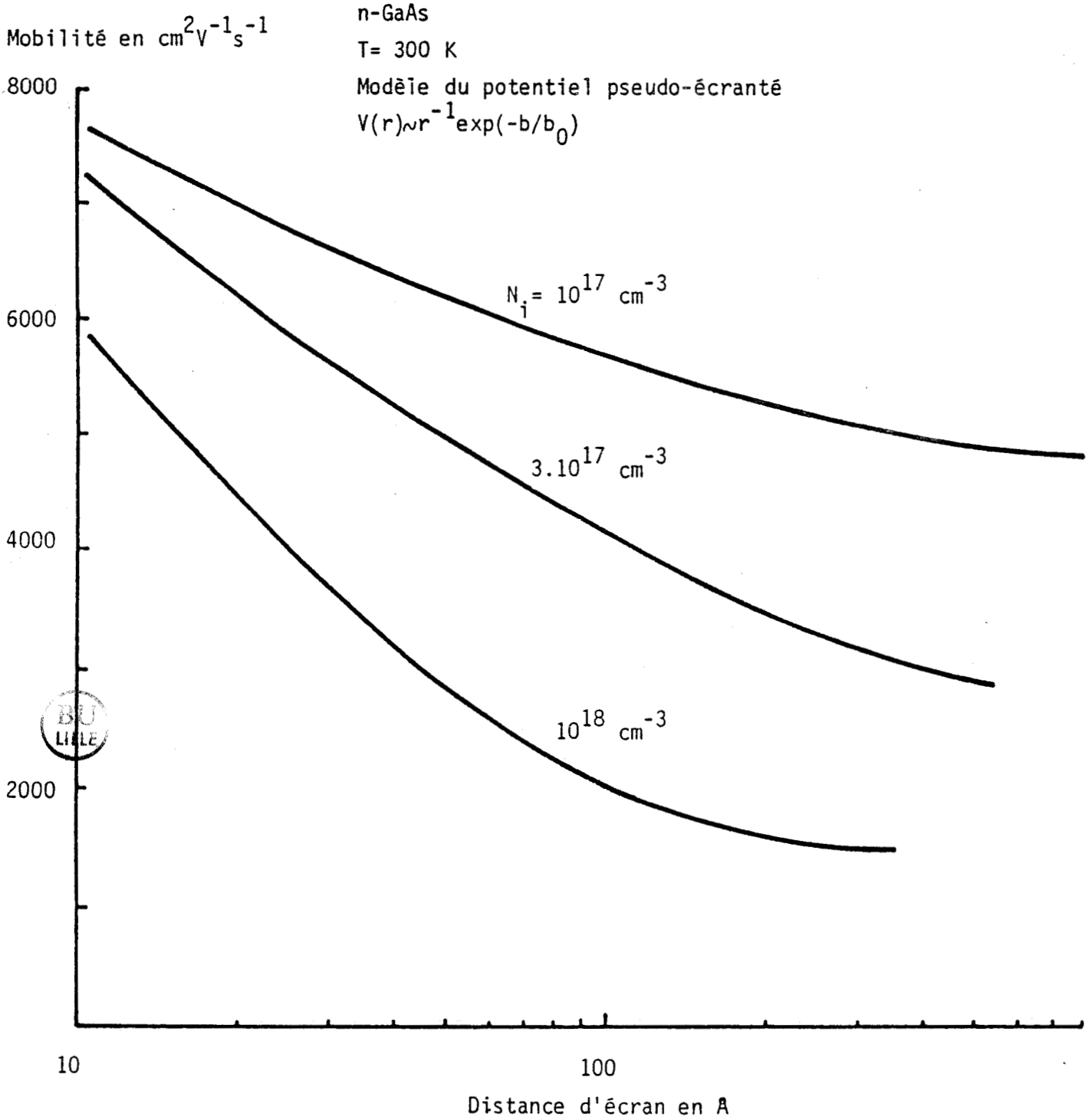


Figure 20

Mobilité calculée en fonction de la distance d'écran b_0 .

Distance d'écran en Å

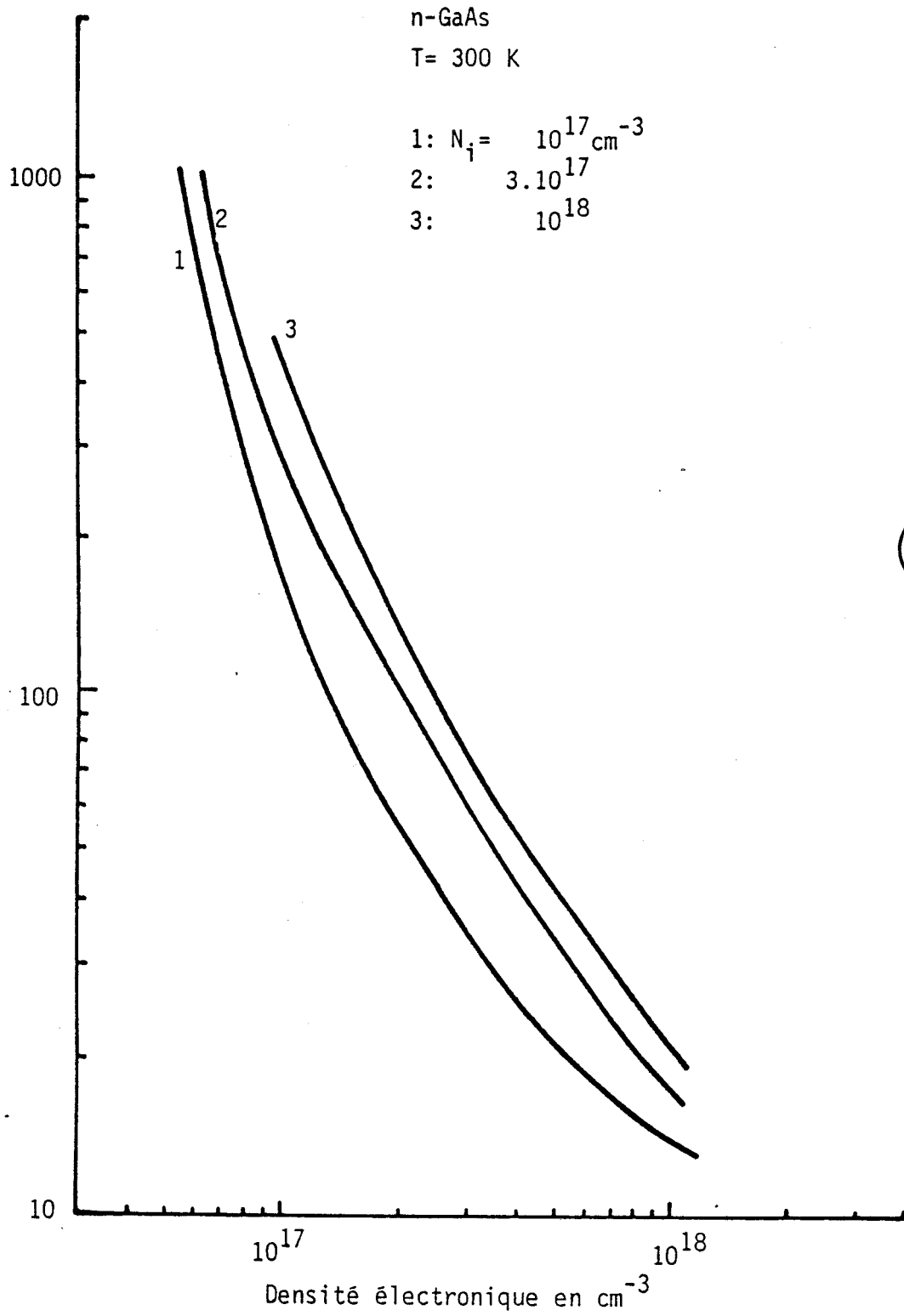


Figure 21

Distance d'écran b_0 en fonction de la densité électronique telle que déterminée à partir des figures 18 et 20 .

où b est le paramètre d'impact de l'électron. Nous regardons maintenant les conséquences de cette approximation.

Conformément à (2.25 - 2.27), l'angle de déviation durant la collision sera donné, d'après (2.32), par :

$$\cos \theta = \frac{64\pi^2 \epsilon_0^2 b^2 \epsilon_1^2 - e^4 \exp(-2b/b_0)}{64\pi^2 \epsilon_0^2 b^2 \epsilon_1^2 + e^4 \exp(-2b/b_0)}, \quad (2.33)$$

où, de nouveau on a introduit le paramètre b_0 qui joue le rôle de $1/\beta$. La simulation est en tout point analogue à ce qui a déjà été écrit, à ceci près que l'on utilise (2.33) dans les formules (2.27a).

La mobilité ohmique de AsGa à l'ambiante ainsi calculée est montrée dans la figure 20 pour trois valeurs de N_1 ; en fonction de la distance d'écran b_0 . De la même façon que dans le paragraphe précédent on en déduit la loi de variation $b_0(n_0)$, paramétrée par N_1 qui permet d'obtenir des résultats en accord avec ceux de Dingle-Brooks-Herring (Fig. 21).

Les résultats présentés en figure 20 proviennent d'une simulation numérique dont l'organigramme est schématisé en figure 17.

Ici le potentiel d'impureté $V(r)$ est explicité par l'égalité (2.30).

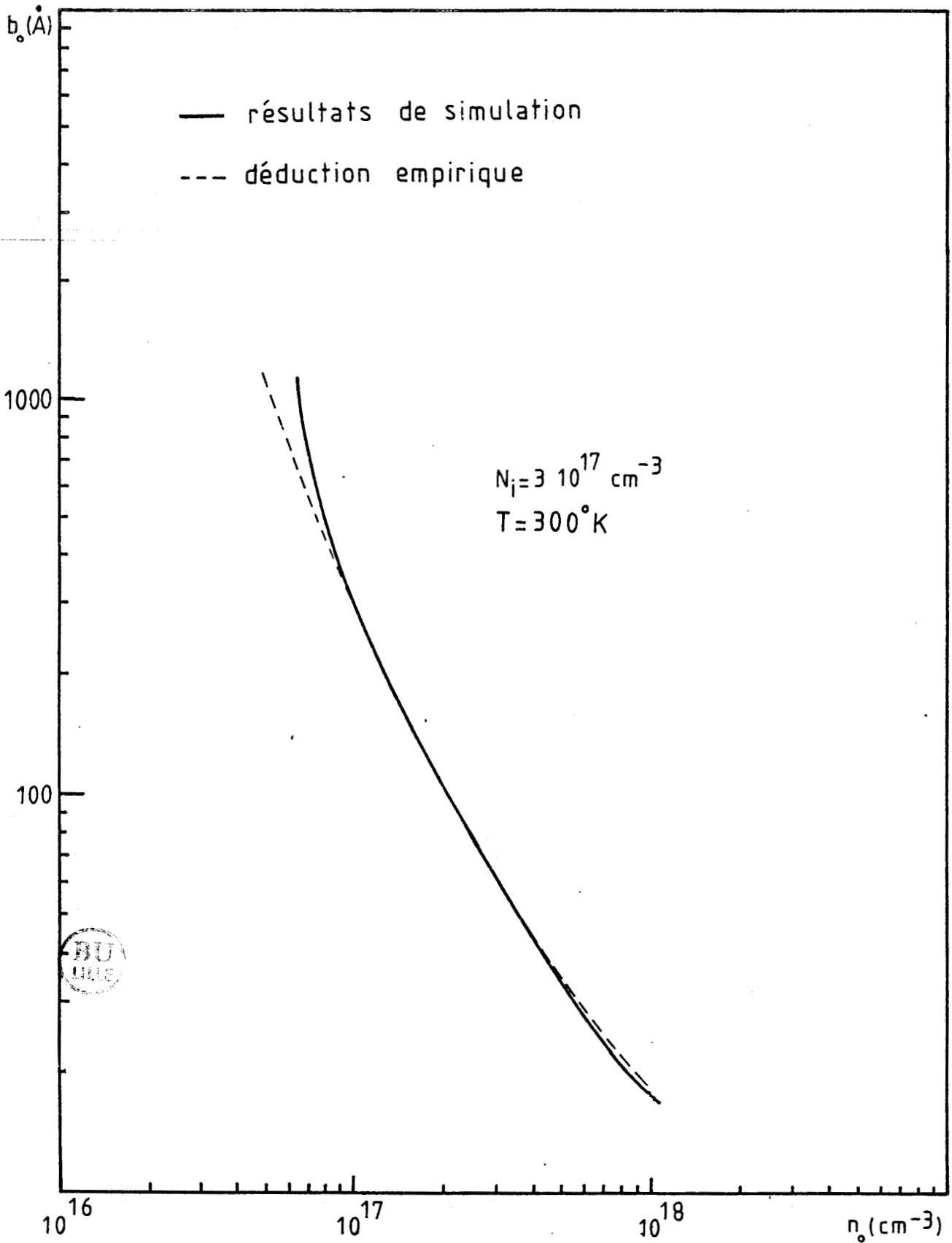


Figure 22

Relation empirique liant b_0 à n_0 , déduite des résultats de simulation.

Déduction d'une loi empirique $b_0(n_0)$

A partir de la représentation graphique b_0 en fonction de n_0 qui provient d'une simulation numérique, on en déduit une relation empirique liant b_0 à n_0 . Pour passer au stade de la simulation d'un composant réel, c'est le but du chapitre IV, il est nécessaire de chiffrer la distance d'écran b_0 induite par la densité de porteurs libres n_0 . En effet, dans un composant (type MESFET) la densité de porteurs libres varie suivant la position géométrique des électrons, ce qui conduit à un écrantage qui est lui-même fonction de la position.

On aboutit à la relation (Fig. 22)

$$\log_{10} b_0 = \frac{10^b}{n_0^a} \quad (2.34)$$

où $\left. \begin{array}{l} a = 0,298 \\ b = 5,458 \end{array} \right\}$ sont déduits graphiquement.

Cette relation n'est valable que pour une densité d'impuretés $N_i = 3 \cdot 10^{17} \text{cm}^{-3}$. Dans cette relation, on obtient b_0 en angströms lorsque n_0 est exprimé en at/cm^3 .

II.2.3.3. Approximation du potentiel écranté

Les deux paragraphes précédents ont montré que quelque soit la forme du potentiel utilisé, le problème revient à en déduire une forme assez simple, idéalement une expression analytique, du cosinus de l'angle de déviation de la trajectoire (2.26 et 2.33). Si l'on introduit le potentiel exact donné en (2.30) l'équation dynamique du mouvement devient une équation différentielle du second ordre non linéaire alors qu'elle reste linéaire avec le potentiel coulombien nu. Cette équation s'écrit* pour une particule de vitesse v :

* Voir annexe 1

$$\frac{d^2 r}{dt^2} - r \left(\frac{d\alpha}{dt} \right)^2 = \frac{a}{r} e^{-\beta r} \left(\frac{1}{r} + \beta \right) , \quad (2.35)$$

$$r^2 \frac{d\alpha}{dt} = -vb , \quad \text{où} \quad a = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m^*} , \quad (2.36)$$

β représente le paramètre d'écran (ou l'inverse de la distance d'écran ; donc est l'analogue de $1/b_0$), r le rayon vecteur instantané et α l'angle de déviation instantané de la particule considérée. b représente le paramètre d'impact (défini en Fig. 10). La constante a est définie pour un électron et une impureté dont les charges sont de même signe.

La seconde équation est la loi de constante des aires. Posant $u = 1/r$, on élimine le temps dans (2.35) et on trouve

$$\frac{d^2 u}{d\alpha^2} + u = \frac{-a}{b^2 v^2} e^{-\beta/u} (\beta/u + 1) \quad (2.37)$$

Les conditions aux limites (l'interaction est élastique) seront :

$$r = \infty \quad \text{et} \quad \frac{dr}{dt} = -v \quad \text{à} \quad \alpha = \pi , \quad \text{et}$$

$$r = \infty \quad \text{et} \quad \frac{dr}{dt} = +v \quad \text{à} \quad \alpha = \theta$$

Représentation cartésienne de la trajectoire de l'électron.

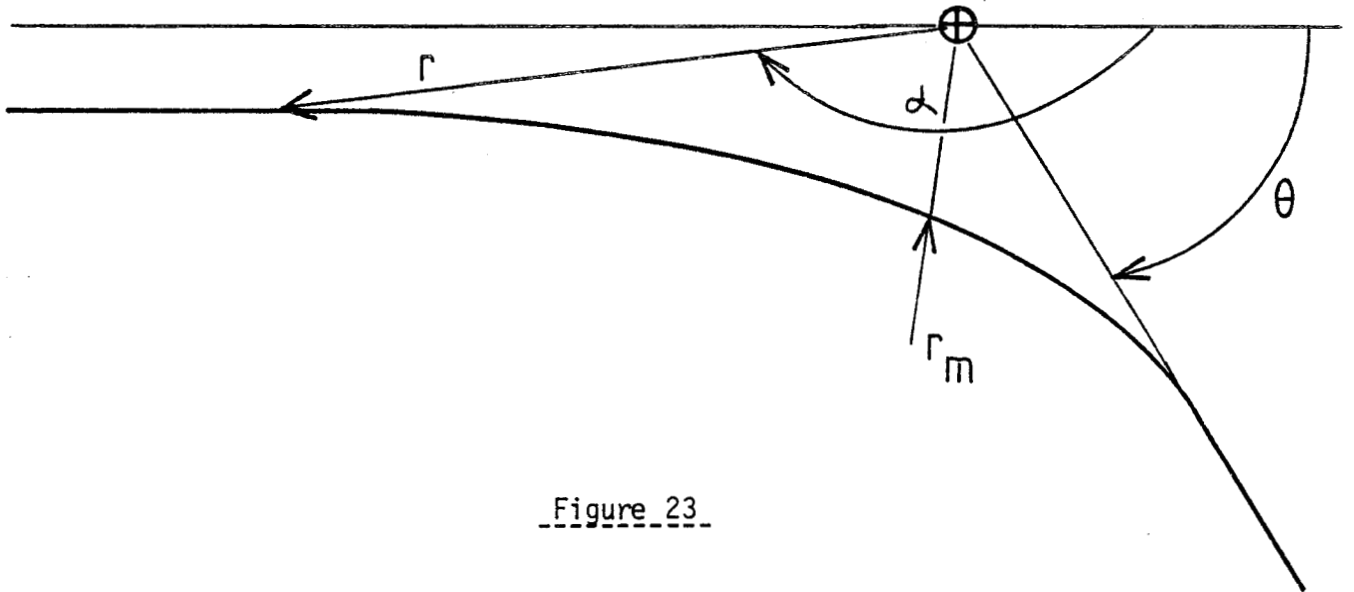
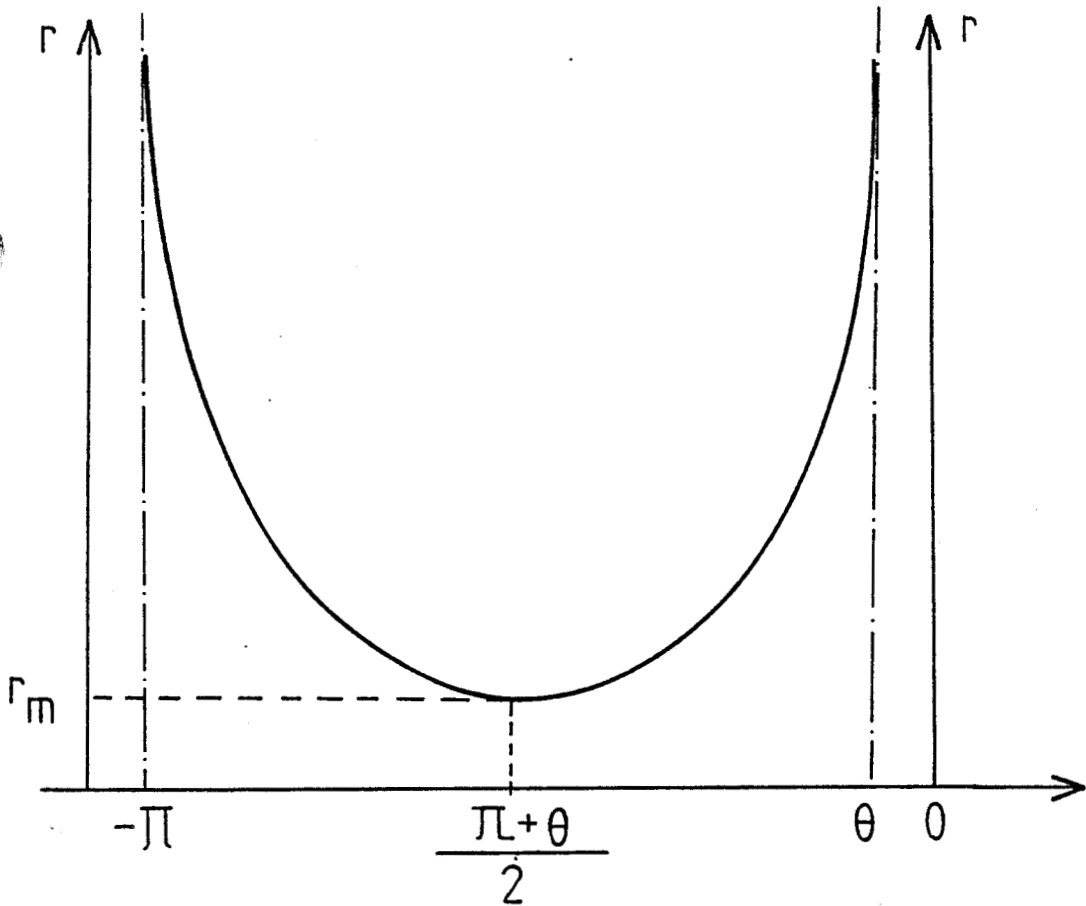


Figure 23



Représentation polaire de la trajectoire de l'électron.

r_m : rayon vecteur minimum de l'électron.

$$dr/d\alpha = 0 \text{ lorsque } r=r_m$$

La détermination du mouvement s'effectue aussi par le calcul de l'intégrale première sur l'énergie. L'énergie totale se conservant à chaque instant, on aura :

$$\varepsilon = - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} e^{-\beta r} + \frac{m^* b^2 v^2}{2 r^2} \left(1 + \frac{1}{r} \left(\frac{dr}{d\alpha} \right)^2 \right) = \text{constante} \quad (2.38)$$

On isole $dr/d\alpha$ pour obtenir par intégration directe la trajectoire $r(\alpha)$ (en fait, on aboutit à la fonction $\alpha(r)$):

$$\left(\frac{dr}{d\alpha} \right)^2 = \left(\varepsilon + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} e^{-\beta r} \right) \frac{2 r^4}{m^* b^2 v^2} - r^2 = A(r) \quad (2.39)$$

Quand l'électron passe au plus près de l'ion, soit à $r = r_m$, $dr/d\alpha = 0$, donc (Fig. 23) :

$$\varepsilon + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^{-\beta r_m}}{r_m} = \frac{m^* b^2 v^2}{2 r_m^2} \quad (2.40)$$

Posant :

$$I(r) = \int_{r_m}^r \frac{d\varrho}{\sqrt{A(\varrho)}} \quad (2.41)$$

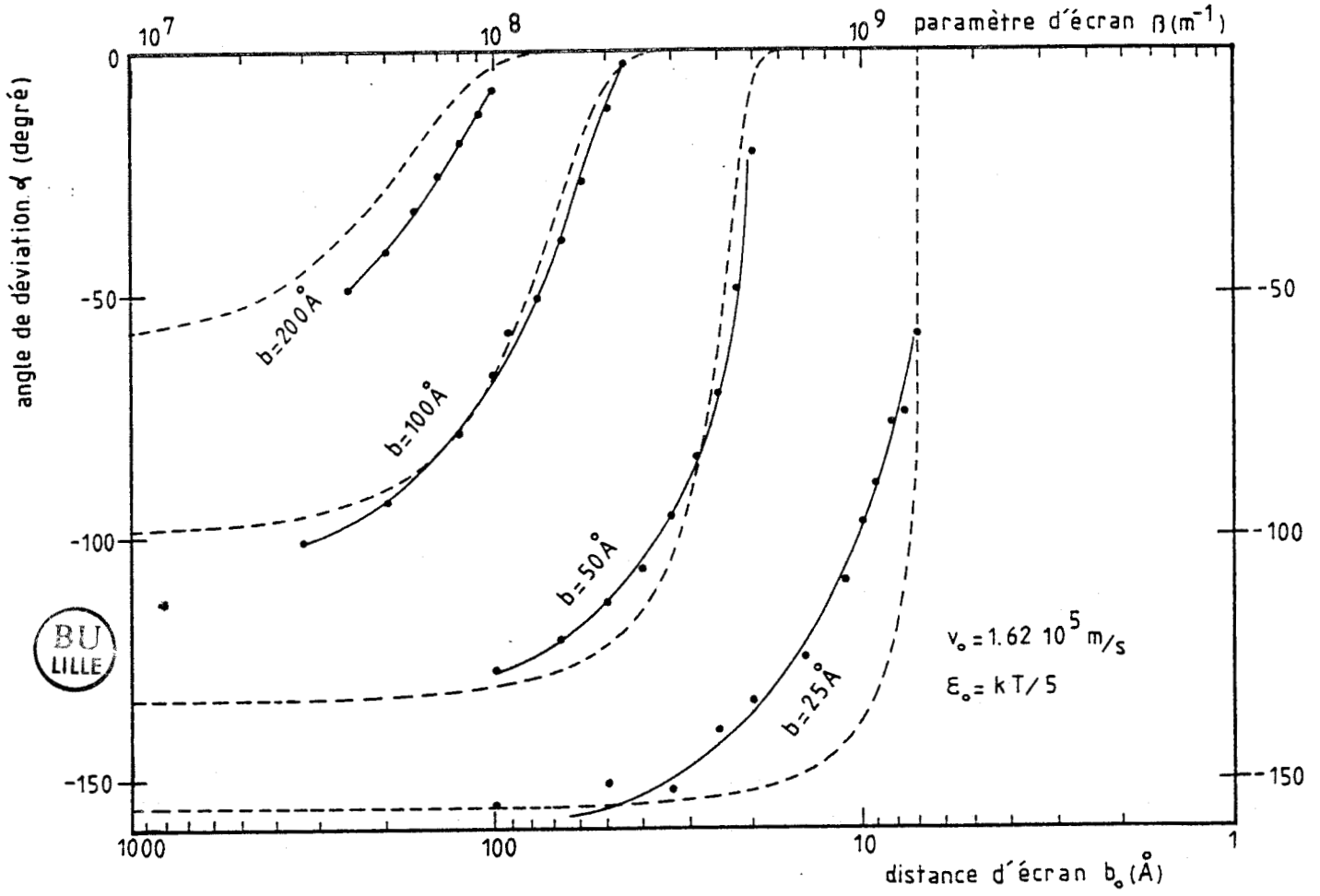


Figure 24

Angle de déviation relatif à l'interaction sur impuretés en fonction du paramètre d'écran β pour diverses valeurs de la distance d'impact b_0 .

- Résultats pour le potentiel écranté.
- Approximation

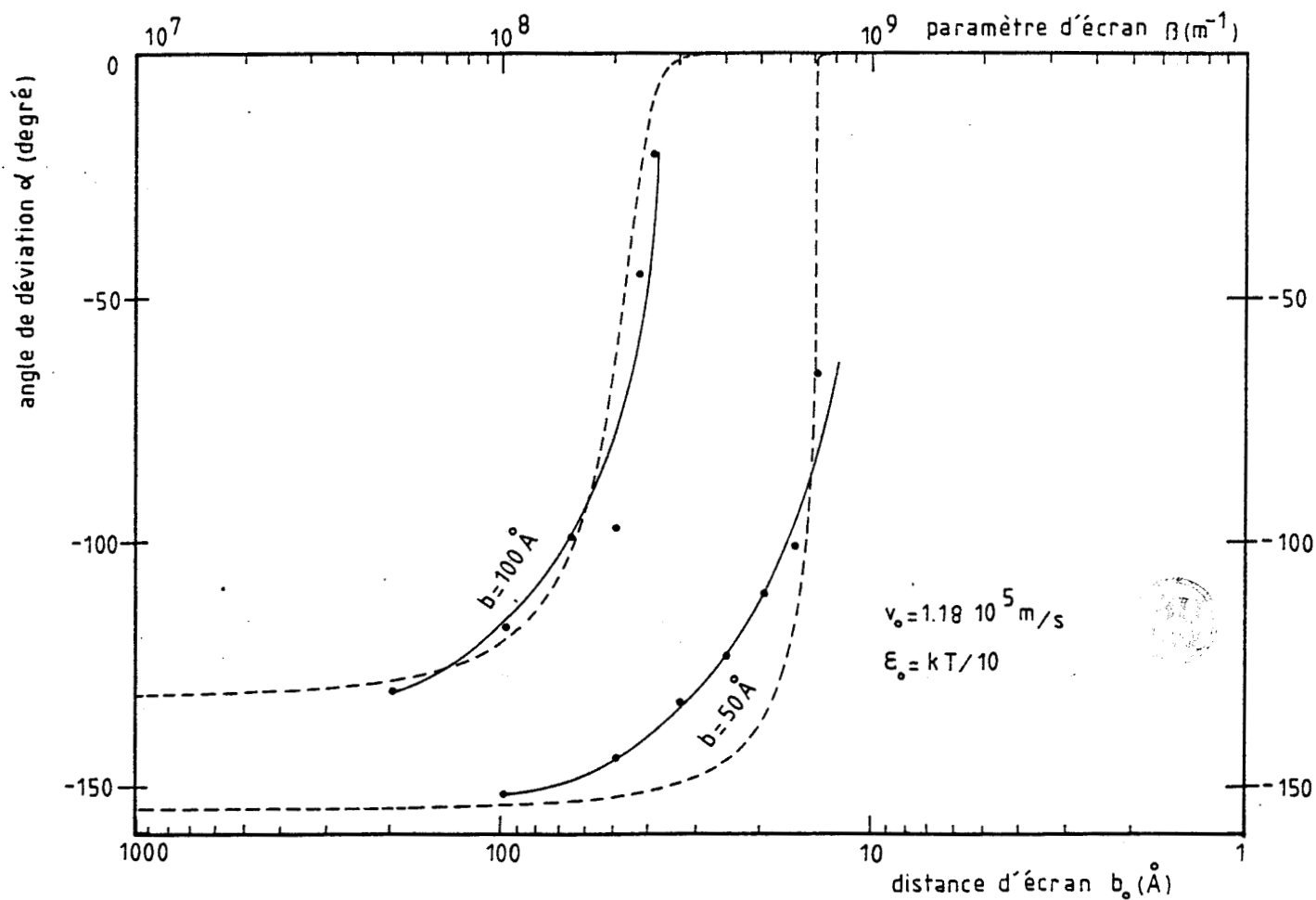


Figure 25

Angle de déviation relatif à l'interaction sur impuretés en fonction du paramètre d'écran β pour diverses valeurs de la distance d'impact b_0 .

- Résultats pour le potentiel écranté.
- Approximation

sachant que : $\alpha = \pi$ pour $r = \infty$ et $\alpha = \frac{\pi + \theta}{2}$ pour $r = r_m$

on aura :

$$\theta = \pi - 2 I(\infty) \quad (2.42)$$

Le calcul de $I(\infty)$ s'effectue assez facilement d'après (2.41); toutefois le fait que $A(\rho) \rightarrow 0$ quand $r = r_m$, nécessite d'apporter un certain soin à ce calcul. En fait, le pas d'intégration $d\rho$ dans (2.41) doit être choisi, lorsque r parvient au voisinage de r_m , de sorte que l'intégrant soit à peu près constant. Ceci implique un temps de calcul assez long en général (nous l'avons effectué sur calculateur HP 9835).

Quelques exemples de résultats sont donnés dans les figures 24 et 25. Le but étant d'obtenir une relation empirique donnant θ en fonction des paramètres indépendants β , b et ϵ , les deux derniers étant aléatoires en cours de simulation, nous avons cherché une telle relation sous la forme :

$$\text{tg} \frac{\theta}{2} = \frac{a}{bv^2} e^{-F}, \quad (2.43)$$

avec $F = \gamma r_m^\delta \beta^\omega$

où γ , δ et ω sont des paramètres ajustables (les deux derniers sont des exposants) permettant de reproduire au mieux les résultats acquis par le calcul de l'intégrale. Pour comparaison, nous avons également reporté ces résultats sur les figures 24 et 25.

Le reste de la simulation procède de manière identique à ce qui est fait pour les deux autres modèles.

Mobilité en $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$

n-GaAs

T= 300 K

Modèle du potentiel écrané exact

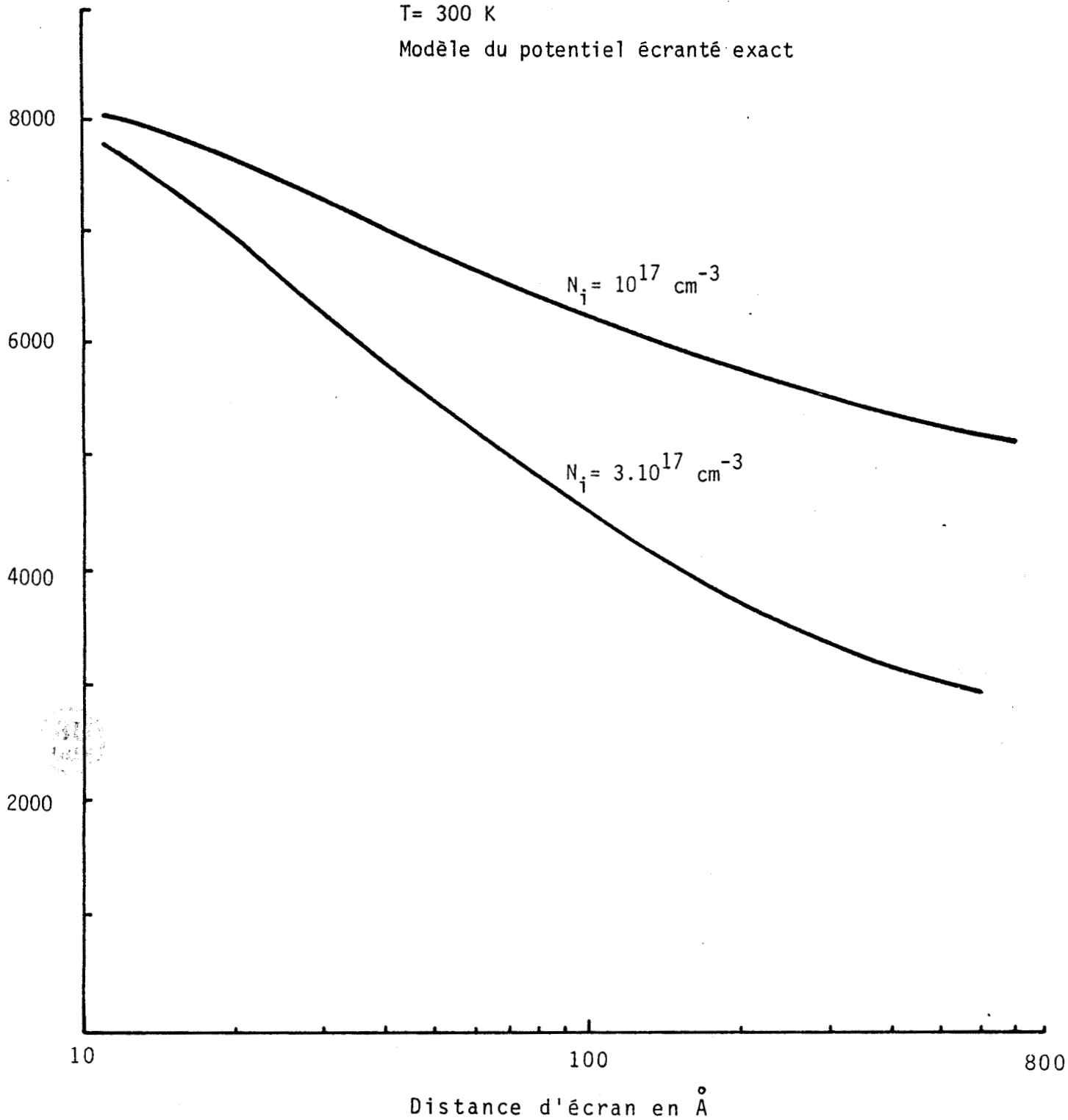


Figure 26

Mobilité calculée en fonction de la distance d'écran $b_0 = 1/\beta$.

100Å

$b=50\text{Å}$

$v_o=3.75 \cdot 10^5 \text{ m/s} ; \epsilon_o=kT$

$b_o=100\text{Å}$

-100Å

100Å

v_o

\bar{e}

-100Å

100Å

$b=50\text{Å}$

$v_o=0.84 \cdot 10^5 \text{ m/s} ; \epsilon_o=kT/20$

$b_o=100\text{Å}$

-100Å

100Å

v_o

\bar{e}

Figure 27

Comparaison des trois formes de potentiel au niveau de la trajectoire.

— pur

- - - exact

- · - pseudo-écrané

-100Å

Sur la figure 26, nous montrons quelques résultats acquis concernant le calcul de la mobilité ohmique en fonction de b_0 qui ici joue le rôle de $1/\beta$.

Comparaison graphique des trois formes de potentiel

A titre d'illustration, nous montrons sur la figure 27 les différences existant entre les trois formes de potentiel, au niveau des trajectoires de l'électron pour diverses valeurs de vitesses et du facteur d'écran.

II.2.4. CAS D'UN DOPAGE NON-HOMOGENE

Nous avons déjà expliqué dans l'introduction l'intérêt de l'étude de l'interaction électron-impureté dans les structures présentant un dopage inhomogène. Dans un tel cas le modèle décrit précédemment reste entièrement valable, la seule différence étant que l'angle azimutal ψ de la position de l'ion autour de l'électron n'est plus uniformément aléatoire entre 0 et 2π , mais au contraire restera limitée à une certaine partie du cercle azimutal (celui-ci est représenté sur la figure 28).

II.2.4.1. Présentation de la structure de base

Nous considérons le cas où le matériau est formé de deux parties séparées par un plan, l'une dépourvue d'impuretés, l'autre contenant des impuretés de répartition aléatoire uniforme N_D , séparée par un plan. La transition de N_D à 0 est supposée être abrupte. Nous situons la transition physiquement en $z = 0$ dans le repère où la position des porteurs est exprimée, le matériau dopé étant en $z < 0$. Le champ électrique extérieur peut être appliqué par exemple parallèlement ou perpendiculairement à l'interface n^n . Dans le chapitre suivant, nous envisageons les deux cas. La mobilité ou la vitesse de

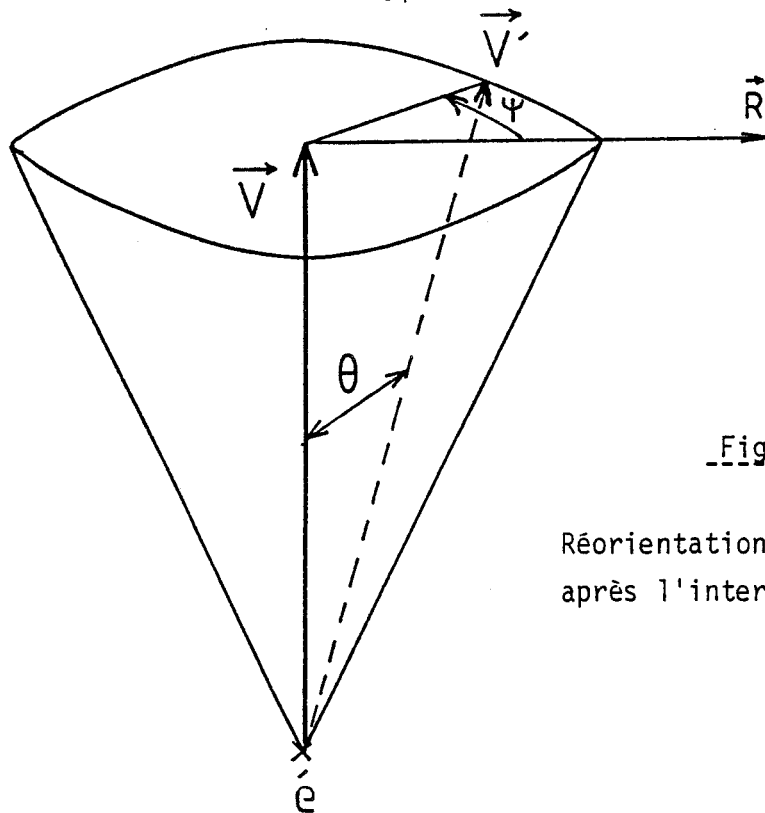


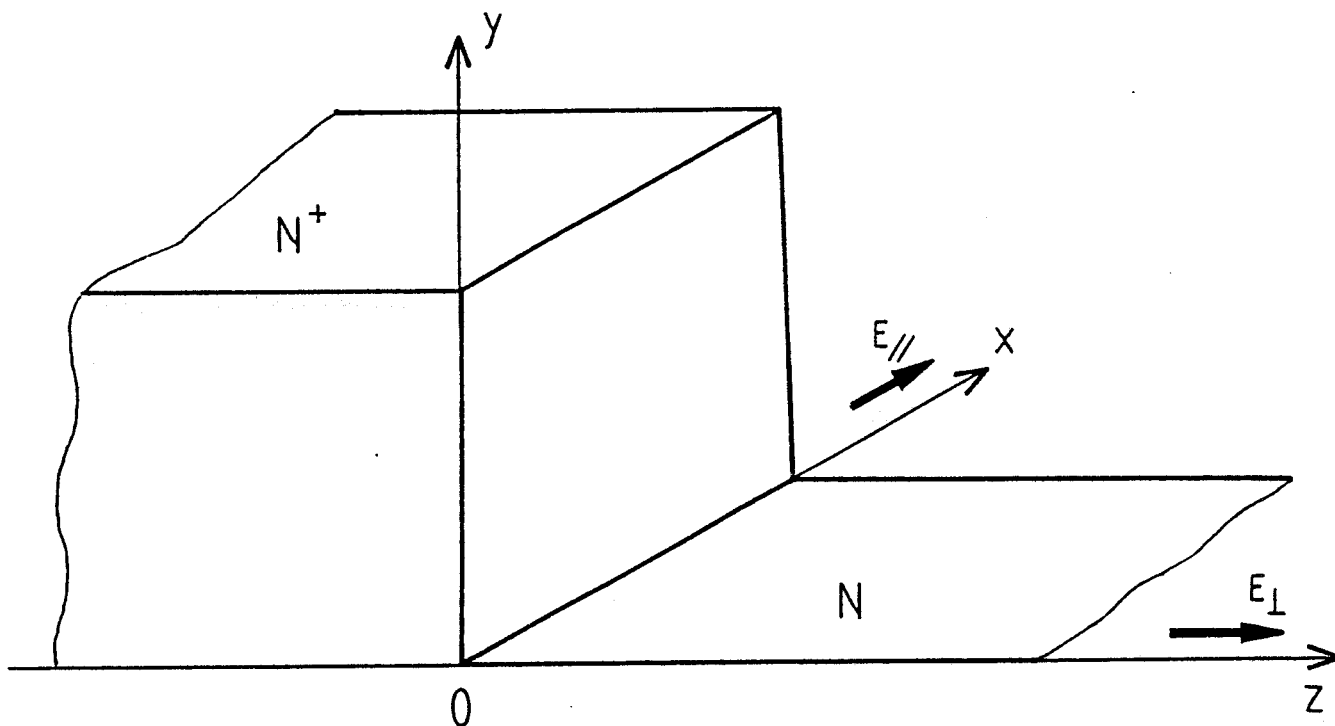
Figure 28

Réorientation du vecteur vitesse après l'interaction.

Figure 29



Structure de base pour l'étude de l'interaction sur impureté dans le cas d'une homo-jonction n⁺n.



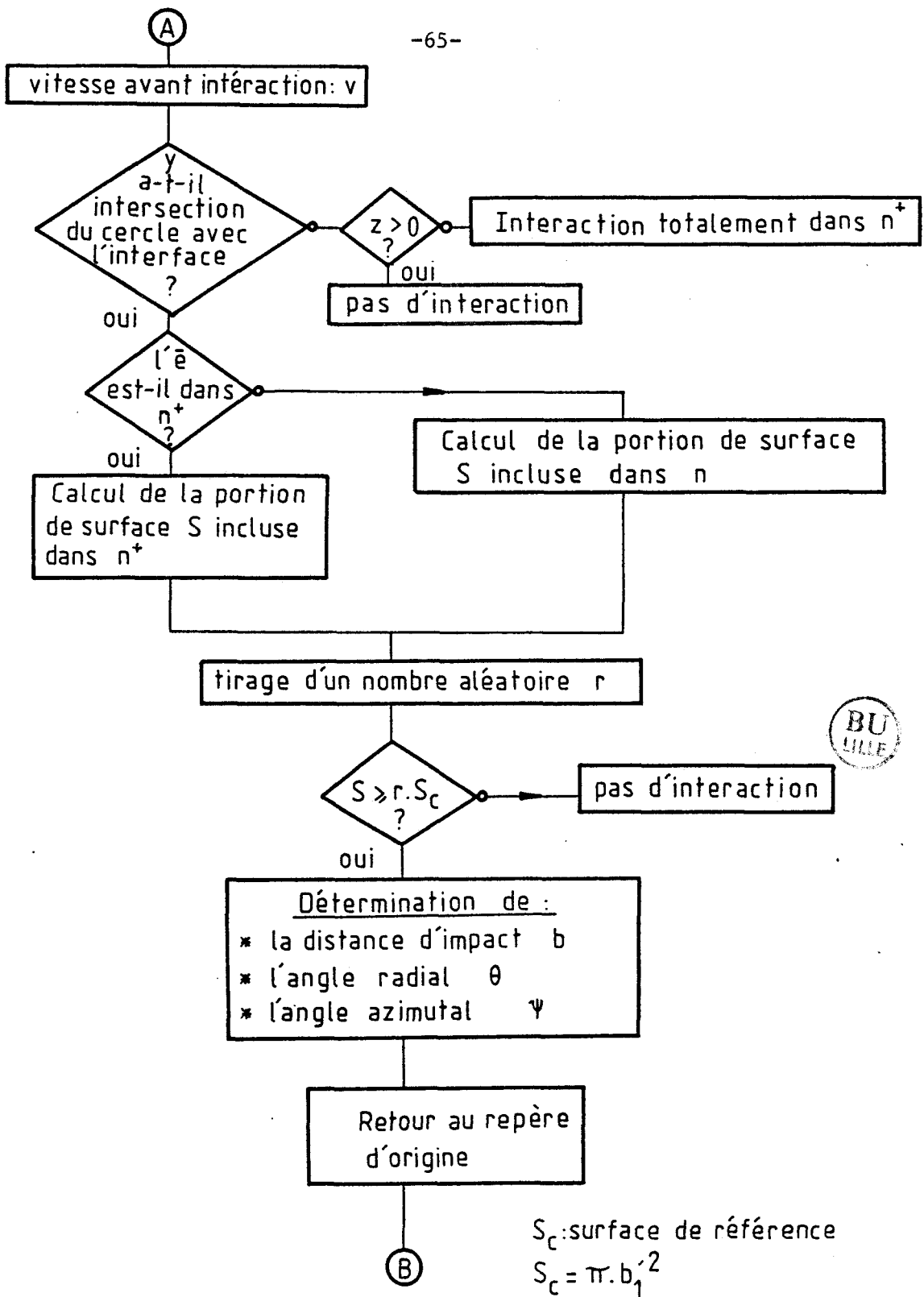


Figure 30

Organigramme du programme de simulation relatif à l'interaction sur impureté dans le cas d'une homo-jonction n⁺n. La partie (A) - (B) s'insère dans le programme principal de simulation de la figure 17.

dérive sera étudiée en fonction de z , éloignement du point considéré de l'interface.

La configuration de cette structure est illustrée en Fig. 29.

II.2.4.2. Principe de la méthode

Il s'agit de sélectionner l'endroit où a lieu la collision sur impureté, puisque la présence de la jonction n^+n introduit trois zones distinctes que nous allons expliciter. Voir organigramme présenté en figure 30.

A l'instant de la collision, la position $r = (x,y,z)$, la vitesse $v = (v_x, v_y, v_z)$ de l'électron et le paramètre d'impact maximum b_1 sont connus d'après le processus de simulation et les données matériau. Un peu de géométrie élémentaire* montre que, en ayant posé,

$$A = (v_x^2 + v_y^2)^{1/2} / |\vec{v}| \quad (2.45)$$

on peut alors déterminer le lieu où la collision s'effectue en testant la grandeur $b'_1 \cdot A$ caractérisant l'intersection du cercle azimutal avec le plan $z = 0$.

- a) si $z > b'_1 \cdot A$,
le cercle azimutal (rayon b'_1 , centre position de l'électron) est en totalité dans le matériau non dopé ;
- b) si $z < - b'_1 \cdot A$,
le cercle azimutal est en totalité dans le matériau dopé;
- c) si $|z| < b'_1 \cdot A$,
le cercle azimutal coupe nécessairement le plan $z = 0$.
Dans ce dernier cas, une collision n'aura lieu que si un ion est présent sur la partie du disque azimutal situé dans l'espace $z < 0$ qui correspond au milieu dopé. Soit

* Voir annexe 2

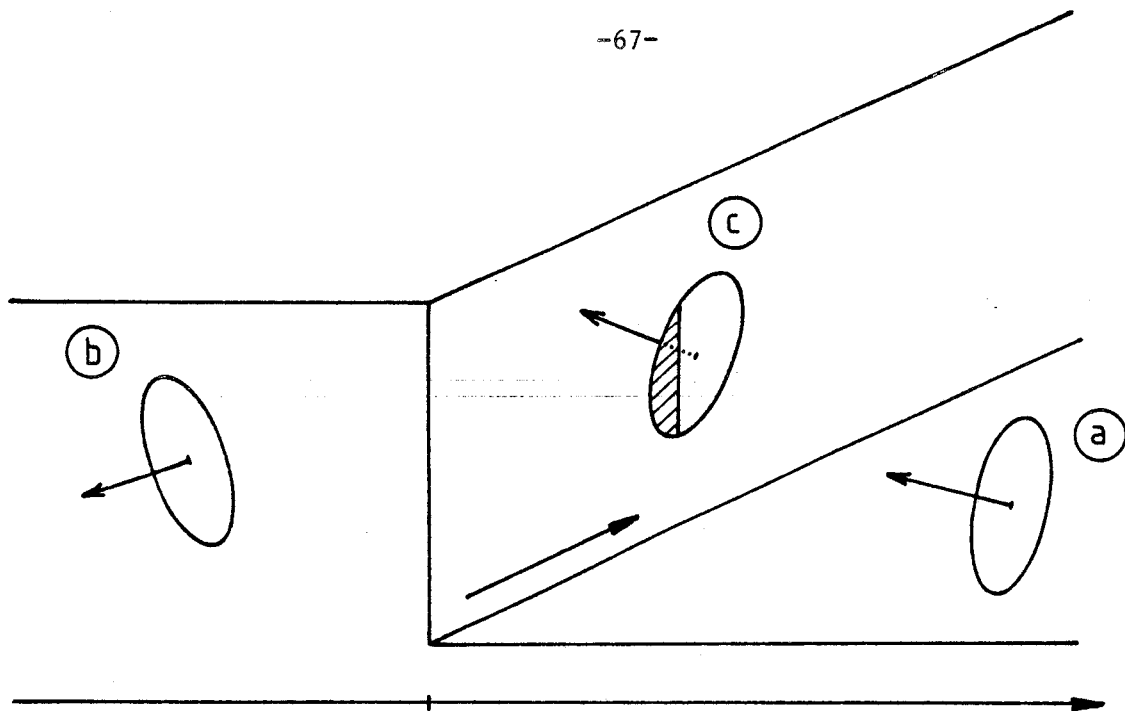
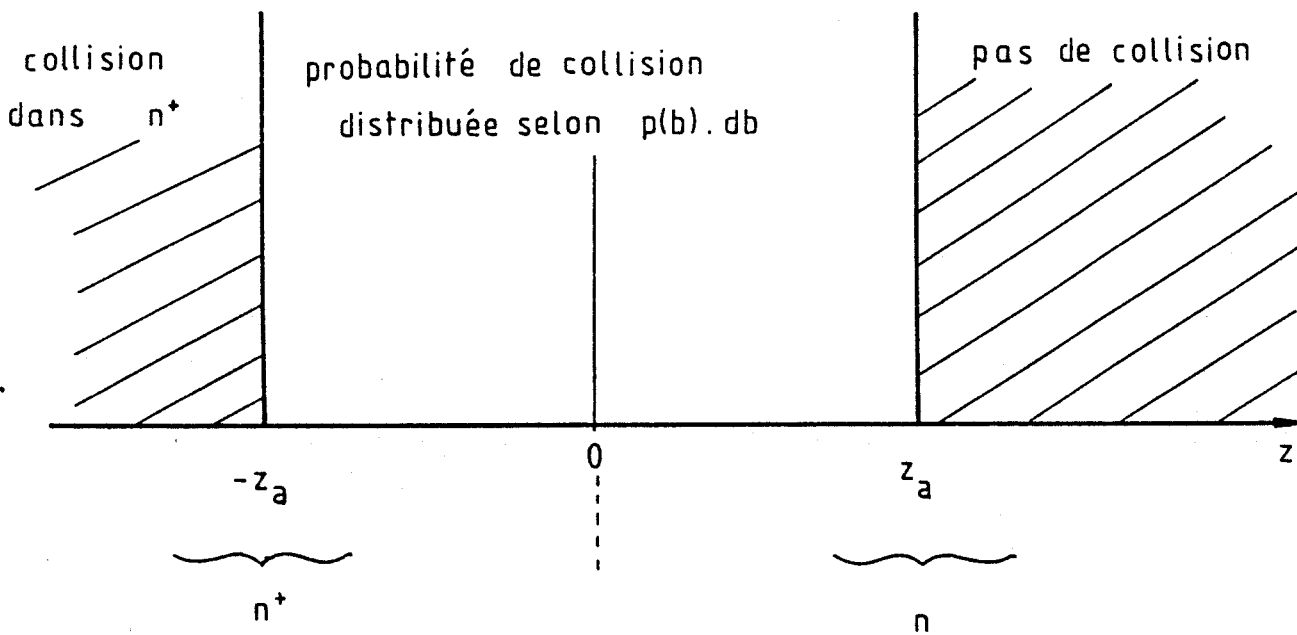


Figure 31

Résumé des trois situations intervenant dans le cas d'une homo-jonction n n.



$$z_a = b_1' \cdot A$$

S_0 l'aire de cette portion de disque, tirant un nombre pseudo-aléatoire r entre 0 et 1, si

$$r < \frac{S_0}{\pi b_1'^2} \quad (2.46)$$

un ion sera placé aléatoirement sur la portion de disque où $z < 0$. La figure 31 résume la situation des trois cas qui peuvent se présenter.

Dans le cas où les deux parties de matériau supportent un dopage non nul N_1 ($z < 0$) et N_2 ($z > 0$) avec $N_1 > N_2$, si ces dopages sont tous deux uniformes dans leur demi-espace respectif, alors l'application de notre modèle sera très facile. Au cours du temps, les porteurs se déplaceront aléatoirement au travers et aux environs de l'interface. Les instants d'interaction sont toujours donnés par (2.16). Par exemple, si on a $N_1 = 10 N_2$, alors les τ_i respectifs seront tels que $\tau_{i1} = 0,464 \tau_{i2}$ en moyenne. A un électron simulé on pourra associer une double échelle de temps dans laquelle on repère les instants d'interactions sur les impuretés de chaque demi-espace. Chaque type d'interaction aura lieu indépendamment à son heure avec le cercle azimutal dont le rayon correspondra à l'un ou à l'autre demi-espace. Dans l'exemple, ce rayon sera plus grand pour le 2 que pour le 1. Le reste de la simulation est en tout point identique au cas précédent.

II.3. POLARISATION DU CHAMP ELECTRIQUE

Nous étudions l'interaction électron-impureté pour deux polarisations de champ électrique que nous définissons par (Fig. 29) :

$E_{//}$: le champ électrique est appliqué parallèlement à l'interface N+N (suivant la direction x).

E_{\perp} : le champ électrique est appliqué perpendiculairement à l'interface N+N (suivant la direction z).

CHAPITRE III

EXPLOITATION DES MODELES ET RESULTATS

CHAPITRE III

EXPLOITATION DES MODELES ET RESULTATS

Dans un souci de rigueur, nous avons tenté de trouver la solution la plus exacte permettant de traiter l'interaction électron-impureté. Il s'est avéré que cette rigueur entraîne nécessairement une complication dans le traitement numérique aboutissant aux résultats, et que le meilleur choix semblait être celui du potentiel pseudo-écranté du point de vue de la simplicité. De par ce fait, les trois hypothèses de potentiel présentées dans le chapitre II n'ont pas été systématiquement exploitées.

Nous sommes plus particulièrement intéressés par les phénomènes d'électrons chauds, et l'évaluation de l'effet des interactions électron-impureté sur ceux-ci. Cet aspect du problème, nous l'avons déjà noté, est important dans la mesure où l'on étudie les phénomènes de conduction dans les composants travaillant le plus souvent en régime d'électrons chauds.

Comme nous avons longuement évoqué le calcul de la mobilité ohmique pour illustrer les modèles présentés dans le chapitre II, nous commencerons ici par la détermination de la vitesse de dérive en champ fort. Ensuite, nous considérerons le cas de l'homojonction, en présence des deux polarisations de champ électrique E_{\perp} et $E_{//}$ définies au chapitre II.

Afin de valider les résultats obtenus dans le cas de l'homojonction, il est nécessaire d'étudier la vitesse de dérive pour diverses valeurs de dopage et du paramètre d'écran. Cela nous permet entre autres de constater la concordance des vitesses limites que l'on peut voir aux extrémités de l'homojonction, loin de l'interface, avec les valeurs obtenues en effet de volume. Notre modèle, après avoir

vérifié les valeurs limites de la vitesse, nous permet de constater une évolution graduelle de la vitesse de part et d'autre de l'interface, sur des distances qui en apparence ne semblent pas corrélées aux valeurs du paramètre d'écran β ou de la distance d'écran b_0 . Le problème majeur consiste à relier correctement cette évolution aux paramètres variables introduits dans le modèle. L'interaction électron-impureté est très bien perçue pour des valeurs extrêmes de dopage et du paramètre d'écran (ou de densité d'électrons libres). Pour exhalter les phénomènes, nous avons également fait une étude aux basses températures (7.7°K), là où l'interaction électron-impureté devient prépondérante vis-à-vis des autres types d'interactions (Fig. 5).

III.1. ETUDE DE LA VITESSE DE DERIVE EN CHAMP FORT

A l'application d'un champ électrique fort produisant les effets d'électrons chauds, dans l'AsGa est associé le phénomène de transfert des porteurs vers les vallées satellites. Les électrons ainsi transférés voient leur masse brusquement augmenter (voir Tableau 1, paragraphe I.3.2.), à quoi correspond une diminution très notable de la vitesse instantanée (et aussi de la vitesse moyenne) par rapport à ce qu'elle est dans la vallée centrale. De même l'effet du champ électrique sera fortement amoindri vis-à-vis de l'effet des collisions inélastiques, menant ainsi au phénomène de saturation de la vitesse de dérive. De ceci, il résulte que l'effet des impuretés ionisées sur les électrons des vallées satellites tendra à disparaître. En effet, à vitesse égale un électron en vallée satellite pourra avoir 3 ou 8 fois plus d'énergie qu'un électron en vallée centrale. Ceci implique des collisions sur impuretés ionisées en moins grand nombre, mais aussi des angles de collisions nettement plus faibles. Il en résulte que les caractéristiques $v(E)$ du matériau tendent rapidement les unes vers les autres quelles que soient les conditions de dopage ou de concentration électronique.

Vitesse de d rive en 10^7 cm/s

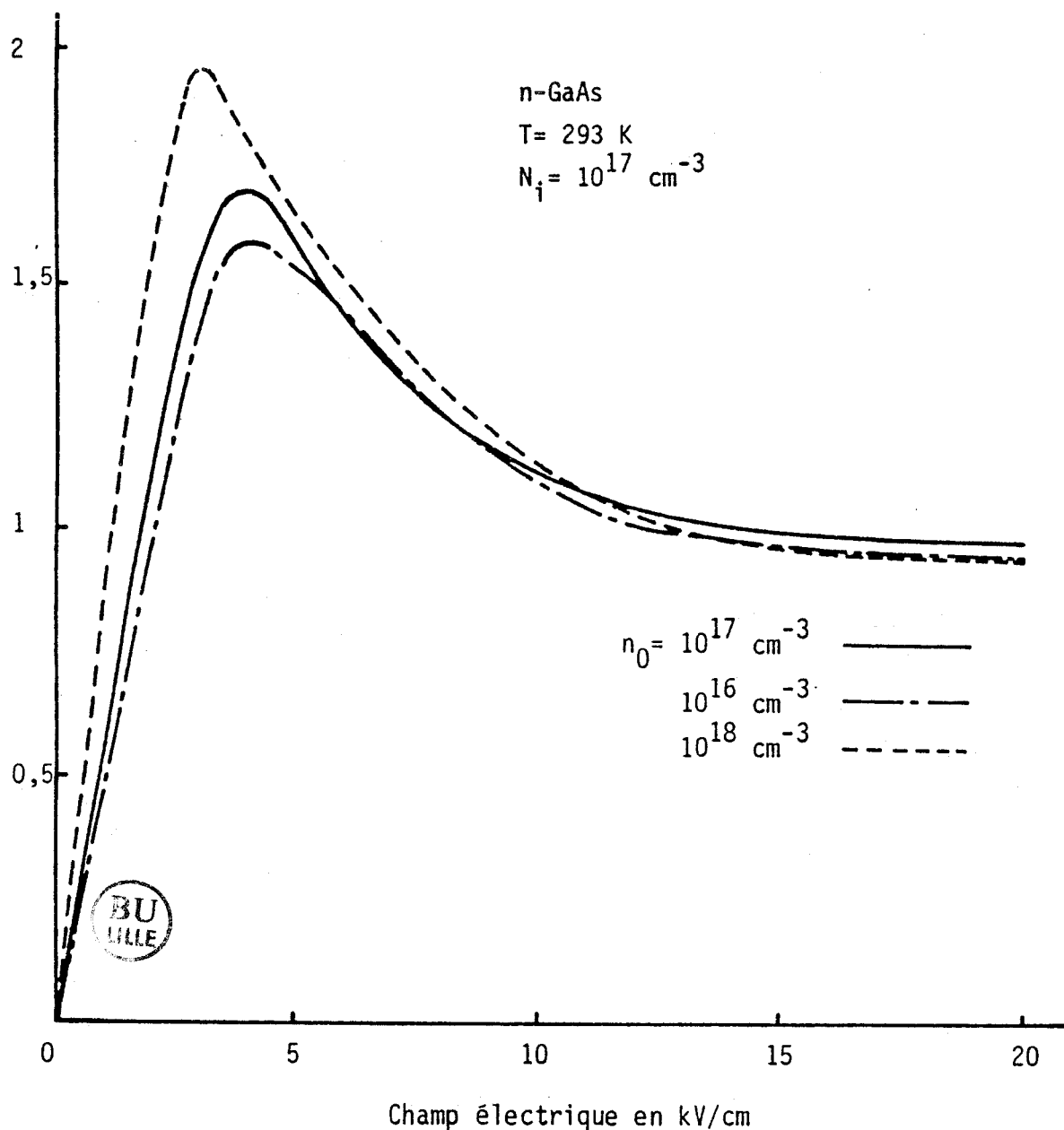


Figure 32

Vitesse de d rive  lectronique calcul e pour la densit  d'impuret s N_i et trois valeurs de densit   lectronique n_0 .

III.1.1. EXPLOITATION DU MODELE DU POTENTIEL
PSEUDO-ECRANTE

Les résultats sont illustrés par la figure 32 où nous avons utilisé le modèle du potentiel pseudo-écranté (paragraphe II.2.3.2), les répartitions d'ions et d'électrons étant uniformes. Dans la figure 32, la densité d'ions est de 10^{17}cm^{-3} , et nous avons fait varier la densité d'électrons par l'intermédiaire du paramètre b_0 . Outre la vitesse de dérive calculée en fonction du champ électrique, nous avons aussi calculé l'évolution de l'énergie moyenne des électrons (Fig. 33). Cette dernière est relativement peu influencée par les collisions. On constatera toutefois que l'énergie moyenne, à un champ donné, tend à diminuer légèrement quand l'influence des interactions électrons-ions augmente. Par contre, la vitesse de dérive est très sensible aux collisions, surtout dans le régime de mobilité en bas champ et jusqu'à des champs de l'ordre de 10 kV/cm, un peu supérieurs au champ de seuil où la vitesse passe par un maximum. Au delà, les courbes restent quasiment confondues et tendent vers la même limite.

III.1.2. COMMENTAIRES SUR L'ALLURE GENERALE DE $V_d(E)$

L'évolution de la vitesse de dérive dans le cas où n_0 est très voisin de N_i , est en tout point similaire aux résultats fournis par la littérature [14]. Les cas extrêmes correspondants aux forts écrantages ($n_0 \gg N_i$) et faibles écrantages ($n_0 \ll N_i$) tendent correctement vers leurs limites physiques respectives.

En effet, lorsque l'écrantage est fort ($n_0 \gg N_i$), la portée du potentiel d'impureté est fortement restreinte, l'action des impuretés est amoindrie, le système électronique se comporte comme si le dopage avait disparu et la vitesse de dérive augmente fortement, tendant vers la vitesse correspondant au cas d'un matériau de dopage nul ($V_d = 2 \cdot 10^7 \text{ cm/s}$ au champ de seuil).

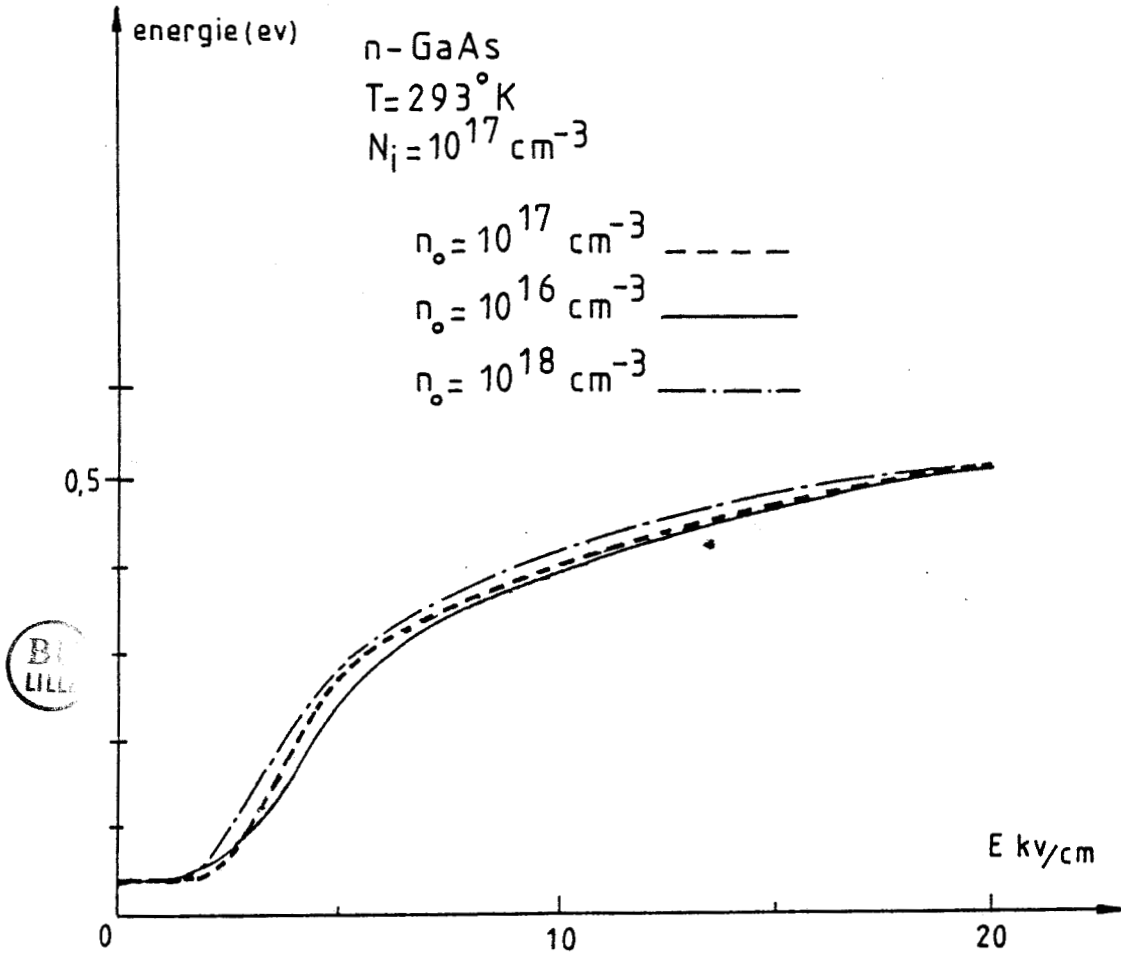


FIGURE 33

Evolution de l'énergie moyenne des électrons en volume en fonction du champ électrique, pour diverses valeurs de la densité électronique n_0 .

Lorsque l'écrantage est faible ($n_0 \ll N_i$), le potentiel d'impureté agit sur de plus longues distances, l'interaction sur impuretés devient prépondérante, la vitesse de dérive diminue nettement par rapport aux cas précédents.

III.1.3. COMMENTAIRES SUR L'ALLURE GENERALE DE $\epsilon(E)$

On notera sur la figure 33, montrant l'énergie moyenne pour les diverses conditions d'écrantage que l'effet des impuretés ionisées est assez faible mais qu'il existe cependant, bien que les collisions soient élastiques. Ceci est dû aux réorientations aléatoires supplémentaires apportées par ces interactions qui ont pour effet de modifier l'influence du champ électrique sur les électrons qui devra être plus grand pour fournir la même énergie moyenne aux porteurs. A ceci correspond aussi une augmentation du champ de seuil comme on a pu le constater sur la figure 32.

III.2. ETUDE DE LA MOBILITE ET DE LA VITESSE DE DERIVE DANS UNE HOMOJONCTION

Afin de concrétiser l'effet d'écran dû aux porteurs libres, nous allons étudier le cas simple d'une homojonction du type n^+n , où les impuretés présentes dans n^+ , génèrent des électrons libres dont une partie va s'accumuler près de l'interface n^+n créant alors l'écrantage. Les autres électrons évoluant dans la partie n seront partiellement soustraits à l'influence des impuretés. Dans le cas présent nous étudions le comportement de ces électrons lorsqu'ils sont soumis à un champ électrique de dérive uniforme.

On est amené à définir ainsi une vitesse de dérive qui

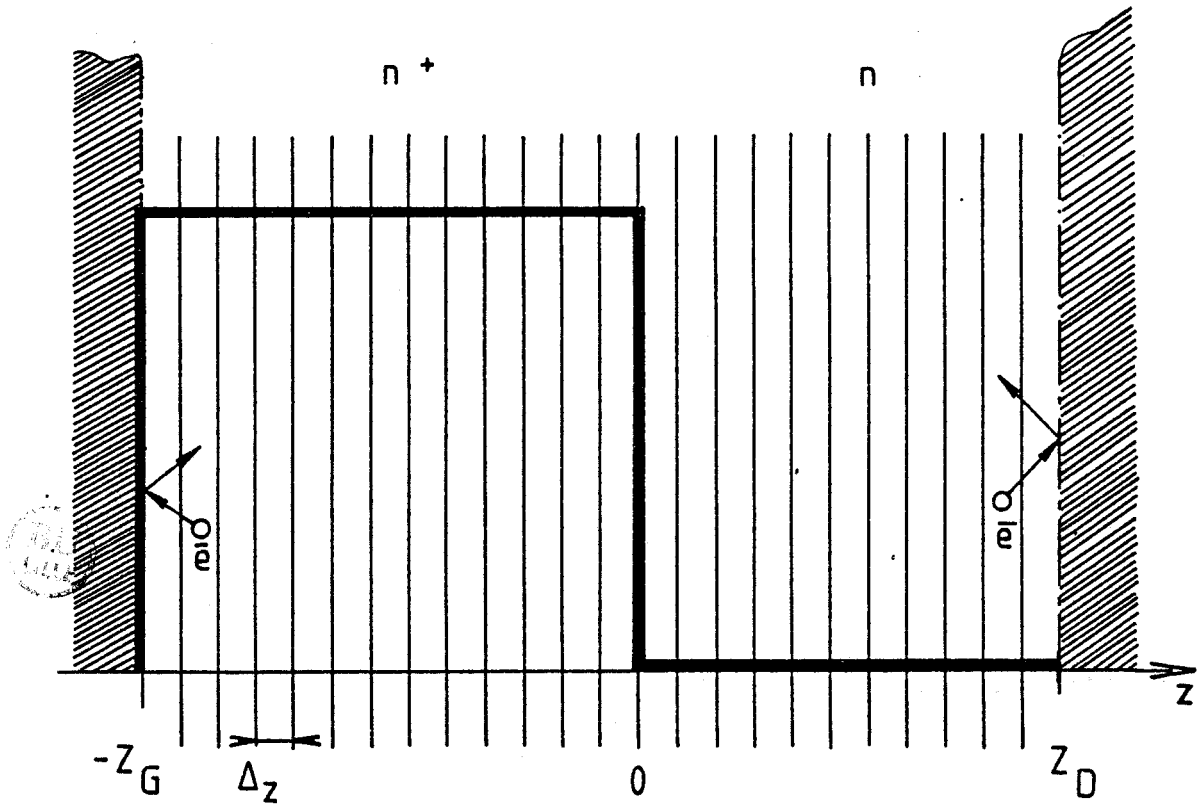


FIGURE 34

Structure de base

dépend non seulement du champ électrique mais aussi de l'espace.

III.2.1. PRESENTATION DE LA STRUCTURE

La structure de base n^+n GaAs que nous employons pour la simulation est présentée en figure 34. La transition de dopage entre les parties n^+ et n est abrupte et la concentration en impuretés N_i est uniforme dans le matériau n^+ tandis que la partie n est très peu dopée pour admettre $N_i = 0$ dans celle-ci.

Il faut remarquer que cette configuration ne représente pas encore un composant réel, mais elle nous permet néanmoins de mettre aisément en évidence l'effet des impuretés ionisées localisées dans la partie n^+ sur le comportement des électrons évoluant dans la partie n . Nous allons voir que cette influence n'est pas aussi simple et directe qu'on pourrait le croire à première vue.

Dans les courbes qui suivent les électrons sont totalement libres de se mouvoir suivant les directions x et y . Ils sont toutefois contraints à résider dans un couloir de largeur s'étendant de $-Z_G$ à Z_D afin d'obtenir :

- (i) - un régime stationnaire à l'intérieur du tronçon étudié.
- (ii) - des résultats significatifs qui concernent le calcul des valeurs moyennes des différentes grandeurs étudiées, en particulier loin de l'homojonction.

* Ces conditions sont satisfaites lorsque $Z_D - Z_G$ est suffisamment grand devant la largeur du libre parcours moyen (de l'ordre de 300 à 500 Å).

* Les valeurs moyennes sont obtenues en comptabilisant le nombre de passage de l'électron dans chaque tranche de matériau de largeur Δz ; il est donc nécessaire que l'électron y ait séjourné un nombre de fois suffisamment grand. Il faut donc limiter l'excursion de l'électron suivant la direction z afin d'éviter une durée de simulation abusive.

Au cours de la simulation, nous ne simulons qu'un seul porteur pendant un temps relativement long.

III.2.2. ETUDE EN CHAMP PARALLELE E//

Dans cette étude, nous avons mis $Z_G = 1000 \text{ \AA}$, $Z_D = 2000 \text{ \AA}$ et $\Delta z = 20 \text{ \AA}$. Pour éviter la dispersion spatiale due à la diffusion du porteur à travers la structure, nous supposerons que celui-ci est réfléchi spéculairement (élastiquement) vers l'intérieur de la lame dès que $z = -Z_G$ ou $z = +Z_D$. Ceci étant, les durées typiques de simulation sont comprises en général entre 10 et 20 ns.

III.2.2.1. Résultats à la température ambiante

Un premier résultat de simulation est montré dans la figure 35. Entre $z = -600 \text{ \AA}$ et $z = +800 \text{ \AA}$, nous avons reporté tous les points fournis par la simulation. Celle-ci, effectuée à 2000 V/cm , donc proche de l'équilibre au voisinage du régime ohmique, a duré 10 ns, soit un temps de résidence moyen de 100 ps dans chaque case. Cette figure illustre bien la dispersion statistique qui résulte du processus stochastique. Pour les paramètres de simulation utilisés, elle est de l'ordre de 5 à 10 %.

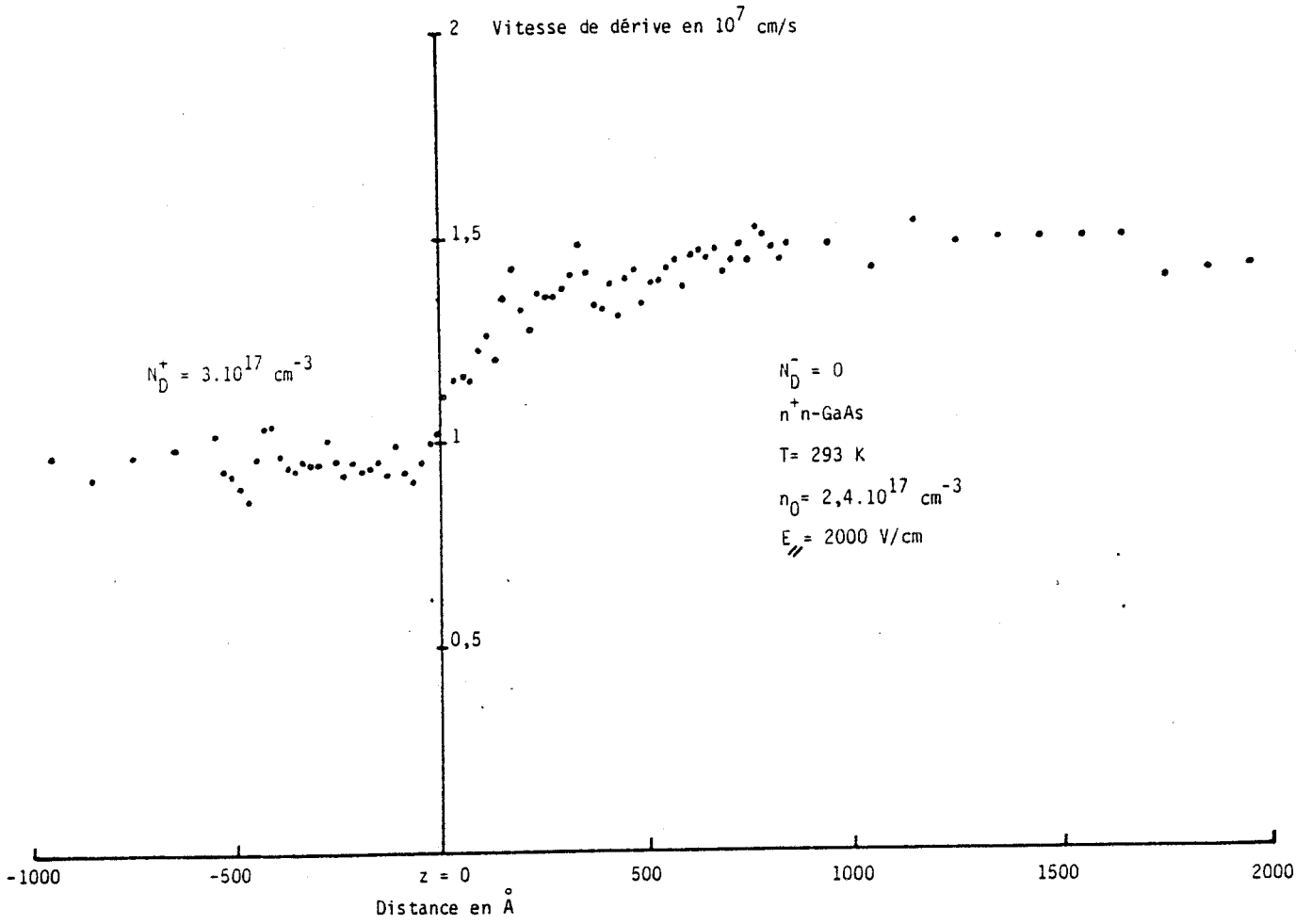


FIGURE 35

Evolution de la vitesse de dérive en fonction de la distance.

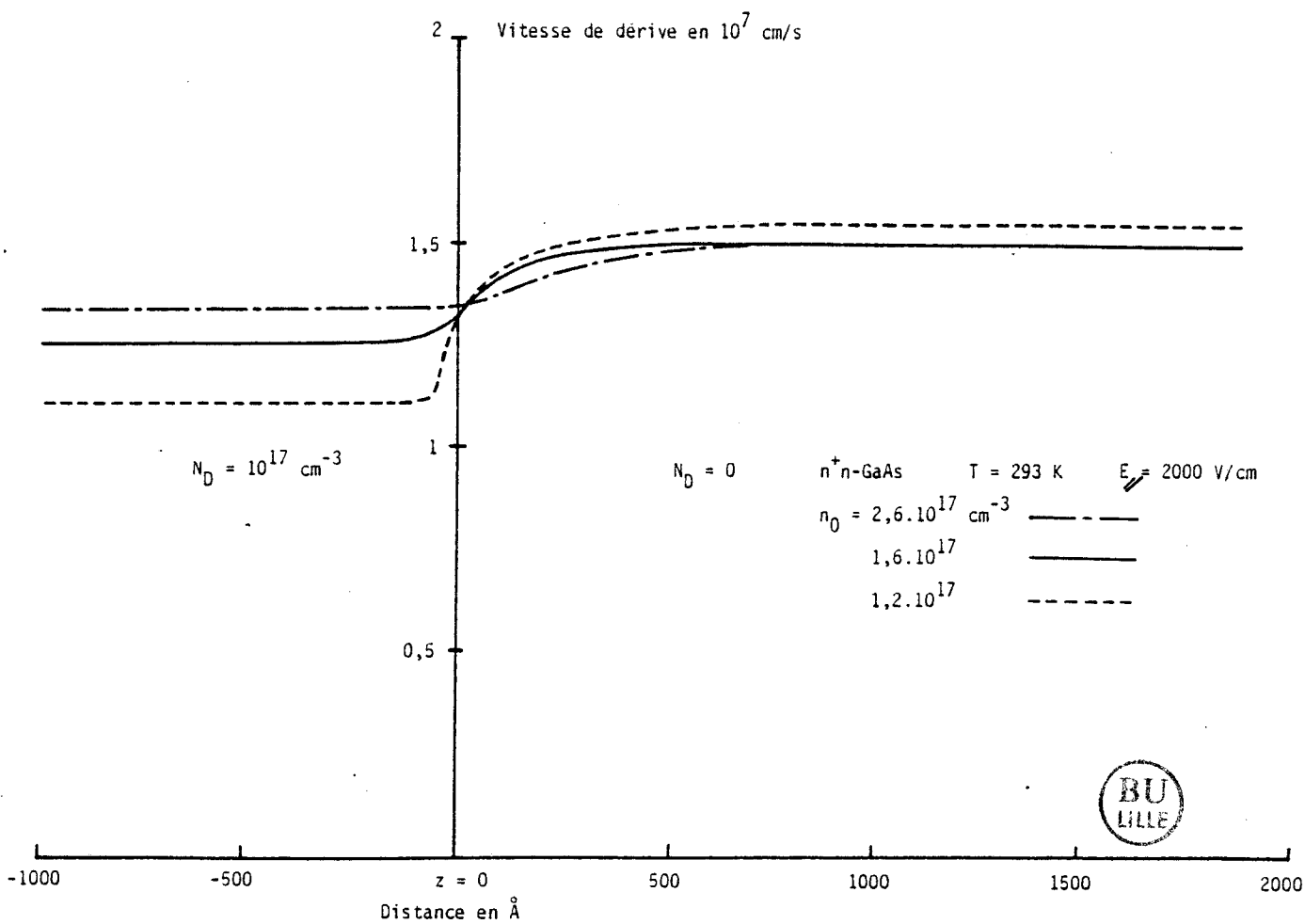


FIGURE 36

Evolution de la vitesse de dérive en fonction de la distance.

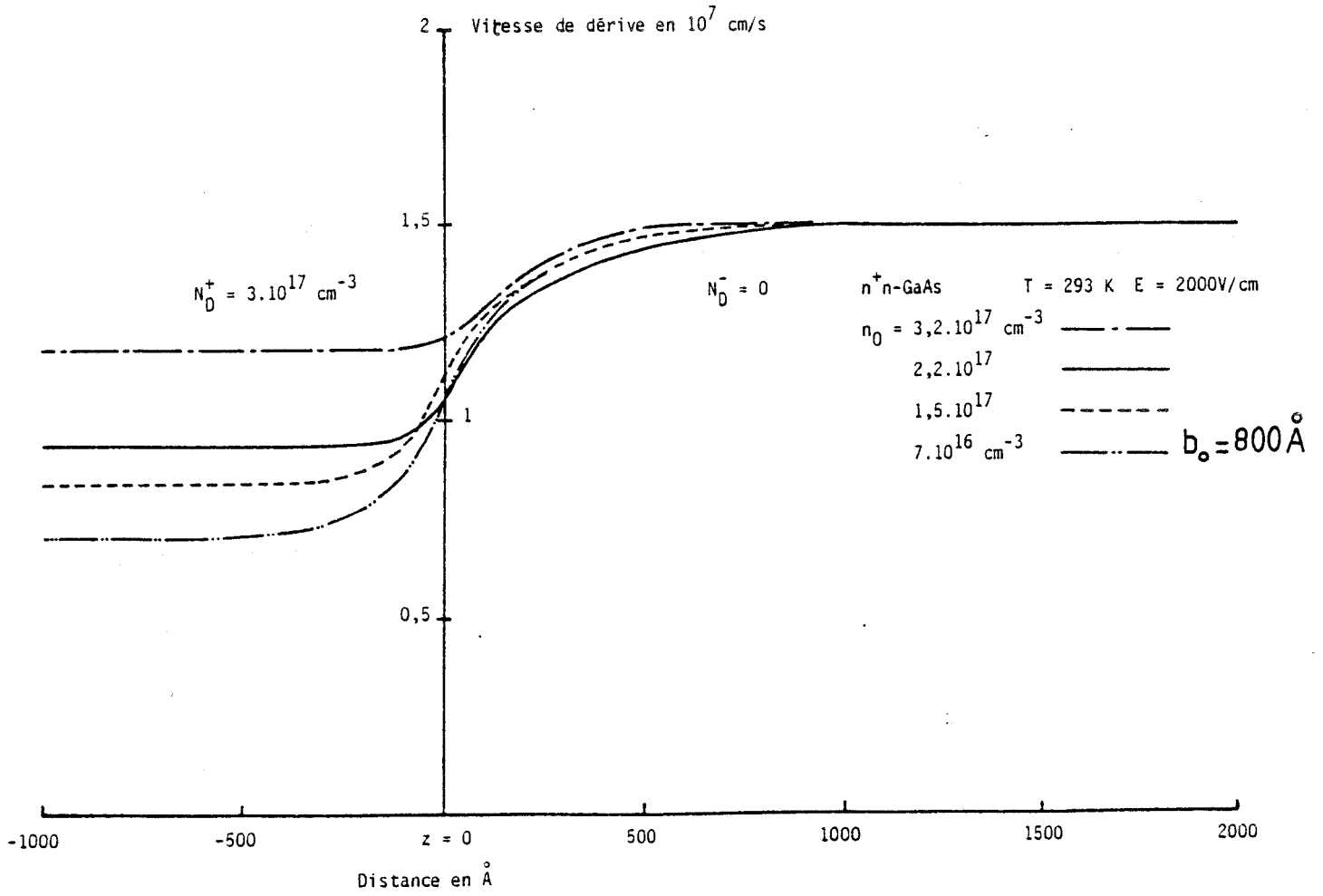


FIGURE 37

Evolution de la vitesse de dérive en fonction de la distance.

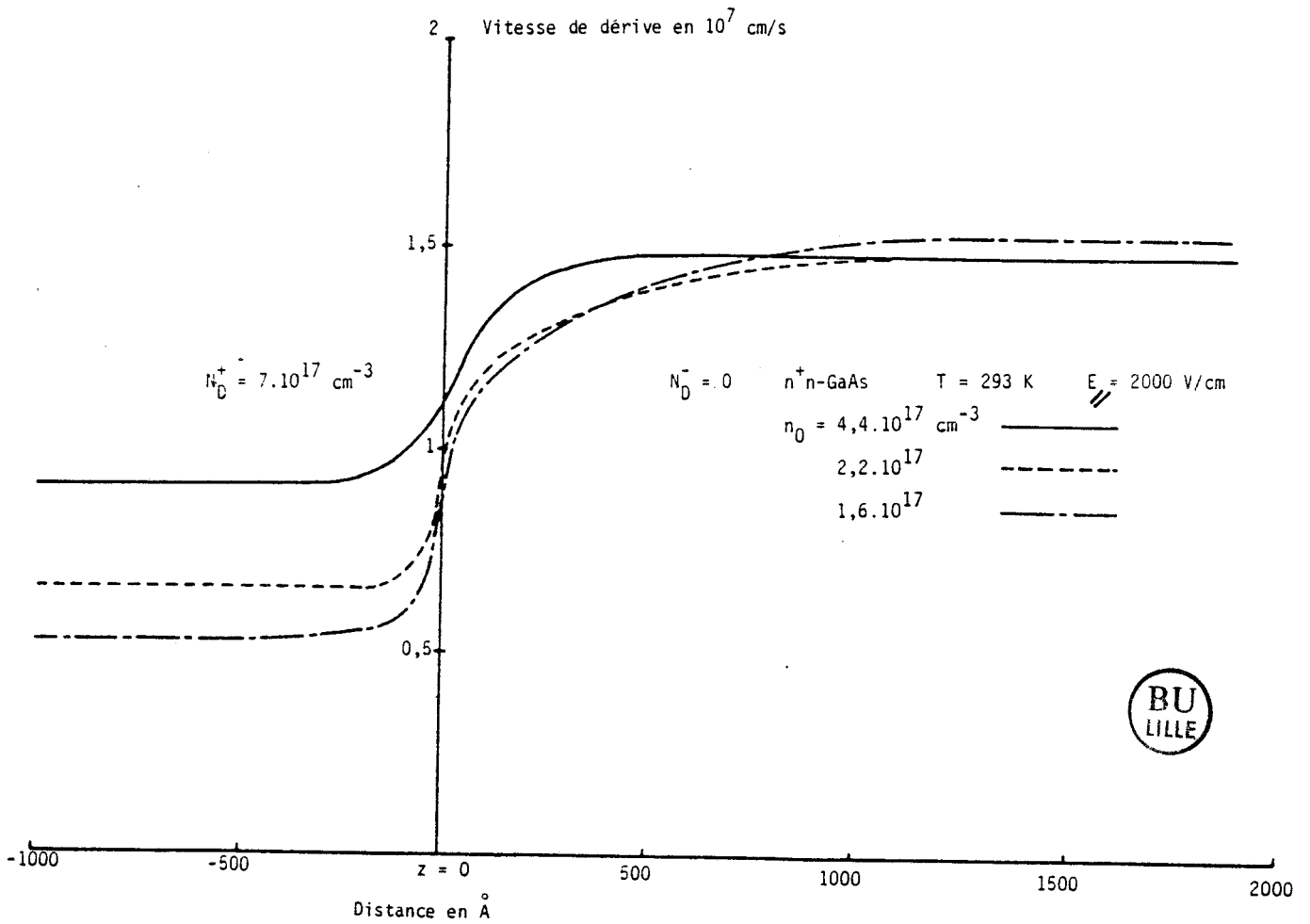


FIGURE 38

Evolution de la vitesse de dérive en fonction de la distance

Le résultat de la figure 35, ainsi que ceux présentés dans toutes les autres figures du chapitre ont été obtenus dans l'hypothèse du potentiel coulombien pseudo-écranté, l'étude ayant été effectuée à 293 K ou à 77K.

Les figures 36 à 38 montrent des résultats acquis pour une homojonction à $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ pour trois valeurs de distance d'écran : à n_0 décroissant, 38,80 et 165 Å. La largeur de la lame de matériau a été prise suffisamment large pour que, à gauche comme à droite, les vitesses de dérive correspondent bien à ce que l'on obtient dans le matériau à dopage uniforme (Cf. Ch. II). On observe la transition de vitesse au niveau de l'homojonction (aux alentours de $z = 0$). La distance sur laquelle s'effectue cette transition est de l'ordre de 500 Å et semble donc surtout liée à la densité d'impuretés. L'effet de celles-ci sur les électrons se répercute essentiellement sur la valeur de la mobilité à l'intérieur du matériau dopé et à la possibilité pour celle-ci d'atteindre des valeurs plus élevées que celles afférentes à un matériau uniforme de même dopage. Par contre, on note une très nette diminution de la mobilité dans le matériau intrinsèque au voisinage immédiat de l'homojonction. Conformément à ce qui avait été annoncé dans l'introduction, nous observons ici l'effet à distance des potentiels coulombiens des ions du matériau dopé sur les électrons situés dans le matériau pur. La distance typique de 500 Å montre que cet effet est relativement délocalisé, et par conséquent peut jouer un rôle dans les prévisions du fonctionnement des composants.

Sur toutes ces figures, l'effet des ions à distance sur les électrons est assez évident. Toutefois, cette influence à distance des ions sur les porteurs ne se caractérise pas simplement en termes de distance d'écran ni en termes de distance géométrique entre ion et porteur. En réalité cette influence est rehaussée par la diffusion des électrons au travers et autour de l'interface puisqu'on permet à l'électron simulé de traverser librement l'interface dans un sens ou dans l'autre. S'il n'y avait pas de diffusion, nous pourrions par exemple constater que l'écrantage serait parfaitement reflété sur

l'évolution de la mobilité avec z . La largeur de cette zone où la mobilité varie avec z serait alors de l'ordre de grandeur de deux fois la distance d'écran b_0 . Ceci ne peut pas être détecté dans nos résultats. Nous pensons que la raison principale à cela est la diffusion. En d'autres termes, s'il n'y a pas de barrière à l'interface, interdisant aux porteurs de traverser l'interface (comme ce serait le cas avec une hétéro-jonction), il existe alors une étroite corrélation entre les états occupés par les porteurs de chaque côté de l'interface. Ceci se traduit par une relaxation spatiale le long de z qui est induite par le potentiel d'impuretés. En fait, on constate que l'électron quittant la zone dopée et entrant dans la zone non dopée conserve la mémoire de la présence des ions auxquels il est resté soumis. Cet effet de mémoire nécessite pour s'effacer un certain laps de temps non nul durant lequel l'électron pourra avoir parcouru une distance assez importante qui peut être de l'ordre de quelques parcours moyens soit plusieurs centaines d'angströms. Cet effet de mémoire sur le phénomène inverse existe également et se caractérise de la même façon. Cet aspect sera étudié plus en détail un peu plus loin. Ce phénomène peut être aussi détecté sur la figure 39 représentant l'évolution de l'énergie moyenne des porteurs en fonction du champ électrique et du dopage dans le GaAs en volume et sur les figures 40, 41 représentant l'évolution de l'énergie moyenne en fonction de l'abscisse z .

On peut remarquer sur la figure 39 qu'à champ faible et moyen, l'énergie change de façon significative suivant les valeurs du champ et de la concentration d'impuretés N_i . L'énergie moyenne des porteurs diminue lorsque la concentration d'impuretés augmente. Donc, si un porteur passe brutalement - par effet de diffusion - d'une région fortement dopée à une autre non dopée ou faiblement dopée, un apport d'énergie moyenne significatif doit être relaxé par les porteurs avant que leurs vitesses de dérive atteigne la valeur normale dans le volume. Cette relaxation de l'énergie apparaît clairement en figures 40 et 41 où nous avons reporté l'évolution spatiale de l'énergie moyenne des porteurs en fonction de z .

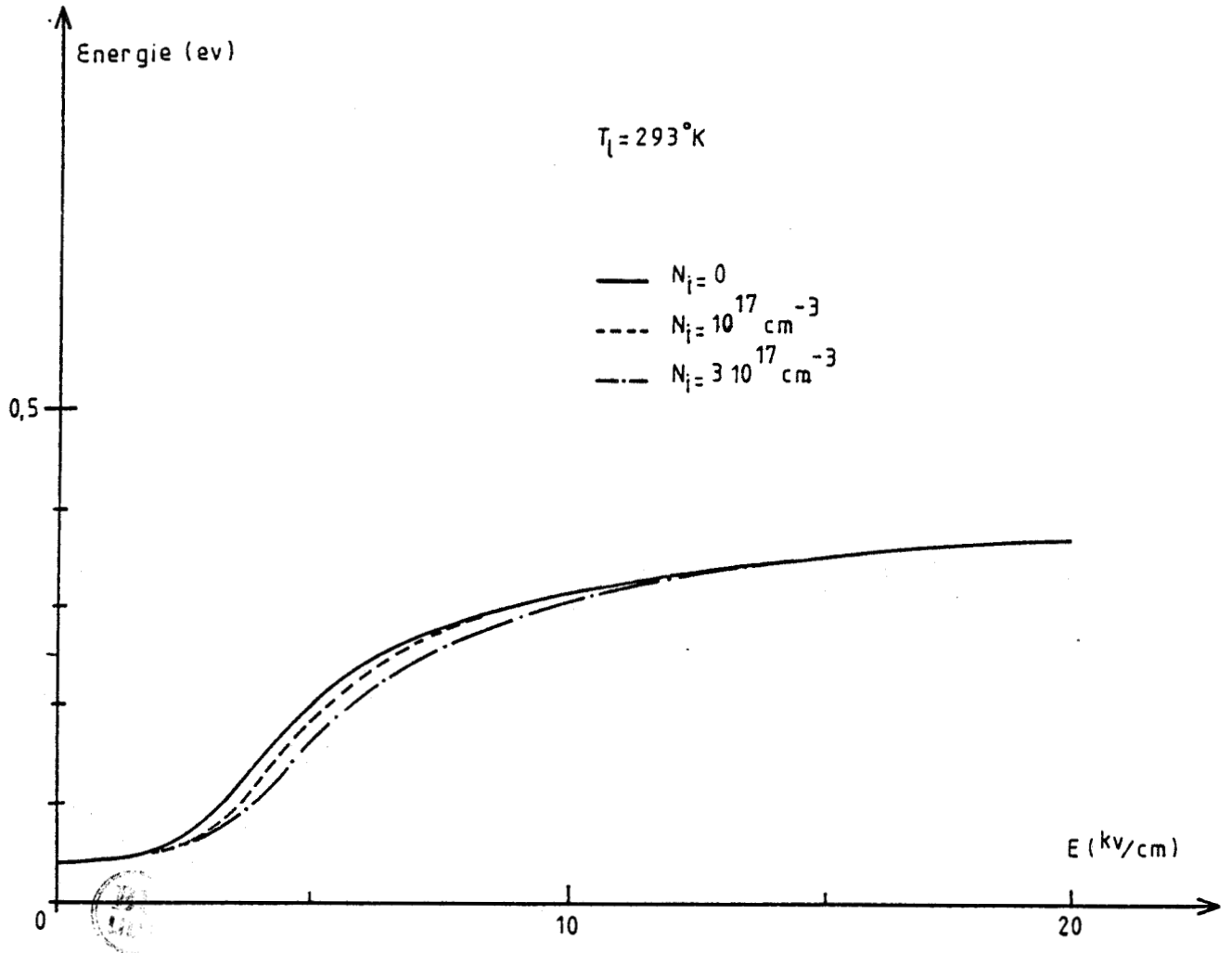


FIGURE 39

Evolution de l'énergie moyenne en fonction du champ électrique pour diverses valeurs de dopage (Résultats avec le modèle de Dingle-Brooks-Herring).

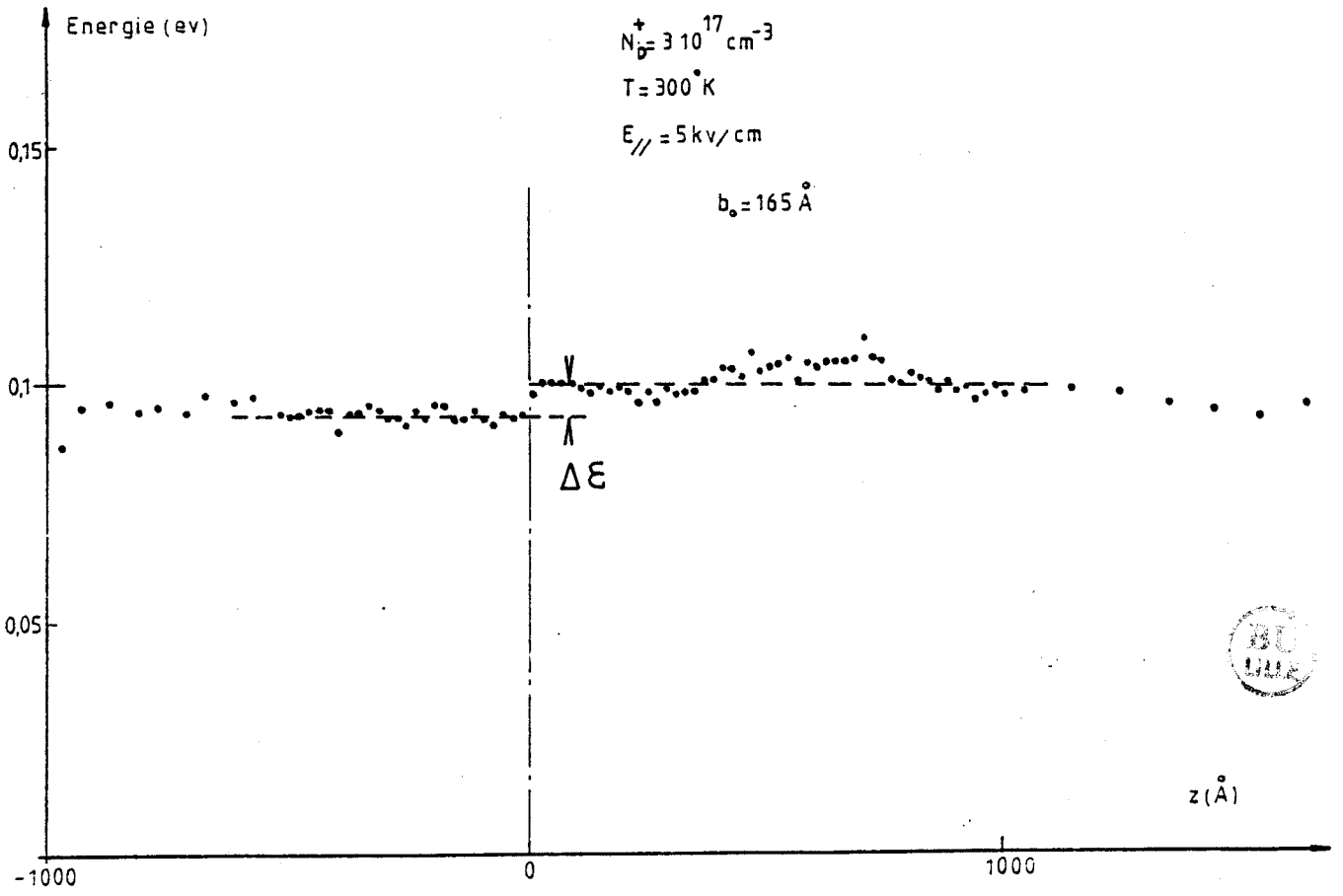


FIGURE 40

Energie moyenne en fonction de la distance z dans le cas d'une homojonction n^+n .

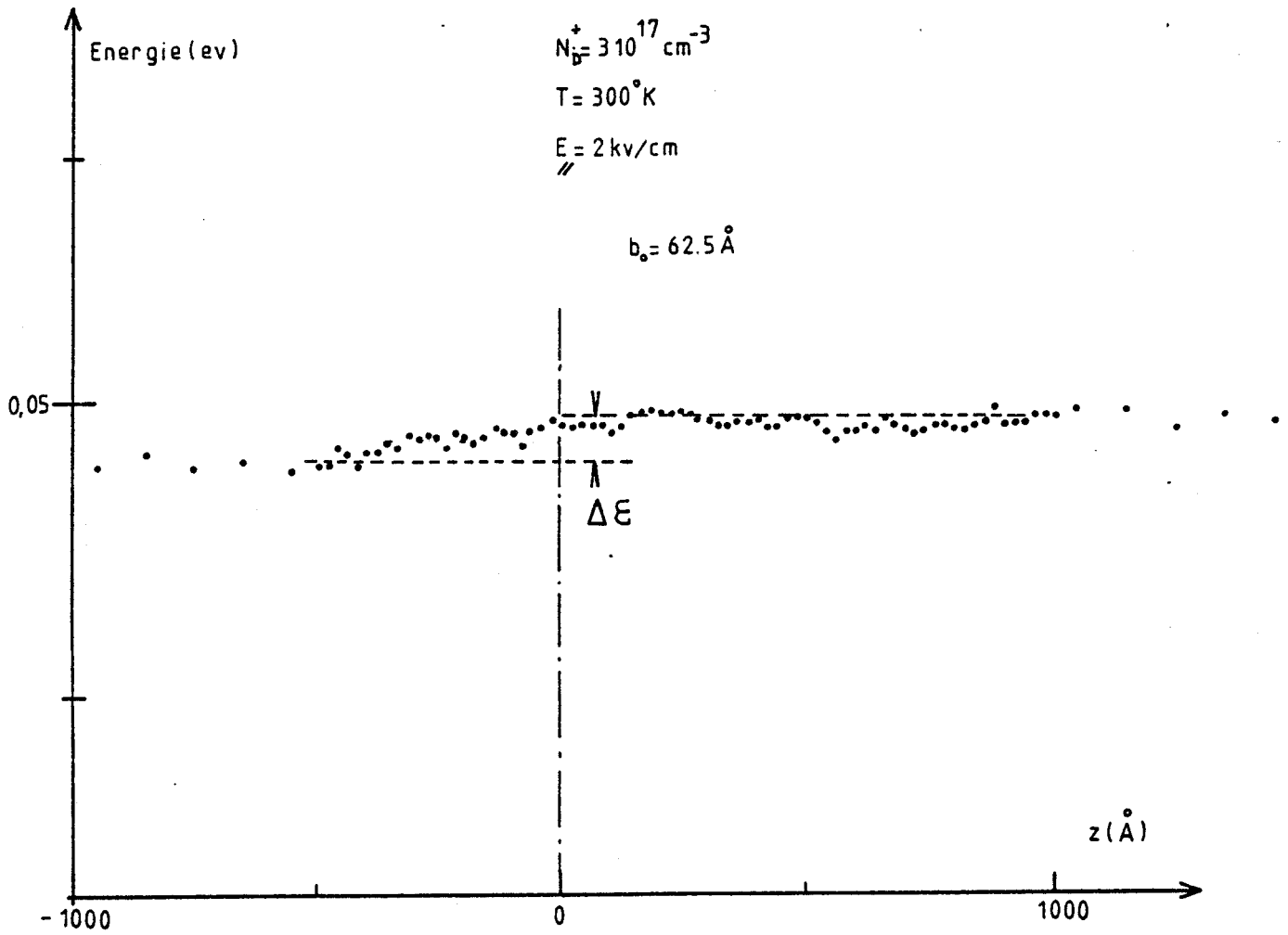


FIGURE 41

Energie moyenne en fonction de la distance z dans le cas d'une homojonction n^+n .

III.2.2.2. Résultats à 77°K

Nous avons vu qu'à la température ambiante, il ne ressort pas de relation directe entre l'évolution de la mobilité dans l'espace et la distance d'écran. Nous avons néanmoins entrepris une étude à 77°K, là où l'interaction sur impuretés devient prépondérante car à cette température les collisions sur le réseau sont moins fréquentes, et on peut espérer ainsi mettre mieux en évidence l'effet des impuretés.

III.2.2.2.1. Etude à champ faible

Nous montrons les résultats sur les figures 42 à 44 pour un champ électrique de 500 V/cm. Nous ne percevons pas encore l'effet ponctuel de la distance d'écran, puisque l'étendue de variation de mobilité s'effectue sur une distance qui est pratiquement indépendante du dopage et de la concentration d'électrons.

III.2.2.2.2. Adjonction d'une barrière à l'interface n+n

Les différents essais effectués avec une simple homojonction visant à caractériser l'effet de la distance d'écran b_0 sur l'interaction avec impuretés ne pouvant mettre en évidence l'effet de b_0 sur la mobilité à l'interface, nous allons tenter de limiter le phénomène de diffusion, en supposant qu'il existe une barrière à l'interface n+n dont le but est d'interdire aux électrons de retourner dans la partie dopée lorsqu'ils sont soumis à l'agitation thermique. Dans ce cas,

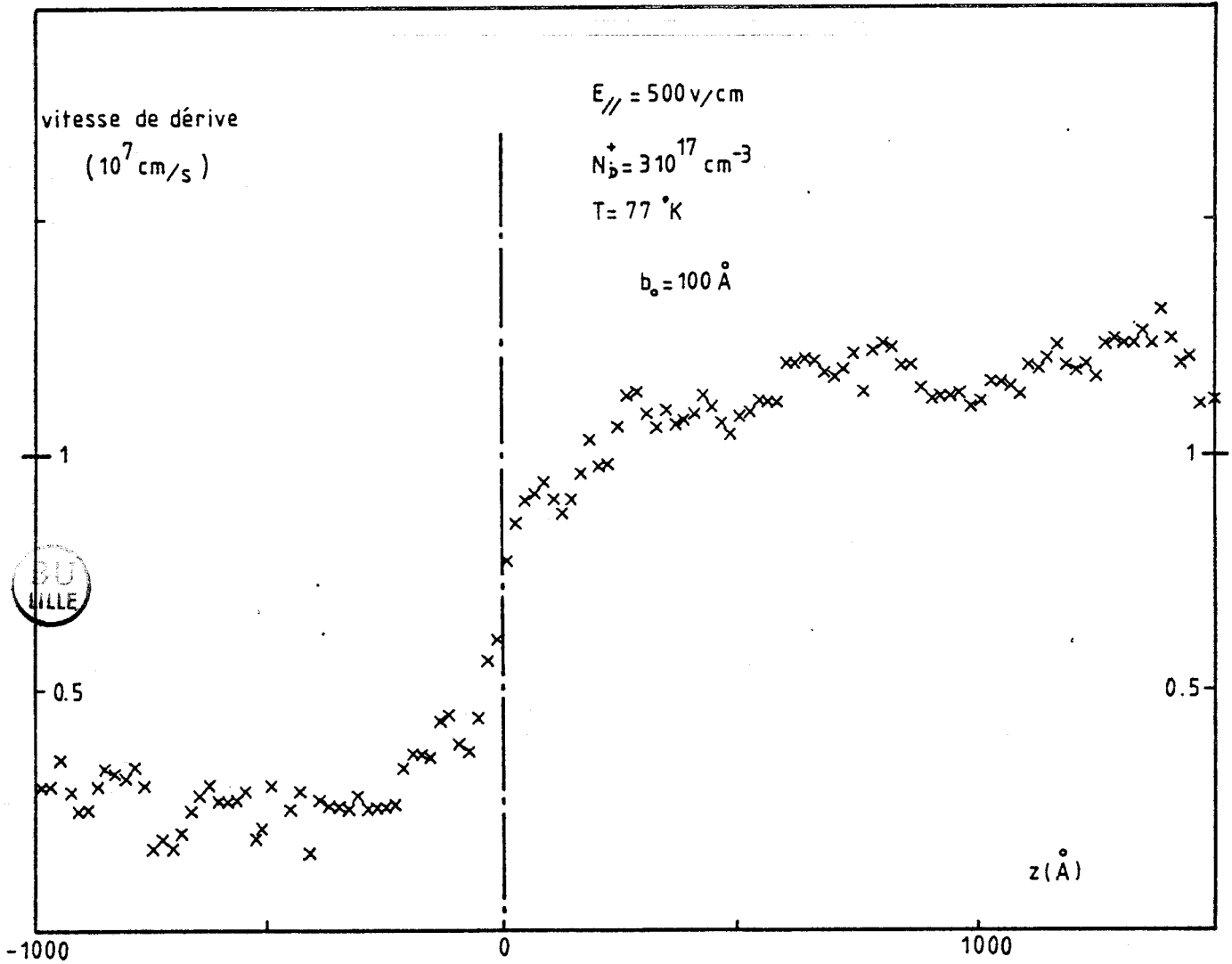


FIGURE 42

Vitesse de dérive électronique en fonction de la distance
(champ parallèle)

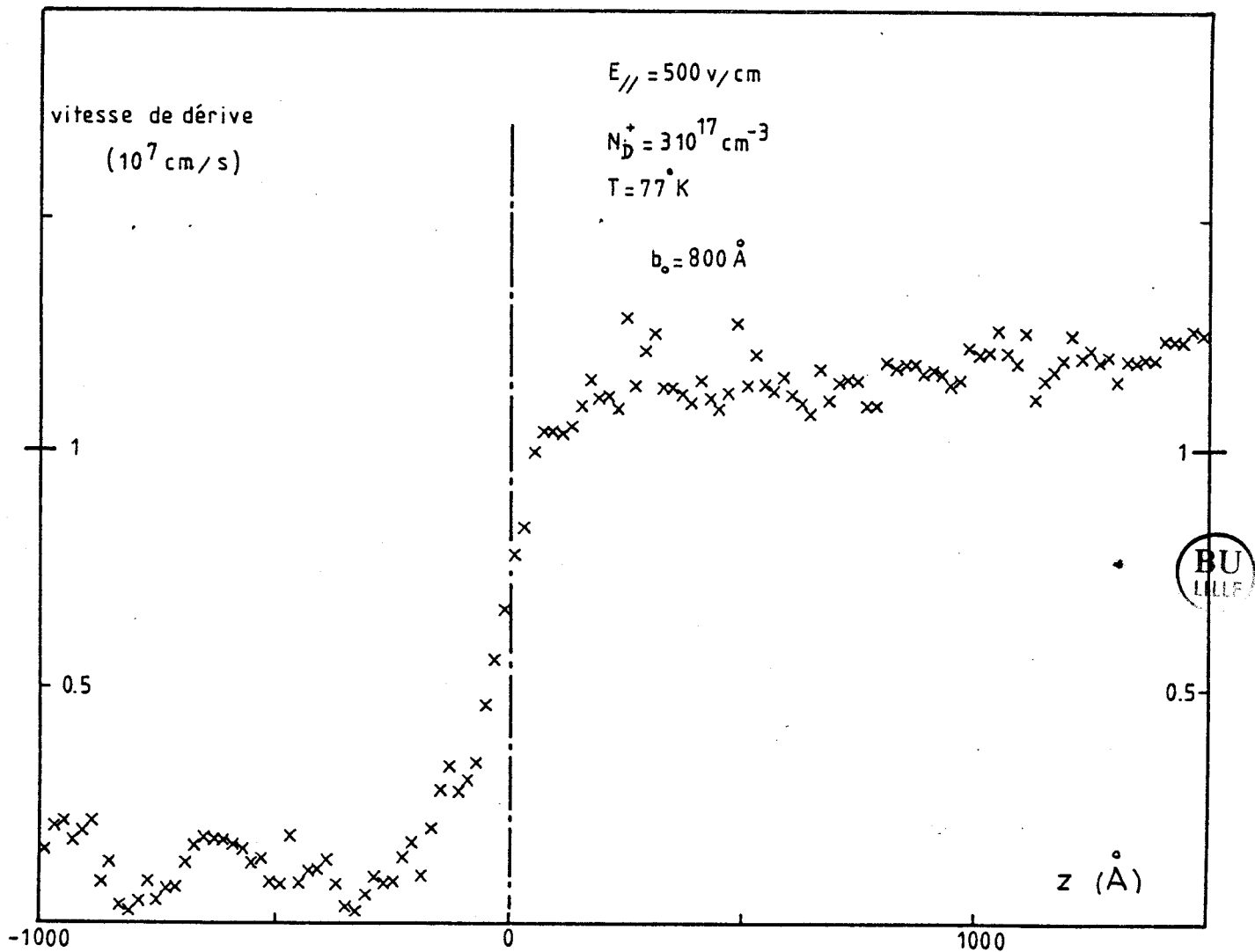


FIGURE 43

Vitesse de dérive électronique en fonction de la distance
(champ parallèle)

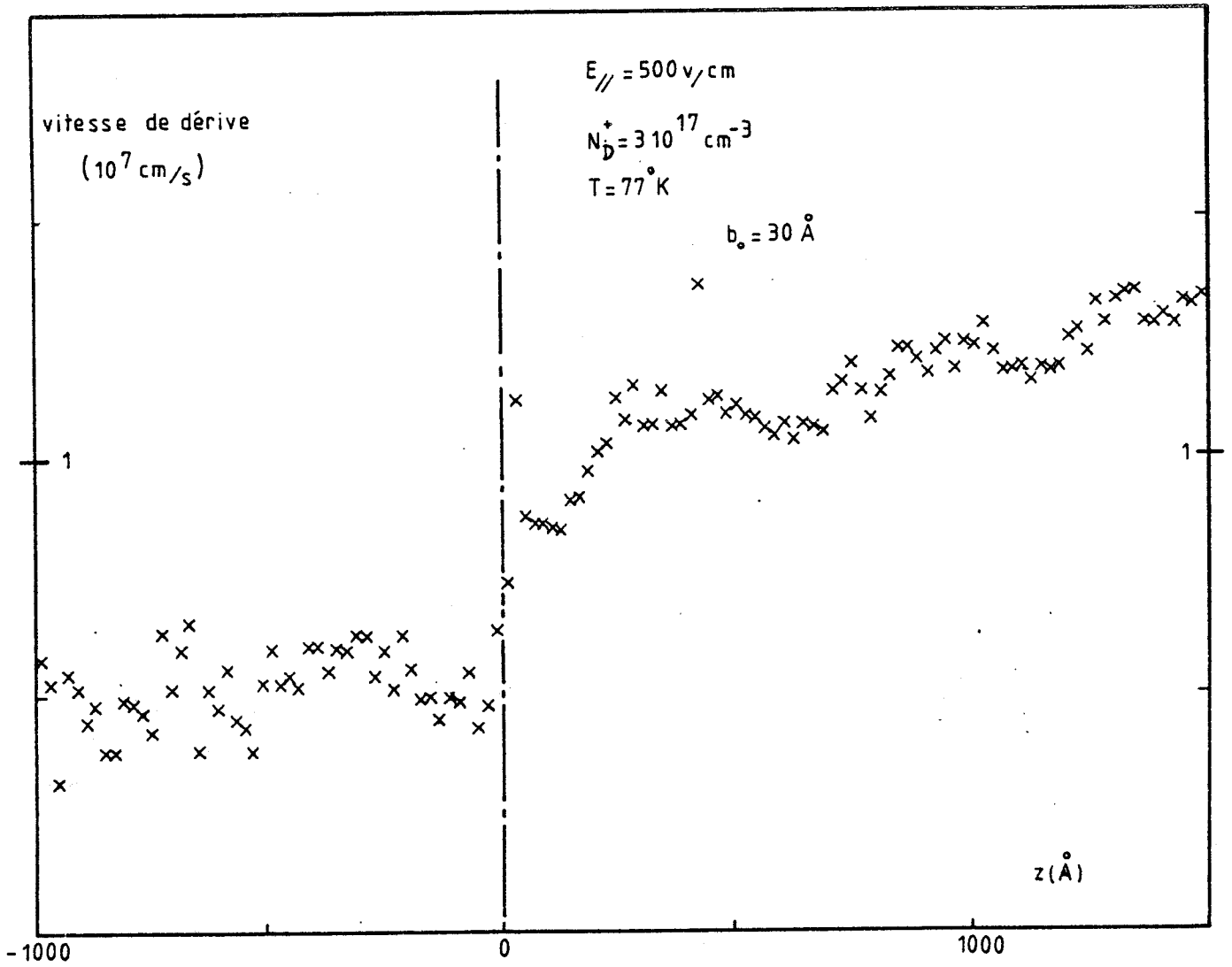


FIGURE 44

Vitesse de dérive électronique en fonction de la distance
(champ parallèle)

nous simulons une collision spéculaire sur la vitesse des électrons quand ils atteignent l'abscisse $z = 0$. Les porteurs sont alors confinés dans la zone non dopée exclusivement.

Les résultats présentés sur les figures 45 et 46 diffèrent de ceux obtenus en l'absence de barrière. La décroissance de mobilité que l'on obtient est quantitativement mieux représentée par la distance d'écran b_0 . Elle s'effectue sur une distance d'environ 100 \AA pour un b_0 de 30 \AA . Pour un b_0 de 800 \AA , la décroissance s'effectue sur une distance de 500 \AA , mais on remarque surtout que la décroissance de mobilité vers l'interface est nettement plus progressive que dans le cas précédent.

III.2.3. REMARQUE

Ici nous allons essayer de discuter le phénomène de relaxation de la vitesse de dérive à l'interface $n+n$.

Nous allons tenter de dégager la cause essentielle du phénomène de relaxation de la vitesse, en réalisant deux étapes que nous allons décrire. Ces deux étapes permettent de dissocier deux phénomènes différents :

- d'une part, ce qui est purement dû à l'influence directe des ions sur les porteurs,
- d'autre part, ce qui est apporté par le phénomène de diffusion.

a) Influence directe des ions.

Pour cela, on doit limiter au maximum l'effet de la diffusion. Pour ce faire, nous astreignons le porteur à demeurer

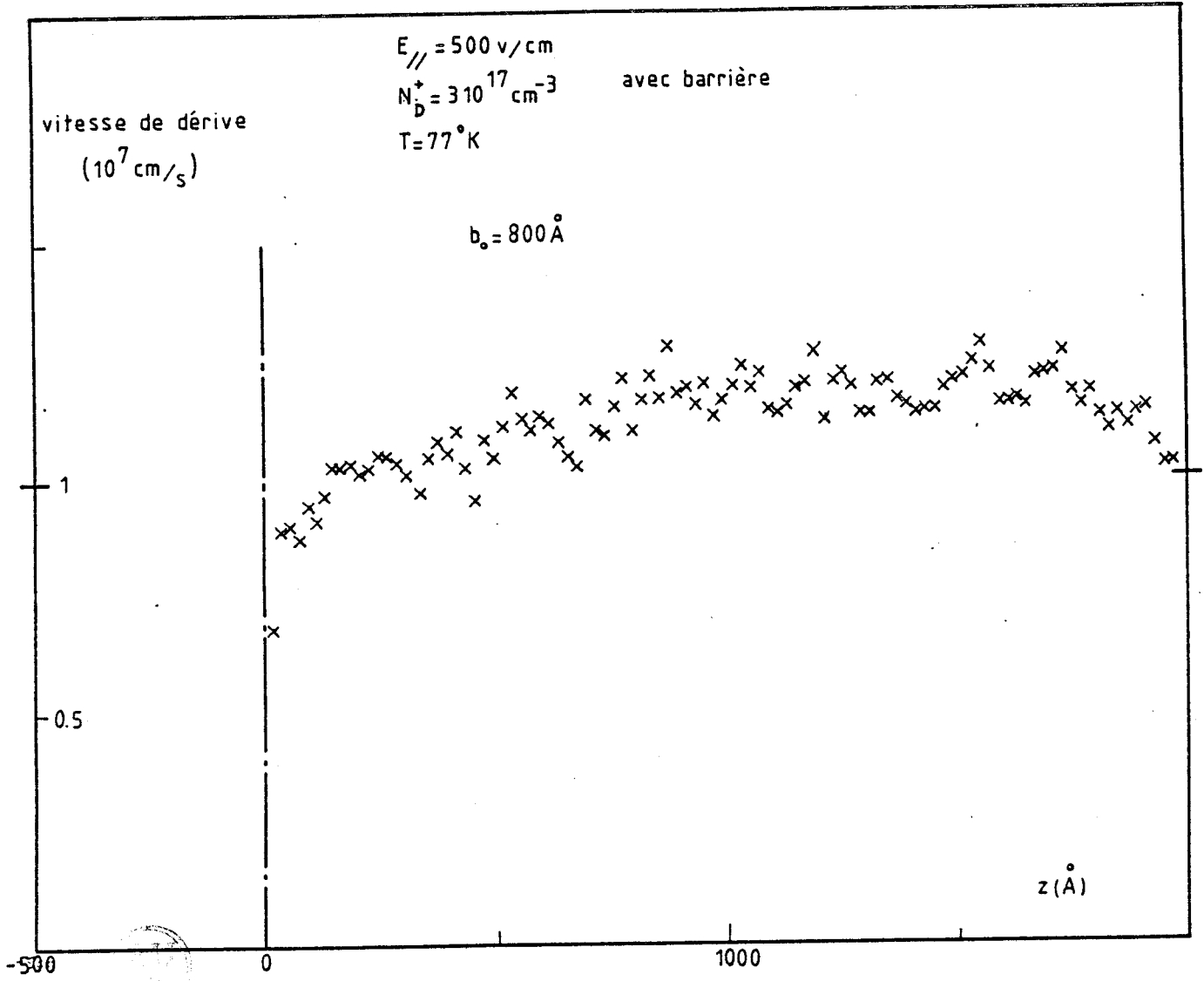


FIGURE 45

Vitesse de dérive électronique en fonction de la distance (champ parallèle) avec présence d'une barrière en $z = 0$

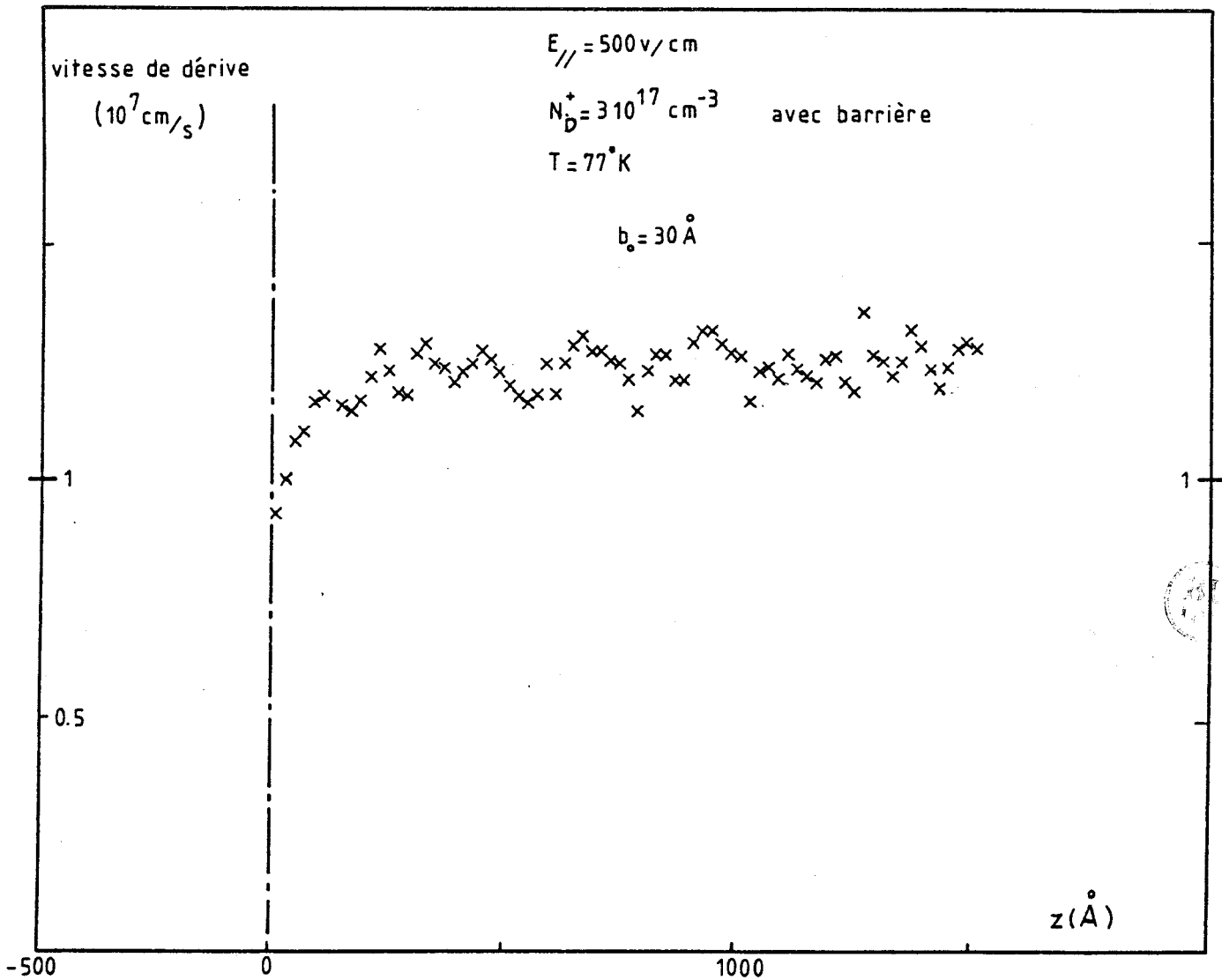


FIGURE 46

Vitesse de dérive électronique en fonction de la distance (champ parallèle) avec présence d'une barrière en $z = 0$.

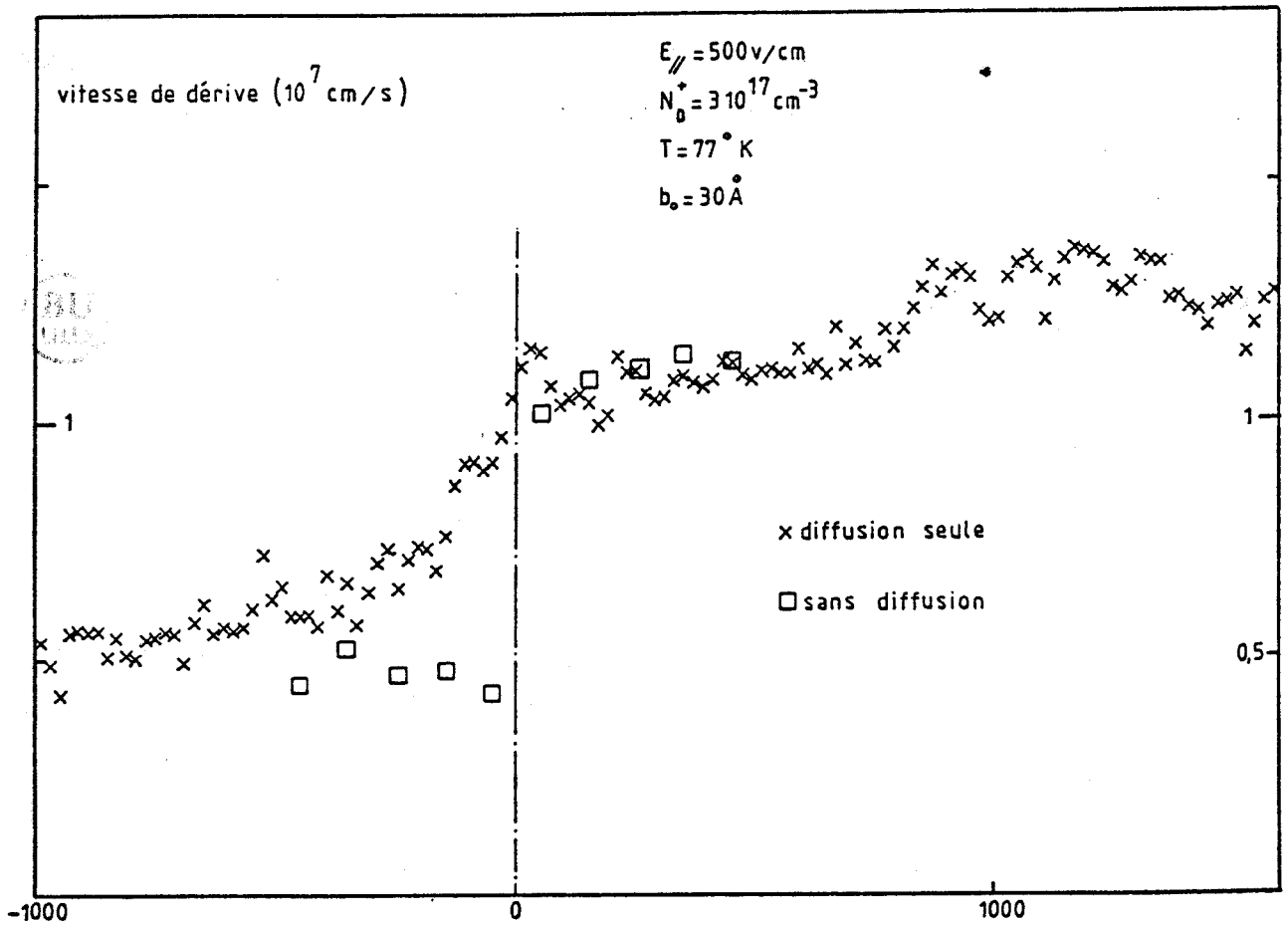
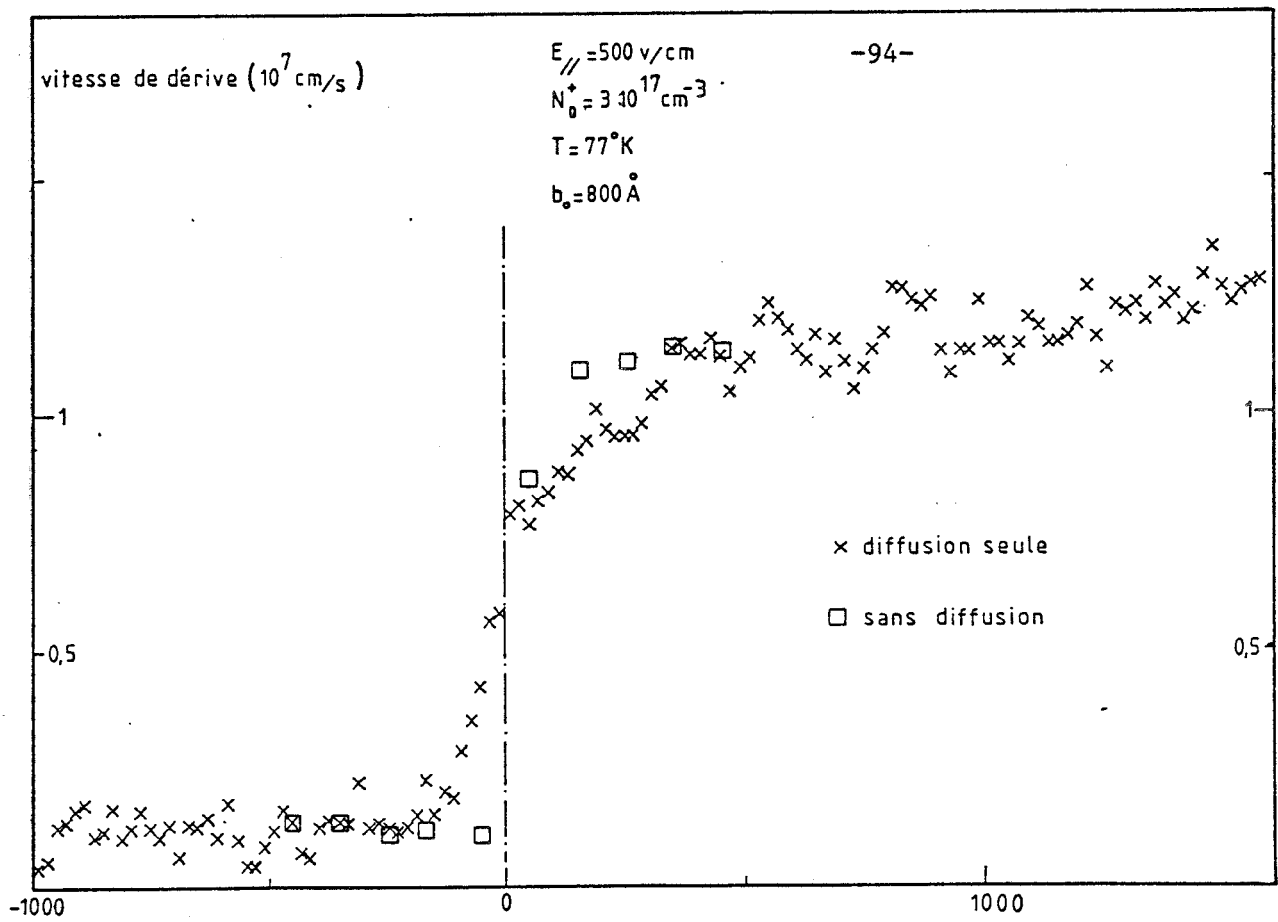


Figure 47

Vitesse de dérive en fonction de la distance
-influence de la diffusion.

pendant un certain temps dans une tranche du matériau faisant 100 \AA de large, c'est à dire une fenêtre dans la structure qui au cours de la simulation sera changée dix fois de position entre $- 500 \text{ \AA}$ et $+ 500 \text{ \AA}$ de part et d'autre de l'interface. Des résultats obtenus sont représentés dans la figure 47. Ils apparaissent sous forme de carrés dans les deux parties de la figure. On notera deux choses. Premièrement, que la vitesse de dérive dans la partie dopée n'évolue pas avec z . Le changement de valeur ne dépend plus que de la distance d'écran b_0 . Deuxièmement, dans la partie non dopée seule la valeur de vitesse de dérive, la plus proche de l'interface rend compte encore de l'effet de proximité des ions. On note par ailleurs que cette vitesse augmente quand la distance d'écran diminue, accusant ainsi l'effet à distance directe des ions situés à gauche de l'interface. Plus loin de l'interface la vitesse de dérive reste inchangée quel que soit la valeur de b_0 . On s'aperçoit donc que l'influence à distance directe des ions reste un phénomène relativement localisé. Mais ce phénomène ne représente qu'une partie de l'influence totale. Globalement, l'influence à distance des ions inclut aussi l'effet mémoire dû à la diffusion comme il avait été déjà indiqué au paragraphe III.2.2.1. En définitive, ce qui est représenté par les carrés de la figure 47 est l'analogie semi-classique du phénomène connu sous le nom de "remote-scattering" qui est utilisé dans les hétérojonctions [19] par l'intermédiaire de la couche non dopée appelée "spacer".

b) Influence des ions par la diffusion

C'est en fait le cas contraire au précédent ; on supprime dans le modèle tout le processus qui a été décrit au paragraphe II.2.4. sur le cas d'un dopage non homogène. Il suffit de dire simplement que lorsque le porteur est à une abscisse $z < 0$, le matériau est homogène dans tout l'espace avec le dopage constant N_D , et lorsque le porteur est à une abscisse $z > 0$, le matériau est homogène dans tout l'espace avec un dopage nul. Ce faisant, on supprime complètement l'influence directe à distance des ions sur les électrons

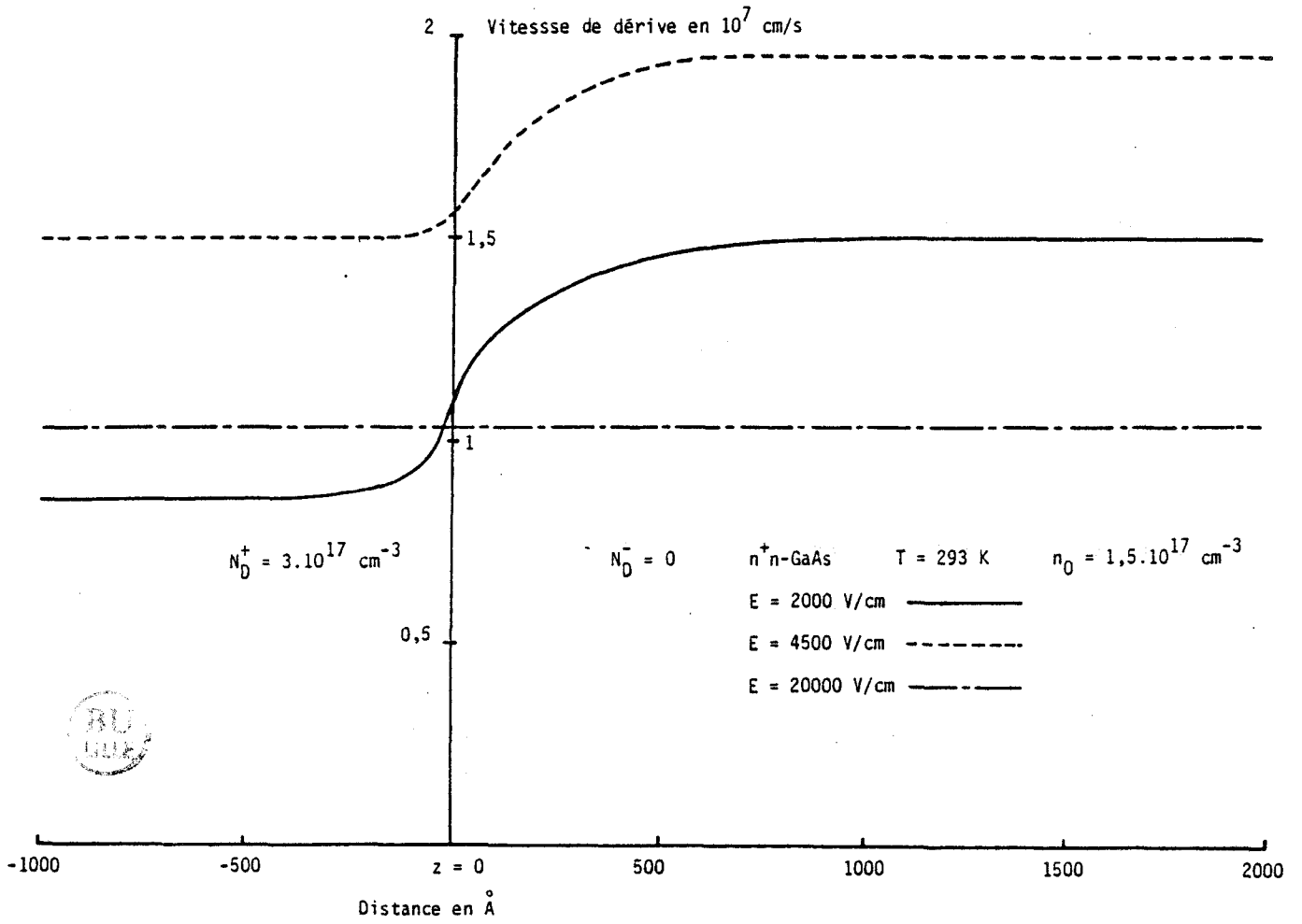


FIGURE 48

Vitesse de d rive  lectronique en fonction de la distance

(champ fort)

et on ne conserve que l'influence s'effectuant par l'intermédiaire de la diffusion.

Le résultat obtenu est représenté par les croix dans les deux cadres de la figure 47.

L'influence des ions à distance se manifeste maintenant par l'effet de la diffusion et se caractérise par des distances de transition de part et d'autre de l'interface beaucoup plus grande que dans le cas précédent. Cette distance caractérise en fait l'étendue sur laquelle la distribution des porteurs dans l'espace k pourra s'établir et se modifier sans discontinuité sous l'influence du petit champ électrique. A ce phénomène peut être associé une relaxation spatiale de l'énergie moyenne des électrons le long de l'axe z . Ce fait était déjà apparu dans les figures 40 et 41.

Nous pensons ainsi avoir montré comment la diffusion contribue fortement à l'existence du phénomène de relaxation spatiale de la vitesse de dérive dû à l'effet des ions à distance. Cet effet se manifeste essentiellement quand il n'existe pas de barrière dans le matériau pour gêner la diffusion.

III.2.4. ETUDE A CHAMP FORT

Pour terminer cette présentation, nous avons également exploité le modèle en régime d'électrons chauds. Nous présentons dans la figure 48 des résultats obtenus à $N_D = 3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et pour trois valeurs de champ électrique. Si les caractères essentiels des courbes précédentes se conservent pour les deux valeurs de champ les plus faibles, on observe un profil plat sur la vitesse de dérive à 20 KV/cm. En fait, la ligne plate de la figure 48 indique que l'on n'observe plus aucun phénomène particulier qui soit détectable au niveau

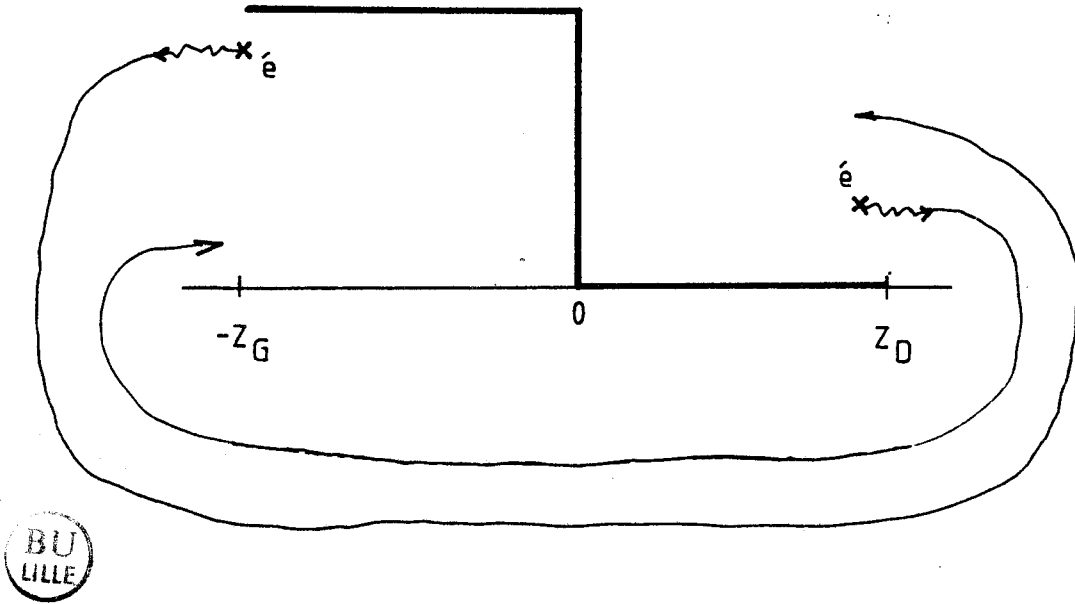


FIGURE 49

Réintroduction de l'électron lorsqu'il sort des limites
du couloir - Z_G , Z_D .

de l'homojonction, compte tenu de l'incertitude obtenue sur la position des points. Ceci s'explique par la disparition du phénomène de collision sur les impuretés ionisées lorsque sous l'effet du champ électrique élevé, les porteurs acquièrent une énergie moyenne élevée. Par contre, le phénomène joue encore un rôle important en régime ohmique et aux alentours du champ de seuil.

III.2.5. ETUDE EN CHAMP PERPENDICULAIRE E_{\perp}

III.2.5.1. Principe d'étude



Les conditions de fonctionnement sont identiques à celles de la polarisation en champ parallèle. Néanmoins, lorsque l'électron sort des limites du couloir étudié, il est réintroduit par l'extrémité opposée à celle où il est sorti, tout en conservant ses mêmes caractéristiques (vitesse et orientation) (Fig. 49).

Toutefois, la réintroduction de l'électron, crée un effet de mémoire indésirable sur les bords de la structure. Ceci s'explique par le fait qu'on réinjecte l'électron avec une vitesse impropre, qui est celle acquise avant sa sortie. Celle-ci s'estompe lentement au cours des multiples collisions avec le réseau et perd progressivement son effet. Aux basses températures, les interactions avec le réseau étant moins fréquentes, cet effet est encore plus marqué. Nous sommes donc amenés à étendre les limites du couloir pour obtenir une évolution correcte de la vitesse aux alentours de l'interface n^+n . Nous portons ces limites à $Z_G = 4000 \text{ \AA}$ à gauche et $Z_D = 8000 \text{ \AA}$ à droite de l'interface placé en $z = 0$.

III.2.5.2. Discussion

L'évolution de la vitesse en fonction de l'abscisse z , est assez semblable à celle obtenue en champ parallèle (Figures 50 à 53). La distance sur laquelle s'effectue la transition est de nouveau à peu près indépendante de la distance d'écran b_0 .

A nouveau, on pourra remarquer que l'effet d'écran n'est pas entièrement reflété, même en champ perpendiculaire.

La différence essentielle qui existe ici par rapport au cas d'une polarisation à champ parallèle est que les électrons sont soumis moins longtemps à l'effet du champ coulombien dû aux impuretés. En effet, en plus de leur vitesse acquise par agitation thermique, l'accélération due au champ électrique qui les pousse vers la droite provoque un éloignement systématique plus rapide des électrons des impuretés situées à gauche. Ceci aurait pour effet de permettre à la mobilité dans le côté non dopé, d'atteindre une valeur stable sur une distance plus courte que dans le cas précédent.

Dans le cas présent, l'effet du champ électrique vient contre-balancer en partie, l'effet de la diffusion qui tend à renvoyer les porteurs dans toutes les directions et en particulier vers l'arrière.

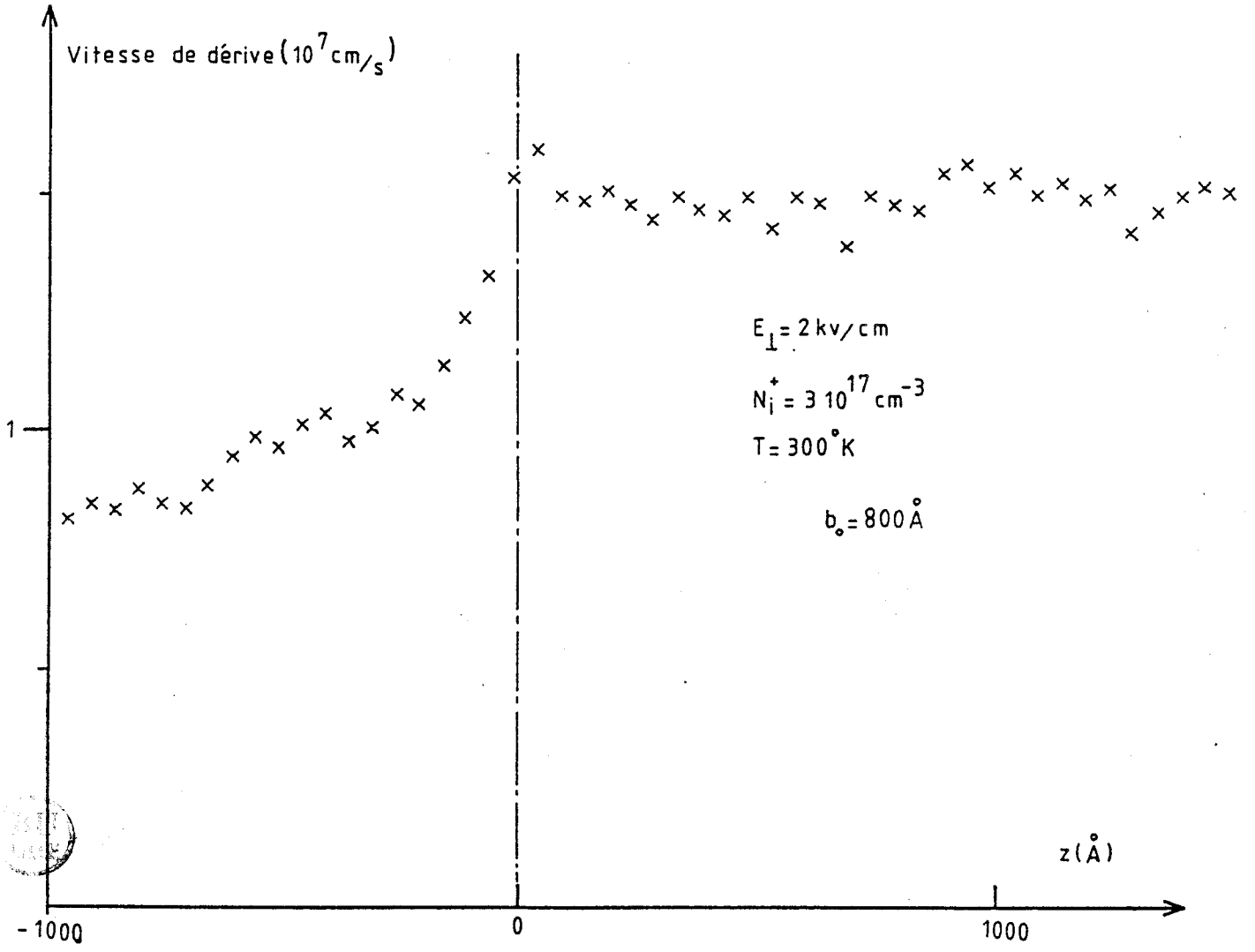


FIGURE 50

Vitesse de dérive électronique en fonction de la distance
(champ perpendiculaire)

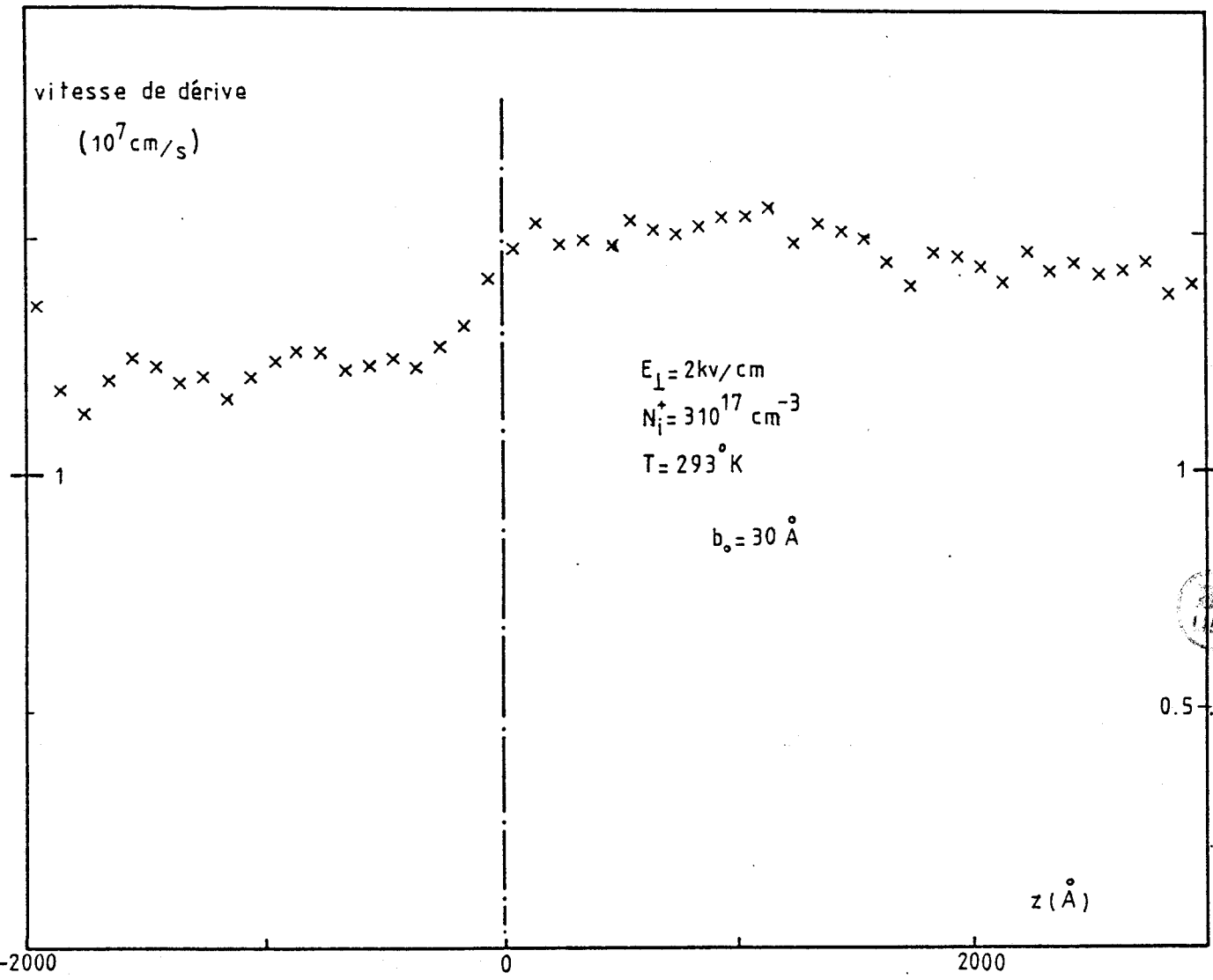


FIGURE 51

Vitesse de dérive électronique en fonction de la distance
(champ perpendiculaire)

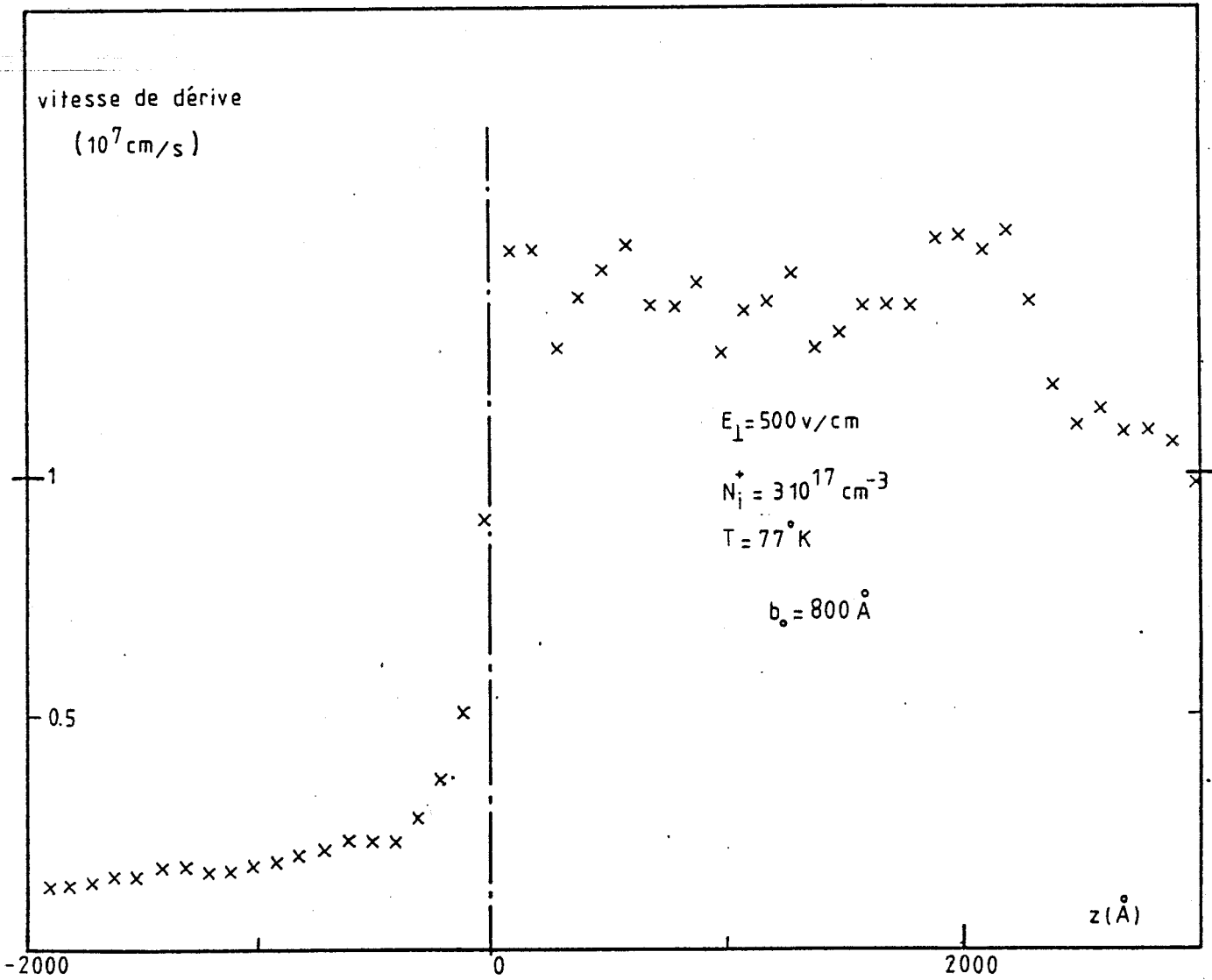


FIGURE 52

Vitesse de dérive électronique en fonction de la distance
(champ perpendiculaire)

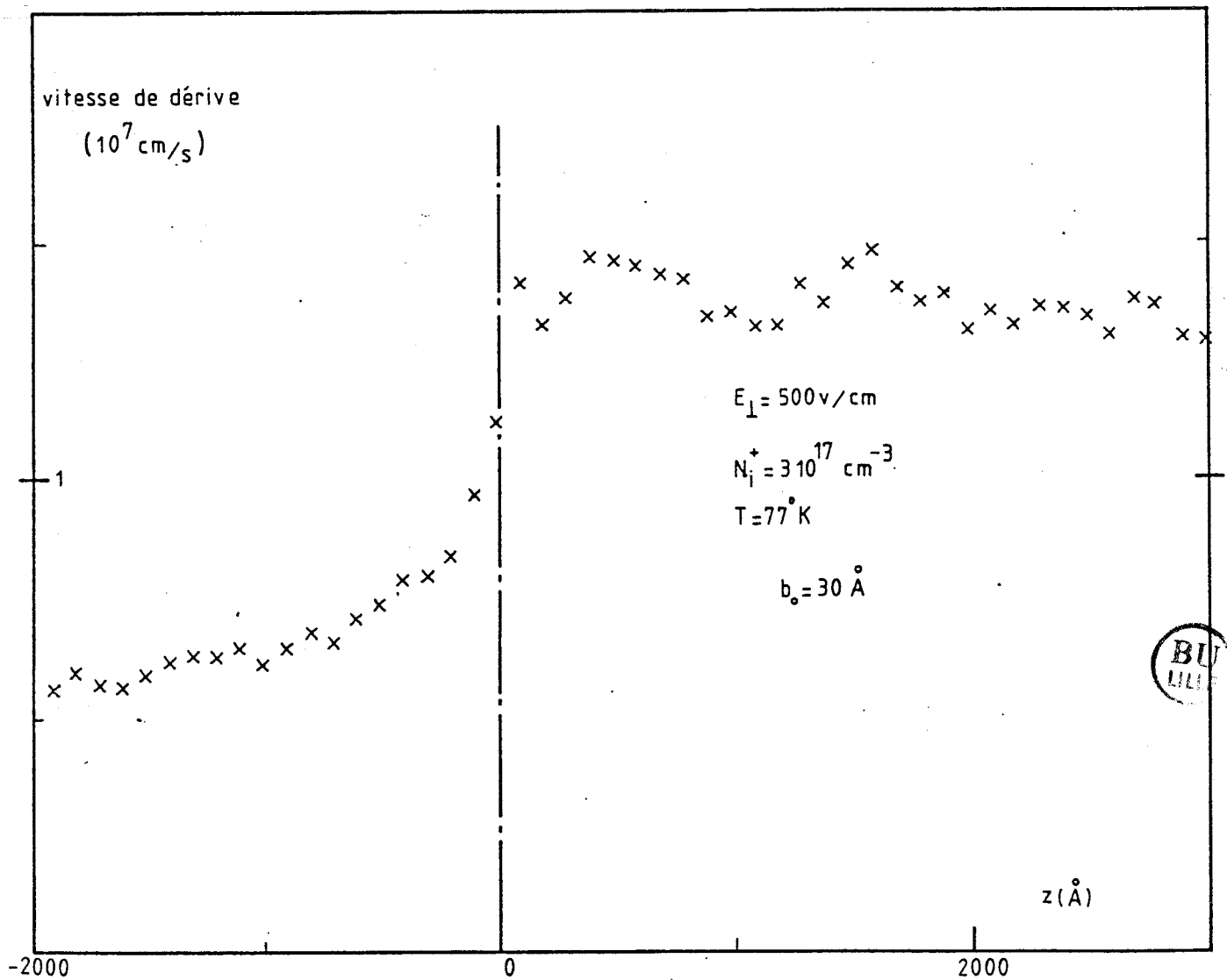


FIGURE 53

Vitesse de dérive électronique en fonction de la distance
(champ perpendiculaire)

CHAPITRE IV

ETUDE DU MODELE DE L'INTERACTION ELECTRON-IMPURETE

DANS UNE STRUCTURE DE TRANSISTOR

A EFFET DE CHAMP PLANAIRE

CHAPITRE IV

ETUDE DU MODELE DE L'INTERACTION ELECTRON-IMPURETE

DANS UNE STRUCTURE DE TRANSISTOR A EFFET DE CHAMP PLANAIRE

Dans le chapitre III nous avons étudié l'effet de l'interaction électron-impureté dans une jonction AsGa n^+n , en considérant que la concentration électronique était uniforme (donc en absence du phénomène de charge d'espace) d'où découlait un phénomène d'écrantage lui aussi uniforme dans l'espace. Nous avons noté que dans tous les cas, la non-uniformité de la densité d'ions dans le matériau induit une évolution graduelle de la mobilité électronique dans l'espace.

Un autre aspect intéressant sur la question est de considérer le cas plus général où la densité électronique est aussi une fonction de l'espace, du fait de l'effet de charge d'espace. Ceci peut se faire aussi bien en simulant une structure de composant réel, en introduisant dans le modèle de simulation le nouveau concept d'interaction électron-impureté que nous avons développé. Ceci permettra entre autres de discuter de la nécessité de notre modèle dans l'analyse du comportement d'un composant déterminé.

Pour ce faire, nous utilisons un programme déjà mis au point dans le laboratoire [11, 20]. Dans ce programme, nous substituons notre modèle à celui de Dingle-Brooks-Herring qui avait été le seul utilisé jusqu'à présent. Nous essayons ensuite à chaque fois que cela est possible de comparer les résultats acquis avec notre modèle à ceux qui résultent du modèle standard D-B-H. Les difficultés qui se présentent sont de deux types : d'une part, celle de définir une "bonne" structure qui exhale au mieux les phénomènes dûs à l'interaction électron-impureté proprement dite, d'autre part celle de dégager des résultats tangibles malgré l'incertitude statistique entachant les quantités calculées. Il résulte de cela que les résultats présentés au cours de ce chapitre sont surtout destinés à illustrer une méthode de simulation qui a la capacité potentielle de prendre en compte le

caractère inhomogène du dopage du matériau, chose qui n'est pas à la portée des modèles standards de l'interaction électron-impureté.

IV.1. PRESENTATION DE LA STRUCTURE

Le composant étudié est représenté dans la figure 54. Il s'agit d'une structure TEC planaire dans laquelle sont incluses la couche active supportant une densité d'impuretés $N_D = 3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, supposées entièrement ionisées contigue à une couche non dopée représentant une partie du substrat. Le profil de dopage à l'interface de la couche active et du substrat est supposé abrupt. L'ensemble est réalisé en AsGa.

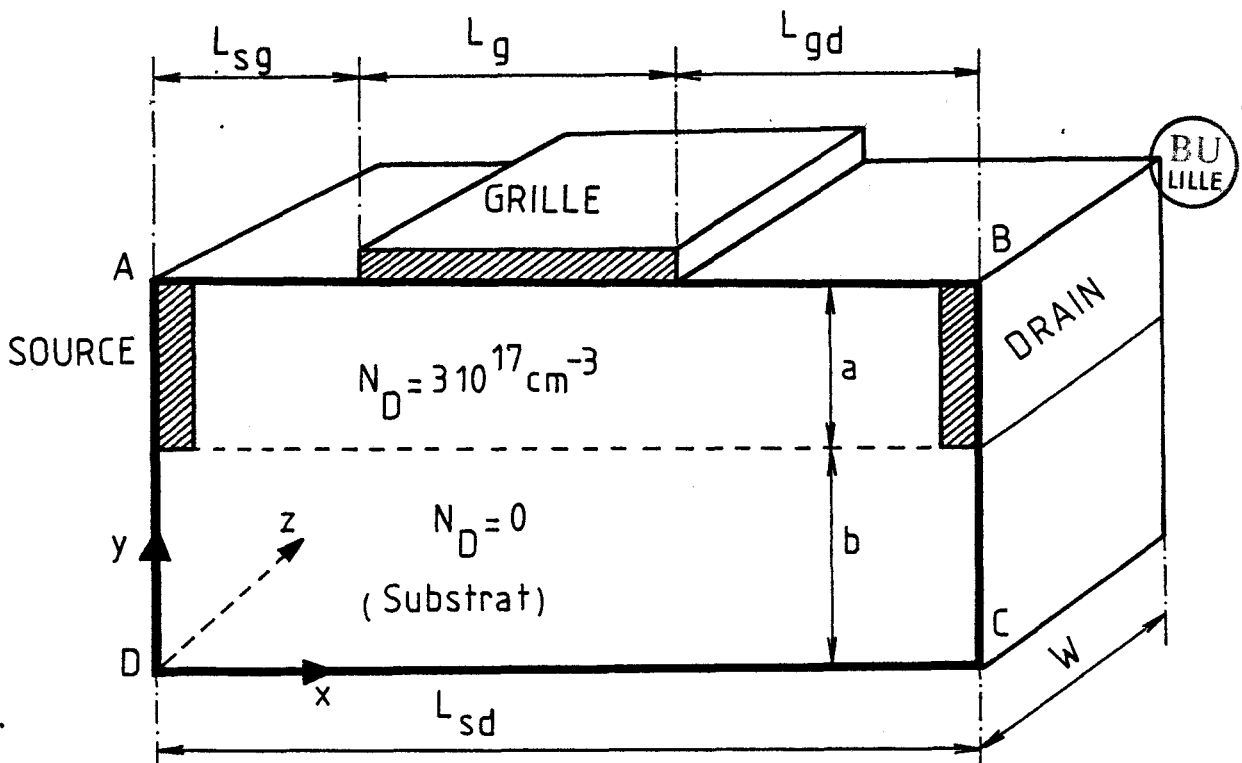


Figure 54

Schéma du transistor simulé

$L_{sg} = 0,32 \mu\text{m}$	$L_{sd} = 1,28 \mu\text{m}$	$W = 1 \text{ mm}$
$L_g = 0,64 \mu\text{m}$	$a = 0,21 \mu\text{m}$	
$L_{gd} = 0,32 \mu\text{m}$	$b = 0,43 \mu\text{m}$	

Pour l'essentiel, les caractéristiques géométriques choisies sont en accord avec les divers critères géométriques qui ont servi au cours du chapitre III. Dans le cas présent, compte tenu des dimensions de la structure, il ne sera pas possible d'avoir des dimensions de cases aussi petites que celles qui ont pu être prises au cours du chapitre III.

IV.2 LES CONDITIONS DE LA SIMULATION

On admet que le système étudié est uniforme le long de la direction z (figure 54) : on résoud donc le problème de la simulation à deux dimensions dans le périmètre ABCD. Ce périmètre contient la grille dans laquelle on fait :

$$\begin{aligned}\Delta x &= 200 \text{ \AA} \\ \Delta y &= 50 \text{ \AA}\end{aligned}$$

Le composant est donc représenté par une matrice à 128 lignes et 64 colonnes, la partie dopée du matériau occupant les 42 lignes du haut. Le nombre d'électrons simulés est de 2688. Durant leur cheminement les électrons atteignant les bords du périmètre de simulation ABCD en tous points autres que les contacts ohmiques de source et de drain sont réfléchis spéculairement (élastiquement) vers l'intérieur du contour.

Dans le cas contraire où un électron atteint l'un des contacts de source ou de drain, la structure est telle que ce porteur est toujours proche de l'équilibre thermique, il est réinjecté à l'autre contact avec une énergie thermique en accord avec la statistique de Maxwell-Boltzmann et une vitesse initiale aléatoire en accord avec cette énergie.

On remarque, d'après les chiffres donnés au paragraphe précédent que la tension de pincement du composant est de :

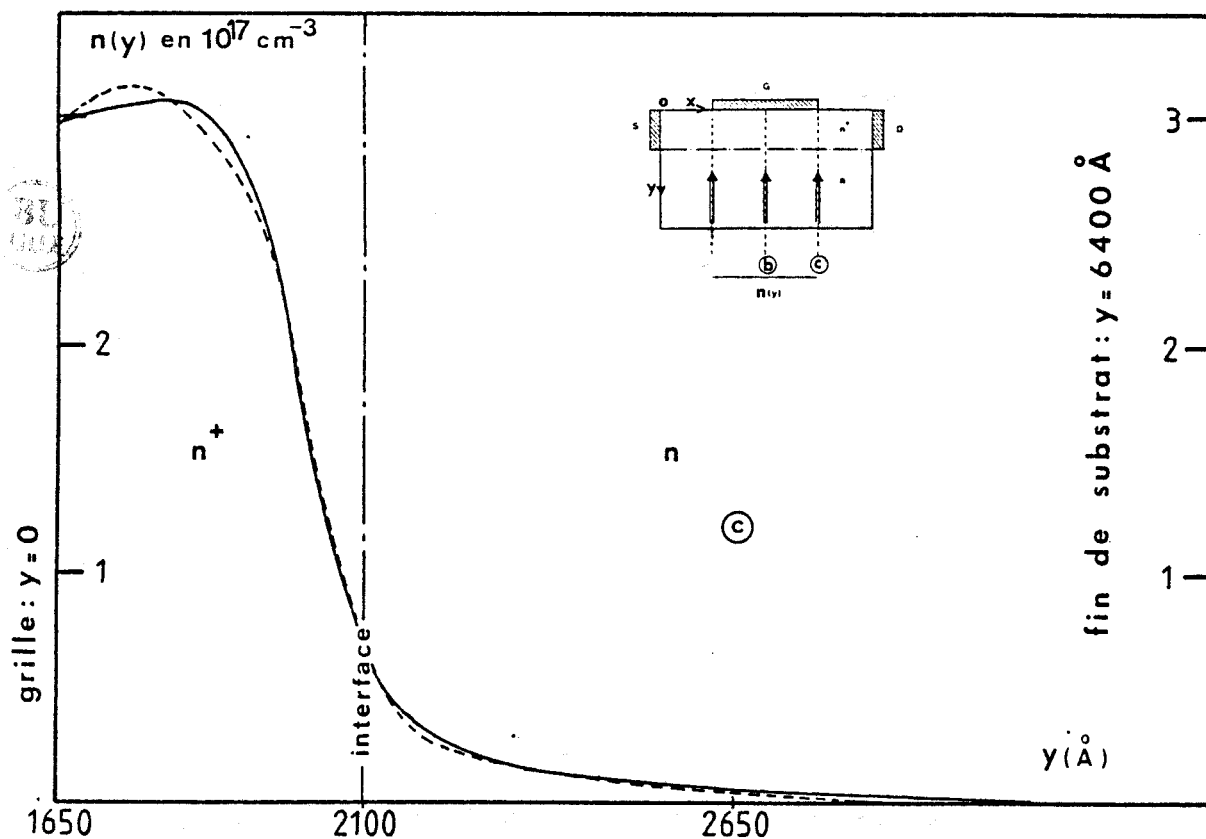
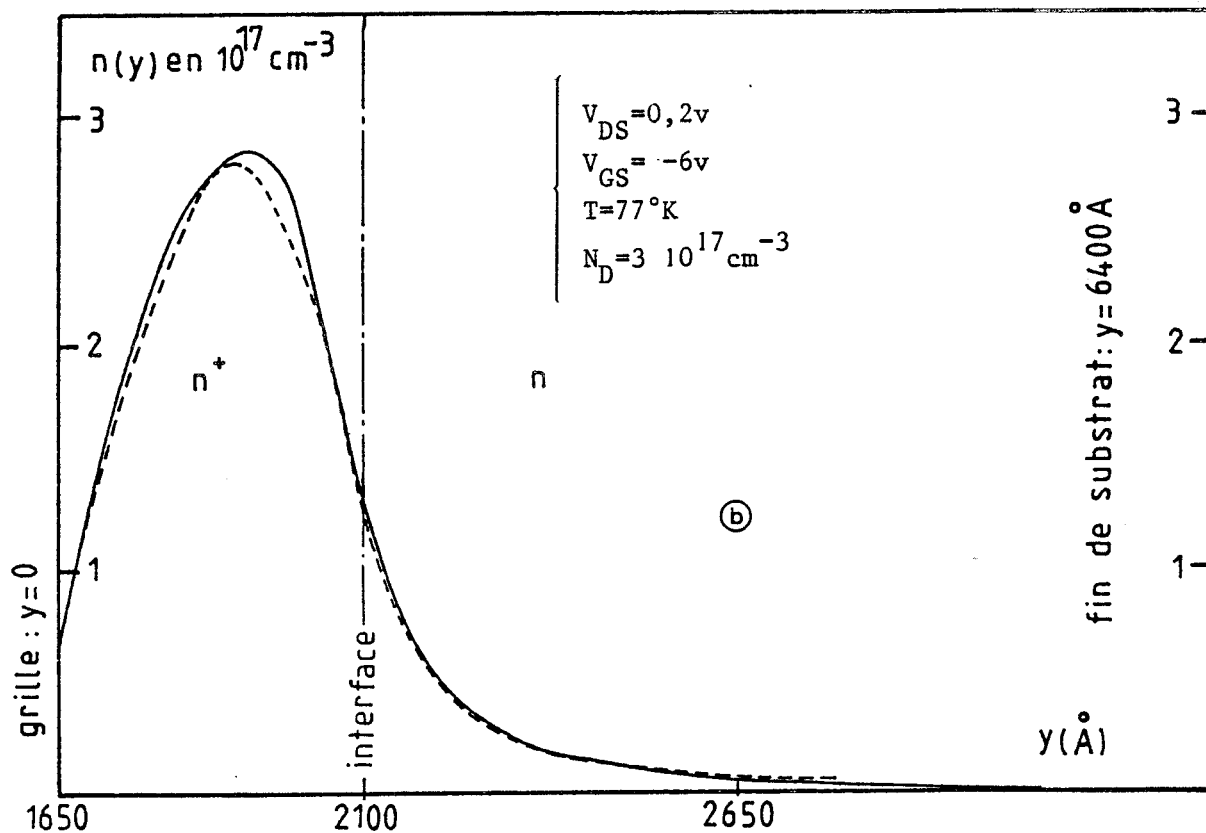


FIGURE 55

Densité électronique en fonction de y .

--- Résultats avec le modèle de Dingle-Brooks-Herring

— Résultats de notre modèle.

$$W_{00} = 9,3 \text{ volt}$$

Compte tenu de ce à quoi nous nous intéressons, à savoir l'effet d'un modèle de l'interaction électron-impureté, les conditions de polarisation doivent être telles que :

- 1) l'énergie moyenne des électrons transitant sur la grille ne doit pas être trop élevée.
- 2) la charge sous la grille doit autant que possible se situer dans le voisinage de l'interface n^+n .

Il en résulte que nous regarderons surtout les phénomènes à polarisation source-drain faible et à des tensions de grille pas trop élevées, en tout cas nettement inférieures à W_{00} .

Pour ce qui concerne le détail de la simulation elle-même, elle est désormais tout à fait habituelle dans le laboratoire. Tout renseignement utile à ce sujet peut être trouvé dans [11, 20].

Comme dans le chapitre III, afin d'exhalter au mieux l'effet des interactions électron-impuretés nous avons effectué cette étude à 77°K. Nous avons utilisé deux programmes réalisant la même simulation de la même structure, l'un tenant compte du modèle de Dingle-Brooks-Herring, l'autre de notre propre modèle aux fins de comparaison.

IV.3. EXPLOITATION ET QUELQUES RESULTATS

Pour les résultats présentés ici, seul le modèle du potentiel pseudo-écranté a été exploité (paragraphe II.3.2) dans le programme contenant notre modèle d'interaction.

Dans la figure 55 nous commençons par montrer l'évolution de la densité des électrons suivant la direction y , c'est à dire de la

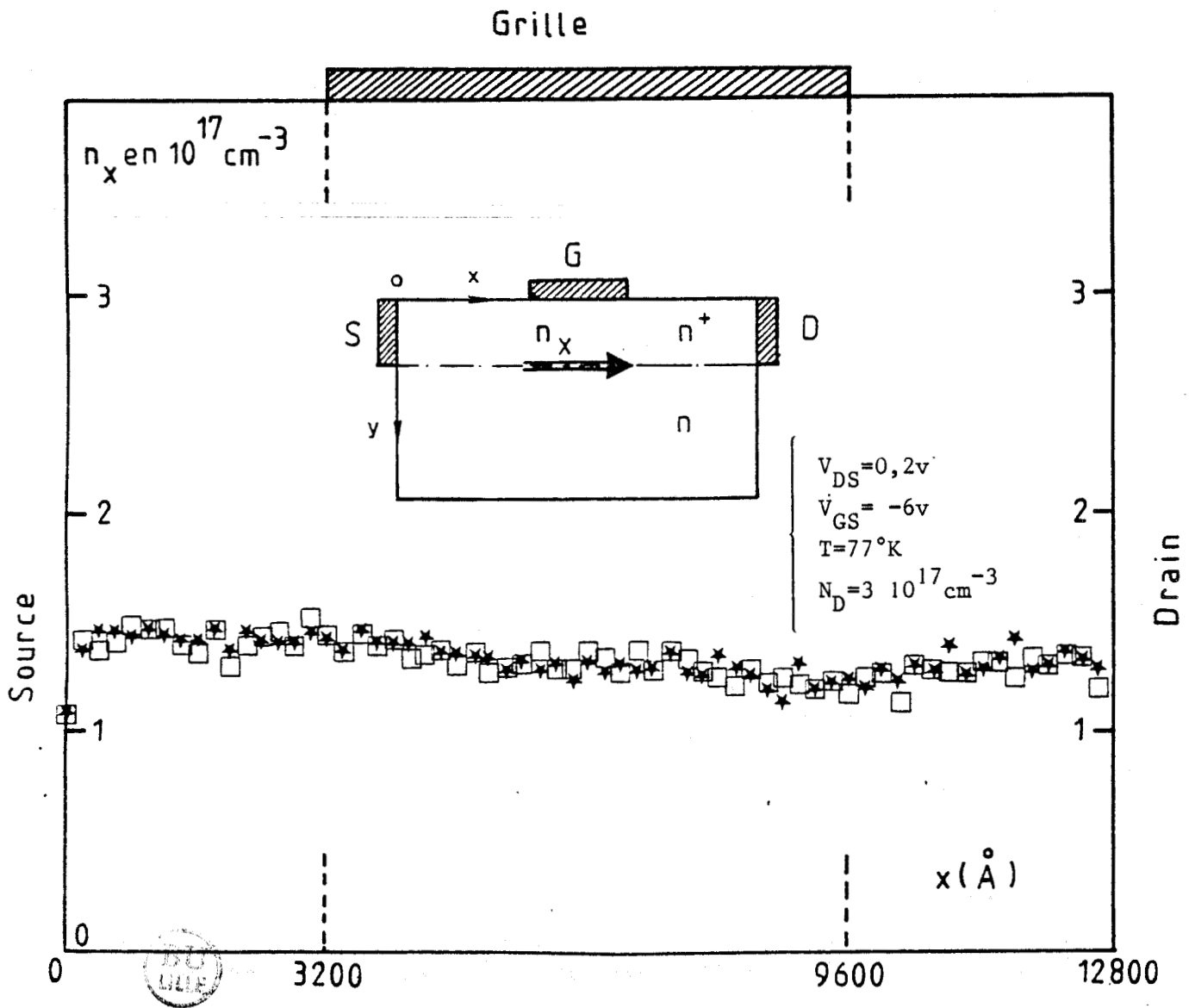


FIGURE 56

Densité électronique à l'interface n^+n

★ Résultats avec le modèle de Dingle-Brooks-Herring.

□ Résultats de notre modèle.

grille située un peu plus loin que le côté gauche de la figure vers le substrat situé vers la droite. La courbe du haut de la figure 55 montre l'évolution au milieu de la grille (à mi-distance drain-source), celle du bas l'évolution au bout de la grille du côté du drain. Le cadre du haut montre bien l'effet de déplétion obtenu en milieu de grille avec une tension grille * $V_{gs} = -6$ V. On remarque par ailleurs que les profils de concentration obtenus en utilisant l'un ou l'autre des deux modèles sont, aux erreurs statistiques près (assez faibles dans le cas présent), tout à fait identiques.

Ceci est vrai non seulement du cas présenté ici dans la figure 54, mais aussi de tous les autres cas de polarisation que nous avons été amenés à considérer. A titre d'exemple nous montrons dans la figure 56 l'évolution de la concentration d'électrons entre source et drain dans un plan parallèle à la grille située un peu à l'intérieur de la couche active, telle qu'elle est obtenue avec l'un et l'autre modèle.

Pour résumer, on constate qu'il ne semble pas exister de relation directe entre le modèle de Monte Carlo utilisé et la manière dont les électrons se disposent dans la structure pour des conditions de polarisation identiques. Puisque les concentrations électroniques dans les deux cas de modèle sont identiques ; étant donné que les conditions aux limites imposées sont également identiques [11], la résolution de l'équation de Poisson sur la charge contenue dans le composant fournira la même solution pour les deux modèles, c'est à dire la même configuration de potentiel et de champ électrique, en tout point de la structure. Les possibles différences existant entre les deux modèles ne peuvent être mises en évidence qu'au niveau de la dynamique électronique microscopique elle-même, dont découle directement la vitesse moyenne des électrons en tout point, et de préférence le long de la direction source-drain (l'axe x du système où est repéré le composant).

* Les valeurs de V_{gs} données dans le texte incorporent toujours le potentiel de diffusion dû au contact métal-semiconducteur à la grille ($\phi_B \sim 0,7$ V).

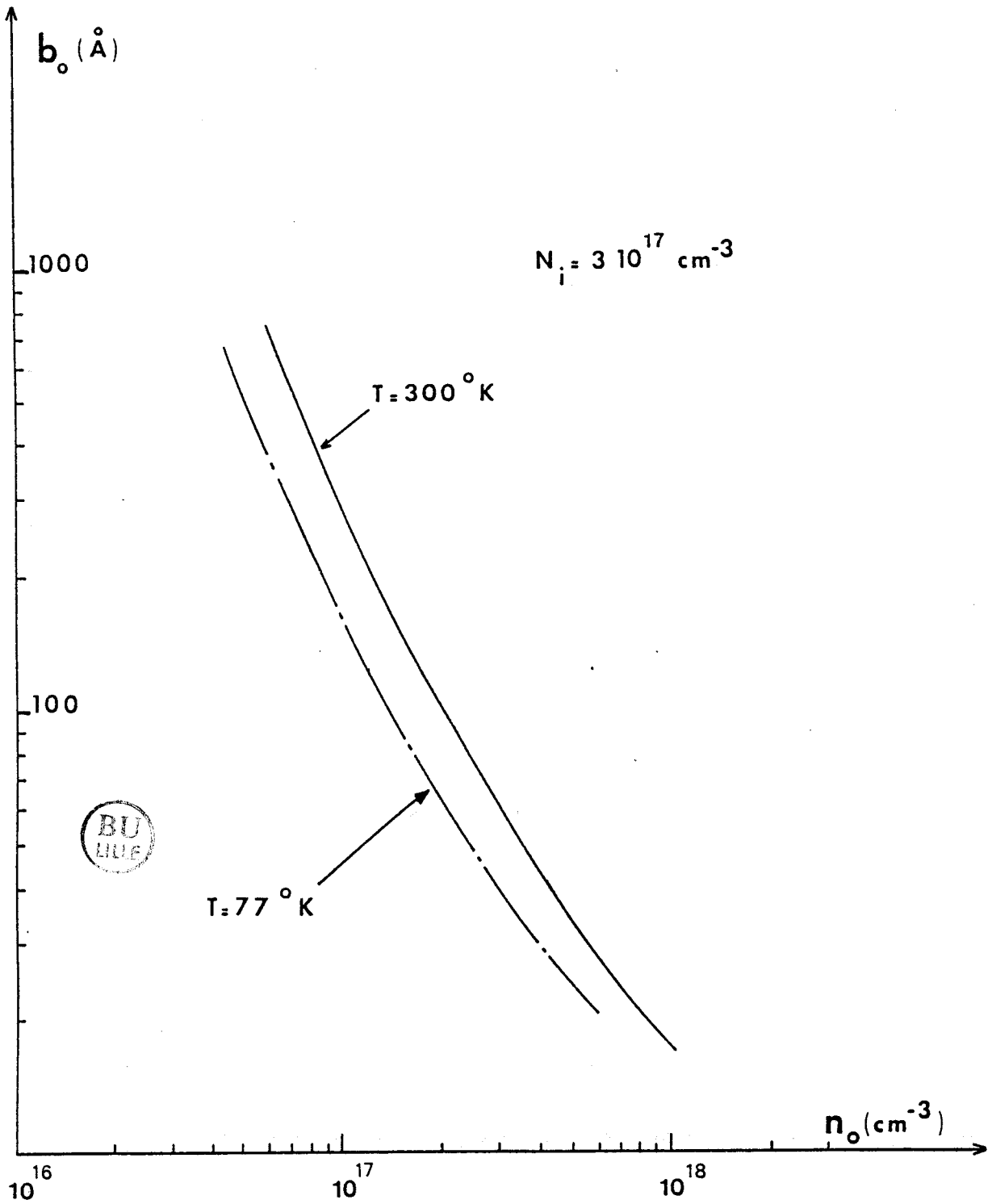


FIGURE 57

Distance d'écran b_0 en fonction de la densité électronique n_0 .

Une fois la densité de porteurs connue en tout point, on peut voir comment l'écrantage joue son rôle à l'intérieur du composant. Comme ce dernier ne comporte qu'un seul type de dopage, nous n'aurons besoin que d'une seule courbe caractéristique reliant la distance d'écran b_0 à la densité de porteurs n . Cette courbe est représentée sur la figure 57. A l'aide des figures 55 (cadre du haut) et 57, nous déduisons la figure 58 qui montre l'évolution spatiale de l'effet d'écran dû aux électrons. $\beta_x(\mathbf{y}) = 1/b_0(\mathbf{y})$ traduit directement l'effet d'écran : où β est faible, l'effet d'écran est faible, et inversement. Sur cette même figure 58 nous avons également montré comment l'écrantage est considéré dans le programme de simulation incorporant le modèle de Dingle-Brooks-Herring. Dans ce dernier, le paramètre d'écran est relié à la densité d'impuretés locale et non à la densité d'électrons locale. Une façon plus physique de traiter le modèle D-B-H consisterait donc à tenir compte de la densité d'électrons locale dans l'évaluation numérique de la probabilité de collision et de l'angle de réorientation de la trajectoire, car il est bien certain que ce sont les électrons libres qui sont la source du phénomène d'écran et non les ions impuretés.

Ceci dit, il n'est pas évident de saisir clairement comment ce phénomène influe sur la mobilité et la vitesse de dérive, étant donné que dans une structure où les effets à deux dimensions jouent un rôle prépondérant, il existe un fort couplage entre ce qui se passe le long de deux directions perpendiculaires (en l'occurrence Ox et Oy). Au cours du chapitre III nous avons été précisément amenés à considérer les deux polarisations possibles du champ électrique de dérive par rapport à la direction de l'interface. Dans le composant les différents effets notés à cette occasion se combinent en tout point.

Compte tenu de ces différentes remarques, nous nous sommes intéressés à l'évolution de la composante longitudinale (le long de l'axe x - la direction source-drain) de la vitesse des porteurs suivant leur éloignement de la grille. De tels résultats sont montrés dans la figure 59 pour le cas de polarisation $V_{ds} = 0,2$ V et $V_{gs} = -6$ V. On voit que suivant la position où l'on se place le long de la grille, des différences entre les résultats de vitesses acquis à

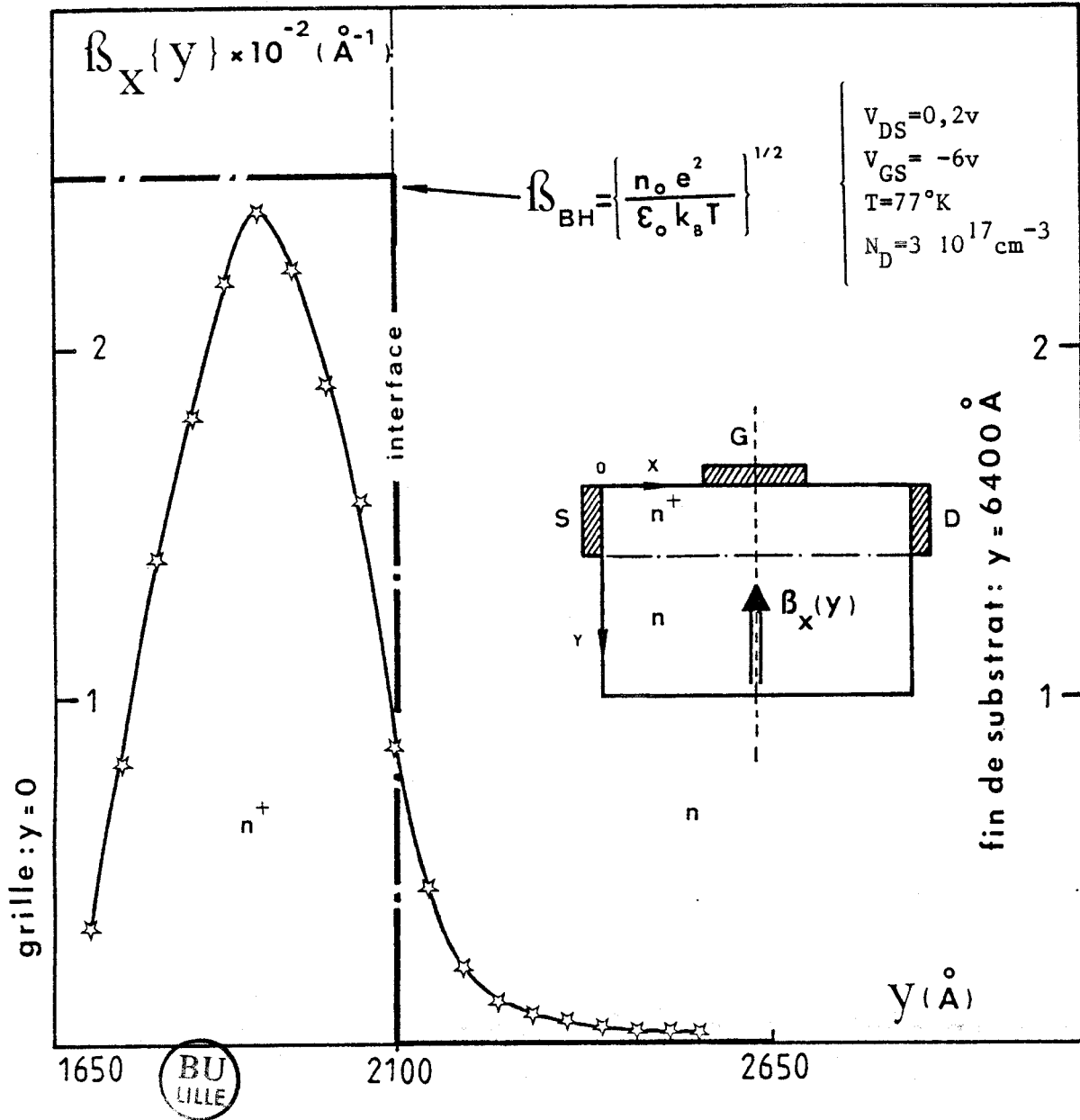


FIGURE 58

Paramètre d'écran β_x en fonction de y

- Résultats de notre modèle.
- Résultats avec le modèle de Dingle-Brooks-Herring. ($n_0 = N_D$)

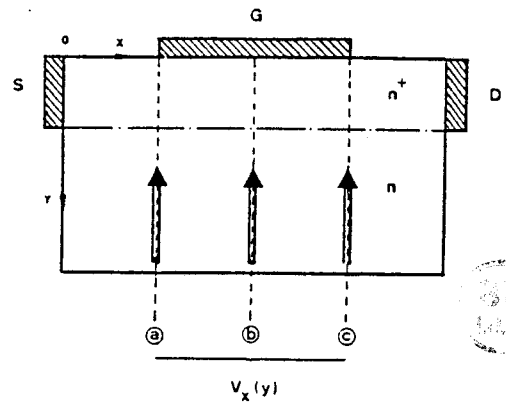
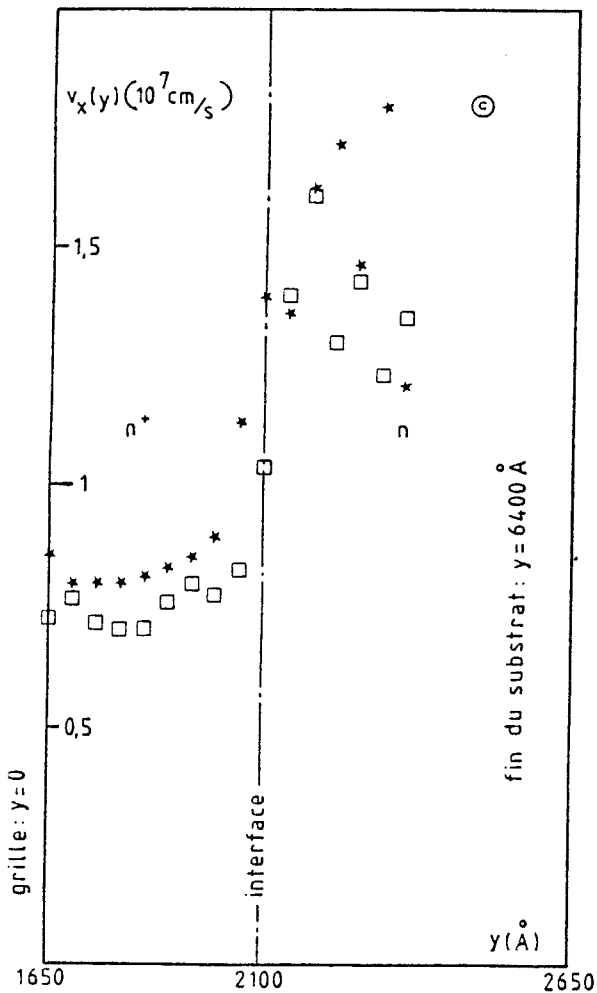
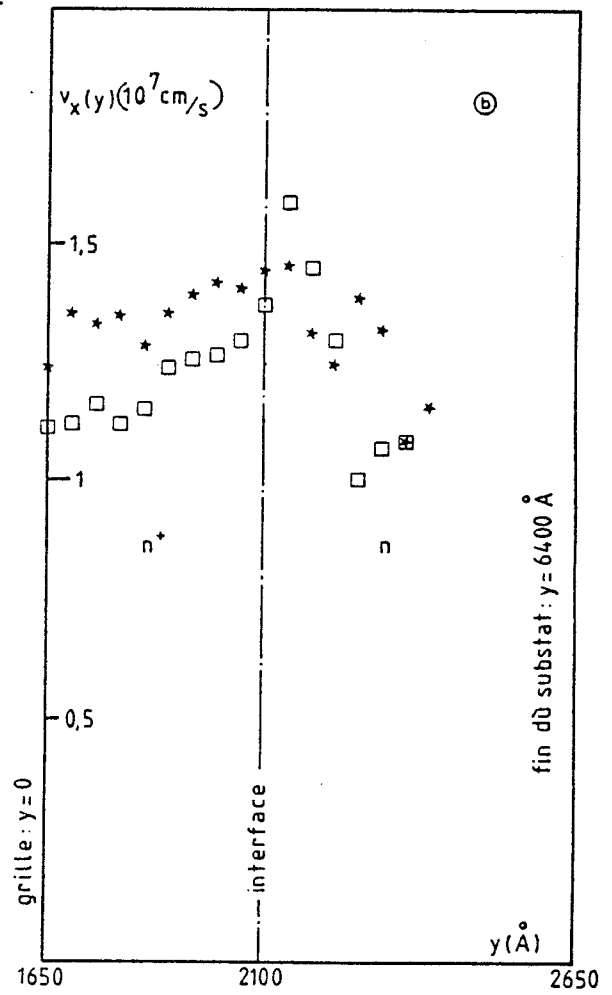
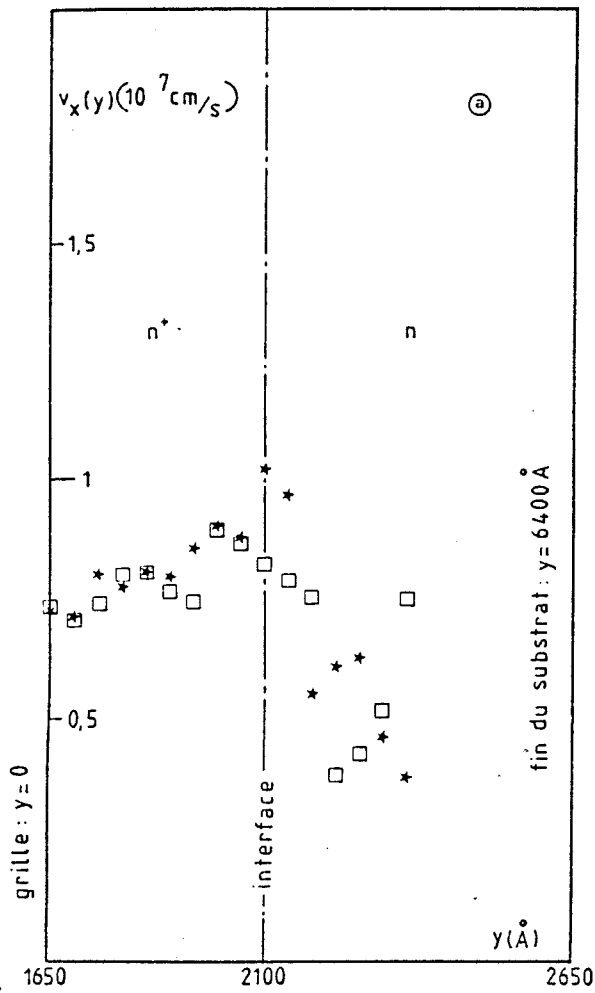


FIGURE 59

$$\left\{ \begin{array}{l} V_{DS} = 0,2v \\ V_{GS} = -6v \\ T = 77^\circ K \\ N_D = 3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3} \end{array} \right.$$

Vitesse électronique en fonction de y.

★ Résultats avec le modèle de Dingle-Brooks-Herring.

□ Résultats avec notre modèle.

Grille

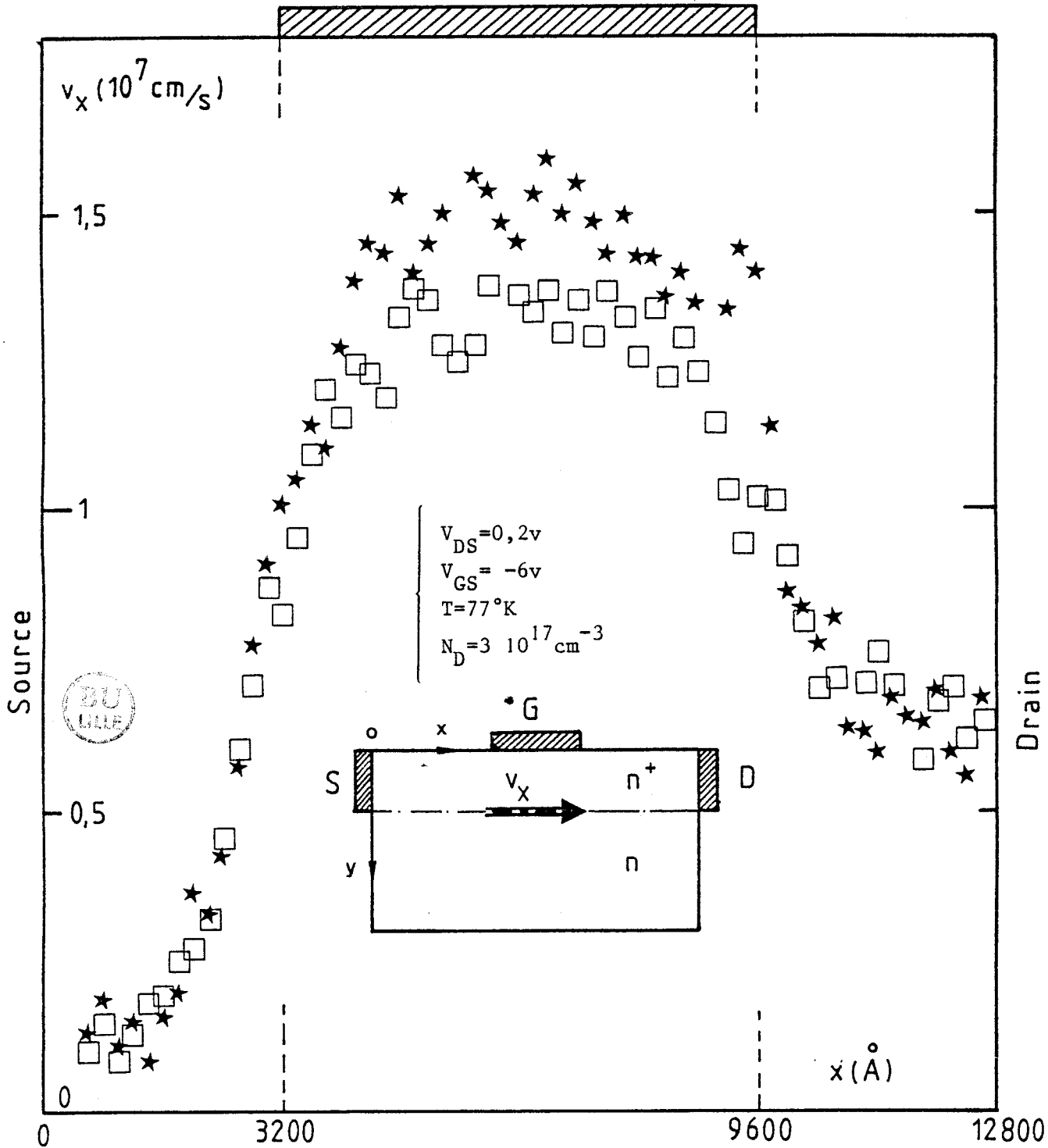


FIGURE 60

Vitesse électronique à l'interface n^+n .

★ Résultats avec le modèle de Dingle-Brooks-Herring.

□ Résultats de notre modèle.

l'aide de l'un et l'autre modèle apparaissent, en particulier dans la zone située entre le milieu de grille et le bout de la grille côté drain. Il est à noter cependant que les écarts obtenus ne semblent pas résulter purement des erreurs statistiques dûes au processus de Monte-Carlo : ils subsistent lorsque les exploitations sont effectuées avec des nombres aléatoires différents. Ceci est obtenu en changeant la semence des séries de nombres aléatoires fournies par l'ordinateur. Ceci étant, on notera que les vitesses électroniques dans la direction source-drain sont sensiblement moins élevées lorsque l'on utilise notre modèle, par rapport à ce qu'elles sont avec le modèle de Dingle-Brooks-Herring. De manière qualitative on doit accrédi-ter ce fait à notre modèle lorsqu'on l'introduit dans la simulation. Une étude rigoureuse et quantitative de ce phénomène nous obligerait de diminuer considérablement l'incertitude statistique d'évaluation des moyennes des quantités calculées et ceci pourrait rendre prohibitifs les temps de calcul nécessaires. Les durées de simulation du système étudié sont en général de 60 ps pour 2688 électrons *.

Correspondant à la figure 59, nous montrons l'évolution de la composante de la vitesse moyenne suivant x entre source et drain le long de l'interface nⁿ sur la figure 60. Les vitesses obtenues suivant les deux modèles sont ici aussi quelque peu différentes, essentiellement à l'aplomb de la grille.

Sur la figure 61 nous montrons le produit $J_x = q n(y) v_x (y)$ obtenu à partir des courbes des figures 55 (cadre du haut) et 59 b. C'est la composante J_x du courant dans le composant à l'aplomb du milieu de la grille dans le sens source-drain. On notera qu'à ce niveau, les densités de courant obtenues suivant l'un ou l'autre modèle restent très proches, ce qui se traduit par des caractéristiques statiques $I_d (V_{ds})/V_{gs}$ également peu différentes. Ces dernières n'ont d'ailleurs été exploitées que pour deux polarisations de drain seulement, soit $V_{ds} = 0,2 \text{ V}$ et $V_{ds} = 1 \text{ V}$; elles apparaissent sur la figure 62.

* A l'heure actuelle, un passage sur ordinateur avec les chiffres indiqués ici demande environ 35 minutes sur le NAS 9080 du CIRCE.

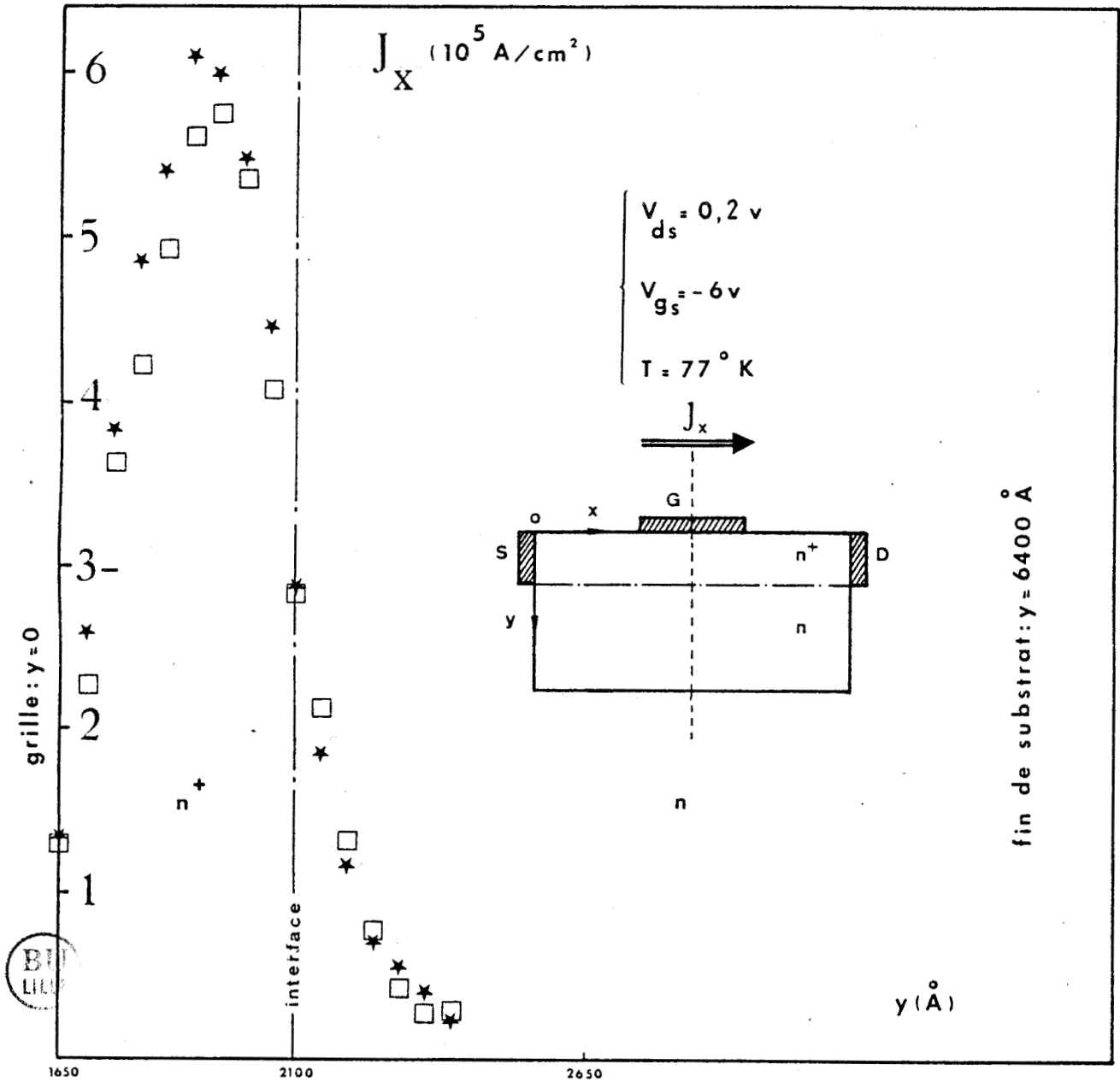


FIGURE 61

Densité de courant J_x en fonction de y.

□ Résultats avec notre modèle

★ Résultats avec le modèle de Dingle-Brooks-Herring.

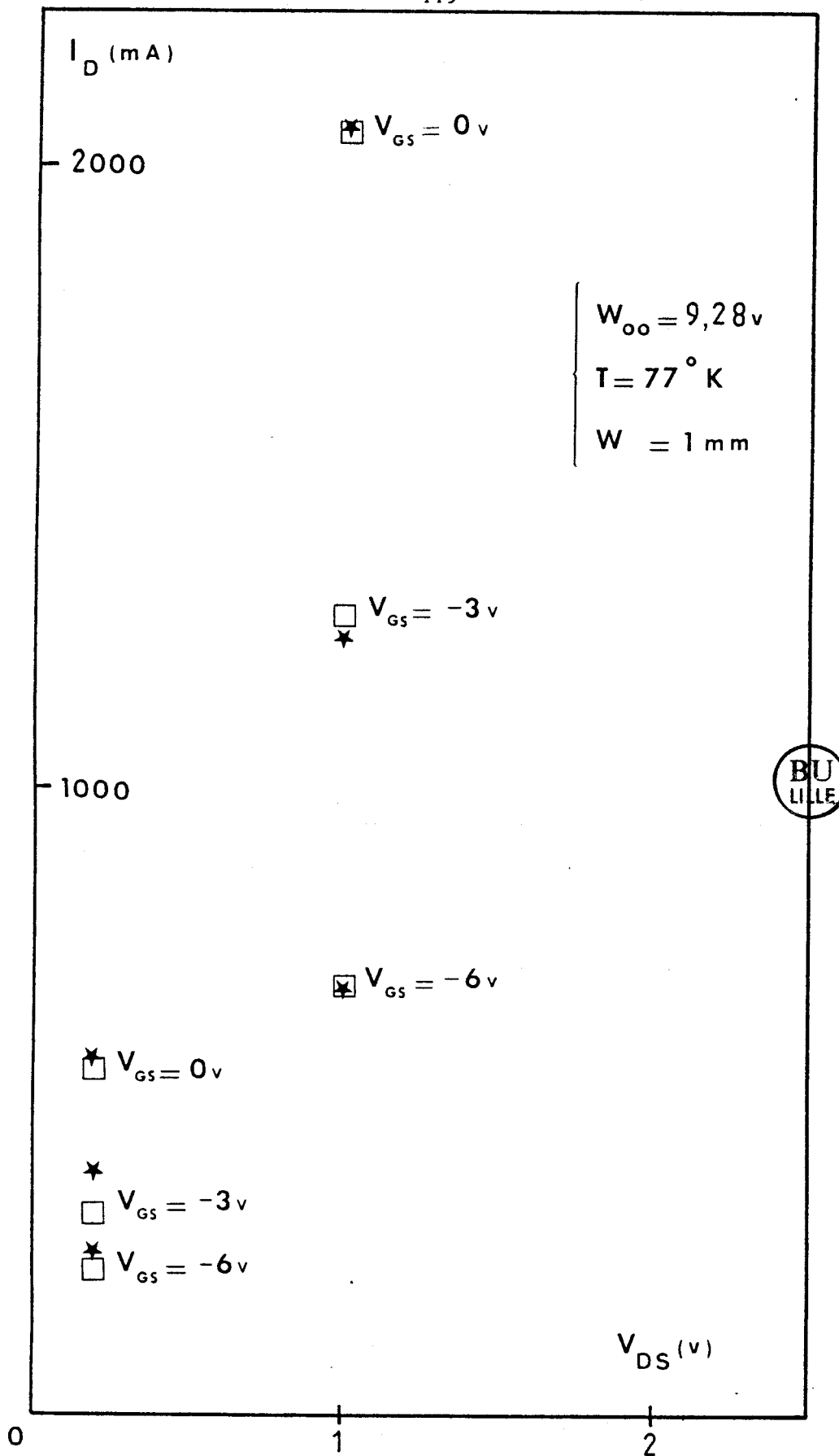


FIGURE 62

Caractéristique I_D en fonction de V_{DS} pour trois valeurs de polarisation de grille.

IV.4. DISCUSSION GENERALE

Pour résumer ce qui vient d'être dit, les seules différences appréciables notées dans les études du transistor faites avec notre modèle ne concernent que l'évolution de la vitesse moyenne des porteurs en tout point : en général, les vitesses fournies par notre modèle sont un peu plus faibles que celles obtenues avec le modèle de Brooks-Herring. Ceci peut être le résultat direct d'un effet d'écrantage qui en général est plus faible avec notre modèle, menant ainsi à des vitesses légèrement dégradées. Toutefois, cet effet reste très limité puisque ceci ne se répercute pas de façon réellement nette au niveau de la caractéristique statique du transistor tel que celui envisagé ici.

On aurait peut-être pu imaginer d'autres structures où les aspects particuliers de notre modèle auraient été mieux mis en évidence. Cela aurait été sans doute le cas d'une structure à hétérojonction, un TEGFET, où les effets d'éloignement des impuretés d'avec les électrons situés dans le canal jouent pleinement leur rôle par l'intermédiaire du spacer. Cet aspect a été mis en évidence à la fin du chapitre III. Il est clair que dans une telle étude le modèle de Dingle-Brooks-Herring tel qu'il a été utilisé dans les simulations de Monte Carlo jusqu'à présent n'est plus valable. Seul un modèle comme le nôtre, ou un modèle équivalent prenant en compte les mêmes aspects de la physique de l'interaction, permet de tenir compte des effets particuliers liés à la présence de l'hétérojonction dans le TEGFET. Ceci n'est vrai bien entendu que dans la mesure où les effets purement quantiques liés au confinement des électrons à l'hétérojonction sont négligés. Néanmoins ceci représente un cas où notre modèle trouve tout son sens et sa pleine utilité.

CONCLUSION

Au cours de ce travail nous avons élaboré un nouveau modèle de l'interaction électron-impureté ayant l'aptitude de prendre en compte les non-homogénéités de la distribution des impuretés dans le matériau, telles qu'elles existent dans les composants, en particulier dans les structures de type transistors à effet de champ. Ce modèle élaboré à l'aide de la méthode de Monte Carlo s'adresse tout particulièrement aux simulations de tout type utilisant la même méthode.

L'idée de base est de repérer les ions relativement à la position des électrons (et non le contraire). On peut alors aisément tenir compte de toute modification spatiale de la répartition des ions et introduire naturellement la notion d'éloignement des zones dopées par rapport à la position des électrons. Ceci étant nous avons été amenés à considérer trois hypothèses formulant la forme du potentiel d'interaction entre l'ion et l'électron qui tiennent compte du phénomène d'écrantage dû aux autres porteurs. La loi reliant le paramètre d'écran (ou la distance d'écran) à la densité locale d'électrons a été obtenue dans chaque cas en comparant les résultats acquis au niveau de la mobilité avec ceux obtenus par le modèle de Dingle-Brooks-Herring dans le cas d'un système homogène partout dans l'espace. Nous avons ensuite exploité une seule des trois hypothèses de potentiel : celle du potentiel pseudo-écranté.

Ce modèle a été ensuite exploité pour l'étude de la transition de la vitesse de dérive électronique à travers une homojonction n^+n dans AsGa. Nous avons ainsi pu mettre en évidence d'une part l'influence de la diffusion dans ce système et d'autre part le rôle de l'éloignement des ions par rapport aux électrons dans des structures comportant des barrières s'opposant à la diffusion des porteurs de part et d'autre de l'interface.

Pour terminer et illustrer l'application de notre modèle, nous avons considéré une structure typique de transistor à effet de champ dans laquelle nous l'avons introduit. Il est apparu des modifi-

cations de détail par rapport aux simulations faites sur la même structure mais intégrant le modèle de Dingle-Brooks-Herring, essentiellement au niveau de la répartition des vitesses électroniques dans le composant au voisinage et dans la couche active sous la grille. Nous avons cependant noté que ce fait ne se reflétait pas sensiblement sur les performances du composant, en particulier sur la caractéristique statique.

En définitive, il apparaît que notre modèle sera particulièrement utile dans les études de structures comportant des hétérojonctions puisqu'il est apte à prendre en compte les effets d'éloignement des impuretés par rapport aux électrons obtenus par l'existence du spacer dans les composants de type TEGFET, par exemple, mais aussi dans les transistors à modulation de dopage. Il apparaît à peu près évident que les modèles standards de l'interaction électron-impureté sont insuffisants dans de tels cas, et seul un modèle comme le nôtre peut prendre en compte tous les effets de façon réaliste.

REFERENCES

- [1] E. CONSTANT,
"Hot-electron transport in Semiconductors", Editeur L. Reggiani, Topics
in applied Physics vol. 58, Chapitre 8 (Springer Verlag, Berlin, 1985).

- [2] J. ZIMMERMANN,
"Monte-Carlo simulation of transport in submicron devices",
Ecole d'été de l'OTAN, San Miniato (Italie), juillet 1983 (Physics of
submicron structures, Plenum Press ASI Series).

- [3] D. LIPPENS,
"Etude des phénomènes de transport et de création de porteurs par ion-
sation par choc en régime non-stationnaire. Application à la simulation
des composants à avalanche et temps de transit millimétriques",
Thèse de Doctorat d'Etat, Université de Lille 1 (1984).

- [4] A. CAPPY,
"Modélisation des transistors à effet de champ à grille submicronique",
Thèse de 3ème cycle, Université de Lille 1 (1981).

- [5] D. CHATTOPADHYAY, M.J. QUEISSER,
"Electron scattering by ionized impurities in semiconductors, Rev. of
Modern Phys. 53, 745 (1981).

- [6] D.L. RODE,
"Semiconductors and Semimetals : transport phenomena",
Editeurs R.K. Willardson et A.C.BEER, vol.10, Chapitre 1
(Academic Press, New York, 1975).

- [7] R. DINGLE,
Philosophical Magazine, 46, 831 (1955)

- [8] M. BROOKS,
"Advances in Electronics and Electron Physics",
Editeur L. Marton, Vol. 7, p. 85 (Academic Press, New York, 1955).

- [9] L.M. FALICOV, M. CUEVAS,
Phys. Review, 164, 1025 (1967).

- [10] J. LEE, H.N. SPECTOR, V.K. ARORA,
J. Appl. Physics, 54, 6995 (1983)

- [11] M. PERNISEK,
"Simulation bidimensionnelle de composants submicroniques. Application
à l'étude de transistors à modulation d'injection", Thèse de 3ème cycle,
Université de Lille 1 (1983).

- [12] M.A. LITTLEJOHN, J.R. HAUSER, T.H. GLISSON,
J. Appl. Physics, 48, 4587 (1977)
- [13] W. WALUKIEWICZ, L. LAGOWSKI, L. JASTRZEBSKI, M. LICHTENSTEIGER,
M.C. GATOS,
J. Appl. Physics, 50, 899 (1979)
- [14] A. KASZYNSKI
"Etude des phénomènes de transport dans les matériaux semiconducteurs
par les méthodes de Monte Carlo : application à l'arséniure de gallium
de type N".
Thèse de Docteur Ingénieur, Université de Lille I, (1979)
- [15] A. VAPAILLE
"Physique des dispositifs à semiconducteurs, Tome 1, Nasson & Cie,
Paris, 1970.
- [16] D.A. Mc QUARRIE
"Statistical Mechanics"
Editeur Harper & Row, Chapitre 1, p. 3, 1976.
- [17] B.K. RIDLEY
"Reconciliation of the Conwell-Weisskopf and Brooks-Herring formulae
for charged-impurity scattering in semiconductors : third-body inter-
ference".
J. Phys. C. : Solid State Phys ; Vol. 10, 1589 (1977)
- [18] T.G. VAN DE ROER, F.P. WIDDERSHOVEN
"Ionized impurity scattering in Monte-Carlo calculations"
J. Appl. Phys. 59 (3), 813, 1 Feb. 1986
- [19] Y. WU
Thèse à paraître(1987)
- [20] M. PERNISEK
Thèse d'état à paraître(1987)

ANNEXES

Détail des calculs concernant le paragraphe II.2.3.3

Expression de la trajectoire pour un mouvement à face centrale dans le cas d'un potentiel 'écrané'.

- Cas de deux particules de même charge et de même masse

$$\mathcal{L} = T - U \quad (\mathcal{L}: \text{Lagrangien})$$

$$U = \frac{e^2}{4\pi\epsilon r} e^{-\beta r}$$

$$T = \frac{1}{2} m^* v^2 = \frac{1}{2} m^* (\dot{x}^2 + \dot{y}^2)$$

$$\begin{aligned} x &= r \cos\theta \\ y &= r \sin\theta \end{aligned}$$

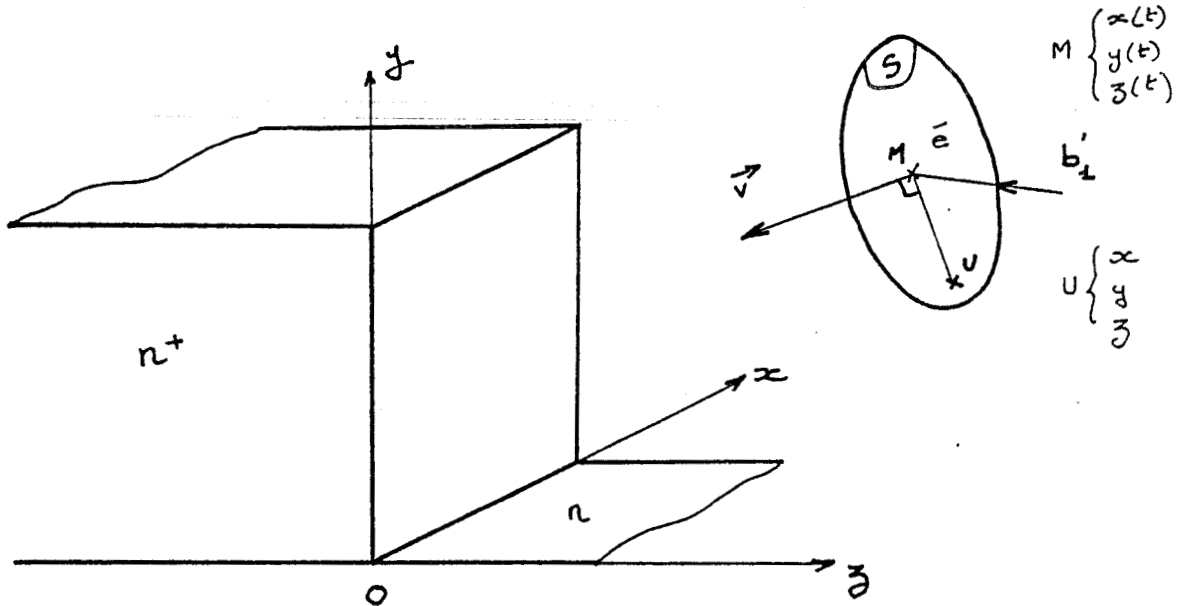
$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m^* \left\{ (\dot{r})^2 + r^2 (\dot{\theta})^2 \right\} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon r} e^{-\beta r}$$

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} = 0 \rightarrow m^* r \dot{\theta}^2 + \frac{k}{r} \left\{ \frac{1}{r} + \beta \right\} e^{-\beta r} = m^* \ddot{r} \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\theta}} = 0 \rightarrow m^* r^2 \dot{\theta} = \text{cte} \Leftrightarrow r^2 \dot{\theta} = -rb \end{cases}$$

en posant $u = \frac{1}{r}$, on aboutit à l'équation de la trajectoire en coordonnées polaires ([16], [15]).

$$\frac{d^2 u}{d\theta^2} + u = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon m^* v^2 b^2} e^{-\beta/u} \quad (\beta/u + 1)$$

Détail des calculs concernant le paragraphe II.2.4.2



* \vec{v} : vecteur vitesse de l'éjection perpendiculaire à la surface

$$S. \quad \vec{v} = v_x(t) \vec{i} + v_y(t) \vec{j} + v_z(t) \vec{k} \quad (1)$$

* U: point quelconque de la surface S

Condition d'orthogonalité: $\vec{v} \perp \text{Surface } S \iff \vec{UM} \cdot \vec{v} = 0$

$$\vec{UM} = (x - x(t)) \vec{i} + (y - y(t)) \vec{j} + (z - z(t)) \vec{k} \quad (2)$$

$$\vec{UM} \cdot \vec{v} = v_x(t) \{x - x(t)\} + v_y(t) \{y - y(t)\} + v_z(t) \{z - z(t)\} = 0 \quad (3)$$

Cette condition d'orthogonalité doit être vérifiée dans le plan de l'homojonction n^+n , afin de déterminer les lieux de l'intersection du cercle avec ce même plan. (donc quand $z=0$)

$$v_x(t) \{x - x(t)\} + v_y(t) \{y - y(t)\} - v_z(t) z(t) = 0 \quad (4)$$

$$\Rightarrow y - y(t) = \frac{v_z(t) z(t) - v_x(t) \{x - x(t)\}}{v_y(t)} \quad (5)$$

$$[y - y(t)]^2 = \frac{v_z^2(t) z^2(t) + v_x^2(t) \{x - x(t)\}^2 - 2v_x(t)v_z(t) z(t) \{x - x(t)\}}{v_y^2(t)} \quad (6)$$

On l'équation du cercle de rayon b_1' donne :

$$\{x - x(t)\}^2 + \{y - y(t)\}^2 + \{z - z(t)\}^2 = b_1'^2 \quad (7)$$

\uparrow
 $z=0$

$$\Leftrightarrow [y - y(t)]^2 = b_1'^2 - z^2(t) - \{x - x(t)\}^2 \quad (8)$$

$$v_y^2(t) \{x - x(t)\}^2 - b_1'^2 v_y^2(t) + v_x^2(t) z^2(t) + v_z^2(t) z^2(t) + v_x^2(t) \{x - x(t)\}^2 - 2v_x(t)v_y(t)z(t) \{x - x(t)\} = 0$$

$$[v_y^2(t) + v_x^2(t)] \{x - x(t)\}^2 - 2v_x(t)v_y(t)z(t) \{x - x(t)\} - b_1'^2 v_y^2(t) + \{v_x^2(t) + v_z^2(t)\} z^2(t) = 0 \quad (9)$$

$$\Delta' = v_y^2(t) \left\{ b_1'^2 (v_x^2(t) + v_y^2(t)) - z^2(t) (v_x^2(t) + v_y^2(t) + v_z^2(t)) \right\} \quad (10)$$

Condition d'intersection : $\Delta' \geq 0$

$$|z| \leq b_1' \cdot \sqrt{\frac{v_x^2(t) + v_y^2(t)}{v_x^2(t) + v_y^2(t) + v_z^2(t)}} = z_A \quad (11)$$

$$x - x(t) = \frac{v_x(t)v_y(t)z(t) \pm \sqrt{\Delta'}}{v_x^2(t) + v_y^2(t)} \quad (12)$$

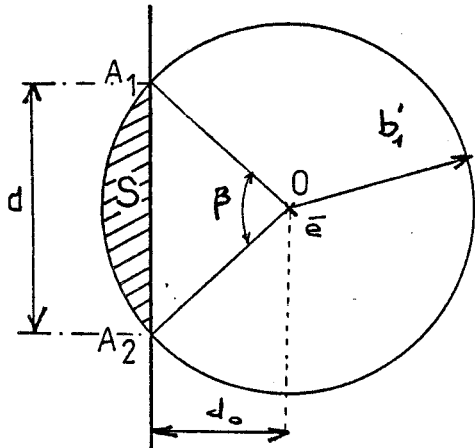
$$x = x(t) + \frac{v_x(t)v_y(t)z(t) \pm |v_y| \sqrt{b_1'^2 (v_x^2(t) + v_y^2(t)) - z^2(t) (v_x^2(t) + v_y^2(t) + v_z^2(t))}}{v_x^2(t) + v_y^2(t)}$$

$$y - y(t) = \frac{v_z(t)}{v_y(t)} z(t) - \frac{v_x(t)}{v_y(t)} \{x - x(t)\} \quad (13)$$

Les points d'intersection du cercle avec l'interface sont:

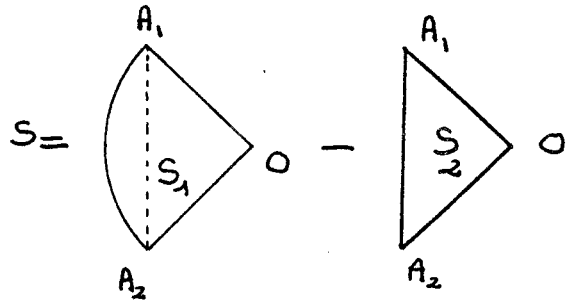
$$\begin{cases} x^+, x^- & (\text{correspondants au signe } + \text{ ou } - \text{ du discriminant}) \\ y^+, y^- \end{cases}$$

$Z(t) > 0$



$\sin \frac{\beta}{2} = \frac{d}{2b'_1} \Rightarrow d = 2b'_1 \sin \frac{\beta}{2}$

$d = |A_1 A_2| = \left\{ (x^+ - x^-)^2 + (y^+ - y^-)^2 \right\}^{1/2}$



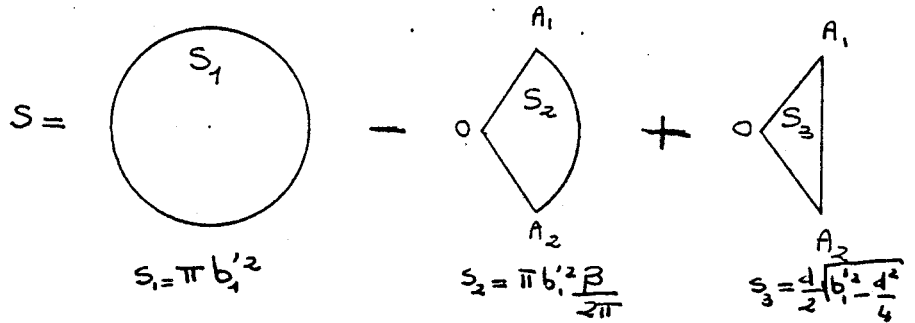
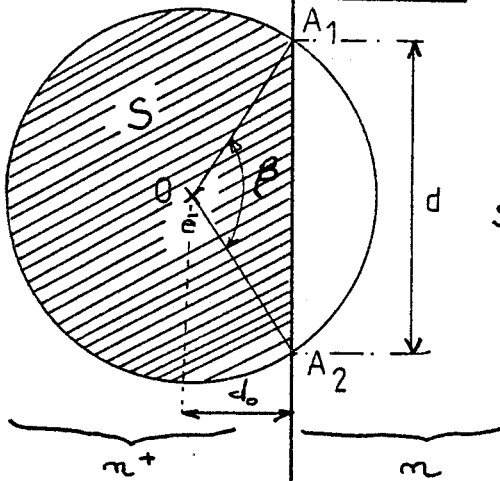
$S = \pi b'^2_1 \frac{\beta}{2\pi} - \frac{d}{2} d_0$

$d_0^2 + \left(\frac{d}{2}\right)^2 = b'^2_1 \Rightarrow d_0 = \sqrt{b'^2_1 - \frac{d^2}{4}}$

$S = b'^2_1 \text{Arccosim} \frac{d}{2b'_1} - \frac{d}{2} \sqrt{b'^2_1 - \frac{d^2}{4}}$



$Z(t) < 0$



$S_1 = \pi b'^2_1$

$S_2 = \pi b'^2_1 \frac{\beta}{2\pi}$

$S_3 = \frac{d}{2} \sqrt{b'^2_1 - \frac{d^2}{4}}$

plan de l'interface.

$S = b'^2_1 \left(\pi - \text{Arccosim} \frac{d}{2b'_1} \right) + \frac{d}{2} \sqrt{b'^2_1 - \frac{d^2}{4}}$

programme de simulation pour
l'interaction e'lectron -impurete'.

```
dimension vxm(151),en(151),pop(151)
dimension ro(2),sv(2),piez(2),dmb(100),colt(1,3,300)
&t(2,63),val(2,3),x(2),y(2),du(2),epi(2),gz(2)
common vk(3),cb,ct,sb,stk,dt,spr,pi,col,kbt,er,gr,rg,ep(2),gp(2),
&rgp(2),u(2),al(2,3),gap(2,3),mef(2,3),xlambda(20),hpo(2),doo(2),
&cop(2),cac(2),pac(2,3),hnp(2),opc(2),dnpo(2),hbo(2,3,3,
&2),z(2,3),ipc(2,3,3,2),civ(2),cep,cpiez(2),aa,bb,dd,pz,
&cimp(2),dop(2),epz(2),rmef(2,3),pmef(2,3),cpmp(2,3),a(2),b(2),
&p(2),ocsh(2),ale,ale1,ale2,ix,iy,iz,isg(2),nint(2,3,20),
&kimp(2),aff(2),am(2),kal,r
real mef,ipc,kno,kbt,modv,modvp,mo
integer va,over,overp,val,tc,td
```

```
*****
*      ce en v/m      *
*****
```

```
ce=0.5e5
tl=77.
tc=1500000
```

list=1 impression du tableau de donnees materiau; list=0 pas d'impression

```
list=1
dt=5.e-15
bzero=800.
dni=3.e17
dop(1)=0.
dop(2)=0.
kimp(1)=0
kimp(2)=0
```

```
kal=0
nal=0
n1=1
imat=1
du(1)=.2
du(2)=.2
td=0
pi=3.1416
```

```
c
c*****
c bzero= inverse du parametre d ecran en angst.
c*****
```

```
bzero=bzero*1.e-10
becrant=1./bzero
dens=18.02*becrant*becrant
```

```
c.....
c concentration d impuretes ni(at/cm3)
```

```
c.....
c
c output dni
```

```
c.....
c longueur du cylindre b1=(1/ni)**.33333 (metres)
```

```
c.....
c
c bun=(1/(dni*1.e6))**.33333
c bunp=bun/sqrt(pi)
c scercl=pi*bunp*bunp
c nwr=tc/10
c zto=50.e-10
```

```
c
c*** limites du couloir: de zg a zd en angstroms
```

```
zg=1000.00
zgg=0.0
zd=2000.00
zg=zg*1.e-10
zd=zd*1.e-10
dzt=20.00
dzt=dzt*1.e-10
```

```
c
c***
c
c ix=131073
c iy=131075
c iz=131077
c kbt=0.8625e-4*tl
c hb=1.055e-34
c mo=9.109e-31
c q=1.6e-19
c epso=8.854e-12
c pi=3.1416
c q2=q*q
c dpi=2.*pi
c cep=1.-cos(0.01)
c isg(1)=-1.
c isg(2)=1.
c u(1)=1.
```

u(2)=0.

lecture donnees materiau imat=1 pour gaas,2 pour inp

jmat=imat

open(01,form="formatted",file=">udd>SWYFPJZ>Perri>gaas")

read(1,1957) (t(1,i),i=1,63)

1957 format(6e13,7)

close(01)

x(jmat)=t(jmat,1)

y(jmat)=t(jmat,2)

do 20 i=1,3

mef(jmat,i)=t(jmat,i+2)

al(jmat,i)=t(jmat,i+5)

z(jmat,i)=t(jmat,i+8)

gap(jmat,i)=t(jmat,i+11)

20 pac(jmat,i)=t(jmat,i+14)

do 21 l=1,2

do 21 j=1,3

do 21 i=1,3

hbo(jmat,i,j,l)=t(jmat,17+i+3*(j-1)+9*(l-1))

21 ipc(jmat,i,j,l)=t(jmat,35+i+3*(j-1)+9*(l-1))

hpo(jmat)=t(jmat,54)

hnpo(jmat)=t(jmat,55)

opc(jmat)=t(jmat,56)

ro(jmat)=t(jmat,57)

sv(jmat)=t(jmat,58)

epz(jmat)=t(jmat,59)

epl(jmat)=t(jmat,60)

piez(jmat)=t(jmat,61)

am(jmat)=t(jmat,62)

aff(jmat)=t(jmat,63)

gz(jmat)=gap(jmat,1)

va=1

nva=1

do 7 i=2,3

if(gap(jmat,i).le.gz(jmat)) then

gz(jmat)=gap(jmat,i)

nva=i

end if

7 continue

do 8 i=1,3

8 gap(imat,i)=gap(imat,i)-gz(imat)

val(imat,1)=1hg

val(imat,2)=1hl

val(imat,3)=1hx

if(list.eq.0) goto 912

write(6,896)x(imat),y(imat)

896 format(55x,'ga(1-x)in(x)p(1-y)as(y)',2(/),56x,'x=',f6.4,5x,'y=',
&f6.4,3(/))

write(6,904)

write(6,897)

897 format(11x,4('* ',8x),'*',12x,' intervallee 1 ',12x,'*',12x,
&' intervallee 2 ',12x,'*')

write(6,898)

898 format(11x,'*',3x,'mef',2x,'*',3x,'alp',2x,'*',3x,'gap',2x,'*',

* t(1,i) : tableau contenant les données du matériau A_5G_2

```

&3x,'pac',2x,'*',38x,'*',38x,'*')
write(6,899)val(imat,1),val(imat,2),val(imat,3),val(imat,1),
&val(imat,2),val(imat,3)
899 format(11x,4('*',8x),'*',6(2x,'vallee ',a1,2x,'*'))
write(6,904)
do 900 i=1,3
write(6,901) ((hbo(imat,i,j,l),j=1,3),l=1,2)
901 format(11x,4('*',8x),'*',6(2x,f8.6,2x,'*'))
write(6,902)val(imat,i),mef(imat,i),al(imat,i),gap(imat,i),
&pac(imat,i)
902 format(2x,'vallee ',a1,x,3('*',x,f6.4,x),'*',x,f6.2,x,'*',
&6(12(x),'*'))
write(6,903) ((ipc(imat,i,j,l),j=1,3),l=1,2)
903 format(11x,4('*',8x),'*',6(x,e10.4,x,'*'))
900 write(6,904)
904 format(x,125('*'))
write(6,905)epz(imat),epi(imat),opc(imat),piez(imat),hnpo(imat),
&hpo(imat),aff(imat),am(imat),ro(imat),sv(imat),gz(imat)
905 format(2(/),10x,'epz=',f6.3,10x,'epi=',f6.3,2(/),10x,'opc=',
&e10.4,5x,'piez=',f8.6,5x,'hnpo=',f8.6,5x,'hpo=',f8.6,2(/),
&10x,'aff=',e10.4,7x,'am=',e10.4,5x,'ro=',e10.4,4x,'sv=',e10.4,
&6x,'gz=',f6.4,3(/))
912 continue
write(6,911)
911 format(1h1)
dpo(imat)=1./(exp(hpo(imat)/kbt )-1.)
cop(imat)=(1./epi(imat)-1./epz(imat))*hpo(imat)*5.580408e15
cac(imat)=1.3094888e23/ro(imat)/sv(imat)/sv(imat)
civ(imat)=1.125165e-6/ro(imat)
dnpo(imat)=1./(exp(hnpo(imat)/kbt )-1.)
cimp(imat)=1.4118433e14/epz(imat)
coiez(imat)=cimp(imat)*piez(imat)*piez(imat)
ocsh(imat)=opc(imat)*civ(imat)/hnpo(imat)
do 55 i=1,3
rmef(imat,i)=sqrt(mef(imat,i))
pmef(imat,i)=mef(imat,i)*rmef(imat,i)
cpmp(imat,i)=cac(imat)*pac(imat,i)*pmef(imat,i)
55 continue
tcr=tc*1.e12*dt
tdr=td*1.e12*dt
emoy=0
vmoy=0
do 4 j=1,3
do 4 i=1,20
4 nint(imat,j,i)=0
if(nal.eq.1) then
aff(1)=du(1)
aff(2)=du(2)
end if

over=0
overp=0
epsz=epso*epz(jmat)
ab=8.*pi*epsz*bunp
ab=ab*ab
abb=8.*pi*epsz
abb=abb*abb
vmxei=0.

```

c
c
c

nd=nbre de depast. zt>zd ng=nbre de depast. zt<-zg

```

c
c
nd=0
ng=0

```

initialisation des accumulateurs

```

do 206 izt=1,151
vxm(izt)=0.0
pop(izt)=1.0e-6
en(izt)=0.0

```

```
206 continue
```

.....ne pas oublier d'affecter spr=1. avant appel du
s/p probacol sinon le tableau de proba. est faux.....

```
spr=1.
```

*****creation tableau somme des probas*****

```

jmat=1
do 41 nval=1,3
do 41 ip=1,300
er=ip*1.e-2
e=ert+gap(jmat,nval)
call probacol(e,jmat,nval)
colt(jmat,nval,ip)=col
41 continue

```

```

*****
! conditions initiales !
*****

```

```

open(02,file=">udd>SWYFPJZ>Perri>dist.max.boltz")
read(2) (dmb(j),j=1,100)
close(02)

```

```

12 do 12 i=1,100
dmb(i)=dmb(i)*kbt
do 9 ia=1,n1
va=nva
call unirel (1.,101.,e,ix)
ie=e
e=dmb(ie)
k=sqrt(e*(1.+al(imat,va)*e)*mef(imat,va))*5.1175e9
call unirel(0.,pi,betao,iy)
call unirel(0.,2.*pi,tetao,iz)
vk(1)=k*sin(betao)*cos(tetao)
vk(2)=k*sin(betao)*sin(tetao)
vk(3)=k*cos(betao)
er=e-gap(imat,va)
v1x=vk(1)*1.1582e-4/mef(imat,va)/(1.+2.*al(imat,va)*er)
v1y=vk(2)*1.1582e-4/mef(imat,va)/(1.+2.*al(imat,va)*er)
v1z=vk(3)*1.1582e-4/mef(imat,va)/(1.+2.*al(imat,va)*er)
v2x=v1x

```

* dmb(i) : tableau contenant les valeurs de la distribution de Maxwell - Boltzmann.

```

v2y=v1y
v2z=v1z

```

```

xt=0.0
yt=0.0
zt=zto
n=0
wtau=0.
wtauc=0.
mtau=0
ncolei=0
ieicol=1
5 n=n+1
if(ieicol.eq.0)goto 30
modv=sqrt(v2x*v2x+v2y*v2y+v2z*v2z)+1.
tau=4/pi*bun/modv
ntau=tau/dt+1
mtau=mtau+ntau
30 if(n.lt.mtau) then
        ieicol=0
        goto 31
    end if

```

.....
collision electron-impurete
.....

```

modvp=sqrt(v2x*v2x+v2y*v2y)+1.
modv=sqrt(v2x*v2x+v2y*v2y+v2z*v2z)+1.
baa=al(imat,va)*er
bab=(1.+baa)/(1.+2.*baa)/(1.+2.*baa)
bab=bab*bab
za=bunp*modvp/modv
if(zt.ge.za) then
        ieicol=1
        goto 31
    end if
if(zt.le.-za) goto 174
ua=zt*zt*modv*modv
ua=bunp*bunp*modvp*modvp-ua
ua=v2y*sqrt(ua)
ub=v2x*v2z*zt
xa1=(ub+ua)/modvp/modvp+xt
ya1=- (xa1-xt)*v2x/v2y+v2z/v2y*zt+yt
xa2=(ub-ua)/modvp/modvp+xt
ya2=- (xa2-xt)*v2x/v2y+v2z/v2y*zt+yt

```

Les nombres (xa1, ya1, 0) et (xa2, ya2, 0) sont les intersections du cercle avec le plan z=0

```

ddd=zt*modv/modvp
dpos=ddd
ddd=bunp*bunp-cdd*ddd
ddd=sqrt(ddd)*2
if(zt.lt.0.0) goto 171

```

*** cas ou zt est positif ou nul

```

sect=bunp*bunp*asin(ddd/2./bunp)
rde=abs(dpos)

```

```

sect=sect-ddd*dde/2.
call unirel (.00001,.99999,ra,ix)
if(sect.lt.ra*scercl) then
    ieicol=1
    goto 31
end if
call unirel (.00001,.99999,rb,ix)
bbb=dde+rb*(bunp-dde)
ala=acos(dde/bunp)
alb=acos(dde/bbb)
call unirel (.00001,.99999,rc,ix)
psi=ala+alb*(2.*rc-1)
goto 172

```

c
c*** cas ou zt est negatif
c

```

171 sect=bunp*bunp*(pi-asin(ddd/bunp/2.))
dde=abs(dpos)
sect=sect+dde*ddd/2.
call unirel (.00001,.99999,ra,ix)
if (sect.lt.ra*scercl) then

```

```

    ieicol=1
    goto 31
end if

```

```

call unirel (.00001,.99999,rb,ix)
bbb=abs(-dde+rb*(bunp+dde))
if(bbb.le.dde) goto 173
ala=acos(dde/bunp)
alb=acos(dde/bbb)
call unirel (.00001,.99999,rc,ix)
psi=dpi*rc-ala-alb*(2.*rc-1.)
goto 172

```

```

173 call unirel (.00001,.99999,rc,ix)
psi=rc*dpi

```

```

172 ieicol=1
ncolei=ncolei+1
ae=bab*abb*er*er*bbb
xbpi=exp(-bbb/bzero)
ctetal=(ae-q2*xbpi*xbpi/bbb)/(ae+q2*xbpi*xbpi/bbb)
stetal=-sqrt(1.-ctetal*ctetal)
ctetalm=ctetalm+ctetal
cpsi=cos(psi)
spsi=sin(psi)
v1x=modv*stetal*cpsi
v1y=modv*stetal*spsi
v1z=modv*ctetal
vnx=v1x*(xa1-xt)/bunp-v1y*(v2z*(ya1-yt)+v2y*zt)/modv/bunp
?+v1z*v2x/modv
vny=v1x*(ya1-yt)/bunp+v1y*(v2x*zt+v2z*(xa1-xt))/modv/bunp
?+v1z*v2y/modv
vnz=-v1x*zt/bunp+v1y*(v2x*(ya1-yt)-v2y*(xa1-xt))/modv/bunp
?+v1z*v2z/modv
goto 170

```

c
c*** collision dans le materiau homogene
c

```

174 ieicol=1
ncolei=ncolei+1
call unirel (0.,1.,ses,ix)
call unirel (0.,dpi,psi,iy)

```

```

bpi=bunp*sqrt(ses)
ae=ab*bab*er
xbpi=exp(-bpi/bzero)
ctetal=(ae-q2*xbpi*xbpi/(er*ses))/(ae+q2*xbpi*xbpi/(er*ses))
stetal=-sqrt(1.-ctetal*ctetal)
ctetalm=ctetalm+ctetal
cpsi=cos(psi)
spsi=sin(psi)
vnx=v2x*ctetal+v2x*v2z*stetal*cpsi/modvp
&-v2y*modv*stetal*spsi/modvp
vny=v2y*ctetal+v2y*v2z*stetal*cpsi/modvp
&+v2x*modv*stetal*spsi/modvp
vnz=v2z*ctetal-modvp*stetal*cpsi
170 v1x=vnx
v1y=vny
v1z=vnz
vmxei=vmxei+v1x
vk(1)=(v1x*(1.+2.*al(imat,va)*er)*mef(imat,va))/1.1582e-4
vk(2)=(v1y*(1.+2.*al(imat,va)*er)*mef(imat,va))/1.1582e-4
vk(3)=(v1z*(1.+2.*al(imat,va)*er)*mef(imat,va))/1.1582e-4

```

```

.....
fin de collision
.....

```

```

wtauic=wtauic+tau*tau
31 continue
idp=0
spr=1.
spr1=1.
10 spr2=1.
11 continue

```

vol libre

```

vk(1)=vk(1)+1.5166e15*ce*dt*spr
k=sqrt(vk(1)*vk(1)+vk(2)*vk(2)+vk(3)*vk(3))
cb=vk(3)/k
sb=sqrt(1.-cb*cb)
if(sb.eq.0) then
    call unirel (0.,2.*pi,tetao,iy)
    st=sin(tetao)
    ct=cos(tetao)
    goto 16
end if
ct=vk(1)/sqrt(vk(1)*vk(1)+vk(2)*vk(2))
st=vk(2)/sqrt(vk(1)*vk(1)+vk(2)*vk(2))
16 e=(-1+sqrt(1+1.5274e-19*k*k*al(imat,va)/mef(imat,va)))/2/
&al(imat,va)+gap(imat,va)
er=e-gap(imat,va)
v2z=vk(3)*1.1582e-4/mef(imat,va)/(1.+2.*al(imat,va)*er)
v2y=vk(2)*1.1582e-4/mef(imat,va)/(1.+2.*al(imat,va)*er)
v2x=vk(1)*1.1582e-4/mef(imat,va)/(1.+2.*al(imat,va)*er)
zt=zt+(v1z+v2z)/2.*dt*spr
if(zt.gt.zd) then
    zt=zd-1.e-10
    nd=nd+1
    goto 175

```



```

end if
if(zt.lt.-zgg) then
  zt=-zgg+1.e-10
  ng=ng+1
  goto 175
end if
goto 176
175 v2z=-v2z
176 yt=yt+(v1y+v2y)/2.*dt*spr
  xt=xt+(v1x+v2x)/2.*dt*spr
  call unirel(0.,1.,r,ix)
  ned=er/1.e-2+1
  if(ned.gt.300) goto 42
  col=colt(imat,va,ned)*spr
  if(r.gt.col) goto 28
  if(col.gt.1.) goto 27
42 call probacol(e,imat,va)
  if(col.gt.1.) goto 27
  call betacol(e,imat,va)
  e=(-1+sqrt(1+1.5274e-19*k*k*al(imat,va)/mef(imat,va)))/2/
  &al(imat,va)+gap(imat,va)
  er=e-gap(imat,va)
  v2z=vk(3)*1.1582e-4/mef(imat,va)/(1.+2.*al(imat,va)*er)
  v2y=vk(2)*1.1582e-4/mef(imat,va)/(1.+2.*al(imat,va)*er)
  v2x=vk(1)*1.1582e-4/mef(imat,va)/(1.+2.*al(imat,va)*er)
  goto 28
27 vk(1)=vk(1)-1.5166e15*ce*dt*spr
  k=sqrt(vk(1)*vk(1)+vk(2)*vk(2)+vk(3)*vk(3))
  zt=zt-(v1z+v2z)/2.*dt*spr
  yt=yt-(v1y+v2y)/2.*dt*spr
  xt=xt-(v1x+v2x)/2.*dt*spr
  idp=1
  spr2=spr2/2.
  spr=spr1*spr2
  overp=overp+1
  if(e.lt.0.01) then
    over=over+1
  end if
go to 11
28 if(idp.eq.1) then
  idp=0
  spr1=spr1-spr
  spr=spr1
  goto 10
end if

v1x=v2x
v1y=v2y
v1z=v2z
izt=(zt+zg)/dzt+1
vxm(izt)=vxm(izt)+v2x
en(izt)=en(izt)+e
pop(izt)=pop(izt)+1.
if(n/nwr*nwr.ne.n) goto 949
write(6,3333) wtau/ncolei,wtauic/ncolei
poptot=0.
do 410 izt=-49,100
  ize=ize+50
  popu=pop(ize)
  dmob=abs(vxm(ize))/popu/ce*1.e4
  write(6,411) izt*dzt*1.e10-10,vxm(ize)/popu,dmob,

```



```

&en(izs)/popu,popu
411 format(5x,f6.1,8x,1pe10.3,5x,1pe10.3,5x,1pe10.3,5x,1pe10.3)
poptot=poptot+popu
410 continue
write(6,412) n,mcol,ncolei
412 format(10x,'n=',i7,5x,'mcol=',i7,5x,'ncolei=',i7)
write(6,413) poptot,nd,ng
413 format(5x,'population totale=',e10.4,5x,'nbre de depast a
&droite=',i7,5x,'nbre de depast a gauche',i7)
write(6,911)
949 if(n.lt.tc) goto 5
write(6,2) tcr,tdr
2 format(5x,'temps calcul=',e10.4,' ps',5x,'moyennes calculees
&a partir de ',e10.4,' ps',3(/))
write(6,3) ce,emoy,v moy
3 format(5x,'champ=',e10.4,5x,'emoy=',e10.4,5x,'vmoy=',e10.4)
9 continue
write(6,1975) becrant,bzero,dens,dni,bun,tc,tl,dt
1975 format(5x,'becrant=',e10.4,/,5x,'bzero=',e10.4,/,5x,
&'dens=',e10.4,/,5x,'dni=',e10.4,/,5x,'bun=',e10.4,/,5x,
&'tc=',i8,/,5x,'tl=',e10.4,/,5x,'dt=',e10.4,/)
write(6,911)
write(6,3333) wtau/ncolei,wtauic/ncolei
3333 format(3(/),5x,'tomoy=',e10.4,5x,'tocmoy=',e10.4)
continue
stop
end
subroutine probacol(e,imat,va)
common vk(3),cb,ct,sb,st,k,dt,spr,pi,col,kbt,
&er,g,rg,ep(2),gp(2),rgp(2),u(2),al(2,3),gap(2,3),mef(2,3),
&xlambda(20),hpo(2),dpo(2),cop(2),cac(2),pac(2,3),
&hpo(2),opc(2),dhpo(2),hbo(2,3,3,2),z(2,3),ipc(2,3,3,2),
&civ(2),cep,cpiez(2),aa,bb,dd,pz,
&cimp(2),dop(2),epz(2),
&rmef(2,3),pmef(2,3),cimp(2,3),a(2),b(2),p(2),
3ocsh(2),ale,ale1,ale2,
&ix,iy,iz,ig(2),nint(2,3,20),kimp(2),
&aff(2),am(2),kal,r
real mef,ipc,k,no,kbt
integer va,vr
ale=al(imat,va)*er
ale1=1.+ale
ale2=ale1+ale
aa=ale*ale/2
bb=-2.*ale*ale2
dd=ale2*ale2
pz=3.9999999975*aa+1.99995*bb+dd*10.59664273
g=er*ale1
rg=sqrt(g)
do 1 i=1,20
1 xlambda(i)=0

**** calcul probabilites interactions ****

if(er.gt.1.e-2) goto 131
const=cpiez(imat)*(10.59664-80.77312*ale+153.54624*ale*ale)
&/cimp(imat)/rmef(imat,va)
col=float(va)/3.*dt*1.0e14*spr*(9*kimp(imat)+1.)/10.
xlambda(18)=(const+1.-kimp(imat))*col/(const+1.)
xlambda(19)=kimp(imat)*col/(const+1.)

```

go to 100

***** interactions sur impuretes *****

```

131 if(kimp(imat).ne.1) goto 130
    xlambda(19)=cimp(imat)*rmef(imat,va)*ale2/rg
130 continue

```

***** interactions optiques non polaires *****

```

if(va.ne.2) goto 109
do 109 i=1,2
  if(er.le.hnpo(imat)) then
    i=2
    end if

  epj=ert+isg(i)*hnpo(imat)
  w=pmef(imat,va)*ocsh(imat)
  alep1=1.+al(imat,va)*epj
  s=sqrt(epj*alep1)
  no=dnpo(imat)+u(i)
  f=ale1*alep1/ale2
  j=14+i
  xlambda(j)=s*no*f*w
109 continue

```

***** interactions sur phonons acoustiques *****

```

w=cpmp(imat,va)*rg
f=(ale1*ale1+ale*ale/3)/ale2
xlambda(17)=f*w

```

***** interactions piezoelectriques *****

```

xlambda(18)=cpiez(imat)*pz/ale2/rg

```

***** interactions optiques polaires *****

```

do 20 i=1,2
  if(er.lt.hpo(imat)) then
    i=2
    end if

  ep(i)=er+hpo(imat)*isg(i)
  alep=al(imat,va)*ep(i)
  alep1=1.+alep
  alep2=alep1+alep
  gp(i)=ep(i)*alep1
  rgp(i)=sqrt(gp(i))
  alggp=al(imat,va)*(g+gp(i))
  ap=2.*ale1*alep1+alggp
  a(i)=ap*ap
  b(i)=-2.*al(imat,va)*rg*rgp(i)*(4.*ale1*alep1+alggp)
  c=4.*ale1*alep1*ale2*alep2
  p(i)=a(i)*alog(abs((rg+rgp(i))/(rg-rgp(i))))+b(i)
  f=p(i)/c
  no=dpo(imat)+u(i)
  xlambda(i)=cop(imat)*alep2*f*no*rmef(imat,va)/rg
20 continue

```

***** intervalles *****



```

do 450 itv=1,2
do 450 vr=1,3
do 450 i=1,2
jj=2*vr+i+(itv-1)*6
hbiv=hbo(imat,va,vr,itv)
if(vr.lt.va) go to 440
if(va.eq.1.and.vr.eq.1) then
xlambd(jj)=0.
goto 450
end if
if(e.lt.gap(imat,vr)-hbiv) then
xlambd(jj)=0.
goto 450
end if
if(e.lt.gap(imat,vr)+hbiv) then
xlambd(jj)=0.
goto 450
end if
440 if(va.eq.vr) then
ieq=1
goto 442
end if
ieq=2
442 epj=e-gap(imat,vr)+isg(i)*hbiv
w=(z(imat,vr)-u(ieq))*pmef(imat,vr)*ipc(imat,va,vr,itv)/hbiv*
&civ(imat)
s=sqrt(epj*(1.+al(imat,vr)*epj))
no=1./(exp(hbiv/kbt)-1.)+u(i)
f=ale1*(1.+al(imat,vr)*epj)/ale2
jj=2*vr+i+(itv-1)*6
xlambd(jj)=w*no*f*s
450 continue
if(kal.eq.0) goto 98
:
:
:
***** alloy scattering *****
xlambd(20)=0.1496588e38*pmef(imat,va)*rg*ale2*am(imat)*1.e6
&*am(imat)*am(imat)*aff(imat)
98 continue
col=0.
dtspr=dt*spr
do 99 i=1,20
xlambd(i)=xlambd(i)*dtspr
99 col=col+xlambd(i)
100 return
end
subroutine betacol(e,imat,va)
common vk(3),cb,ct,sb,stk,dt,spr,pi,col,kbt,
&er,gr,rg,ep(2),gp(2),rgp(2),u(2),al(2,3),gap(2,3),mef(2,3),
&xlambd(20),hpo(2),dpo(2),cop(2),cac(2),pac(2,3),
&hpo(2),opc(2),dnpo(2),hbo(2,3,3,2),z(2,3),ipc(2,3,3,2),
&civ(2),cep,cpiez(2),aa,bb,dd,pz,
&cimp(2),dop(2),epz(2),
&rmef(2,3),pmef(2,3),cpmp(2,3),a(2),b(2),p(2),
&ocsh(2),ale,ale1,ale2,
&ix,iy,iz,isg(2),nint(2,3,20),kimp(2),
&aff(2),am(2),kal,r
real mef,ipc,k,no,kbt
integer va,vr
preci=1.e-4

```

```
col=0.
ii=0
465 ii=ii+1
if(ii.gt.20) go to 6
col=col+xlamba(ii)
if(r.gt.col) go to 465
nint(imat,va,ii)=nint(imat,va,ii)+1
if(ii.eq.17)goto 55
if(ii.eq.18) go to 54
if(ii.eq.19) go to 47
if(ii.eq.20) goto 675

      beta: intervallees

vr=(ii-1)/2
i=ii-2*vr
if(vr.eq.0)goto 58
itv=1
if(vr.ge.4.and.vr.le.6) then
                                vr=vr-3
                                itv=2
                                end if

hbz=hbo(imat,va,vr,itv)
if(vr.eq.7) then
                                vr=2
                                hbz=hnp0(imat)
                                end if
call unirel(0.,1.,ri,iz)
y=1.-2.*ri
epj=e-gap(imat,vr)+isg(i)*hbz
if(epj.le.0.) then
                                output epj,va,vr,ii,i
                                end if
k=sqrt(epj*(1.+al(imat,vr)*epj)*mef(imat,vr))*5.1175e9
va=vr
go to 68

      beta   impuretes

47 continue
call unirel (0.,1.,rim,iz)
y=1.-2.*(1.-rim)/(1.+rim*g*mef(imat,va)/dop(imat)*epz(imat)
&*1.466614e26)
go to 68

      beta   piezoelectric mode

54 continue
ccp=-aa*2.49996e-9-bb*4.99996e-5+dd*9.903495
call unirel(0.,1.,rpz,iy)
y1=4.99996e-5
pas=0.1
cc=ccp-rpz*pz
f1=aa*y1*y1+bb*y1+cc+dd*alog(y1)
541 y2=y1+pas
if(pas.lt.preci) then
                                y=(y1+y2)/2
                                goto 545
                                end if
f2=aa*y2*y2+bb*y2+cc+dd*alog(y2)
```

```
if((f1*f2)) 542,544,543
542 pas=pas/2
go to 541
543 y1=y2
f1=f2
go to 541
544 if(f1*1.e25.lt.1.e-25) then
      y=y1
      goto 545
      end if
y=y2
545 y=1-y
goto 68

beta:accoustiques
55 call unirel(0.,1.,ra,ix)
ale23=ale2*ale2*ale2
y=((ale23*(1-ra)+ra)**0.3333333-1.)/ale-1.
goto 68

beta:interaction polaire
58 continue
k=5.1175e9*rgp(i)*rmef(imat,va)
rgrgp=4.*rg*rgp(i)
c=ale1*(1.+al(imat,va)*ep(i))*rgrgp/er/ep(i)
pp=p(i)/c
aa=ale*ale*ep(i)*ep(i)/rgrgp
bb=-b(i)/2./c
dd=a(i)/2./c
gg=2.*(g+gp(i))/rgrgp
ccp=-aa-bb+dd*alog(rgrgp/2./((rg-rgp(i))/(rg-rgp(i))))
call unirel(0.,1.,rp,iy)
cc=ccp-rp*pp
ya=-1.
yb=1.
671 fa=aa*ya*ya+bb*yb+cc+dd*alog(gg-ya)
fb=aa*yb*yb+bb*yb+cc+dd*alog(gg-yb)
derb=2.*aa*yb+bb-dd/(gg-yb)
dif=-fb/derb
ya=(yb*fa-ya*fb)/(fa-fb)
yb=yb+dif
if(abs(ya-yb).gt.1.e-4)goto 671
y=(ya+yb)/2
goto 68

beta alloy scattering
675 call unirel(0.,1.,ral,iz)
y=1.-2.*ral

expression de vk apres l interaction
68 call unirel(0.,2.*pi,teta,iy)
if((1.-abs(y)).lt.1.e-3) then
      y=1.
      yy=0.
      goto 681
      end if
```

```
yy=sqrt(1.-y*y)
681 vk(1)=k*yy*cos(teta)
vk(2)=k*yy*sin(teta)
vk(3)=k*y
v1=cb*ct*vk(1)+ct*sb*vk(3)-st*vk(2)
v2=cb*st*vk(1)+st*sb*vk(3)+ct*vk(2)
v3=-sb*vk(1)+cb*vk(3)
vk(1)=v1
vk(2)=v2
vk(3)=v3
6 return
end
```

**** SUBROUTINE UNIREL

```
subroutine unirel(binfb,bsup,alea,inc)
double precision xmin,xmax
double precision g05daf
double precision xr
xmin=dbl(binf)
xmax=dbl(bsup)
xr=g05daf(xmin,xmax)
alea=sngl(xr)
return
end
```



RESUME

Nous présentons un modèle original de traitement de l'interaction électron-impureté dans les semiconducteurs, élaboré à l'aide de la méthode de Monte-Carlo. Ce modèle permet de prendre en compte les non-uniformités spatiales de concentration de porteurs et d'impuretés et représente donc une approche plus physique de cette interaction telle qu'elle se manifeste dans les composants. Cet avantage n'existe pas dans les modèles de Conwell-Weisskopf et Dingle-Brooks-Herring qui supposent l'uniformité de la concentration d'ions et de porteurs du système étudié.

La première partie résumera donc l'ensemble des modèles qui ont été utilisés jusqu'à présent et mettra en valeur leurs limitations essentielles.

La seconde partie expose en détail le modèle que nous avons élaboré. La méthode de simulation utilisée nous permettant de connaître à tout instant la position du porteur dans l'espace, nous localisons la position de l'ion le plus proche par des lois de probabilité ad-hoc et déterminons l'effet du potentiel de l'ion sur le porteur dans la limite d'une interaction à deux corps. On en tire la mobilité et la vitesse de dérive des porteurs en fonction de la densité de ceux-ci et de la concentration d'impuretés.

Dans la troisième partie, nous appliquons notre modèle à l'étude de la vitesse de dérive électronique dans une jonction n+n AsGa et interprétons l'effet des impuretés sur le comportement des électrons. Cet effet est double : il y a d'une part une interaction directe à distance (mise en évidence par des effets de barrière) et une interaction supplémentaire transmise par le phénomène de diffusion (l'agitation thermique induit un effet de mémoire dans l'espace).

La quatrième partie présente la simulation d'un transistor à effet de champ planar dans lequel nous avons introduit notre modèle. Nous comparons les résultats acquis à ceux obtenus par l'utilisation du modèle standard de Dingle-Brooks-Herring.

MOTS CLES

SEMI-CONDUCTEURS III-V
TRANSPORT
COMPOSANTS
SIMULATION NUMERIQUE
INTERACTION ELECTRON-IMPURETES