

N° d'ordre: 1761

THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITÉ DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES DE LILLE

pour obtenir le titre de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ

Spécialité: **ÉLECTRONIQUE**

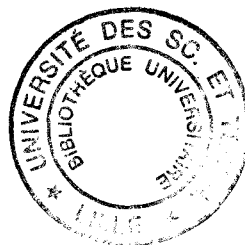
par

Olivier MOUTON

**MODÈLE DE STRUCTURE DE BANDE ET
TRANSPORT ÉLECTRONIQUE EN CHAMP FORT
DANS LES SEMICONDUCTEURS III-V.
APPLICATION AUX MATÉRIAUX GaAs ET InP**

Soutenue le 8 juillet 1996 devant la commission d'examen:

Membres du jury:	G.SALMER	Président
	R.FAUQUEMBERGUE	Directeur de Thèse
	J.ZIMMERMANN	Rapporteur
	J.C.VAISSIÈRE	Rapporteur
	G.ALLAN	Examineur
	J.L.THOBEL	Examineur



*A ma chère maman
et à ma regrettée grand-mère*

Ce travail a été effectué à l'Institut d'Electronique et de Microélectronique du Nord (IEMN) dirigé par Monsieur le Professeur E.Constant.

Monsieur le Professeur G.Salmer, Directeur du Département Hyperfréquences et Semiconducteurs de l'IEMN, a accepté de présider mon jury et d'examiner mes travaux. Je le remercie de l'honneur qu'il me fait.

J'exprime ma très sincère gratitude à Monsieur le Professeur R.Fauquembergue qui a dirigé ce travail, et dont les conseils éclairés m'ont aidé tout au long de cette étude.

Mes remerciements vont aussi à Messieurs, J.Zimmermann, Directeur de Recherches au CNRS, et J.P.Vaissière, Professeur à l'Université de Montpellier, qui ont accepté de rapporter ce travail.

Qu'il me soit permis d'exprimer mes remerciements à Monsieur G.Allan, Directeur de Recherches au CNRS, pour l'aide utile qu'il m'a apporté au début de cette étude, et de l'intérêt témoigné pour ce travail en acceptant de l'examiner.

Je remercie Monsieur J.L.Thobel, Chargé de Recherches au CNRS, pour sa disponibilité, et pour l'aide efficace de ses réponses à des questions souvent compliquées.

Je tiens particulièrement à remercier Monsieur M.Charef, Maître de Conférences, dont le soutien ma été très précieux tout au long de ces années.

Je remercie également F.Banse, doctorant informaticien de l'équipe, qui s'est toujours montré aimablement disponible à de nombreuses questions sur l'utilisation de logiciels du commerce.

Je n'oublierai pas d'associer à mes remerciements, les autres membres et anciens membres de l'équipe pour leur aide amicale et sympathique: A.Clergeau, L.Baudry, M.Badirou, F.Dessenne, A.Sleiman, P.Chevalier, O.Schüler, P.Bourel, E.Leduc, D.Courtecuisse, et N.Ménard.

SOMMAIRE GÉNÉRAL

INTRODUCTION GÉNÉRALE.....	i-1
<u>CHAPITRE I:</u> BASES DU TRANSPORT ÉLECTRONIQUE EN CHAMP FORT DANS LES SOLIDES CRISTALLINS SEMICONDUCTEURS.	I-1
<u>CHAPITRE II:</u> LE MODÈLE DE STRUCTURE DE BANDE ET LES INTERACTIONS APPLIQUÉS AUX MATÉRIAUX MASSIFS GAAS ET INP. MISE EN OEUVRE DANS LA MÉTHODE MONTE- CARLO.....	II-1
<u>CHAPITRE III:</u> ÉTUDE DU TRANSPORT ÉLECTRONIQUE DANS LES MATÉRIAUX GAAS ET INP MASSIFS.....	III-1
CONCLUSION GÉNÉRALE.....	c-1
ANNEXES	A-1

INTRODUCTION GÉNÉRALE

INTRODUCTION GÉNÉRALE.

Dans le domaine des communications modernes, l'utilisation de composants à base de semiconducteurs III-V est de plus en plus répandue. C'est par exemple le cas du transistor à effet de champ, largement utilisé pour remplir les différentes fonctions de la microélectronique: amplification, logique,...

Dans la plupart des domaines d'application du transistor, une qualité essentielle requise est sa rapidité de fonctionnement, qui est obtenue en réduisant les dimensions du composant. En dépit d'une baisse concomitante des tensions de polarisation, la forte réduction des longueurs de grille fait apparaître des champs électriques intenses dans le matériau semiconducteur. Ainsi, le champ électrique peut atteindre des valeurs supérieures à 200 kV/cm, et l'énergie moyenne des électrons, des valeurs supérieures à 1 eV.

En régime de champ fort, la fonction de distribution des électrons est amenée loin de l'équilibre thermodynamique. Tout nouveau modèle d'étude du transport doit être capable de produire une fonction de distribution réaliste de manière à décrire correctement les phénomènes de transport mettant en jeu des événements rares, mais ayant une incidence sur le fonctionnement du composant. C'est le cas de l'ionisation par choc, phénomène causé par des porteurs provenant de la partie hautement énergétique de la fonction de distribution.

L'ionisation par choc qui donne naissance à un courant supplémentaire, le courant d'ionisation, a un effet parasite dans la plupart des composants, mis à part des composants comme les photodétecteurs [STI77] et les diodes à avalanche [SZE81,] qui exploitent les forts courants d'ionisations conduisant à l'avalanche électronique.

Pour prévoir les performances des composants actuels, il est donc essentiel de déterminer le transport électronique à énergie élevée dans le matériau. En dépit des progrès dans les approches réalisées à l'aide des modèles de dérive-diffusion ('drift diffusion') et des modèles hydrodynamiques, la méthode Monte-Carlo demeure la plus précise pour traiter le régime d'électrons chauds [WAN93]. Pour une étude correcte du transport, il est également nécessaire d'utiliser une relation de dispersion réaliste quel que soit le domaine d'énergie. L'objet de ce travail est donc d'étudier le transport électronique à l'aide de la méthode Monte-Carlo à partir d'un modèle de structure de bande particulièrement adapté aux hautes énergies.

Le chapitre I présente les fondements théoriques nécessaires à l'étude du transport. L'équation de transport de Boltzmann régit la dynamique des porteurs, et la méthode statistique de Monte-Carlo en permet une résolution précise. Pour résoudre l'équation de transport, il faut connaître la relation de dispersion donnée par la structure de bande du semiconducteur, ainsi que les mécanismes d'interaction dont les probabilités dépendent de la structure de bande. En particulier, l'importance de la dépendance de la probabilité d'ionisation par choc vis-à-vis de la structure de bande à haute énergie a été mise en évidence assez récemment.

Des modèles de calcul de la structure de bande ont été élaborés. Les plus fréquemment utilisés sont soit rigoureux mais nécessitent un volume de calculs très important, soit simples mais décrivent mal la structure de bande réelle à haute énergie.

Le modèle classique des vallées, fréquemment utilisé à basse énergie pour sa simplicité, présente l'inconvénient de mal rendre compte de la complexité de la structure de bande réelle à haute énergie. Il apparaît donc nécessaire de proposer un modèle de bande original pour les III-V, qui ne recourt pas à un important volume de calculs, tout en donnant une description suffisamment précise de la structure de bande. Il est en particulier nécessaire de bien décrire la courbure de bande pour obtenir une densité d'états réaliste, conditionnant la section efficace totale de collision. En outre, la prise en compte de la seconde bande de conduction dans le modèle semble être rendue également nécessaire par la mise en évidence récente [STO94] de l'importance des bandes supérieures sur la probabilité d'ionisation par choc.

Le chapitre II propose un modèle original, modèle des "vallées étendues", prenant en compte les principales caractéristiques de la structure de bande à haute énergie dans les matériaux III-V, dont une anisotropie spécifique liée à la localisation des plus hauts maxima de bande.

Le modèle proposé est appliqué aux matériaux GaAs et InP. Les probabilités d'interaction en sont déduites. Pour l'ionisation par choc, il est présentée une méthodologie particulière de détermination de la probabilité d'ionisation à partir des résultats récents de la littérature. La mise en oeuvre du modèle dans la méthode Monte-Carlo est présentée, avec toutes ses particularités à haute énergie.

Le chapitre III étudie le transport électronique au moyen de la simulation Monte-Carlo, utilisant le modèle de structure de bande des vallées étendues.

La distribution en énergie est détaillée, car sa bonne prise en compte est nécessaire pour une description correcte du transport à haute énergie. La comparaison de cette grandeur, avec des résultats de la littérature utilisant la structure de bande réelle contribuera à valider le modèle des

vallées étendues. L'étude de la distribution des électrons dans les bandes va permettre de vérifier le rôle de la seconde bande de conduction sur le transport à haute énergie.

D'autres grandeurs importantes sont également présentées, comme la population électronique moyenne, l'énergie moyenne, la vitesse de dérive stationnaire, le libre parcours moyen, et le coefficient d'ionisation par choc.

Les résultats sur l'ionisation par choc sont analysés. En particulier, l'influence de la seconde bande de conduction sur ce phénomène est précisée.

BIBLIOGRAPHIE.

[STI77]: G.E.Stillman & C.M.Wolfe, in *Semiconductor and Semimetals*, edited by R.K.Willardson & A.C.Beers (Academic New York), n°12 (1977).

[SZE81]: S.M.SZE, 'Physics of Semiconductor Devices', éd. Wiley New-York (1981).

[WAN93]: X.Wang & al., *J. Appl. Phys* 73 n°7, 3339 (1993).

[STO94]: M.Stobbe & al., *Phys. Rev. B* 49 n°7, 4494 (1994).

CHAPITRE I

BASES DU TRANSPORT ÉLECTRONIQUE EN CHAMP FORT DANS LES SOLIDES CRISTALLINS SEMICONDUCTEURS

CHAPITRE I

BASES DU TRANSPORT ÉLECTRONIQUE EN CHAMP FORT DANS LES SOLIDES CRISTALLINS SEMICONDUCTEURS

SOMMAIRE DU CHAPITRE I

INTRODUCTION.	I-4
I-I) LA THÉORIE DU TRANSPORT ÉLECTRONIQUE.	I-6
I-I.1) ÉQUATION DE TRANSPORT DE BOLTZMANN (ETB).	I-6
I-I.1.1) EXPRESSION DE L'ETB.	I-6
I-I.1.2) DISCUSSION.	I-7
I-I.1.3) INTÉGRATION DIRECTE DE L'ETB.	I-8
I-I.2) MÉTHODE DE MONTE-CARLO POUR LA RÉOLUTION DE L'ETB	I-8
I-I.2.1) PRINCIPE DE LA MÉTHODE.	I-8
I-I.2.2) DESCRIPTION DE LA MÉTHODE.	I-8
I-II) LA STRUCTURE DE BANDE.	I-10
I-II.1) MODÈLE DU PSEUDO-POTENTIEL EMPIRIQUE. CALCUL DE LA STRUCTURE DE BANDE RÉELLE	I-10
I-II.1.1) DESCRIPTION ET GRANDEURS ASSOCIÉES À LA MÉTHODE DU PSEUDO- POTENTIEL EMPIRIQUE.	I-10
I-II.1.2) DIAGRAMME DE BANDE.	I-11
I-II.1.3) NOMBRE TOTAL D'ÉTATS DANS UNE BANDE ET DENSITÉ D'ÉTATS.	I-12
I-II.1.4) UTILISATION DE LA STRUCTURE DE BANDE RÉELLE.	I-15
I-II.2) MÉTHODE K.p ET MODÈLE CLASSIQUE DES VALLÉES.	I-16
I-II.2.1) DESCRIPTION SOMMAIRE ET PRINCIPAUX RÉSULTATS ANALYTIQUES DE LA MÉTHODE K.p.	I-16
I-II.2.3) MODÈLE DES VALLÉES.	I-18
I-II.3) MODÈLES DE BANDES À HAUTE ÉNERGIE DANS LE SILICIUM.	I-21
I-II.3.1) MODÈLE DE R. BRUNETTI & C. JACOBONI [BRU89].	I-22
I-II.3.2) MODÈLE DE T. VOGELSANG & W. HÄNSCH [VOG91].	I-22
I-II.3.3) MODÈLE DE X. WANG & AL. [WAN93].	I-23
I-II.3.4) NÉCESSITÉ D'UN AUTRE MODÈLE POUR LES MATÉRIAUX III-V.	I-23

I-III)LES MÉCANISMES D'INTERACTION.....I-24

I-III.1)LES PRINCIPAUX MÉCANISMES PHYSIQUES..... I-24

I-III.1.1)DESCRIPTION SOMMAIRE DES PRINCIPAUX MÉCANISMES
DE DIFFUSION.I-25

I-III.1.2)EXPRESSIONS GÉNÉRALES DES PROBABILITÉS D' INTERACTION.....I-28

I-III.2)L'IONISATION PAR CHOC. I-29

I-III.2.1)DESCRIPTION PHYSIQUE.I-29

I-III.2.2)PROBABILITÉS D'IONISATION PAR CHOC.....I-31

CONCLUSIONI-49

BIBLIOGRAPHIE I-50

INTRODUCTION

Le § I-I a pour objet de présenter les équations fondamentales permettant de décrire les phénomènes de transport dans un matériau semiconducteur.

La description de tout phénomène de physique du solide passe par la résolution explicite ou implicite de l'équation de Schrödinger. La notion de quasi-impulsion déduite de l'approximation semi-classique de l'équation de Schrödinger permet de résoudre indirectement cette équation compliquée via la résolution de l'équation cinétique de transport de Boltzmann (ETB). Cette équation caractérise la modification de l'état d'un système de particules à travers l'évolution de la fonction de distribution particulaire. L'ETB est présentée ainsi que la méthode de Monte-Carlo qui en permet une résolution stochastique.

Comme la résolution des équations du mouvement dans un semiconducteur nécessite la connaissance de sa structure de bande, l'objet du § I-II est de présenter des méthodes de calcul de la structure de bande (SDB).

Un calcul complet de la SDB a pour objet de déterminer, dans une bande, les énergies associées à chaque point de l'espace réciproque.

Les méthodes de calcul de la SDB sont basées sur la résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps. Nous distinguerons trois types de modèles de calcul de la SDB.

Le premier type de modèle consiste à faire un calcul prenant en compte tous les détails de la SDB. C'est le cas de la méthode du pseudo-potentiel empirique qui est largement utilisé pour les études de transport électronique en champ fort.

Le second type de modèle consiste à utiliser la notion de masse effective introduite par la méthode **K.p** brièvement présentée. C'est le cas du modèle classique des vallées fréquemment utilisé à basse énergie pour sa simplicité.

Malheureusement, lorsque l'énergie de l'électron est élevée, ce qui est le cas en champ fort, le modèle classique des vallées ne peut plus être utilisé. Il faut alors utiliser un modèle plus précis tel que le modèle du pseudo-potentiel empirique, ou bien développer un modèle plus simple qui rende suffisamment bien compte du transport en champ fort. Ce travail a été réalisé assez récemment, spécialement pour le Silicium [BRU89] [VOG91] [WAN93]. Ce troisième type de modèle est présenté, mais nous verrons que pour des raisons de topologie dans l'espace réciproque, il ne peut pas être utilisé tel quel pour les semiconducteurs III-V comme GaAs.

Outre la connaissance de la structure de bande (SDB), la résolution des équations du mouvement suppose de connaître les mécanismes de diffusion modifiant la section efficace totale de

collision avec les porteurs libres, qui se traduit par une probabilité de collision par unité de temps (*). C'est ce qui est réalisé au § I-III.

Les principaux mécanismes de diffusion sont présentés, parmi lesquels l'ionisation par choc qui est d'une grande importance en champ fort. Ce mécanisme complexe a fait l'objet de nombreuses études. On distingue trois types de méthodes de calcul de sa probabilité.

Le premier type de méthode calcule la probabilité d'ionisation par choc à partir de son expression la plus générale, dont la formulation est assez compliquée.

Le second type de méthode considère un moyennage de l'expression générale de la probabilité d'ionisation par choc par rapport aux états (vecteur d'onde et bande). On obtient alors une expression ne dépendant que de l'énergie, dont T.Kunikiyo & al. [KUN94] ont montré qu'elle peut être utilisée en régime stationnaire.

Ces deux premiers types de méthodes de calcul de la probabilité d'ionisation sont complexes, car ils utilisent la structure de bande complète, dont le calcul ne peut être que numérique.

Le troisième type de méthodes de calcul de la probabilité d'ionisation par choc, consiste à effectuer une approximation analytique de la structure de bande.

(*) Dans tout ce qui suit, cette "probabilité par unité de temps" sera désignée par commodité "probabilité".

I-I) LA THÉORIE DU TRANSPORT ÉLECTRONIQUE.

I-I.1) ÉQUATION DE TRANSPORT DE BOLTZMANN (ETB).

La connaissance de l'évolution du système d'électrons est donnée par la fonction de distribution $f(\mathbf{r}, \mathbf{K}, t)$, fournissant la proportion d'électrons libres présents à un instant 't' dans un volume élémentaire de l'espace des phases autour du point $(\mathbf{r}, \mathbf{K})$.

La valeur moyenne d'une grandeur physique observable 'A' associée au système à un instant 't', peut alors s'en déduire par intégration:

$$\langle A \rangle (t) = \iiint \iiint A(\mathbf{r}', \mathbf{K}', t) f(\mathbf{r}', \mathbf{K}', t) d^3 \mathbf{r}' d^3 \mathbf{K}' \quad (\text{I-1})$$

I-I.1.1) EXPRESSION DE L'ETB.

Le point de départ des théories du transport est l'équation quanto-mécanique de Liouville-Von Neumann [BAC86]. Le théorème de Liouville [KIR75], affirme que le volume de phase reste invariable lorsque le système se déplace le long d'une trajectoire de phases:

$$\frac{df(\mathbf{r}, \mathbf{K}, t)}{dt} = 0$$

Cette condition conduit à l'ETB:

$$\left(\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{K}, t)}{\partial t} \right)_{\text{ch}} + \left(\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{K}, t)}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{K}, t)}{\partial t} \quad (\text{I-2})$$

Dans l'ETB (I-2), le taux de changement de la fonction de distribution dû au déplacement des porteurs et à l'accélération des charges par l'action des forces extérieures $\mathbf{f}_e$ vaut:

$$\left(\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{K}, t)}{\partial t} \right)_{\text{ch}} = -\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{K}, t) - \frac{\mathbf{f}_e}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{K}} f(\mathbf{r}, \mathbf{K}, t)$$

Le taux de changement de la fonction de distribution dû aux interactions vaut:

$$\left(\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{K}, t)}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = -\frac{\mathbf{f}_i}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{K}} f(\mathbf{r}, \mathbf{K}, t)$$

Dans cette expression, $\mathbf{f}_i$ est la résultante des forces intérieures dues aux défauts de toutes sortes perturbant le champ périodique idéal du réseau: lacunes, atomes d'impureté, vibrations thermiques du réseau etc..

Le terme de collision associé à la section efficace totale de collision, définit pour un électron sa probabilité de subir une diffusion. En pratique le terme de collision n'est pas exprimé en fonction des forces intérieures difficilement explicitables, mais en fonction d'un terme intégral renfermant les différentes perturbations du potentiel périodique.

Soit $w(\mathbf{K}, \mathbf{K}') d^3 \mathbf{K}'$, la probabilité de transition par unité de temps de passer d'un état $\mathbf{K}$ au point $\mathbf{r}$, à un état $\mathbf{K}'$ contenu dans le volume $d^3 \mathbf{K}'$. Le terme de collision s'écrit:

$$\left(\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{K}, t)}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = \frac{2}{(2\pi)^3} \iiint_{\text{BZ}} w(\mathbf{K}', \mathbf{K}) f(\mathbf{r}, \mathbf{K}', t) (1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{K}, t)) d^3 K - \iiint_{\text{BZ}} w(\mathbf{K}, \mathbf{K}') f(\mathbf{r}, \mathbf{K}, t) (1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{K}', t)) d^3 K' \quad (\text{I-3})$$

L'intégration du second membre de la relation (I-3) est étendue à toute la zone de Brillouin (BZ).

Si $w(\mathbf{K}, \mathbf{K}') = w(\mathbf{K}', \mathbf{K})$, l'expression du terme de collision (I-2) devient:

$$\left(\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{K}, t)}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = \frac{2}{(2\pi)^3} \iiint_{\text{BZ}} w(\mathbf{K}, \mathbf{K}') (f(\mathbf{r}, \mathbf{K}', t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{K}, t)) d^3 K'.$$

En régime stationnaire, l'ETB (I-2) devient [CON66]:

$$\left(\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{K}, t)}{\partial t} \right)_{\text{ch}} + \left(\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{K}, t)}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = 0$$

Une fois connue la fonction de distribution, on peut calculer la valeur moyenne des observables comme l'énergie ou la vitesse en régime stationnaire.

I-I.1.2) DISCUSSION.

Fondamentalement l'ETB est une équation de continuité dans l'espace des phases qui est associée à l'approximation mono-particulaire. Les hypothèses de base sont les suivantes [BAC82][BAC86]:

- i) L'équation de Schrödinger à une particule est applicable.
- ii) La théorie des bandes est applicable.
- iii) Le champ électrique varie lentement sur une échelle de distance comparable aux dimensions physiques du paquet d'onde décrivant le mouvement d'une particule.
- iv) Les collisions sont supposées instantanées. En particulier, cela impose que leur durée soit suffisamment courte pour que l'action des champs extérieurs pendant l'interaction soit négligeable.
- v) Les probabilités de diffusion sont indépendantes du champ électrique appliqué.

Par essence l'ETB est associée à une représentation semi-classique du transport de charge dans les semi-conducteurs. Le mouvement de l'électron est le résultat d'une série de dérives (ou vols libres) dues au champ, suivies de diffusions. Le vol libre est déterministe et dépend de la distribution spatiale du champ. Par contre, la durée de dérive et la nature des processus de diffusion sont des quantités stochastiques qui peuvent être exprimées en terme de taux de transition dû aux différents processus.

I-I.1.3)INTÉGRATION DIRECTE DE L'ETB.

L'intégration directe de l'ETB s'effectue de manière itérative en partant d'une valeur initiale de la fonction de distribution. Typiquement, pour résoudre ces équations en régime stationnaire on part de la fonction de distribution à l'équilibre thermodynamique donnée par la fonction de distribution de Fermi-Dirac ou de Maxwell-Boltzmann, et pour les résoudre en régime transitoire on part de la fonction de distribution obtenue en régime stationnaire.

A l'issue d'un processus itératif convergent, la fonction de distribution reflétant l'état de tout le système de particules est obtenue.

Comme l'ETB est une équation différentielle lourde à intégrer directement, la plupart des auteurs lui préfèrent une autre méthode particulière: la méthode de Monte-Carlo.

Il a été démontré par W.Fawcett & al. [FAW70] que la fonction de distribution résultant de la méthode de Monte-Carlo, satisfait à l'ETB.

I-I.2)MÉTHODE DE MONTE-CARLO.

I-I.2.1)PRINCIPE DE LA MÉTHODE.

La méthode de Monte-Carlo est une méthode statistique de résolution de l'équation de transport de Boltzmann (ETB), qui consiste à suivre l'évolution au cours du temps d'un électron ou d'un ensemble d'électrons dans un matériau semiconducteur.

Le mouvement d'un électron est constitué d'une succession de vols libres sous l'action du champ de force extérieur $\mathbf{f}_e$, entrecoupés par des interactions instantanées de nature stochastique.

I-I.2.2)DESCRIPTION DE LA MÉTHODE.

Une phase de vol libre est déterminée pour chaque électron en intégrant simultanément par rapport au temps les équations du mouvement dans l'espace réciproque et dans l'espace réel:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{f}_e \\ \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{K}) \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{(I - 4)} \\ \text{(I - 5)} \end{array}$$

L'équation (I-4) est l'équation du mouvement dans l'espace réciproque. Elle est similaire à la loi de la dynamique de la mécanique classique, mais avec la masse effective de l'électron à la place de la masse de l'électron libre, et la quasi-impulsion, $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{K}$, à la place de la quantité de mouvement classique.

Sous l'action du champ de force extérieur $\mathbf{f}_e$, le vecteur d'onde électronique est modifié, et l'électron effectue un vol libre dans l'espace réel suivant l'équation (I-5). Le second membre de cette équation est l'expression générale de la vitesse de groupe dans le matériau. Elle dépend de la

relation de dispersion $E(\mathbf{K})$ donnée par la connaissance de la structure de bande du semiconducteur (SDB).

A l'issue d'un vol libre et sous l'action des forces intérieures, un électron subit une collision élastique ou inélastique selon qu'il y a échange ou non d'énergie avec un centre de diffusion, avec une probabilité dépendant de la nature du mécanisme de diffusion.

D'un point de vue pratique, la probabilité de collision associée à un centre de diffusion étant exprimée sous une forme moyennée en fonction de l'énergie, il est ici aussi nécessaire de connaître l'énergie $E(\mathbf{K})$ donnée par la SDB pour calculer cette probabilité.

Lorsqu'une interaction se produit, le vecteur d'onde électronique est réorienté suivant une loi de distribution angulaire dépendant de l'interaction et de l'énergie. L'inversion de la relation de dispersion est alors nécessaire; elle permet de connaître la nouvelle valeur du vecteur d'onde $\mathbf{K}$ en fonction de l'orientation de ce vecteur et de l'énergie électronique à l'issue de l'interaction.

Une nouvelle phase de vol libre-interaction peut alors commencer.

REMARQUES.

Dans la méthode de Monte-Carlo de résolution de l'ETB, on détermine directement une observable A par des moyennes statistiques $\langle A \rangle(t)$ lors de l'intégration des équations du mouvement (I-4) et (I-5). La détermination de la distribution électronique $f(\mathbf{r}, \mathbf{K}, t)$ peut être réalisée, mais elle n'est pas obligatoire contrairement aux méthodes de résolution directes de l'ETB, pour lesquelles la valeur moyenne d'une observable doit être calculée par la relation (I-1).

Dans une simulation ayant pour objet l'étude physique du transport électronique dans le matériau en volume, on ne prend en compte le déplacement de l'électron dans l'espace réel que pour le calcul du libre parcours moyen, car la connaissance du détail de ce déplacement ne nous apporterait rien pour cette étude. Par contre, il n'en va pas de même dans des simulations faisant intervenir des hétérostructures donc le franchissement de barrières de potentiels dans l'espace réel, ou dans une simulation de composant électronique, où l'on devra en tenir compte.

Les raisonnements précédents portent sur des électrons, mais auraient pu être également tenus pour des trous.

La plupart des simulations Monte-Carlo du transport électronique utilisent une approximation simple de la relation de dispersion $E(\mathbf{K})$ valable à basse énergie. Aux énergies élevées cette approximation n'est plus valable et il faudra utiliser une description plus précise de la SDB.

I-II) LA STRUCTURE DE BANDE.

I-II.1) MODÈLE DU PSEUDO-POTENTIEL EMPIRIQUE. CALCUL DE LA STRUCTURE DE BANDE RÉELLE.

I-II.1.1) DESCRIPTION ET GRANDEURS ASSOCIÉES À LA MÉTHODE DU PSEUDO-POTENTIEL EMPIRIQUE.

Le principe général de la méthode consiste à déterminer l'énergie $E_n(\mathbf{K})$ à l'intérieur d'une bande n , par la recherche des valeurs propres de l'équation de Schrödinger dans laquelle on remplace le potentiel $U(\mathbf{r})$ par un pseudo-potentiel $V_p(\mathbf{r})$ décrivant l'environnement de l'électron.

Le pseudo-potentiel $V_p(\mathbf{r})$ est déterminé en utilisant les données expérimentales telles que le spectre de réflexion ou encore le spectre de la partie imaginaire de la fonction diélectrique.

La connaissance des pics de réflexion permet de calculer les valeurs propres $E_n(\mathbf{K})$ [KIR75].

L'équation de Schrödinger s'écrit:

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_p(\mathbf{r}) \right] \Psi_n(\mathbf{K}) = E_n(\mathbf{K}) \Psi_n(\mathbf{K})$$

Le pseudo-potentiel $V_p(\mathbf{r})$ s'exprime par:

$$V_p(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V(\mathbf{G}) S(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}$$

Dans cette expression du pseudo-potentiel, $\mathbf{G}$ est un vecteur du réseau réciproque, $S(\mathbf{G})$ représente le facteur de structure, et $V(\mathbf{G})$ est le facteur de forme du pseudo-potentiel.

On montre que le pseudo-potentiel peut se mettre sous la forme:

$$V_p(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \left(S^S(\mathbf{G}) V^S(\mathbf{G}) + i S^A(\mathbf{G}) V^A(\mathbf{G}) \right) e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad (\text{I-6})$$

avec S pour symétrique et A pour antisymétrique.

Dans le cas d'un matériau de symétrie du type diamant ou zinc-blende, les facteurs de structure s'écrivent:

$$S^S(\mathbf{G}) = \cos(\mathbf{G}\mathbf{t}), \text{ et } S^A(\mathbf{G}) = \sin(\mathbf{G}\mathbf{t})$$

Dans cette expression, $\mathbf{t} = a\left(\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}\right)$, où ' a ' est le paramètre de maille,

L'expression (I-6) du pseudo-potentiel, d'un matériau binaire permet également d'obtenir la structure de bande, en exprimant les facteurs de forme du composé binaire en fonction des facteurs de forme de chacun de ses deux constituants. Ainsi, les facteurs de forme d'un matériau III-V par exemple, s'écrivent:

$$\begin{cases} V^S(\mathbf{G}) = \frac{1}{2}(V_{III}(\mathbf{G}) + V_V(\mathbf{G})) & (I-7) \\ V^A(\mathbf{G}) = \frac{1}{2}(V_{III}(\mathbf{G}) - V_V(\mathbf{G})) & (I-8) \end{cases}$$

Dans les expressions (I-7) et (I-8) des facteurs de forme symétriques et antisymétriques, les termes V_{III} et V_V désignent respectivement les facteurs de forme des atomes du composé III et du composé V. C'est le cas en particulier pour le matériau GaAs.

La détermination des potentiels symétriques et antisymétriques se fait par un ajustement de ces paramètres aux valeurs expérimentales des distances inter-bandes, aux principaux points de symétrie du cristal.

I-II.1.2) DIAGRAMME DE BANDE.

Un diagramme de bande est souvent associé à un calcul de structure de bande réelle, comme celle obtenue avec la méthode du pseudo-potentiel, pour en donner un aperçu assez synthétique.

I-II.1.2.1) DÉFINITION.

Les résultats d'un calcul de structure de bande fournissent la relation $E_v(\mathbf{K})$ pour chaque bande v . Pour être complets, ils devraient être représentés sur un support à quatre dimensions puisque dans la relation de dispersion, le vecteur d'onde appartient à l'espace réciproque à trois dimensions.

On représente communément la relation de dispersion en fonction de la projection du vecteur d'onde le long des trois directions cristallographiques principales Λ , Δ , et Σ de l'espace réciproque.

La figure I-1 représente la zone de Brillouin avec les points principaux placés dans la zone réduite constituant $1/48^e$ de la zone de Brillouin complète, cette dernière s'en déduisant par symétrie.

L'annexe I indique la position précise de ces points avec l'ordre et la multiplicité des directions cristallographiques principales. Le choix de ces directions tient au fait que le champ dans l'espace réciproque est toujours orienté le long de l'une de ces trois directions principales.

Le diagramme obtenu est représenté par un ensemble de courbes représentant chacune une image de la structure de bande le long des trois directions principales.

La figure I-2 représente un tel diagramme de bande dans le cas de GaAs à 300°K, calculé par une méthode de pseudo-potentiel par M.V.Fischetti [FIS88].

I-II.1.2.2) LECTURE DU DIAGRAMME DE BANDE.

On prendra, pour illustrer le propos, le cas de la première bande de conduction illustrée par la courbe inférieure de la figure I-2.

A partir du centre de la zone de Brillouin situé au point Γ , sont représentées les projections du vecteur d'onde le long de chacune des trois directions principales Λ , Δ , et Σ , jusqu'au minimum d'énergie situé respectivement en L, X, et R. En lisant le diagramme de gauche à droite;

- on part du point L, et on suit la relation de dispersion le long de l'axe principal Λ jusqu'au point Γ , en passant par un maximum intermédiaire,
- du point Γ , on suit la relation de dispersion le long de l'axe principal Δ jusqu'au point X en passant par un autre maximum intermédiaire d'énergie double du précédent,
- du point X on suit la relation de dispersion le long de l'axe Σ jusqu'au minimum Γ , en passant par un autre maximum intermédiaire d'énergie voisine du précédent.

Le point U est confondu sur le dessin avec le point K, de même que devrait l'être le point R, extérieur à la zone de Brillouin dans la direction Σ , avec le point X. En réalité ces points ne sont pas confondus mais pour des raisons de symétrie, la relation de dispersion le long de l'axe XU étant équivalente à celle le long de l'axe KR [BLA82], on peut représenter ces points sur le même diagramme.

I-II.1.3) NOMBRE TOTAL D'ÉTATS DANS UNE BANDE ET DENSITÉ D'ÉTATS.

I-II.1.3.1) NOMBRE TOTAL D'ÉTATS.

Le nombre total d'états par bande dépend de la symétrie du cristal et de son paramètre de maille 'a' qui mesure la distance entre deux mailles successives.

Dans un cristal cubique à faces centrées, le nombre total d'états par unité de volume dans une bande vaut :

$$N_{\infty} = \frac{8}{a^3}$$

I-II.1.3.2) DENSITÉ D'ÉTATS.

La densité d'états (DOS) $D(\epsilon)$ est une grandeur se déduisant directement de la structure de bande.

A l'origine, le calcul de la densité d'états à une certaine énergie ϵ s'obtient par dérivation du nombre d'états $N(\epsilon)$ présents du fond de bande à cette énergie:

$$D(\epsilon) = \frac{dN(\epsilon)}{d\epsilon}$$

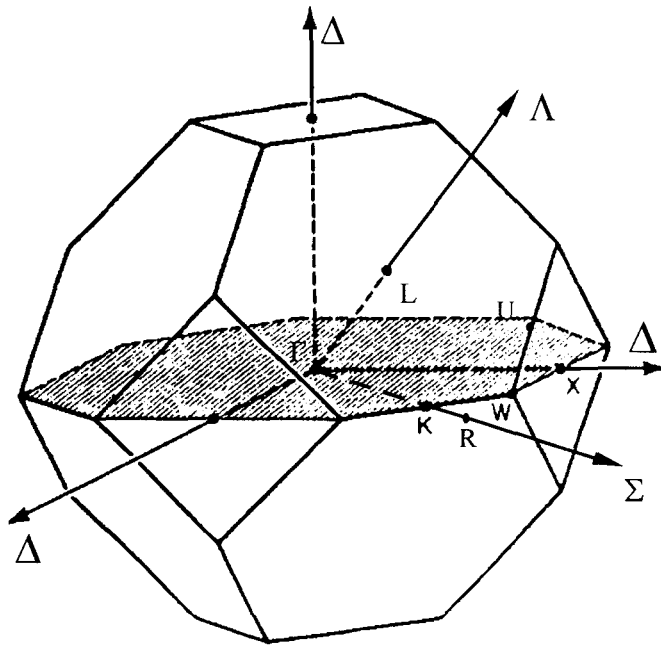


Figure I-1. Zone de Brillouin . Un plan ΓXW est figuré en grisé. Les trois axes principaux sont représentés dans le premier quadrant, ainsi que les points principaux dans la zone réduite. Le point R est extérieur à cette zone.

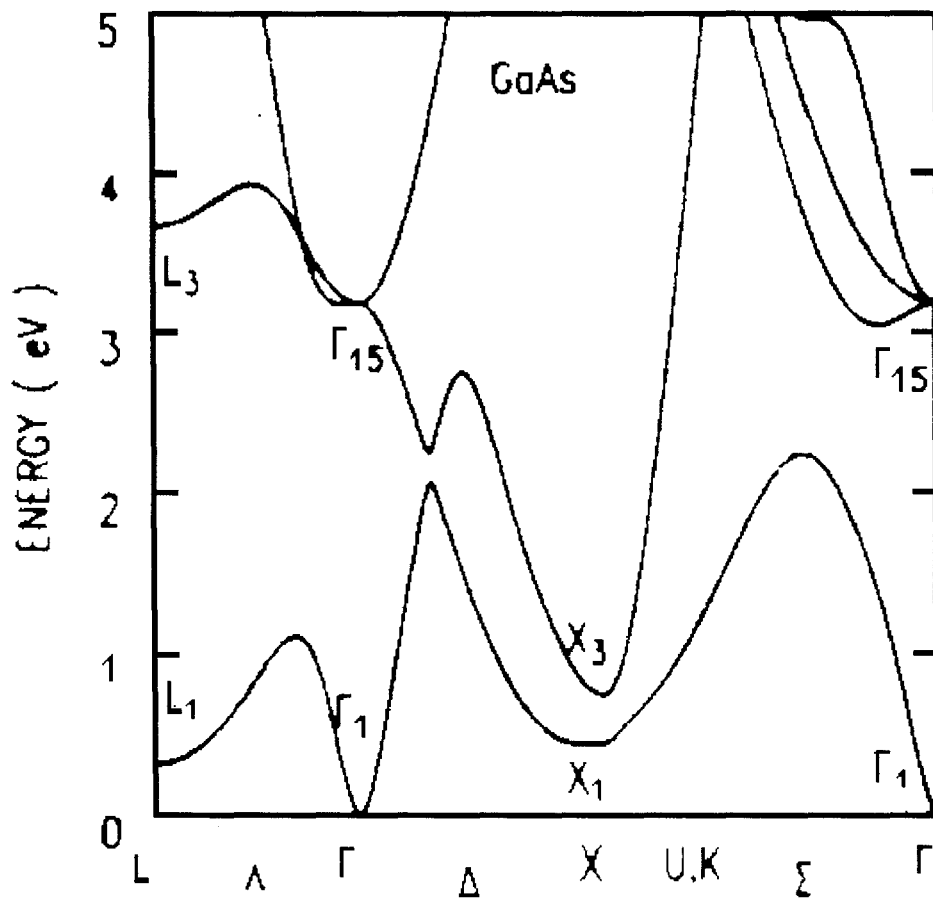


Figure I-2. Diagramme de bande de GaAs à 300°K, obtenu par la méthode du pseudo-potentiel d'après M.V.Fischetti [FIS88].

La DOS mesure le nombre maximum d'états disponibles par unité d'énergie et de volume au voisinage d'une certaine énergie.

Elle peut s'exprimer directement à partir de la relation de dispersion.

Pour des fermions dans un matériau en volume la densité d'états vaut:

$$D(\epsilon) = \frac{2}{(2\pi)^3} \iiint d_3\mathbf{k} \delta(\epsilon'(\mathbf{k}) - \epsilon)$$

Dans cette expression, δ est la distribution de Dirac.

I-II.1.3.3) EXEMPLE DE DENSITÉ D'ÉTATS.

La figure I-3 présente un exemple de densité d'états dans GaAs massif, incluant l'ensemble des bandes de conduction, et calculée à partir d'une structure de bande obtenue par la méthode du pseudo-potentiel empirique. Les deux principaux maxima de densité d'états sont dus aux contribution de la première et de la deuxième bande de conduction.

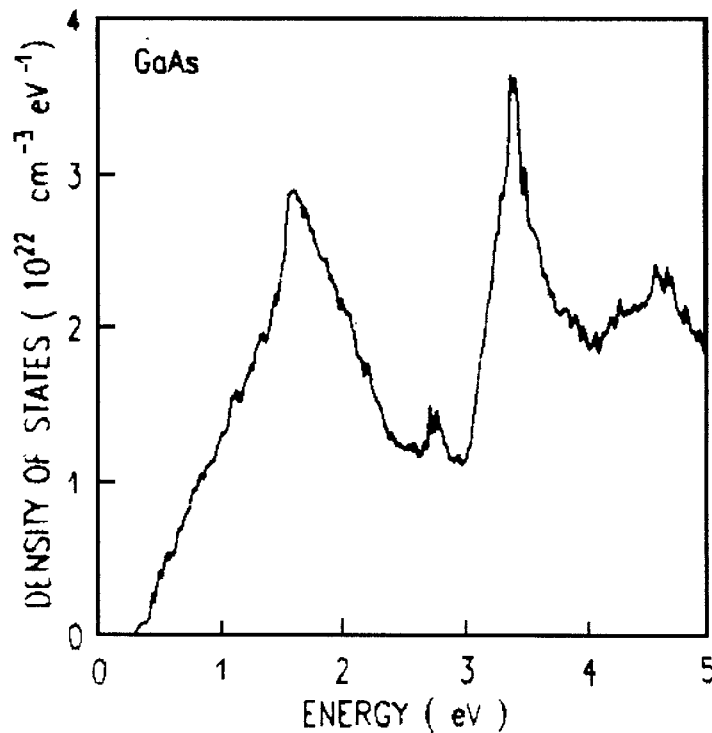


Figure I-3. Densité d'états de conduction calculée numériquement par M.V.Fischetti [FIS88], à partir d'une structure de bande obtenue par la méthode du pseudo-potentiel empirique.

I-II.1.4)UTILISATION DE LA STRUCTURE DE BANDE (SDB) RÉELLE.

I-II.1.4.1)PROBLÈMES DE L'UTILISATION DE LA SDB RÉELLE DANS UN PROGRAMME MONTE-CARLO.

En pratique, pour mettre en oeuvre la structure de bande réelle dans un programme de simulation de type Monte-Carlo, il est nécessaire de discrétiser préalablement la zone de Brillouin en un maillage aux noeuds desquels sont mémorisées l'énergie et la vitesse de groupe.

Pour des raisons de capacité mémoire, il peut être nécessaire de ne considérer que la zone de Brillouin réduite, qui rappelons-le, constitue $1/48^e$ de la zone de Brillouin complète. Lors de chaque phase de vol libre-interaction, la détermination de l'énergie et de la vitesse de groupe nécessite alors de ramener le vecteur d'onde électronique dans la zone réduite par les opérations de symétrie appropriées. C'est ce qui est réalisé par la plupart des auteurs, comme H.Shichijo & K.Hess [SHI81] ou M.V.Fischetti [FIS88].

L'utilisation d'une structure de bande réelle, comme celle obtenue avec la méthode du pseudo-potentiel, a pour principal inconvénient de consommer beaucoup de temps de calcul. En effet, la partie la plus coûteuse en temps calcul est relative à la détermination du nouveau vecteur d'onde après que l'électron a subi une interaction. On doit en effet déterminer la surface isoénergie sur laquelle se trouve l'électron pour y chercher le vecteur d'onde correspondant à sa nouvelle orientation. Certains auteurs [WAN93] évaluent ces deux étapes à 95% du temps CPU.

Le temps mis par l'utilisation de la SDB réelle la rend difficilement utilisable dans la simulation de composants électroniques.

I-II.1.4.2)CHAMP D'APPLICATION PRATIQUE DE LA SDB RÉELLE.

En champ faible, les régions de l'espace réciproque les plus peuplées sont celles qui sont situées au voisinage des minima. La méthode du pseudo-potentiel empirique est lourde alors qu'il est possible d'utiliser une méthode plus simple et rapide basée sur l'approximation de la masse effective: le modèle classique des vallées.

Par contre en champ fort, les électrons occupent toute la zone de Brillouin, et il n'est plus possible d'utiliser le modèle classique des vallées pour une description physique des phénomènes. La plupart des auteurs recourent à la structure de bande réelle, souvent calculée par la méthode du pseudo-potentiel, pour étudier précisément les phénomènes de transport à haute énergie [SHI81] [CHA83] [FIS88] [FIS91] [BUD92] (pour GaAs) [FIS88] [FIS91] [KUN94] [WAN94] (pour Si).

Des auteurs [BRU89][VOG91][WAN93] ont montré la possibilité d'éviter le recours à la SDB réelle à haute énergie, par l'utilisation d'une structure de bande associée à une densité d'états

réaliste. J.Bude & K.Hess [BUD92] ont souligné la nécessité d'une étroite association entre la densité d'états réaliste et le modèle de structure de bande.

I-II.2) MÉTHODE **K.p** ET MODÈLE CLASSIQUE DES VALLÉES.

La méthode **K.p** permet de calculer la structure de bande d'un semi-conducteur au voisinage des minima d'énergie de l'espace réciproque. Elle introduit la notion de masse effective au voisinage de ces points, ce qui permet, dans l'Hamiltonien de l'équation de Schrödinger, de supprimer le potentiel cristallin, et de substituer la masse effective à la masse de l'électron libre. La masse effective de l'électron inclut donc implicitement l'effet du potentiel cristallin. On montre plus généralement [KIR75] que l'approximation de la masse effective est également valable au voisinage des maxima.

Le modèle classique des vallées est un modèle purement analytique de la structure de bande basé sur l'approximation de la masse effective au voisinage des minima. Il permet d'y obtenir simplement et rapidement une modélisation assez précise de la relation de dispersion. Au voisinage du minimum d'énergie situé au point central, le modèle des vallées utilise certains résultats analytiques de la méthode **K.p**.

I-II.2.1) DESCRIPTION SOMMAIRE ET PRINCIPAUX RÉSULTATS ANALYTIQUES DE LA MÉTHODE **K.p**.

Si l'on connaît les solutions de l'équation de Schrödinger à un électron au voisinage des minima, il est possible d'obtenir les solutions en leur voisinage immédiat, en considérant la quantité

$\frac{\hbar}{m_0} \mathbf{K.p}$ comme une perturbation de l'Hamiltonien de l'équation de Schrödinger [RID81]. Dans

cette quantité, m_0 , est la masse de l'électron libre. Les valeurs propres de l'équation de Schrödinger donnent la relation de dispersion au voisinage d'un minimum. La méthode **K.p** introduit la notion

de masse effective via le tenseur de l'inverse de la masse effective, $\frac{1}{m_{ij}^*}$. La relation de dispersion

dans une bande 'n' s'écrit:

$$E_n(\mathbf{K}) = E_n(0) + \sum_{i,j} \frac{\hbar^2}{2m_{ij}^*} K_i K_j \quad (I-9)$$

Lorsque le tenseur est diagonal, la surface d'isoénergie obtenue à l'aide de la relation de dispersion (I-9) est un ellipsoïde. Les composantes du tenseur sont les inverses des masses effectives longitudinales et transverses à l'axe principal associé au minimum.

La méthode **K.p** donne une expression analytique de la masse effective m_{Γ}^* en fonction de la masse de l'électron libre m_0 , de l'énergie $E_{0\Gamma}$ du gap, et de l'énergie Δ_0 de séparation entre la bande de trou lourd et la bande de splitt-off, et de l'intégrale de recouvrement I_{cv}^2 entre la bande de valence et la bande de conduction:

$$m_{\Gamma}^* = \frac{m_0}{1 + \frac{2I_{cv}^2}{3m_0} \left(\frac{2}{E_{0\Gamma}} + \frac{1}{E_{0\Gamma} + \Delta_0} \right)} \quad (I-10)$$

La relation de dispersion peut être approchée au voisinage du point central Γ , à l'aide de la masse effective (I-10), après avoir posé $k = K$ et $\varepsilon = E$:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\Gamma}^*} = \varepsilon(1 + \alpha_{\Gamma}\varepsilon + \beta_{\Gamma}\varepsilon^2) \quad (I-11)$$

$$\left\{ \alpha_{\Gamma} = \frac{1}{E_{0\Gamma}} \left(1 - \frac{m_{\Gamma}^*}{m_0} \right)^2 \right. \quad (I-12)$$

$$\left\{ \beta_{\Gamma} = -\frac{2}{E_{0\Gamma}^2} \frac{m_{\Gamma}^*}{m_0} \left(1 - \frac{m_{\Gamma}^*}{m_0} \right) \right. \quad (I-13)$$

Dans les relations (I-12) et (I-13), α_{Γ} et β_{Γ} sont des coefficients de non-parabolicité, respectivement du premier et du second ordre.

Dans GaAs à 300°K, le rapport de la masse effective au point central à la masse de l'électron libre vaut $\frac{m_{\Gamma}^*}{m_0} = 0.063$, et le gap vaut $E_{0\Gamma} = 1.42$ eV. On en déduit que les coefficients de non-parabolicité du premier et du second ordre valent respectivement: $\alpha_{\Gamma} = 0.62$ eV⁻¹, et $\beta_{\Gamma} = -0.06$ eV⁻².

A basse énergie, jusqu'à 0.3 eV, il est possible de limiter le développement du second membre de la relation de dispersion implicite (I-11) au coefficient de non-parabolicité du premier ordre α_{Γ} . La quasi totalité des simulations du transport électronique se limite à ce coefficient de non-parabolicité, car le transport y est étudié à basse énergie.

A haute énergie, l'obtention d'un coefficient du second ordre β_{Γ} négatif dans GaAs, est en contradiction avec la forme de plus en plus fortement non-parabolique de la bande lorsque l'énergie augmente. En outre, d'après M.V.Fischetti [FIS88], l'utilisation d'un coefficient du second ordre positif et isotrope, se heurte à la forte anisotropie de la structure de bande à partir de 0.7 eV. Dans sa simulation Monte-Carlo, M.V.Fischetti [FIS88] a changé la relation de dispersion (I-11) en prenant une valeur α_{Γ} plus grande à partir de 0.3 eV. Nous verrons au chapitre II, que nous procéderons différemment pour rendre compte au mieux des états situés à un voisinage éloigné du point central.

En conclusion, la méthode **K.p**, fournit une bonne approximation analytique de la structure de bande au voisinage du point central, pour la masse effective m_{Γ}^* , et pour le coefficient de non-parabolicité du premier ordre α_{Γ} . Au voisinage des autres minima de l'espace réciproque, les masses effectives et les coefficients de non-parabolicité doivent être ajustés aux caractéristiques de structure de bande (SDB) réelle. C'est ce qui est réalisé par le modèle classique des vallées, avec un assez bon ajustement de la SDB réelle dans un voisinage assez proche des minima.

I-II.2.3)MODÈLE DES VALLÉES.

I-II.2.3.1)PRÉSENTATION.

On définit une vallée comme étant l'ensemble des points appartenant au voisinage d'un minimum de l'espace réciproque.

En pratique les minima choisis par la plupart des auteurs sont les points $\Gamma 1$, $L1$, et $X1$ de la première bande de conduction.

Le voisinage d'un point $\Gamma 1$, qui est unique, constitue une vallée.

Le voisinage des points $L1$ et $X1$ situés en bordure de la zone de Brillouin constitue une demi-vallée latérale. Chaque direction cristallographique principale possède son homologue dans le sens opposé. A chaque axe portant une direction principale, sont donc associés deux minima symétriques par rapport au point central. On peut donc regrouper les deux demi-vallées associées, en une vallée, dite vallée latérale ou vallée satellite. La multiplicité d'une vallée latérale est le nombre de vallées ayant le même type d'axe de symétrie. Elle correspond à la multiplicité de l'axe principal associé. Ainsi, la multiplicité d'une vallée 'L' vaut $M_L = 4$, et celle d'une vallée 'X' vaut $M_X = 3$.

Les vallées latérales d'une bande, ayant un axe de symétrie de même type sont appelées vallées équivalentes.

I-II.2.3.2)EXPRESSION DE LA RELATION DE DISPERSION EN VALLÉE.

On considère une relation de dispersion de type non parabolique et sphérique ou ellipsoïdal au voisinage de chaque minimum $\Gamma 1$, $L1$, et $X1$ de la première bande de conduction.

La non-équivalence des vallées implique l'existence d'une relation de dispersion pour chaque type de vallée.

Les calculs par une méthode de pseudo-potentiel empirique [COH66][CHE76][FIS91] établissent que les vallées latérales peuvent être approchées par des ellipsoïdes au voisinage du fond de vallée.

$$\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_{//}^2}{m_{//}^*} + \frac{k_{\perp 1}^2 + k_{\perp 2}^2}{m_{\perp}^*} \right) = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon) \quad (\text{I-14})$$

Dans l'expression (I-14), l'indice '/' désigne la composante parallèle à l'axe principal de la masse effective ou du vecteur d'onde, et les indices ' $\perp 1$ ', ' $\perp 2$ ' désignent les composantes dans deux directions transverses à l'axe principal et mutuellement perpendiculaires. La masse effective transverse, $m_{\perp}^*$, est une valeur moyenne décrivant les états situés dans un plan transverse à l'axe principal associé à la vallée latérale: $m_{\perp 1}^* = m_{\perp 2}^* = m_{\perp}^*$.

La grandeur α est le coefficient de non-parabolicité, qui décrit la courbure de bande.

L'utilisation en vallée centrale $\Gamma 1$, de masses longitudinales et transverses permet de décrire une anisotropie moyenne de la masse effective, reflétant partiellement l'anisotropie réelle existant le long des axes principaux de symétrie Λ , Δ ou Σ .

APPLICATION AU MATÉRIAU GaAs.

Dans l'Arséniure de Gallium, le point $\Gamma 1$ est le point de plus basse énergie, suivi des points $L1$ puis $X1$.

La plupart des auteurs utilisent actuellement pour l'arséniure de Gallium des modèles multi-vallées non équivalentes. Les vallées latérales $L1$ et $X1$ sont décrites dans l'approximation de la relation de dispersion (I-14).

En vallée centrale $\Gamma 1$, la méthode **K.p** fournit, sous forme analytique, une bonne approximation de la relation de dispersion pour des énergies pas trop élevées, typiquement inférieures à environ 0.3 eV dans GaAs à 300°K (l'origine des énergies étant prise au minimum de la première bande de conduction). La relation de dispersion est assez bien décrite à basse énergie en supposant la masse effective de fond de vallée isotrope: dans la relation (I-14), les masses effectives longitudinale et transverse sont égales. La relation de dispersion en vallée centrale devient:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\Gamma}^*} = \gamma_{\Gamma}(\varepsilon)$$

Dans cette expression, $\gamma_{\Gamma}(\varepsilon) = \varepsilon(1 + \alpha_{\Gamma}\varepsilon)$.

Le coefficient de non-parabolicité α_{Γ} s'exprime par la méthode **K.p** en fonction de la masse effective m_{Γ}^* et de l'énergie de bande interdite (gap) E_g , par:

$$\alpha_{\Gamma} = \frac{1}{E_{0\Gamma}} \left(1 - \frac{m_{\Gamma}^*}{m_0} \right)^2$$

En vallées latérales, dans GaAs, les modèles utilisant une relation de dispersion à isoénergies sphériques au voisinage d'un minimum font l'hypothèse que les énergies sont suffisamment élevées pour que les processus de diffusion soient dominés par les interactions sur phonons, et particulièrement sur phonons inter-vallées. Le vecteur d'onde électronique est orienté de façon aléatoire et les effets de structure de bande sont supposés être gommés. Seule la densité d'états compte et une relation de dispersion basée sur cette dernière et introduisant la masse de densité d'états peut être utilisée. La masse effective est isotrope et donc les masses longitudinale et transverse sont égales.

I-II.2.3.3) DENSITÉ D'ÉTATS AU VOISINAGE D'UN EXTREMUM.

L'approximation de la masse effective permet souvent de ramener les surfaces d'isoénergies à des ellipsoïdes ou à des sphères. Le calcul de la densité d'états est alors plus aisé.

Dans le cadre du modèle classique des vallées, au voisinage de l'énergie de fond de vallée, la densité d'états peut s'exprimer simplement en fonction des paramètres de vallées, même pour une dimensionalité autre que volumique. Pour cela, G.Gombos [GOM93] fournit une expression de la densité d'états pour une structure de bande avec des coefficients de non parabolicité α , et β , dans le cas d'une dimensionalité 'N' paire ou impaire du matériau. La relation de dispersion au voisinage du fond de vallée 'v' s'exprime par:

$$\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_v^*} = \gamma_v(\epsilon)$$

On obtient, avec 'g' le degré de dégénérescence de spin et m_{dv}^* la masse de densité d'états de fond de vallée 'v', la densité d'états au voisinage du fond de vallée 'v':

$$D_{Nv}(\epsilon) = \begin{cases} \frac{2g}{N!(2\pi)^{(N+1)/2}} \frac{(2m_{dv}^*)^{N/2}}{\hbar^N} \frac{N}{2} \frac{d\gamma_v(\epsilon)}{d\epsilon} \gamma_v(\epsilon)^{\frac{(N-2)}{2}}, & \text{pour } N \text{ impair} \\ \frac{g}{N!(2\pi)^{N/2}} \frac{(2m_{dv}^*)^{N/2}}{\hbar^N} \frac{N}{2} \frac{d\gamma_v(\epsilon)}{d\epsilon} \gamma_v(\epsilon)^{\frac{(N-2)}{2}}, & \text{pour } N \text{ pair} \end{cases}$$

Pour des électrons ou des trous qui sont des fermions, $g=2$.

Dans le cas du matériau massif qui nous intéresse, $N=3$, on obtient:

$$D_{3v}(\epsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_{dv}^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{d\gamma_v(\epsilon)}{d\epsilon} \sqrt{\gamma_v(\epsilon)}.$$

Pour avoir la densité d'états dans la bande, on somme les densités d'états en vallées, chacune d'entre elles étant bien évidemment nulle pour une énergie inférieure à celle de fond de vallée E_{ov} :

$$D_N(E) = \sum_v D_{Nv}(E - E_{ov}) \Theta(E - E_{ov}), \text{ où } \Theta(x) = \begin{cases} 0, & \text{pour } x < 0 \\ 1, & \text{pour } x \geq 0 \end{cases}.$$

Pour les matériaux massifs III-V, nous verrons que le modèle de structure de bande élaboré afin d'étudier le transport à haute énergie, utilise cette possibilité d'exprimer simplement la densité d'états au voisinage des extrema: aussi bien des minima que des maxima. Nous en déduirons une expression s'étendant sur toute une bande.

I-II.2.3.4) PROBLÈMES DU MODÈLE CLASSIQUE DES VALLÉES AUX ÉNERGIES ÉLEVÉES.

Il est possible d'utiliser un tel modèle de relation de dispersion non-parabolique sphérique ou ellipsoïdale et fournissant une densité d'états correcte dans le domaine d'énergie étudié à partir du moment où la section efficace totale de diffusion est respectée.

Le modèle classique des vallées donne ainsi de bons résultats à des champs suffisamment faibles pour que la distribution de porteurs très énergétiques soit négligeable.

Pour les grands vecteurs d'onde électroniques, la relation de dispersion du modèle des vallées tend à surestimer l'énergie associée, ce qui fausse l'étude du transport en champ fort.

En outre, dans le modèle classique des vallées, le vecteur d'onde et l'énergie peuvent croître indéfiniment avec le champ imposé, ce qui est incompatible avec l'existence d'une périodicité non infinie de la zone de Brillouin.

Le modèle des vallées n'étant pas valable à haute énergie, il faut recourir à un modèle physique aussi bien à bas champ qu'à champ fort. Ces dernières années, ont été développés pour le Silicium, des modèles de SDB également valables à haute énergie. Leur description nous permettra d'élaborer un modèle s'en inspirant pour les III-V. Ce modèle tient compte assez bien de l'anisotropie des points de plus haute énergie W, dont dépend la relation de dispersion à haute énergie, et donc la densité d'états associée.

I-II.3) MODÈLES DE BANDES À HAUTE ÉNERGIE DANS LE SILICIUM.

À haute énergie le modèle classique des vallées ne pouvant plus physiquement décrire le transport électronique à cause du non respect de la densité d'états réelle, des auteurs ont élaboré des modèles de bande s'inspirant du modèle des vallées au voisinage des minima et des maxima, et en tenant compte d'une densité d'états réaliste sur toute une bande de manière à bien refléter les phénomènes de transport en champ fort. Une telle démarche a l'avantage de pouvoir être mise en oeuvre rapidement, et de rendre plus rapide la résolution des équations du mouvement.

En conclusion on verra brièvement en quoi ces méthodes ne sont pas adaptées pour l'étude des III-V

$$D_N(E) = \sum_v D_{Nv}(E - E_{ov}) \Theta(E - E_{ov}), \text{ où } \Theta(x) = \begin{cases} 0, & \text{pour } x < 0 \\ 1, & \text{pour } x \geq 0 \end{cases}.$$

Pour les matériaux massifs III-V, nous verrons que le modèle de structure de bande élaboré afin d'étudier le transport à haute énergie, utilise cette possibilité d'exprimer simplement la densité d'états au voisinage des extrema: aussi bien des minima que des maxima. Nous en déduirons une expression s'étendant sur toute une bande.

I-II.2.3.4) PROBLÈMES DU MODÈLE CLASSIQUE DES VALLÉES AUX ÉNERGIES ÉLEVÉES.

Il est possible d'utiliser un tel modèle de relation de dispersion non-parabolique sphérique ou ellipsoïdale et fournissant une densité d'états correcte dans le domaine d'énergie étudié à partir du moment où la section efficace totale de diffusion est respectée.

Le modèle classique des vallées donne ainsi de bons résultats à des champs suffisamment faibles pour que la distribution de porteurs très énergétiques soit négligeable.

Pour les grands vecteurs d'onde électroniques, la relation de dispersion du modèle des vallées tend à surestimer l'énergie associée, ce qui fausse l'étude du transport en champ fort.

En outre, dans le modèle classique des vallées, le vecteur d'onde et l'énergie peuvent croître indéfiniment avec le champ imposé, ce qui est incompatible avec l'existence d'une périodicité non infinie de la zone de Brillouin.

Le modèle des vallées n'étant pas valable à haute énergie, il faut recourir à un modèle physique aussi bien à bas champ qu'à champ fort. Ces dernières années, ont été développés pour le Silicium, des modèles de SDB également valables à haute énergie. Leur description nous permettra d'élaborer un modèle s'en inspirant pour les III-V. Ce modèle tient compte assez bien de l'anisotropie des points de plus haute énergie W, dont dépend la relation de dispersion à haute énergie, et donc la densité d'états associée.

I-II.3) MODÈLES DE BANDES À HAUTE ÉNERGIE DANS LE SILICIUM.

A haute énergie le modèle classique des vallées ne pouvant plus physiquement décrire le transport électronique à cause du non respect de la densité d'états réelle, des auteurs ont élaboré des modèles de bande s'inspirant du modèle des vallées au voisinage des minima et des maxima, et en tenant compte d'une densité d'états réaliste sur toute une bande de manière à bien refléter les phénomènes de transport en champ fort. Une telle démarche a l'avantage de pouvoir être mise en oeuvre rapidement, et de rendre plus rapide la résolution des équations du mouvement.

En conclusion on verra brièvement en quoi ces méthodes ne sont pas adaptées pour l'étude des III-V

I-II.3.1) MODÈLE DE R.BRUNETTI & C.JACOBONI [BRU89].

R.Brunetti & C.Jacoboni [BRU89] furent les premiers à avoir introduit un modèle de structure de bande analytique pour le Silicium qui approche la densité d'états réelle dans une bande. La relation de dispersion au voisinage d'un minimum X est de type non-parabolique sphérique:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon) \quad (I-15)$$

La masse de densité d'états en fonction de l'énergie s'exprime simplement en fonction du coefficient de non-parabolicité α et de la masse effective de l'électron, par:

$$m(\varepsilon) = (1 + \alpha\varepsilon)m^* \quad (I-16)$$

La relation de dispersion (I-15) peut alors s'écrire à l'aide de la masse de densité d'états (I-16):

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m(\varepsilon)} = \varepsilon \quad (I-17)$$

Au voisinage du maximum Γ , la formulation de la relation de dispersion est identique mais les termes figurant dans la relation de dispersion (I-17) sont exprimés relativement à ce point, à la manière de la relation de dispersion de type vallée au voisinage d'un maximum d'une bande de trous.

L'énergie aux points de croisement des deux relations de dispersion locales aux extrema, est l'énergie pour laquelle le module du vecteur d'onde dans une direction Δ ($\langle 100 \rangle$) relativement au fond de vallée X, égale le module du vecteur d'onde relativement au maximum Γ dans cette même direction.

A partir de ces relations, la formulation de la densité d'états est alors simple puisqu'elle est de type vallée.

I-II.3.2) MODÈLE DE T.VOGELSANG & W.HÄNSCH [VOG91].

Pour obtenir une meilleure approximation de la densité d'états que dans le modèle de R.Brunetti & C.Jacoboni [BRU89], T.Vogelsang & W.Hänsch [VOG91] adoptent la démarche inverse, en partant de la densité d'états réelle, calculée par une méthode de type pseudo-potentiel empirique, pour en déduire une relation de dispersion à un type de vallée: les vallées X, étendues jusqu'au maximum Γ . Pour cela, les auteurs calculent la masse de densité d'états à partir de la densité d'états réelle.

Chez T.Vogelsang & W.Hänsch, la relation de dispersion ne s'exprime explicitement qu'en fonction de la densité d'états réelle, le calcul étant réalisé relativement à un extremum de bande, X ou Γ :

$$m(\varepsilon) = \left(\frac{3\pi^2 \hbar^3}{2\sqrt{2}} \right)^{2/3} \frac{\left| \int_0^\varepsilon d\varepsilon' D(\varepsilon') \right|^{2/3}}{\varepsilon} \quad (I-18)$$

L'utilisation de l'expression de la masse de densité d'états (I-18) dans l'expression (I-17) permet d'en déduire la relation de dispersion du modèle de T.Vogelsang & W.Hänsch.

Au voisinage du maximum d'énergie de bande, on a une formulation du même type que la relation (I-18) mais relativement au maximum d'énergie, tout comme R.Brunetti & C.Jacoboni [BRU89]. L'intégration de la densité d'états dans l'expression de la masse de densité d'états (I-18), se fait par rapport au maximum d'énergie.

Pour tenir compte de l'anisotropie ellipsoïdale des vallées X en première bande de conduction les auteurs appliquent la transformation de C.Herring & E.Vogt [HER56] pour trouver la relation de dispersion sur l'ellipsoïde à partir de celle définie sur la sphère par la relation (I-17).

$$\mathbf{k}_i^* = \mathbf{T}_{ij} \mathbf{k}_j$$

Dans cette expression, $\mathbf{T}_{ij} = \begin{bmatrix} \left(\frac{m_o}{m_{\perp}} \right)^{1/2} & 0 & 0 \\ 0 & \left(\frac{m_o}{m_{\perp}} \right)^{1/2} & 0 \\ 0 & 0 & \left(\frac{m_o}{m_{//}} \right)^{1/2} \end{bmatrix}$

T.Vogelsang & W.Hänsch prennent en compte jusqu'à 4 bandes de conduction du Silicium.

I-II.3.3) MODÈLE DE X.WANG & AL. [WAN93].

X.Wang & al. [WAN93] reprennent la formulation de R.Brunetti & C.Jacoboni [BRU89], mais en prenant en compte l'ellipticité des vallées, ainsi que davantage de points de symétrie, pour mieux refléter l'effet de la structure de bande réelle sur le transport. Ces auteurs ajustent les relations de dispersion longitudinales relatives aux axes principaux, à celles obtenues à l'aide d'un calcul par la méthode du pseudo-potentiel.

La méthode, décrite pour le Silicium, est complexe et ne donne pas une expression explicite de la densité d'états.

I-II.3.4) NÉCESSITÉ D'UN AUTRE MODÈLE POUR LES MATÉRIAUX III-V.

Contrairement au Silicium, dans les matériaux III-V, comme GaAs ou InP, le point Γ est un minimum d'énergie de la bande de conduction, et le maximum d'énergie de bande est situé en un point W. Il faudra donc tenir compte des principales caractéristiques topologiques de ces points,

pour décrire correctement la structure de bande (SDB) réelle aux plus hautes énergies. Il sera proposé un tel modèle de SDB, s'inspirant des modèles pour le Silicium quant à la décomposition en deux expressions de la relation de dispersion: l'une de ces expressions étant considérée relativement à un minimum d'énergie, et l'autre, relativement à un maximum.

I-III) LES MÉCANISMES D'INTERACTION.

I-III.1) LES PRINCIPAUX MÉCANISMES PHYSIQUES.

Les principaux mécanismes physiques dans le semiconducteur sont des mécanismes de diffusion dus à l'existence de centres de diffusion qu'une particule est susceptible de rencontrer.

La particule considérée, dans les développements suivants, est un électron de conduction interagissant avec un des différents centres de diffusion dans le matériau massif. On peut réaliser une classification des mécanismes de diffusion, en distinguant les mécanismes de diffusion dus au réseau cristallin, aux désordres du réseau, et aux porteurs:

- réseau cristallin:

- phonons:

-phonons de la branche optique: -phonons optiques polaires

(matériaux polaires exclusivement)

-phonons optiques non polaires

-phonons de la branche acoustique

-phonons inter-vallées

-piézoélectricité

- désordres du réseau:

-impuretés:

-atomes d'impuretés ionisées

-atomes d'impuretés neutres

-lacunes

-défauts ponctuels

-dislocations

-désordre d'alliage (pour les matériaux ternaires et quaternaires).

- porteurs:

-électrons

-trous

I-III.1.1)DESCRIPTION SOMMAIRE DES PRINCIPAUX MÉCANISMES DE DIFFUSION ET DES PHÉNOMÈNES MODIFIANT LE NOMBRE DE PORTEURS LIBRES.

Les mécanismes de diffusion correspondant aux trois principales classes précédemment définies, réseau cristallin, désordres du réseau et porteurs, seront brièvement décrits.

I-III.1.1.1)RÉSEAU CRISTALLIN.

Ces centres de diffusion sont associés à la périodicité du cristal: les atomes, et les quanta de vibration de ces derniers: les phonons, ainsi que la piézoélectricité dans les matériaux polaires comme les composés III-V. Ils comportent les centres de diffusion suivants:

Les phonons sont les quanta de vibrations du réseau cristallin. Plus la température augmente, plus les atomes vibrent autour de leur position d'équilibre et plus cette interaction devient importante.

Dans GaAs, l'interaction sur phonons optiques polaires a un impact décisif sur le transport en champ faible au voisinage du centre de la zone de Brillouin en première bande. Cette interaction inélastique est caractérisée par une forte anisotropie des états finals probables. A énergies élevées, les états correspondant à une déviation quasi-nulle du vecteur d'onde sont favorisés.

Dans le modèle de structure de bande trois vallées, l'interaction sur phonons optiques non-polaires n'est présente qu'en vallée L [KAS79]. Elle est inélastique et réoriente le vecteur d'onde de façon aléatoire.

L'interaction intervallée fait passer le vecteur d'onde d'une vallée à une autre vallée. Elle est inélastique et provoque une déviation aléatoire du vecteur d'onde.

Puisque la possibilité de passer continûment d'un minimum de la zone de Brillouin à un autre n'existe pas dans les modèles utilisant une structure de bande multi-vallées, les phonons intervallées permettent donc à la fois de rendre compte de la randomisation du vecteur d'onde, et de la possibilité concomitante de passer du voisinage d'un minimum à un autre lors de ces collisions. Bien entendu, cette possibilité existe également dans les modèles de transport utilisant la structure de bande réelle, mais alors, ce sont les phonons optiques et acoustiques, avec une relation de dispersion de phonon plus réaliste, qui interviennent.

Les phonons intervallées sont des phonons moyens appartenant à la branche optique ou acoustique.

L'interaction intervallée joue un rôle prépondérant à énergie élevée car elle s'accompagne d'une forte discontinuité d'énergie cinétique donc de la vitesse de groupe. Cette interaction est ainsi responsable du phénomène de mobilité différentielle négative observée dans la plupart des semi-conducteurs III-V.

L'interaction acoustique est une interaction sur les quanta de vibration du réseau cristallin. A température ambiante de 300°K, l'interaction acoustique peut être considérée comme élastique car l'énergie du phonon acoustique (quelques meV) est négligeable par rapport à l'énergie thermique de vibration du réseau. Après interaction, le vecteur d'onde est réorienté de façon quasiment aléatoire.

La piézoélectricité produit une déformation du réseau cristallin due à la polarité de la maille cristalline. Cette déformation produit une perturbation du potentiel cristallin qui agit comme un centre de diffusion.

I-III.1.1.2)DÉSORDRES DU RÉSEAU.

Dans un semiconducteur, des défauts de toutes sortes perturbent le potentiel cristallin. Ceux dus aux impuretés ionisées sont intentionnels pour rendre le matériau conducteur. Les interactions sur atomes d'impuretés interviennent surtout pour de forts dopages.

Les autres centres de diffusion de désordre du réseau, sont les impuretés neutres et les défauts de toute sorte apparus lors de la fabrication ou du raffinage du matériau. Ils sont inévitables, mais en quantité variable suivant la qualité du processus de fabrication; c'est le cas des lacunes, défauts ponctuels, et dislocations.

I-III.1.1.3)PORTEURS.

Les centres de diffusion sont aussi bien des électrons de la bande de conduction que de la bande de valence ou même des trous. Comme le matériau est supposé de type N, on ne considérera que les interactions subies par des électrons. L'absence de dopant de type P, permet de négliger l'interaction électron de conduction-trou.

La description qui suit sera symétrique pour des trous dans un matériau de type P.

Les collisions électron de conduction-électron de conduction interviennent pour de très fortes concentrations électroniques.

I-III.1.1.4) PHÉNOMÈNES PHYSIQUES MODIFIANT LE NOMBRE DE PORTEURS LIBRES.

Le nombre de porteurs dans une bande peut être modifié lorsque le champ est suffisamment fort pour faire passer un électron d'une bande à l'autre; on parle d'effet tunnel [KAN59] dans l'espace réciproque. Il peut s'agir du franchissement du gap par un électron de valence (cas d'un électron au point ' α ' passant au point ' β ' sur la figure I-4), ou du passage d'un électron de conduction d'une bande à la bande supérieure (sur la figure I-4, cas d'un électron de valence de GaAs, situé au point 'a' et passant au point 'b', d'après H.D.Law & C.A.Lee [LAW77]).

En pratique le franchissement de la bande interdite n'est pas observé dans les matériaux à grand gap comme le Silicium ou l'Arséniure de Gallium, mais plutôt dans ceux à petit gap comme InSb [KAN59] [CHA93] ($E_{\text{gap}} = 0.225 \text{ eV}$ à $T = 77^\circ\text{K}$), ou InAs.

En outre, la concentration électronique en bande de conduction peut être augmentée par l'ionisation par choc, mécanisme de diffusion se produisant lorsque des électrons de conduction gagnent suffisamment d'énergie, pour "libérer" des électrons de valence.

L'ionisation par choc est traitée séparément car elle est primordiale dans notre étude à champ fort, pour les matériaux à grand gap GaAs et InP.

REMARQUE.

Dans un composant semiconducteur, l'électron de valence libéré en bande de conduction participe à un courant supplémentaire appelé courant d'ionisation. Ce courant a un effet parasite excepté dans les composants qui tirent parti de cette effet, comme les diodes à avalanche.

Dans les matériaux à petit gap, l'effet tunnel "bande à bande" et l'ionisation par choc peuvent se produire simultanément; on aura donc à la fois un courant tunnel "bande à bande", et un courant d'ionisation.

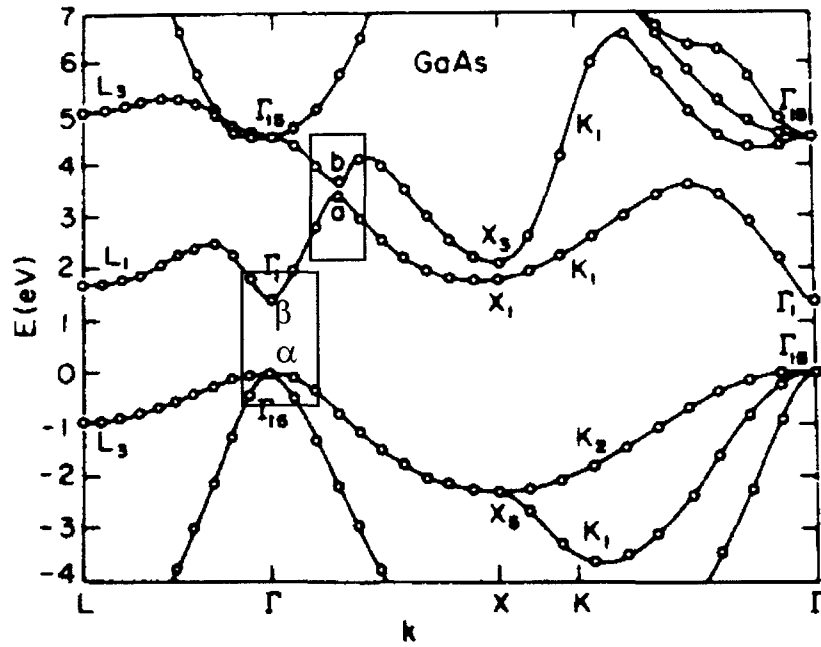


Figure I-4. Points 'α' et 'β' de passage entre la bande de valence et la bande de conduction et points 'a' et 'b' de passage possible par effet tunnel dans l'espace réciproque, entre les deux premières bandes de conduction, sur un diagramme de bande obtenu par la méthode du pseudo-potentiel par M.L.Cohen & T.K.Bergstresser [COH66].

I-III.1.2) EXPRESSIONS GÉNÉRALES DES PROBABILITÉS D' INTERACTION.

Les probabilités de diffusion sont calculées dans le cadre de la théorie des perturbations du premier ordre par la règle d'Or de Fermi.

I-III.1.2.1) EXPRESSION GÉNÉRALE.

L'expression générale de la probabilité d'interaction vaut:

$$W = \int \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_{ep} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i) dS_f \quad (I-19)$$

Dans cette expression, les indices i et f désignent respectivement l'état initial et l'état final. Le terme dS_f est un élément d'intégration dans l'espace réciproque des états finals.

L'expression (I-19) suppose implicitement que la probabilité de survenue d'une interaction est proportionnelle à la densité d'états disponibles.

A haute énergie, le modèle classique des vallées ne permet pas une bonne description de la structure de bande. Cela se traduit par une mauvaise prise en compte de la densité d'états et donc des probabilités d'interaction. La prise en compte de la densité d'états réelle est donc nécessaire pour avoir une description physique correcte des mécanismes de diffusion.

I-III.1.2.2) APPROXIMATIONS USUELLES.

Pour avoir le détail des principales probabilités d'interaction, on se reportera à W.Fawcett [FAW70] ou à A.Kaszynski [KAS79]. Dans leur approche l'interaction sur phonons est traitée en

considérant un phonon moyen échangé et en supposant la structure de bande de type multi-vallées classique.

On se trouve souvent dans des situations où l'énergie, fournie aux électrons par un champ extérieur appliqué ou simplement par agitation thermique, est suffisante pour arracher les électrons des impuretés donneuses. On considère alors en pratique, à 300°K, que quasiment tous les atomes d'impuretés sont ionisés. On peut alors négliger les interactions sur les impuretés neutres.

L'interaction sur impuretés est élastique.

L'interaction électron de conduction-électron de conduction, qui "apparaît" pour de très fortes concentrations en impuretés donneuses, est généralement négligée.

A 300°K et en régime stationnaire, les temps de génération-recombinaison sont assez longs devant les temps caractéristiques du transport. Ce mécanisme est donc généralement négligé.

La probabilité de passage d'une bande de conduction à une autre par effet tunnel "bande à bande", d'un point 'a' à un point 'b' (voir figure I-4), est supposée négligeable par rapport à la probabilité de transition inter-bande par diffusion sur phonons. Cette hypothèse est justifiée par la faible densité d'états au point d'instabilité 'a'. La probabilité de transition par effet tunnel "bande à bande" dans l'espace réciproque est donc négligée, tant pour les électrons de valence que de conduction.

Les collisions électron de conduction-électron de valence ne sont traitées que pour des électrons de conduction fortement énergétiques, dans le cadre de l'ionisation par choc.

I-III.2)L'IONISATION PAR CHOC.

I-III.2.1)DESCRIPTION PHYSIQUE.

L'ionisation par choc dans un matériau de type N, est un mécanisme de diffusion entre un électron de haute énergie d'une bande de conduction, et un électron d'une bande de valence. On parle d'ionisation par choc provoquée par les électrons, ou d'ionisation par choc dans la bande de conduction.

Le principe est le même pour un matériau de type P, dans lequel l'ionisation par choc est provoquée par des trous de très haute énergie (en valeur absolue) interagissant avec des électrons de conduction.

Dans tout ce qui suit, le raisonnement portera sur l'ionisation par choc provoquée par des électrons. Les deux particules avant interaction, l'électron de conduction et l'électron de valence, sont appelées particules primaires ou particules diffusantes. L'électron de conduction primaire est également appelé électron ionisant. Les deux particules après diffusion sont appelées particules

secondaires ou particules diffusées. La figure I-5 représente un tel processus entre un électron de la seconde bande de conduction d'un matériau à gap direct, approximée par une vallée parabolique, et un électron de valence, placé dans la bande de trou.

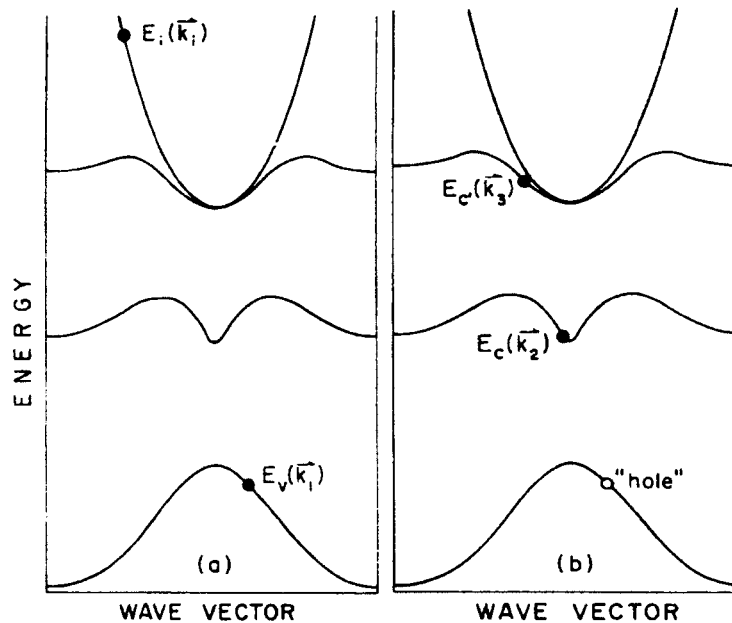


Figure I-5. Processus d'ionisation par choc hypothétique d'après C.L.Anderson & C.R.Crowell [AND72].

(a): particules primaires avant ionisation

(b): particules secondaires immédiatement après ionisation. Le processus décrit concerne un électron de conduction de la seconde bande, approximée par une vallée parabolique au voisinage du point central.

L'électron diffusant de la bande de valence apparaît après interaction sous la forme d'un électron secondaire dans la bande de conduction. Il laisse alors la place à un trou dans la bande de valence.

L'ionisation par choc doit satisfaire aux équations de conservation de l'énergie et du vecteur d'onde.

Si on désigne par '1', '2', '3', et '4' respectivement l'électron de conduction primaire, l'électron de valence primaire, l'électron de conduction primaire après diffusion, et l'électron secondaire provenant de la bande de valence, les équations de conservation de l'énergie (I-20) et du vecteur d'onde (I-21) s'écrivent:

$$\begin{cases} E_1 + E_2 = E_3 + E_4, & \text{(I - 20)} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2 = \mathbf{K}_3 + \mathbf{K}_4 + \mathbf{G}_0, & \text{(I - 21)} \end{cases}$$

Le terme $\mathbf{G}_0$ du second membre de l'équation (I-21) est un vecteur de l'espace réciproque qui ramène les vecteurs d'onde dans la première zone de Brillouin. Ce vecteur peut être nul si les vecteurs d'onde sont tous dans cette zone.

Ces deux équations devraient permettre de fournir un critère sur les états des particules permettant de réaliser l'ionisation par choc. Le vecteur d'onde à partir duquel il est possible de réaliser l'ionisation par choc, dans une direction cristallographique donnée, est appelé vecteur d'onde de seuil d'ionisation. L'énergie associée est l'énergie de seuil d'ionisation ou plus rapidement énergie de seuil. Un électron dont l'énergie est supérieure à l'énergie de seuil est susceptible, avec une certaine probabilité, de provoquer une ionisation.

I-III.2.2)PROBABILITÉS D'IONISATION PAR CHOC.

I-III.2.2.1)MÉTHODE GENERALE.

Dans la méthode générale, l'expression de la probabilité d'ionisation par choc est compliquée à cause de la prise en compte de la SDB réelle. L'expression générale de la probabilité d'ionisation dépend du vecteur d'onde et de la bande des quatre particules impliquées dans l'ionisation par choc. Cette expression est toutefois un passage obligé pour tous les auteurs qui réalisent un calcul simplifié de la probabilité d'ionisation par choc. Nous allons en donner la formulation, puis nous verrons comment la simulation Monte-Carlo assez récente de T.Kunikiyo & al. [KUN94] a établi que cette expression peut être utilisée de manière simplifiée en régime stationnaire.

La probabilité pour un électron d'ioniser ou probabilité d'ionisation est fournie par la règle d'Or de Fermi (théorie des perturbations dépendantes du temps au premier ordre)[STO94]:

$$P_{ii}(\mathbf{K}_1, \nu_1) = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{\Omega}{(2\pi)^3} \right)^3 \sum_{\nu_2, \dots, \nu_4} \iiint_{BZ} \iiint_{BZ} \iiint_{BZ} d_3 \mathbf{K}_2 d_3 \mathbf{K}_3 d_3 \mathbf{K}_4 |M(1,2;3,4)|^2 \delta(E_{\nu_1}(\mathbf{K}_1) + E_{\nu_2}(\mathbf{K}_2) - E_{\nu_3}(\mathbf{K}_3) - E_{\nu_4}(\mathbf{K}_4)) \quad (I-22)$$

Dans l'expression de la probabilité d'ionisation par choc moyennée (I-22), le terme Ω est le volume du cristal, et le terme $M(1,2;3,4)$ est l'élément de matrice de l'interaction de Coulomb, ou intégrale de recouvrement. Ce dernier s'exprime en fonction de la fonction d'onde ψ^{ν_i} de l'électron i dans la bande ν_i , et de l'énergie potentielle de Coulomb $\hat{V}$ par :

$$M(1,2;3,4) = \langle \psi^{\nu_1} \psi^{\nu_2} | \hat{V} | \psi^{\nu_3} \psi^{\nu_4} \rangle \quad (I-23)$$

L'électron de conduction diffusant '1' appartient à la bande de conduction ν_1 , et l'électron de valence diffusant '2' appartient à la bande de trou ν_2 . Les particules secondaires '3' et '4' correspondent respectivement aux particules précédentes après diffusion. Elles appartiennent toutes deux aux bandes de conduction ν_3 et ν_4 .

I-III.2.2.2) EXPRESSIONS GÉNÉRALES MOYENNÉES.

L'intérêt d'utiliser une expression moyennée de l'expression générale de la probabilité d'ionisation par choc, est d'obtenir une expression plus simple d'utilisation, car la probabilité résultante ne dépend que de l'énergie.

Cette probabilité d'ionisation par choc en fonction de l'énergie pourra facilement faire l'objet de comparaisons, selon qu'elle a été calculée avec telle ou telle hypothèse, par tel ou tel auteur.

Le premier auteur à avoir donné une expression générale moyennée est E.O.Kane [KAN67] pour le Silicium.

Assez récemment, M.Stobbe & al. [STO94] ont calculé la probabilité d'ionisation générale pour GaAs, et en on déduit une expression analytique simple d'ajustement, qui s'accorde également avec la probabilité d'ionisation moyenne en fonction de l'énergie.

Par la suite, N.Sano & A.Yoshii [SAN95] ont fourni une fonction intégrale de la probabilité d'ionisation ne dépendant que de la densité d'états de la bande de conduction. Leur étude sur plusieurs matériaux a permis d'établir que la probabilité d'ionisation des différents semiconducteurs est assez voisine à très haute énergie. Leurs résultats sur GaAs confirment ceux de M.Stobbe & al. [STO94].

I-III.2.2.2.1) MODÈLE DE E.O.KANE [KAN67].

E.O.Kane [KAN67] utilise la règle d'Or de Fermi avec des fonctions d'onde et des bandes calculées par la méthode du pseudo-potential. Il considère une interaction coulombienne entre électrons dont la constante diélectrique dépend de la fréquence et du vecteur d'onde suivant l'approximation de phase aléatoire [ADL63][EHR59].

Après avoir moyenné sur tous les vecteurs d'onde $\mathbf{K}_1$, et avoir normalisé par rapport à la densité d'états à l'énergie $E = E_{v_1}$ de la bande v_1 de l'électron '1', il obtient pour la probabilité d'ionisation:

$$P_{ii}(E) = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{\Omega}{(2\pi)^3} \right)^2 \sum_{v_1, \dots, v_4} \frac{\int_{BZ} \int_{BZ} \int_{BZ} \int_{BZ} d_3 K_1 d_3 K_2 d_3 K_3 d_3 K_4 \delta(E_{v_1}(\mathbf{K}_1) - E)}{\sum_{v_1} \int_{BZ} d_3 K_1 \delta(E_{v_1}(\mathbf{K}_1) - E)}$$

$$\delta(E_{v_1}(\mathbf{K}_1) + E_{v_2}(\mathbf{K}_2) - E_{v_3}(\mathbf{K}_3) - E_{v_4}(\mathbf{K}_4)) \left(|M_a|^2 + |M_b|^2 - \frac{1}{2} (M_a^* M_b + M_a M_b^*) \right) \quad (I-24)$$

Dans cette expression, $\begin{cases} M_a = M(1,2;3,4) \\ M_b = M(1,2;4,3) \end{cases}$.

L'intégrale de recouvrement M de l'expression générale (I-24) de la probabilité d'ionisation, dépend du potentiel V qui s'exprime par:

$$V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3) = \frac{e^2}{4\pi\kappa\|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3\|} \quad (\text{I-25})$$

Dans l'expression (I-25) du potentiel V , la fonction diélectrique κ est utilisée en écrivant les fonctions d'onde du pseudo-potentiel sous la forme:

$$\psi_{\mathbf{K}_i}(\mathbf{r}_i) = \sum_{\mathbf{G}} u_{\mathbf{G}}(\mathbf{K}_i) \frac{e^{i(\mathbf{K}_i + \mathbf{G})\mathbf{r}_i}}{\sqrt{\Omega}}$$

En exprimant le potentiel $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3)$ dans l'espace des $\mathbf{K}$, E.O.Kane trouve:

$$V(\mathbf{K}_1 - \mathbf{K}_3) = \sum_{\mathbf{q}} \frac{e^2}{\|\mathbf{q}\|^2 \Omega \kappa(\mathbf{q}, \omega)} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3)}.$$

L'intégrale de recouvrement devient dans cette représentation:

$$M(1,2;3,4) = \sum_{\mathbf{G}_1, \mathbf{G}_3, \mathbf{G}_4} u_{\mathbf{G}_1}^*(\mathbf{K}_1) u_{\mathbf{G}_3}^*(\mathbf{K}_3) \frac{e^2}{\|\mathbf{q}\|^2 \Omega \kappa(\mathbf{q}, \omega)} u_{\mathbf{G}_3}(\mathbf{K}_3) u_{\mathbf{G}_4}(\mathbf{K}_4)$$

avec $\begin{cases} \mathbf{q} = \mathbf{K}_1 + \mathbf{G}_1 - \mathbf{K}_3 - \mathbf{G}_3 \\ \hbar\omega = E_{\mathbf{G}_1}(\mathbf{K}_1) - E_{\mathbf{G}_3}(\mathbf{K}_3) \\ \mathbf{G}_1 + \mathbf{G}_2 + \mathbf{G}_0 = \mathbf{G}_3 + \mathbf{G}_4, \end{cases}$ (I-26)

La conservation du vecteur d'onde (I-21) en conjonction avec l'expression (I-26), donne le vecteur d'onde $\mathbf{G}_4$ du trou résultant.

L'intégration du second membre de la probabilité d'ionisation par choc (I-24) étant difficile, E.O.Kane [KAN67] propose l'approximation $\mathbf{K}$ -aléatoire. Cette approximation considère le vecteur d'onde de l'électron de valence primaire $\mathbf{K}_2$, comme étant une variable aléatoire dont la probabilité p_2 de se trouver dans un intervalle d'énergie $dE_{\mathbf{v}_2}$ au voisinage de son énergie $E_{\mathbf{v}_2}(\mathbf{K}_2)$, est proportionnelle à la densité d'états dans la bande:

$$p_2 = \frac{D_2(E_{\mathbf{v}_2})dE_{\mathbf{v}_2}}{\int D_2(E_{\mathbf{v}_2})dE_{\mathbf{v}_2}} \quad (\text{I-27})$$

L'intégrale au dénominateur de la probabilité (I-27) est étendue sur toute la bande $\mathbf{v}_2$. Elle représente le nombre total d'états dans la bande de trou occupée par l'électron de valence primaire, compte tenu des états spin orbitaux (D'après S.M.Sze [SZE81], dans GaAs, le nombre total d'états dans une bande vaut $\frac{2N_c}{\Omega} = 4.43 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$).

En posant $A_e = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\left(|M_a|^2 + |M_b|^2 - \frac{1}{2}(M_a^* M_b + M_a M_b^*)\right)}{8N_c}$, et $D_i(E_{vi})$ la densité d'états

dans la bande v_i de l'électron 'i', E.O.Kane obtient une formulation plus simplifiée de la probabilité d'ionisation par choc:

$$P_{ii}(E) = A_e \iint_{E_{v2} \leq E_F \leq E_{v1}, E_{v3}, E_{v4}} D_2(E_{v2}) D_3(E_{v3}) D_4(E_{v4}) dE_{v3} dE_{v4} \quad (I-28)$$

avec E_F l'énergie de Fermi qui peut être prise égale à l'énergie au maximum de la bande de valence.

D'après la conservation de l'énergie: $E_{v1} = E_{v3} + E_{v4} - E_{v2}$

E.O.Kane obtient la probabilité moyenne d'ionisation pour le Silicium en intégrant l'équation (I-28) par la méthode d'intégration de Monte-Carlo.

Etant donné la complexité de cette formule il est nécessaire de faire des approximations sur l'état des particules participant au processus d'ionisation pour en avoir une expression simplifiée.

Dans une simulation Monte-Carlo utilisant une structure de bande réelle du Silicium, avec une probabilité d'ionisation par choc calculée par la règle d'Or de Fermi, directement à partir de la structure de bande, T.Kunikiyo & al. [KUN94] ont montré que le coefficient d'ionisation par choc est indépendant de l'orientation du champ appliqué en régime stationnaire. Tout se passe comme si la probabilité d'ionisation d'un électron ne dépendait que de son énergie.

Cette simulation complète valide la méthode **K**-aléatoire de E.O.Kane [KAN67] faisant apparaître une probabilité d'ionisation ne dépendant que de l'énergie.

Des études théoriques récentes [BUD92][STO94] ont confirmé l'expression de la probabilité d'ionisation obtenue par E.O.Kane [KAN67], excepté au voisinage de l'énergie de seuil, d'après J.Bude & al. [BUD92], à cause du fort phénomène d'étalement par collision ("collisional broadening") ou incertitude sur l'énergie due aux collisions électron-phonon et au champ appliqué.

I-III.2.2.2.3) MODÈLE DE M.STOBBE & al. [STO94].

La méthode M.Stobbe & al. [STO94] permet d'obtenir une probabilité d'ionisation par choc proche de celle de J.Bude & K.Hess [BUD92] à haute énergie.

M.Stobbe & al. [STO94] calculent numériquement la probabilité d'ionisation par choc à l'aide de la formule générale (I-22), puis en déduisent un modèle d'ajustement analytique. Ces auteurs calculent ensuite la probabilité moyenne d'ionisation par choc.

Le calcul de la probabilité d'interaction à l'aide de la formule générale présente les principales particularités suivantes:

- la structure de bande est calculée par la méthode du pseudo-potentiel empirique local, étendue aux trois premières bandes de conduction.
- les auteurs mettent en évidence l'importance de la dépendance de la fonction diélectrique vis-à-vis du vecteur d'onde par comparaison avec leur étude antérieure [STO91].

M.Stobbe & al. [STO94] ajustent la probabilité d'ionisation par choc réelle à l'aide d'une expression analytique, pour chaque direction principale:

$$P_{ii}(\mathbf{K}_1, v_1) = P[E_2(\mathbf{K}_1) - E_{th}]^a \quad (I-29)$$

Dans l'expression de la probabilité d'ionisation par choc (I-29), les trois paramètres P , a et E_{th} permettent l'ajustement au calcul numérique complet issu de l'expression générale.

Les auteurs réalisent également un calcul de la probabilité d'ionisation moyennée sur toutes les directions de l'espace des $\mathbf{K}$, par la relation suivante:

$$P_{ii}(E) = \frac{\sum_{v_1} \iiint_{BZ} d_3 \mathbf{K}_1 \delta(E_{v1}(\mathbf{K}_1) - E) r(\mathbf{K}_1, v_1)}{\sum_{v_1} \iiint_{BZ} d_3 \mathbf{K}_1 \delta(E_{v1}(\mathbf{K}_1) - E)} \quad (I-30)$$

Les auteurs montrent que cette expression est bien approchée par la formule d'ajustement (I-29) qui peut être réécrite simplement en fonction de l'énergie:

$$P_{ii}(E) = P[E - E_{th}]^a \quad (I-31)$$

La formulation (I-31) est justifiée par l'étude récente de T.Kunikyio & al. [KUN94] qui montrent qu'en régime stationnaire le coefficient d'ionisation par choc ne dépend pas de l'orientation.

REMARQUE.

Contrairement à E.O.Kane [KAN67], l'intégration par M.Stobbe & al. [STO94] de l'expression (I-30) de la probabilité d'ionisation par choc moyennée, n'est pas réalisée par la méthode de Monte-Carlo par un maillage régulier de la première zone de Brillouin, mais en n'y considérant que quelques points particuliers, suivant la méthode de génération de points spéciaux élaborée par D.J.Chadi & M.L.Cohen [CHA73].

APPLICATION DU MODÈLE DE M.STOBBE & AL. [STO94] AU MATÉRIAU GaAs.

Les calculs de M.Stobbe & al. sont appliqués à GaAs de type N à 300°K avec une concentration d'impuretés de $10^{16} / \text{cm}^3$.

Les auteurs montrent que dans ce matériau, les points de l'espace réciproque satisfaisant aux conditions d'ionisation sont essentiellement issues des bandes supérieures.

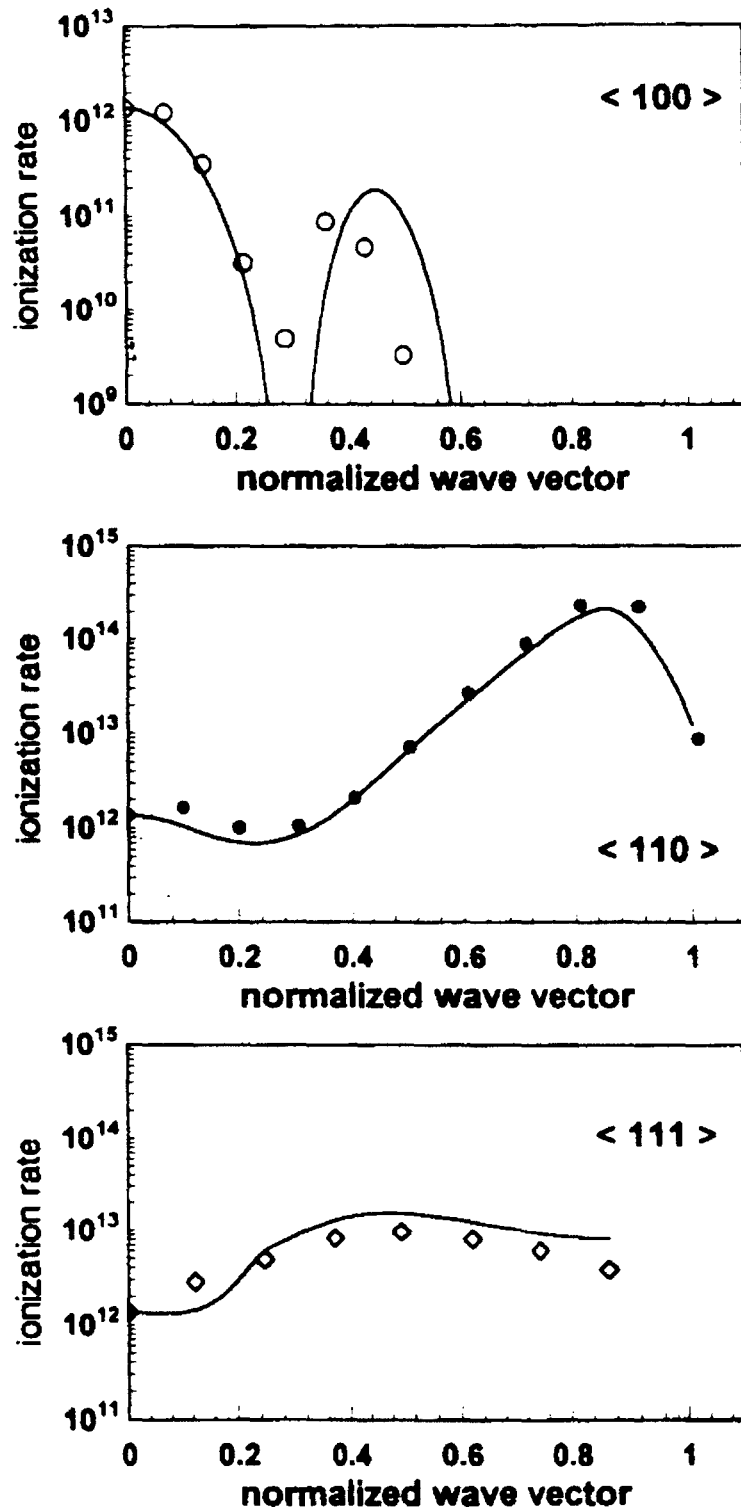


Figure I-6. Probabilité d'ionisation par choc de M.Stobbe & al. [STO94].
 -pointillés: expression générale le long des trois directions principales Δ , Σ , et Λ , respectivement $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$.
 - traits pleins: formule d'ajustement analytique.

Les trois paramètres P , a et E_{th} de la probabilité d'ionisation par choc (I-31) valent:

$$\begin{cases} P = 2 \times 10^{12} s^{-1} eV^{-a} \\ a = 4 \\ E_{th} = 2.1 eV \end{cases}$$

La figure I-6 présente la probabilité d'ionisation par choc le long des trois directions principales Δ ($<100>$), Σ ($<110>$), et Λ ($<111>$). Elle a été calculée d'une part à l'aide de l'expression générale (I-22), et d'autre part à l'aide de la formule d'ajustement (I-31).

La figure I-7 présente la probabilité d'ionisation par choc moyennée en fonction de l'énergie, et la contribution à cette probabilité de la probabilité d'ionisation le long des trois directions principales. Cette courbe montre que chacune des trois directions principales contribue à l'ionisation par choc dans un domaine d'énergie particulier recouvrant peu le domaine d'une autre direction.

- un axe Δ contribue à l'ionisation dans le domaine d'énergie s'étendant jusqu'à 3 eV.
- un axe Λ contribue à l'ionisation dans le domaine d'énergie de 2.9 eV à 3.8 eV.
- un axe Σ contribue à l'ionisation dans le domaine d'énergie de 2.8 eV à 5.7 eV.

La formule d'ajustement (I-31) permet donc de représenter correctement la probabilité d'ionisation par choc dans tout le domaine d'énergie.

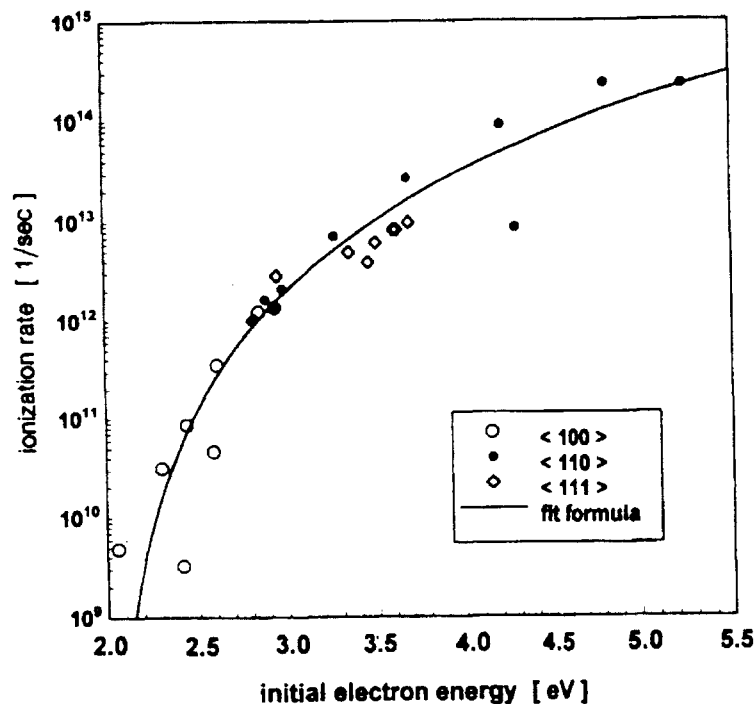


Figure I-7. Probabilité d'ionisation par choc dans GaAs par rapport à l'énergie de M.Stobbe & al. [STO94].

- pointillés: calcul le long des trois directions principales $<100>$ (cercles), $<110>$ (points noirs) et $<111>$ (losanges). La correspondance avec l'énergie est fournie par la relation de dispersion réelle le long de ces directions principales.
- trait plein: formule d'ajustement.

I-III.2.2.2.4) APPROXIMATION DE N.SANO & A.YOSHII [SAN95].

N.Sano & A.Yoshii [SAN95] ont exprimé la probabilité d'ionisation par choc en supposant constant le carré de l'intégrale de recouvrement $|M(1,2;3,4)|^2$, terme du second ordre de la probabilité d'ionisation par choc: c'est l'approximation CME. Cette première hypothèse est basée sur le fait que le nombre d'états finals s'accroît rapidement une fois que l'électron dépasse l'énergie de seuil, ce qui entraîne un moyennage de l'intégrale de recouvrement vis-à-vis du vecteur d'onde lorsque l'énergie est suffisamment importante. La probabilité d'ionisation par choc devient alors:

$$P_{ii}(E_{v_1}) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\Omega^2}{(2\pi)^6} |M|^2 \iiint \delta(E_{v_1} + E_{v_2} - E_{v_3} - E_{v_4}) d^3K_3 d^3K_4 \quad (I-32)$$

La probabilité (I-32) est réécrite en fonction de la densité d'états dans la bande de conduction:

$$P_{ii}(E_{v_1}) = \frac{\pi}{\hbar} \frac{\Omega^2}{(2\pi)^3} |M|^2 \iiint D(E_{v_1} + E_{v_2} - E_{v_3}) d^3K_3 \quad (I-33)$$

Dans la deuxième approximation des auteurs, la probabilité (I-33) est considérée en supposant que les énergies E_{v_1} et E_{v_2} , des électrons de conduction et de valence, ne dépendent pas des états K_3 et K_4 des électrons finals. La troisième hypothèse est que l'énergie de l'électron de valence s'exprime en fonction de celle de l'électron de conduction à partir de l'énergie du gap ' E_{gap} ', de l'énergie de seuil ' E_{th} ', et d'une constante ' s ', par la relation:

$$E_{v_2} = -E_{\text{gap}} - s \times (E_{v_1} - E_{\text{th}})$$

La probabilité d'ionisation s'exprime alors en fonction de la densité d'états réelle à l'aide d'une intégrale simple, après avoir posé $C_{ii} = \frac{\pi}{2\hbar} \Omega^2 |M|^2$:

$$P_{ii}(E_{v_1}) = C_{ii} \int dE D(E) D(E_{v_1} + E_{v_2}(E_{v_1}, E_{\text{gap}}, E_{\text{th}}, s) - E) \quad (I-34)$$

Les auteurs obtiennent, par l'expression (I-34), une formulation intégrale de la probabilité d'ionisation par choc dépendant de la densité d'états, avec les paramètres ' C_{ii} ', ' E_{th} ', et ' s '.

La figure I-8 présente la probabilité d'ionisation par choc dans GaAs d'après N.Sano & A.Yoshii [SAN95], avec comme paramètres:

$$\begin{cases} C_{ii} = 6.1 \times 10^{-31} \text{ eVcm}^6 / \text{s} \\ E_{\text{th}} = E_{\text{gap}} = 1.4 \text{ eV} \\ s = 0.55 \end{cases}$$

La formule analytique de M.Stobbe & al. [STO94] constitue un compromis entre théorie [BUD92][STO94][SAN95], et expérience [EKL92] même si elle s'approche davantage des courbes théoriques [BUD92][SAN95].

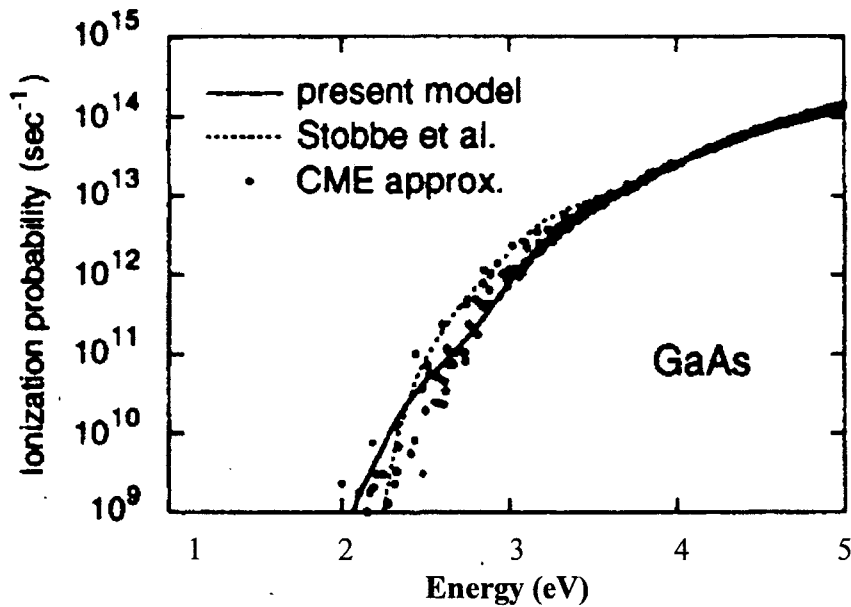


Figure I-8. Probabilité d'ionisation par choc dans GaAs.
 - trait plein: calcul de N.Sano & A.Yoshii [SAN95]
 - pointillés: calcul de M.Stobbe & al. [STO94]
 - gros points: ancien calcul de N.Sano & A.Yoshii (approximation CME)

L'expression de N.Sano & A.Yoshii permet donc d'obtenir une fonction intégrale de la densité d'états réelle et du gap, et des paramètres ' C_{ii} ' et ' s '. Ces deux paramètres sont a priori inconnus en absence de calcul complet pour un matériau quelconque. Un tel calcul permettra par exemple de lever l'indétermination liée à l'un de ces paramètres, sachant que la plupart des semiconducteurs ont leurs probabilités d'ionisation par choc voisines aux très hautes énergies d'après un calcul de N.Sano & A.Yoshii.

I-III.2.2.3) MÉTHODES BASÉES SUR UNE APPROXIMATION ANALYTIQUE DE LA STRUCTURE DE BANDE.

La complexité de la relation de dispersion rend impossible toute recherche d'une solution analytique en l'absence d'approximations portant sur la forme de la relation de dispersion.

I-III.2.2.3.1) APPROXIMATION DE L.V.KELDYSH [KEL65].

L.V.Keldysh [KEL65] est le premier à fournir une expression analytique simple de la probabilité d'ionisation. Son modèle suppose que les bandes de conduction et de valence sont paraboliques et sphériques. Il suppose également que le semiconducteur est à gap direct: il obtient une relation de la forme:

$$P_{ii}(E) = C \left(\frac{E}{E_{th}} - 1 \right)^n$$

Dans cette expression, $n=1,2$ ou 3 . Pour la plupart des semiconducteurs usuels, $n=2$.

C est une constante qui mesure l'amplitude de probabilité d'ionisation par choc pour le matériau, et E_{th} est l'énergie de seuil d'ionisation.

Lorsque la constante C est telle qu'au voisinage de l'énergie de seuil la probabilité d'ionisation par choc est du même ordre de grandeur que la probabilité sur phonons on parlera de seuil dur. Dans le cas où elle est nettement plus faible on parlera de seuil doux. Si l'on est amené à utiliser une probabilité d'ionisation avec un seuil dur, l'ionisation apparaît brutalement au voisinage de l'énergie de seuil (le seuil dur reflète "l'effet de seuil" à proprement parler) ce qui correspond à une distribution des électrons limitée au voisinage de l'énergie de seuil.

Avec sa constante de couplage, $C = 2.5 \times 10^{15} / s$, M.V.Fishetti [FIS88][FIS91] trouve un seuil d'ionisation dur. Toutefois, la plupart des auteurs ayant récemment étudié l'ionisation par choc [BUD92][STO94][SAN95] ont montré que le seuil d'ionisation est doux, donc que l'ionisation ne se concentre pas au voisinage de l'énergie de seuil.

I-III.2.2.3.2) APPROXIMATION DE B.K.RIDLEY [RID87].

B.K.Ridley [RID87] fournit une expression analytique voisine de celle de Keldysh mais sans paramètre d'ajustement C .

L'auteur fait dans un premier temps l'hypothèse de bandes paraboliques et d'une énergie électronique située au voisinage du seuil d'ionisation. Dans ces conditions, et après avoir utilisé la théorie de D.J.Robbins [ROB80], B.K.Ridley obtient pour la probabilité d'ionisation par choc:

$$P_{ii}(E) = W_0 \left(\frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty} \right)^2 \frac{m_c^*}{m_0} \frac{I_c^2 I_v^2}{(1 + 2\gamma)^2} \left(\frac{E - E_{th}}{E_{gap}} \right)^2$$

Dans cette expression, $\gamma = \frac{m_c^*}{m_v}$ est le rapport de la masse effective de l'électron ionisant à celle de l'électron de valence, et avec $I_c = I_{cc}(\mathbf{K}_1, \mathbf{K}_3)$ et $I_v = I_{cv}(\mathbf{K}_2, \mathbf{K}_3)$, les intégrales de recouvrement des états électroniques.

La formule analytique de B.K.Ridley [RID87] a l'avantage d'être simple tout en n'ayant que l'énergie de seuil pour paramètre.

B.K.Ridley montre qu'une variation quadratique de l'énergie avec le vecteur d'onde aboutit à $I_v = 0$, puisque les fonctions d'onde de la bande de valence ont des orbitales de type p et les fonctions d'onde de la bande de conduction ont des orbitales de type s. Ce qui aboutirait à l'impossibilité d'ioniser. Il utilise alors un modèle de structure de bande de type **K.p** à quatre bandes et obtient au voisinage du seuil:

$$I_v^2 \approx \frac{3}{2} \frac{m_c^*}{m_0} \left(1 + \frac{m_0}{m_v^*} \right) \left(\frac{1 + \gamma}{1 + 2\gamma} \right)$$

Pour GaAs, avec $I_v = 0.91$, et en prenant $I_c = 1$, B.K.Rydley obtient:

$$P_{ii}(E) = 5.0 \times 10^{12} \left(\frac{E - E_{th}}{E_{gap}} \right)^2 s^{-1}$$

Comme l'énergie de bande interdite est du même ordre de grandeur que l'énergie de seuil, l'expression trouvée par B.K.Rydley est semblable à celle de L.V.Keldysh [KEL65], mais avec $C \approx 5.0 \times 10^{12} s^{-1}$. Cette faible valeur du facteur de proportionnalité par comparaison avec celui de M.V.Fishetti [FIS91] ($C = 2.5 \times 10^{15} s^{-1}$), traduit le caractère de seuil doux de la probabilité d'ionisation de B.K.Rydley. On peut expliquer ces écarts importants, d'une part pour B.K.Rydley par l'hypothèse simplificatrice sur l'approximation parabolique de la structure de bande, et d'autre part pour M.V.Fishetti [FIS88][FIS91] par l'ajustement de C au coefficient d'ionisation par choc expérimental, lors d'une simulation Monte-Carlo du transport utilisant la structure de bande réelle mais limitée à la première bande de conduction.

Si les résultats obtenus par la formule de Keldysh-Rydley ne sont pas fortement erronés au voisinage de l'énergie de seuil, (ce qui est normal puisque les hypothèses sur la structure de bande y sont moins erronées), ils sont de moins en moins valables à mesure que l'énergie de l'électron ionisant augmente, car l'hypothèse de bandes paraboliques n'est plus valable.

I-III.2.2.3.3) APPROXIMATION DE W.QUADE & al. [QUA93].

La plupart des simulations utilisent une énergie de seuil isotrope alors que la structure de bande est fortement anisotrope à haute énergie. Récemment W.Quade & al. [QUA93] ont donné une condition d'ionisation, ainsi que l'expression de la probabilité d'ionisation par choc, en ne faisant pas d'hypothèses sur la forme de la structure de bande de l'électron ionisant avant interaction. Les auteurs font toutefois les hypothèses suivantes:

- i) l'électron ionisant avant interaction relaxe en vallée parabolique, la bande de trou étant supposée également parabolique, de même que celle des électrons diffusés.
- ii) le terme de recouvrement $I_c^2 I_v^2$ est constant avec $0 \leq I_c^2 I_v^2 \leq 1$.
- iii) le calcul est limité aux semi-conducteurs non dégénérés.

La probabilité d'ionisation par choc dépend de l'orientation du vecteur d'onde. Son allure dans une direction cristallographique donnée, est voisine de celle obtenue à l'aide de la formule de L.V.Keldysh [KEL65]. L'énergie de seuil d'ionisation par choc dépend également de l'orientation, et sa valeur peut être calculée de manière indirecte par une inéquation dans laquelle intervient le vecteur d'onde.

Le problème de nature quantitative de la formule de W.Quade & al. [QUA93], est qu'aux énergies suffisamment éloignées de l'énergie de seuil, l'énergie de l'électron de conduction primaire après ionisation est trop élevée, d'après le principe de conservation de l'énergie, pour que sa vallée d'arrivée après ionisation puisse encore être supposée parabolique.

Les résultats qualitatifs suivants peuvent toutefois être mis en évidence, toutes choses étant égales par ailleurs:

- plus le gap de la vallée de l'électron ionisant est élevé, plus l'énergie de seuil d'ionisation par choc est élevée.
- plus le gap de la vallée de l'électron ionisant est indirect, plus l'énergie de seuil est basse.
- lorsque l'électron ionisant se trouve en vallée centrale, plus le rayon de courbure est important, plus l'énergie de seuil d'ionisation est élevée.
- lorsque l'électron ionisant se trouve en vallées latérales, plus le rayon de courbure est important, plus l'énergie de seuil d'ionisation est bas.
- lorsque l'électron ionisant se trouve en vallées latérales, l'énergie de seuil augmente et la probabilité d'ionisation par choc diminue à mesure que le vecteur d'onde de l'électron s'éloigne de la direction principale associée à la vallée.
- la probabilité d'ionisation par choc dépend faiblement de la concentration électronique.

APPLICATION AU MATÉRIAU GaAs.

En vallée centrale $\Gamma 1$, le calcul de la probabilité d'ionisation par choc de W.Quade dans GaAs le long d'une direction $\langle 100 \rangle$ du diagramme de bande de M.V.Fischetti [FIS88], fournit une énergie de seuil de 1.7 eV. A partir du point $\Gamma 1$ jusqu'au maximum située dans une direction $\langle 111 \rangle$ ou $\langle 110 \rangle$, la probabilité d'ionisation par choc est nulle.

La figure I-10, compare la probabilité d'ionisation obtenue avec la formule de W.Quade en vallée X3, située à 0.88 eV d'après J.Blakemore [BLA82], à celle plus réaliste d'un calcul complet de M.Stobbe & al. [STO94] prenant en compte les trois premières bandes de conduction. Elle montre que le seuil d'ionisation avec la probabilité de W.Quade est situé à 3 eV dans une direction principale $\langle 100 \rangle$ associée à la vallée, alors qu'il est situé vers 2.1 eV d'après M.Stobbe & al., pour lesquels la contribution de la première bande est négligeable.

A mesure que le vecteur d'onde relatif en vallée s'éloigne de l'axe principal, l'énergie de seuil augmente et la probabilité d'ionisation diminue. La formule de W.Quade & al. [QUA93] fait apparaître un angle de coupure quand le vecteur d'onde en vallée s'écarte de la direction principale; à partir de cet angle, l'ionisation n'est plus possible.

Les probabilités d'ionisation par choc de M.Stobbe & al. [STO94] et de W.Quade & al. [QUA93] sont comparables dans un secteur angulaire d'environ 30° autour de l'axe principal, et sur une gamme d'énergie allant de 3 eV à 3.4 eV.

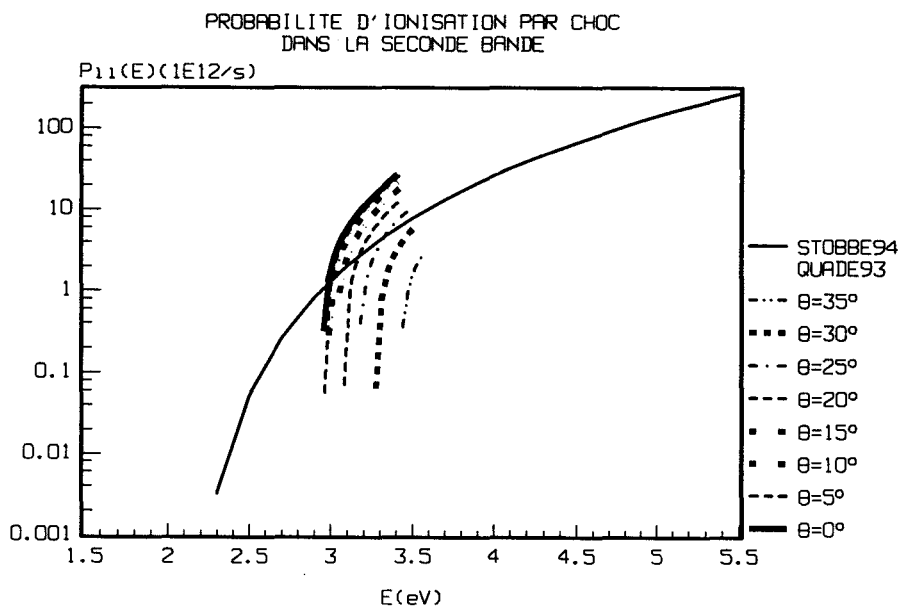


Figure I-10. Probabilité d'ionisation par choc en vallées X3 de GaAs avec la formule analytique de W.Quade & al. [QUA93] pour différents angles par rapport à l'axe principal associée à ce type de vallées (trait plein gras et traits discontinus), comparée à un calcul complet de M.Stobbe & al. [STO94] (trait plein fin).

I-III.2.2.3.4) APERCU DE MODÈLES DE DÉTERMINATION ANALYTIQUE DU SEUIL D'IONISATION PAR CHOC.

Nous avons vu que les hypothèses des théories analytiques de l'ionisation par choc, de type L.V.Keldysh [KEL65], sont valables pour des matériaux dans lesquels l'ionisation se produit à des énergies suffisamment basses, donc pour des matériaux à petit gap. Pour des matériaux à grand gap comme le Silicium, J.Bude & al. [BUD92] ont montré l'existence d'une grande incertitude sur l'énergie de seuil d'ionisation par choc.

Des auteurs ont tenté de déterminer analytiquement l'énergie de seuil d'ionisation à partir des théories analytiques valables pour des matériaux à petit gap. Les valeurs d'énergie de seuil d'ionisation présentées pour des matériaux à grands gap le seront donc à titre purement indicatif.

APPROXIMATION PARABOLIQUE DE C.L.ANDERSON & C.R.CROWEL [AND72].

Dans les années 1970, C.L.Anderson & C.R.Crowel [AND72] calculent les énergies de seuil E_{th} , pour cinq matériaux binaires: Si, Ge, GaAs, GaP, InSb respectivement égales à 1.1, 0.8, 1.7, 2.6, et 0.2 eV, en prenant respectivement pour les énergies de bandes interdites E_{gap} : 1.1, 0.7, 1.4, 2.3, et 0.2 eV.

Les relations de dispersion dans les bandes de conduction et de valence sont supposées paraboliques. Les semi-conducteurs sont supposés être à gap direct; ce qui est en réalité faux pour le Silicium où les minima de basse énergie sont situés aux points X, de même que pour le Germanium où ils sont situés aux points L [QUA93]. En outre les particules secondaires sont supposées être situées dans la même bande de conduction que l'électron de conduction primaire.

En appliquant les multiplicateurs de Lagrange à la contrainte de minimisation de l'énergie:

$$E_{v_1}(\mathbf{K}_1) = \min_{\mathbf{G}_0, \mathbf{K}_i, v_i: i=2,4} \left(E_{v_3}(\mathbf{K}_3) + E_{v_4}(\mathbf{K}_4) - E_{v_2}(\mathbf{K}_2), \mathbf{K}_1 = \mathbf{K}_3 + \mathbf{K}_4 - \mathbf{K}_2 + \mathbf{G}_0 \right) \quad (I-35)$$

où v_i est l'indice de bande de la particule i et où le vecteur d'onde de seuil d'ionisation $\mathbf{K}_1$ de la particule ionisante, et les autres vecteurs d'onde $\mathbf{K}_2$, $\mathbf{K}_3$ et $\mathbf{K}_4$ satisfont à la conservation du vecteur d'onde et de l'énergie:

$$\begin{cases} \mathbf{K}_1 = \mathbf{K}_3 + \mathbf{K}_4 - \mathbf{K}_2 + \mathbf{G}_0 \\ E_{v_1}(\mathbf{K}_1) = E_{v_3}(\mathbf{K}_3) + E_{v_4}(\mathbf{K}_4) - E_{v_2}(\mathbf{K}_2) \end{cases}$$

$\mathbf{G}_0$ est un vecteur de l'espace réciproque, les auteurs obtiennent comme condition nécessaire d'ionisation l'égalité des vitesses de groupe:

$$\frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{K}} E_{v_2}(\mathbf{K}_2) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{K}} E_{v_3}(\mathbf{K}_3) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{K}} E_{v_4}(\mathbf{K}_4).$$

Compte tenu de ces hypothèses les auteurs fournissent une expression analytique simple de l'énergie de seuil en bande de conduction:

$$E_{th} = \left(\frac{1+2\gamma}{1+\gamma} \right) E_{gap}$$

Dans cette expression $\gamma = \frac{m_c^*}{m_v^*}$, où m_v^* , et m_c^* , désignent respectivement la masse effective de l'électron de la bande de valence, et celle de l'électron de la bande de conduction.

Plus tard des auteurs [LAN88] ont amélioré ce modèle en introduisant un coefficient de non-parabolicité pour la bande de conduction de l'électron primaire pour aboutir à une expression analytique plus réaliste.

D'autres auteurs [BEA88][QUA93] ont pris en compte le caractère indirect du gap pour des semiconducteurs comme le Silicium mais en reprenant des hypothèses de C.L.Anderson & C.R.Crowell dont celle concernant la forme parabolique d'au moins une bande de conduction impliquée dans l'ionisation.

J.Bude & K.Hess [BUD92] montrent que l'anisotropie vis-à-vis du vecteur d'onde dans la théorie de C.L.Anderson & C.R.Crowell est exagérée. Ils montrent que la condition (I-35) détermine bien si oui ou non un électron dans une certaine direction ionise, mais que la recherche des solutions par ces derniers auteurs restreint le domaine de recherche utile en avançant que pour une certaine valeur $\mathbf{K}_1$ la minimisation sur $\mathbf{K}_2$, $\mathbf{K}_3$ et $\mathbf{K}_4$ est atteinte par des vecteurs d'onde colinéaires:

$$\frac{\mathbf{K}_2}{\|\mathbf{K}_2\|} = \frac{\mathbf{K}_3}{\|\mathbf{K}_3\|} = \frac{\mathbf{K}_4}{\|\mathbf{K}_4\|} \quad (I-36)$$

La recherche par C.L.Anderson & C.R.Crowell des états satisfaisant aux égalités (I-35) se restreignant à ceux satisfaisant également à (I-36) est considérablement simplifiée, alors qu'en fait il faudrait rechercher les solutions parmi toutes les valeurs $\mathbf{K}_2$, $\mathbf{K}_3$ et $\mathbf{K}_4$

J.Bude & K.Hess [BUD92] montrent, en considérant le cas d'une bande de conduction ellipsoïdale et d'une bande de valence sphérique, que des états satisfaisant à la colinéarité des vecteurs d'onde (I-36) ne sont possibles que si la bande de conduction est également isotrope.

En prenant l'exemple du Silicium, J.Bude & K.Hess montrent en utilisant un calcul s'inspirant de la méthode de E.O.Kane [KAN67] que l'approximation analytique de C.L.Anderson & C.R.Crowell n'est pas bonne pour ce type de matériau à grand gap.

APPROXIMATION NON PARABOLIQUE DE P.T.LANDSBERG & Y.J.YU [LAN88].

Dans l'approximation de P.T.Landsberg et Y.J.Yu [LAN88], la bande de conduction des électrons primaires et secondaires est supposée à gap direct.

Ces deux auteurs [LAN88] supposent que la bande de l'électron de conduction primaire a la forme non parabolique du modèle classique des vallées. Les électrons secondaires sont en bande parabolique.

Les auteurs trouvent pour l'énergie de seuil:

$$E_{th} = \left(\frac{1+\gamma}{2\alpha\gamma} \right) \left(1 + \sqrt{1 - 4\alpha E_{gap} \frac{(2+\gamma)}{(1+\gamma)^2}} \right)$$

Pour GaAs, $E_{gap} \approx 1.424$ eV, $\alpha E_{gap} \approx 1$, $\gamma = 0.149$, l'énergie de seuil d'ionisation est estimée à $E_{th} \approx 1.95$ eV.

Avec l'hypothèse d'une bande de conduction de l'électron primaire parabolique, l'utilisation de la formule de C.L.Anderson & C.R.Crowel [AND72] avec les mêmes paramètres que ci-dessus donne: $E_{th} \approx 1.61$ eV. Ce résultat confirme que l'augmentation du rayon de courbure de bande, résultant ici de la prise en compte d'un coefficient de non-parabolicité positif, augmente l'énergie de seuil, conformément à ce que nous avons vu dans le cadre du modèle de W.Quade & al. [QUA93].

Les hypothèses concernant les bandes des électrons secondaires sont considérées valables par les auteurs étant donné qu'après l'ionisation l'électron de conduction primaire est supposé avoir perdu suffisamment d'énergie pour que son nouvel état puisse être considéré comme un état de fond de bande, pour lequel l'approximation parabolique est justifiée.

Les auteurs supposent également que l'électron diffusé provenant de la bande de valence se trouve dans un état de basse énergie.

L'énergie de seuil trouvée pour GaAs avec ces approximations est assez proche de celle obtenue par M.Stobbe & al. [STO94]. Cependant les résultats de calculs numériques obtenus par ces derniers auteurs montrent que la contribution à la probabilité d'ionisation par choc des électrons de la première bande est négligeable, par rapport à ceux des bandes supérieures, et en particulier de la seconde bande dont le minimum d'énergie se trouve en un point X, donc dans une vallée à gap indirect. Il convient donc d'être prudent sur l'utilisation des expressions analytiques ne faisant pas intervenir le caractère indirect du gap.

I-III.2.2.3.5)LIMITE PRINCIPALE DES MODÈLES ANALYTIQUES.

Les modèles analytiques de l'ionisation par choc sont basés sur l'hypothèse que l'énergie de l'électron de conduction primaire après ionisation, est suffisamment basse pour que la vallée de son état final puisse être supposée parabolique. Or nous avons vu que plus le gap est élevé plus l'énergie d'ionisation et l'énergie de l'état final sont élevées, et donc moins cette hypothèse se trouve satisfaite.

I-III.2.2.4)COMPARAISON DE DIFFÉRENTES PROBABILITÉS D'IONISATION.

La figure I-10 présente la probabilité d'ionisation par choc dans GaAs à 300K calculée soit avec la méthode générale utilisant la structure de bande réelle avec un moyennage par rapport aux états, soit avec des méthodes analytiques basées sur une approximation simple de la structure de bande de type vallée [RID87][FIS91].

A titre de comparaison, nous avons présenté la première tentative de détermination expérimentale de la probabilité d'ionisation par choc due à E.A.Eklund & al. [EKL92].

Les méthodes complètes de moyennage par rapport au vecteur d'onde [STO91][BUD92][STO94] aboutissent toutes à des probabilités d'ionisation par choc en fonction de l'énergie assez voisines.

Les résultats expérimentaux s'approchent mieux des probabilités d'ionisation théoriques calculées avec la structure de bande réelle que de ceux obtenus à l'aide d'une approximation analytique de la structure de bande. L'écart entre théorie réaliste et expérience s'amenuise à mesure que l'énergie augmente. On peut l'expliquer en partie par une meilleure statistique de l'ionisation par choc à haute énergie à cause du plus grand nombre d'événements ionisants.

Les probabilités d'ionisation basées sur une approximation analytique de la structure de bande sont soit nettement surestimées (cas de la probabilité d'ionisation de L.V.Keldysh [KEL65] de la simulation de M.V.Fischetti [FIS91] avec pour paramètres $C=2.5 \times 10^{15}$ /s et $E_{th}=1.7$ eV), soit nettement sous-estimées dans la formule de B.K.Ridley [RID87]. Comme cette dernière formule a pour paramètre ajustable la seule énergie de seuil, que la plupart des méthodes analytiques de détermination de l'énergie de seuil se situe vers 1.7 eV, nous pouvons considérer que la formule de B.K.Ridley [RID87] est emblématique des approximations des théories analytiques les plus réalistes. Nous en déduisons que ce type d'approximation conduit à une sous-estimation de la probabilité d'ionisation par choc pour un matériau à grand gap comme GaAs.

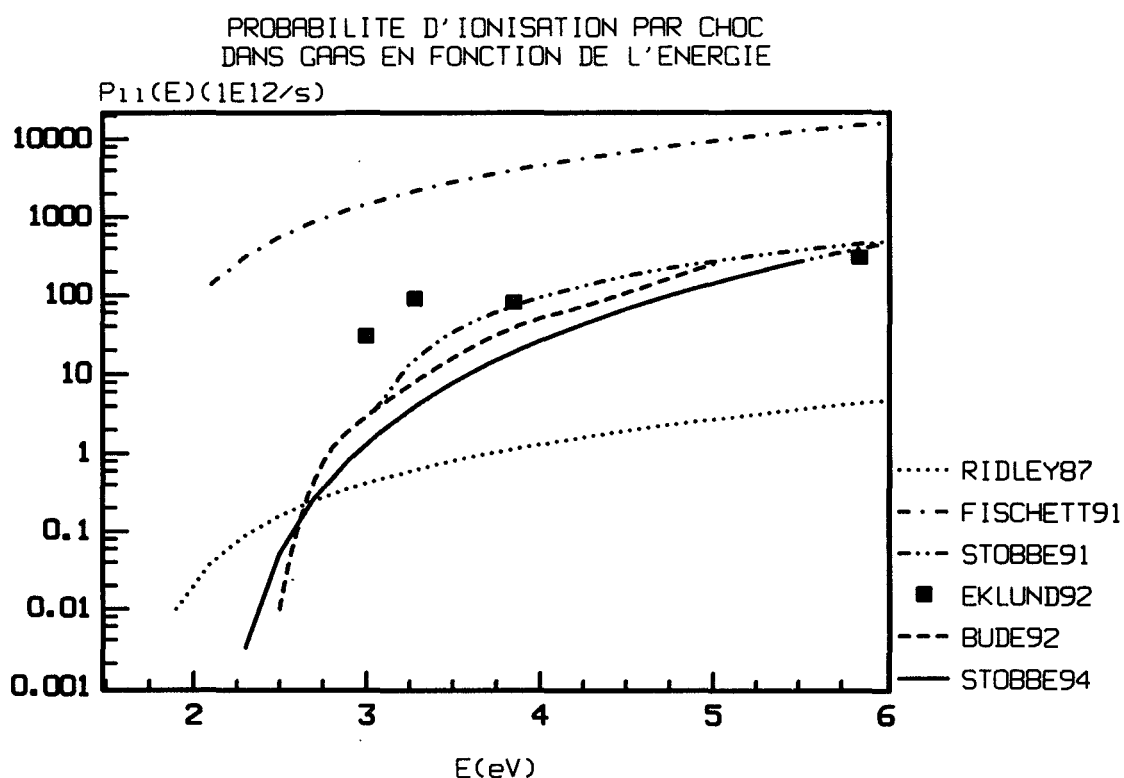


Figure I-10. Probabilité d'ionisation par choc dans GaAs à 300K.

- pointillés: calcul avec la formule analytique de B.K. Ridley [RID87]
- traits mixtes: calcul de M.V.Fischetti [FIS91] avec la formule analytique de L.V.Keldysh [KEL65]
- traits mixtes doubles: calcul numérique de M.Stobbe & al. [STO91]
- carrés: détermination expérimentale de E.A.Eklund [EKL92]
- tirets: calcul numérique de J.Bude & K.Hess [BUD92]
- trait plein: calcul numérique de M.Stobbe & al. [STO94]

CONCLUSION.

L'ionisation par choc qui est le principal mécanisme de diffusion en champ fort a fait l'objet, dans la littérature, d'une étude assez détaillée.

Nous avons vu que l'expression générale de la probabilité d'ionisation par choc peut, en régime stationnaire, être simplifiée en une expression moyennée ne dépendant que de l'énergie de l'électron ionisant.

Les modèles de calcul de la probabilité d'ionisation basés sur une approximation parabolique d'une vallée impliquée dans l'ionisation par choc, comme le modèle de W.Quade & al. [QUAD93], donnent des résultats qualitatifs intéressants pouvant servir au choix d'un matériau pour une application particulière en champ fort. Malheureusement, dans ce type de modèle l'approximation sur la structure de bande, est trop simplificatrice à très haute énergie d'ionisation donc pour des matériaux à grand gap comme GaAs. Pour ces matériaux, il faut donc recourir à un calcul plus général utilisant la structure de bande réelle.

L'expression moyennée de la probabilité d'ionisation par choc de N.Sano & A.Yoshii [SAN95] permet de retrouver un étalement par collision ("collisional broadening") vers les basses énergies, déjà mis en évidence par J.Bude & al. [BUD92], confirmant l'incertitude sur l'énergie de seuil. La probabilité d'ionisation par choc de N.Sano & A.Yoshii ne dépend que de l'énergie, sous la forme d'une fonction-intégrale simple de la densité d'états réelle. La comparaison de leur probabilité d'ionisation dans GaAs avec celle issue du calcul général moyenné de M.Stobbe & al. [STO94], a permis de confirmer les résultats de leur calcul.

L'expression analytique d'ajustement de la probabilité d'ionisation par choc de M.Stobbe & al. [STO94], donne une formulation analytique simple de la probabilité d'ionisation par choc, dont les paramètres pourront être ajustés aux calculs numériques obtenus avec l'expression de N.Sano & A.Yoshii [SAN95].

BIBLIOGRAPHIE.

- [ADL63]: S.L.Adler, Phys. Rev. 130, 1654 (1963).
- [AND72]: C.L.Anderson & C.R.Crowell Phys. Rev. B 5 n°6, 2267 (1972).
- [BAC82]: G.Baccarani & al., «Physics of Submicron Devices, in Large Scale Integrated Circuit Technology: State of the Art and Prospects», éd. The Hage:Nijhoff, 647 (1982).
- [BAC86]: G.Baccarani & al., «Process and Devices Modeling», éd. W.L.Engl North Holland, (1986).
- [BEA88]: A.R.Beattie, Semicond. Sci. Technol. 3, 48 (1988).
- [BLA82]: J.Blakemore, J. Appl. Phys. 53 n°10, 123 (1982).
- [BRU89]: R.Brunetti & C.Jacobini, Solid State Electron.32 n°12, 1663 (1989).
- [BUD92]: J.Bude & K.Hess, J. Appl. Phys. 72 n°8, 3554 (1992).
- [BUD92]: J.Bude, K.Hess, G.J.Iafrate, Phys. Rev. B 45, n°19, 10958 (1992).
- [CHA73]: D.J.Chadi & M.L.Cohen, Phys. Rev. B 8 n°12, 5747 (1973).
- [CHA83]: Y.C.Chang & al. Appl. Phys. Lett. 42 n°1, (1983).
- [CHA93]: P.K.Chakraborty & K.P.Ghatak, J. Appl. Phys. 74 n°5, 3246 (1993).
- [CHE76]: J.R.Chelikowsky & M.L.Cohen Phys. Rev. B 14 n°2, 556 (1976).
- [COH66]: M.L.Cohen & T.K.Bergstresser, Phys. Rev. 141, 789 (1966).
- [CON66]: E.M.Conwell & M.O.Vassell, IEEE Trans. Electron. Dev. ED-13 n°1, 22 (1966).
- [EHR59]: H.Ehrenreich & M.H.Cohen, Phys. Rev. 115, 786 (1959).
- [EKL92]: E.A.Eklund & al., J. Vacuum Sci. Technol. B 10 n°4, 2046 (1992).
- [FAW70]: W.Fawcett & al., J. Chem. Phys. Chem. Solids 31, 1963 (1970).
- [FIS88]: M.V.Fischetti, Phys. Rev. B 38, n°14, 9721 (1988).
- [FIS91]: M.V.Fischetti, IEEE Trans. Elec. Dev. 38 n°3, 634 (1991).
- [GOM93]: G.Gombos, Phys. stat. sol. (b) 176, K17 (1993).
- [HER56]: C.Herring & E.Vogt, Phys. Rev. 101, 944 (1956).
- [KAN59]: E.O.Kane, J. Phys. Chem. Solids 12, 181 (1959).
- [KAN67]: E.O.Kane, Phys. Rev. 159 n°3, 159 (1967).
- [KAS79]: A.Kaszynski, Thèse de doctorat, Lille (1979).
- [KEL65]: L.V.Keldysh, Soviet Phys. JETP 21 n°6, 1135 (1965).
- [KIR75]: P.Kiréev, 'La physique des semi-conducteurs', éd. Mir Moscou (1975).
- [KUN94]: T.Kunikiyo & al., J. Appl. Phys. 75 n°1, 297 (1994).
- [LAN88]: P.T.Landsberg & Y.J.Yu, J. Appl. Phys. 63 n°5, 1789 (1988).
- [LAW77]: H.D.Law & C.A.Lee, Solid State Elec. 21, 331 (1977).

- [QUA93]: W.Quade & al., Solid State Electron. 36 n°10, 1493 (1993).
- [RID81]: B.K.Ridley, Quantum Processes in Semiconductors', (1981).
- [RID87]: B.K.Ridley, Semicond. Sci. Technol. 2, 116 (1987).
- [SHI81]: H. Shichijo & K.Hess, Phys. Rev. B 23 n°8, 4197 (1981).
- [SAN95]: N.Sano & A.Yoshii, J. Appl. Phys. 77 n°5, 2020 (1995).
- [STO94]: M.Stobbe & al., Phys. Rev. B 49 n°7, 4494 (1994).
- [SZE81]: S.M.SZE, 'Physics of Semiconductor Devices', éd. Wiley New-York (1981).
- [VOG91]: T.Vogelsang & W.Hänsch, J.Appl. Phys. 7 n°3, 1493 (1991).
- [WAN93]: X.Wang & al., J. Appl. Phys 73 n°7, 3339 (1993).
- [WAN94]: Y.Wang & K.F.Brennan, J. Appl. Phys. 75 n°1, 313 (1994).

CHAPITRE II

**LE MODÈLE DE STRUCTURE DE BANDE
ET LES INTERACTIONS
APPLIQUÉS AUX MATÉRIAUX MASSIFS GaAs et InP.
MISE EN OEUVRE DANS LA MÉTHODE MONTE-CARLO**

CHAPITRE II

**LE MODÈLE DE STRUCTURE DE BANDE
ET LES INTERACTIONS
APPLIQUÉS AUX MATÉRIAUX MASSIFS GaAs et InP.
MISE EN OEUVRE DANS LA MÉTHODE MONTE-CARLO**

SOMMAIRE DU CHAPITRE II

INTRODUCTION.....	II-4
II-I)LE MODÈLE DE STRUCTURE DE BANDE ET SON APPLICATION AUX MATÉRIAUX GaAs ET InP.....	II-6
II-I-1)MODÈLE DES VALLÉES ÉTENDUES INCLUANT LA DEUXIÈME BANDE DE CONDUCTION.....	II-6
II-I.1.1)FORMULATION GÉNÉRALE.....	II-6
II-I.1.2)FORMULATION EN VALLÉE CENTRALE Γ_1	II-9
II-I.1.3)FORMULATION EN VALLÉES LATÉRALES L1, X1 ET X3.	II-11
II-I.2)APPLICATION DU MODÈLE À GaAs.....	II-17
II-I.2.1)VALEURS DES PARAMÈTRES DE BANDE DE GaAs.	II-19
II-I.2.2)DENSITÉS D'ETATS ÉLECTRONIQUES DANS GaAs.	II-24
II-I.2.3)ISOÉNERGIES DANS UN PLAN Γ XW DE LA ZONE DE BRILLOUIN DANS GaAs.	II-27
II-I.2.4)COURBES DE DISPERSION LE LONG DES DIRECTIONS PRINCIPALES DANS GaAs. COMPARAISON AVEC LA LITTÉRATURE.	II-29
II-I.3)APPLICATION DU MODÈLE À InP.....	II-36
II-I.3.1)VALEURS DES PARAMÈTRES DE BANDE DE InP.....	II-36
II-I.3.2)DENSITÉS D'ETATS ÉLECTRONIQUES DANS InP.....	II-41
II-I.3.3)ISOÉNERGIES DANS UN PLAN Γ XW DE InP.	II-43
II-II)LES INTERACTIONS ET LEUR PRISE EN COMPTE AVEC LE MODÈLE DE STRUCTURE DE BANDE.....	II-45
II-II.1)DESCRIPTION GÉNÉRALE DES INTERACTIONS.....	II-45
II-II.1.1)LES INTERACTIONS AUTRES QUE L'IONISATION PAR CHOC.	II-45
II-II.1.2)L'IONISATION PAR CHOC.	II-47
II-II.2)LES PROBABILITÉS EN VALLÉES DANS GaAs.....	II-52
II-II.2.1)TABLEAU DES PARAMÈTRES D'INTERACTIONS DANS GaAs.	II-52
II-II.2.2)PROBABILITÉS EN FONCTION DE L'ÉNERGIE DANS GaAs	II-54
II-II.2.3)COMPARAISON DES PROBABILITÉS AVEC LA LITTÉRATURE.....	II-55
II-II.3)LES PROBABILITÉS EN VALLÉES DANS InP.....	II-60
II-II.3.1)TABLEAU DES PARAMÈTRES D'INTERACTIONS DANS InP.....	II-60
II-II.3.2)PROBABILITÉS EN FONCTION DE L'ÉNERGIE DANS InP.....	II-60

II-III)LA MISE EN OEUVRE DU MODÈLE DANS LA MÉTHODE MONTE-CARLO..... II-65

II-III.1)TRAITEMENT DE LA MÉTHODE MONTE-CARLO.....II-66

II-III.1.1)VOL LIBRE. ACTION DU CHAMP EXTÉRIEUR APPLIQUÉ II-66

II-III.1.2)ACTION DES INTERACTIONS..... II-67

II-III.2)STATISTIQUE LIÉE AU TEMPS DANS LA SIMULATION.....II-73

BIBLIOGRAPHIE..... II-76

INTRODUCTION.

Le transport électronique dans un matériau cristallin semiconducteur de type N est essentiellement dû aux électrons situés en bande de conduction dont la relation de dispersion est déterminée par le modèle de structure de bande (SDB). En champ fort, donc à haute énergie, nous avons vu au chapitre I qu'un modèle analytique simple développé au voisinage des minima d'énergie, comme le modèle classique des vallées, doit être abandonné, car, à haute énergie, il ne restitue ni une SDB correcte, ni par conséquent une densité d'états (DOS) correcte.

Pour avoir une représentation correcte du transport électronique, il faut utiliser, soit un modèle complet de calcul de la SDB réelle, comme la méthode du pseudo-potentiel empirique, soit un modèle plus simple, en rendant assez bien compte au voisinage des minima Γ , L, X et des maxima W, et permettant de déterminer rapidement l'inversion de la relation de dispersion [BRU89][VOG91][WAN93] donnant le vecteur d'onde de l'électron en fonction de son énergie, la bande qu'il occupe, et son orientation. Rappelons que cette partie du traitement est la plus coûteuse dans une simulation Monte-Carlo utilisant une SDB réelle du type pseudo-potentiel empirique, puisqu'elle y accapare près de 95% du temps CPU, d'après X.Wang & al. [WAN93].

Le § II-I propose un modèle analytique de SDB satisfaisant à ces conditions, et développé pour les matériaux de type III-V. Ce modèle sera dit des vallées étendues, parce qu'il prolonge le modèle classique des vallées aux énergies les plus élevées d'une bande.

La mise en évidence du rôle des bandes supérieures, par M.Stobbe & al. [STO94], nous a conduit à prendre en compte la seconde bande de conduction par l'intermédiaire des vallées de symétrie X de cette bande. Le modèle de SDB proposé est le premier modèle analytique à tenir compte de la seconde bande de conduction pour l'étude du transport dans les III-V.

Les principales caractéristiques de structure de bande (SDB) sont présentées pour les matériaux GaAs puis InP. La présentation de ces grandeurs calculées à partir du modèle proposé suit grosso modo le même cheminement pour les deux matériaux semiconducteurs.

Les paramètres de SDB sont présentés. Dans le matériau GaAs, dont la connaissance de la SDB fait globalement l'objet d'un consensus unanime, les relations de dispersion dans les directions principales sont également présentées.

La DOS calculée à partir du modèle de SDB est comparée à différents calculs de la littérature. Elle est ensuite détaillée pour connaître les contributions respectives des deux premières bandes et des vallées qui y sont modélisées.

Pour avoir un aperçu de la SDB à haute énergie, les isoénergies sont présentées dans un plan Γ XW de la zone de Brillouin, contenant les points de plus haute énergie W.

Nous avons vu au chapitre I, que le transport électronique dans l'espace réciproque ayant un caractère stochastique, il est nécessaire de déterminer les probabilités d'interaction à partir du modèle de SDB. C'est ce qui est fait au § II-II.

L'explicitation analytique assez simple des probabilités d'interaction dans le cas de l'approximation de la structure de bande (SDB) par le modèle classique des vallées, est adaptée à haute énergie au modèle des vallées étendues, pour rendre compte de la décroissance de la densité d'états (DOS) réelle.

La comparaison des différentes probabilités d'interaction prises en compte donne, à haute énergie, une idée de leur importance relative.

Pour GaAs, les ordres de grandeur des probabilités d'interaction sont vérifiés par comparaison avec les résultats de publications. Par contre pour InP, la comparaison est difficile étant donné le peu de résultats de la littérature.

Une attention particulière est portée à l'ionisation par choc, pour laquelle J.Bude & K.Hess [BUD92], ont montré, dans GaAs, que la simulation réaliste de ce processus nécessite la prise en compte d'une probabilité nettement plus faible que celle utilisée par des simulations se limitant à l'étude du transport dans la première bande [SHI81] [BRE84] [FIS88] [FIS91]. La description d'un événement ionisant est détaillée, et les grandeurs physiques intervenant dans ces calculs sont précisées.

L'étude portant sur le transport dans le matériau massif, nous avons vu au chapitre I que les phénomènes de transport peuvent être entièrement décrits dans l'espace réciproque par une succession d'interactions et de vols libres, sous l'action du champ appliqué, modifiant le vecteur d'onde et l'énergie de l'électron.

La mise en oeuvre de la simulation du transport électronique dans le cadre de l'équation de transport de Boltzmann, est réalisée à l'aide de la méthode de Monte-Carlo. Elle est exposée au § II-III, compte tenu des caractéristiques des interactions et du modèle de SDB des vallées étendues.

II-I) LE MODÈLE DE STRUCTURE DE BANDE ET SON APPLICATION AUX MATÉRIAUX GaAs ET InP.

II-I-1) MODÈLE DES VALLÉES ÉTENDUES INCLUANT LA DEUXIÈME BANDE DE CONDUCTION.

II-I.1.1) FORMULATION GÉNÉRALE.

La modélisation de la structure de bande est réalisée en décomposant les bandes étudiées en vallées. La première bande de conduction est décrite par la vallée centrale Γ_1 et les vallées latérales L_1 , et X_1 . La seconde bande de conduction est décrite par les vallées latérales X_3 .

Chaque vallée est décomposée en deux parties: l'une relativement au minimum d'énergie, et l'autre relativement à un maximum d'énergie. Il s'agit donc de vallées "étendues" puisque leur description va bien au delà des minima correspondant. En cela, elles diffèrent profondément des vallées du modèle classique des vallées dont la validité est limitée au voisinage des minima.

Chaque relation de dispersion en vallée (RDV) s'exprime en deux parties, l'une étant calculée relativement à un minimum, l'autre relativement à un maximum d'énergie. La RDV est donc elle-même décomposée en deux relations de dispersion locales (RDL): l'une inférieure en fond de vallée (RDLi), l'autre supérieure (RDLs). L'ensemble des RDV constitue la relation de dispersion de la structure de bande.

La courbe en trait plein à la figure II-1 représente la RDV avec le modèle proposé dans une direction contenant un maximum principal, et la courbe en pointillés, qui en fond de vallée est confondue avec la précédente, représente la RDV avec le modèle classique des vallées.

Le passage de la RDLi à la RDLs se fait en un point $(\mathbf{k}_c; \varepsilon_c)$, appelé point de croisement. Une grandeur " $\hat{x}$ " s'exprime relativement à un extremum $(\mathbf{k}_0; \varepsilon_0)$, qui est soit un minimum $(0;0)$, dans ce cas " $\hat{x} = x$ ", soit un maximum $(\bar{\mathbf{k}}_{\max}; \bar{\varepsilon}_{\max})$, dans ce cas " $\hat{x} = \bar{x}$ ". La RDV s'exprime par:

$$\frac{\hbar^2 \hat{k}^2}{2\hat{m}^*} = \hat{\gamma}(\hat{\varepsilon}) \quad (II-1)$$

$$\text{avec } \begin{cases} \hat{\gamma}(\hat{\varepsilon}) = \hat{\varepsilon}(1 + \hat{\alpha}\hat{\varepsilon} + \hat{\beta}\hat{\varepsilon}^2) \\ \hat{k}_i = |\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_{0i}| \\ \hat{\varepsilon} = |\varepsilon - \varepsilon_0| \end{cases}, \text{ et } \begin{cases} (\mathbf{k}_0; \varepsilon_0) = (0;0) & \text{pour } 0 < k \leq k_c \\ (\mathbf{k}_0; \varepsilon_0) = (\bar{\mathbf{k}}_{\max}; \bar{\varepsilon}_{\max}) & \text{pour } k_c < k \leq \bar{k}_{\max} \\ k_c = \frac{\bar{k}_{\max}}{2} \end{cases}$$

Le polynôme $\hat{\gamma}$ du modèle proposé est de degré 3 pour assez bien rendre compte de la SDB à haute énergie. Dans certains cas, pour traduire l'incorporation d'états de haute énergie ne pouvant pas

être décrits par les seuls coefficients α et β d'ordres respectifs 1 et 2, il sera nécessaire, au niveau de la RDLi, de considérer un polynôme γ de degré 4, à l'aide d'un coefficient de non-parabolicité ω d'ordre 3.

La RDV (II-1) pour les III-V est analogue à celles de R.Brunetti & C.Jacoboni [BRU89] pour Si, mais avec, pour ces auteurs, l'utilisation au second membre de (II-1), d'une fonction $\hat{\gamma}$ donnée par le modèle classique des vallées: $\hat{\gamma}(\varepsilon) = \varepsilon(1 + \hat{\alpha}\varepsilon)$. Ces auteurs montrent que c'est la prise en compte de la RDLs qui permet de mieux décrire la SDB que dans le modèle classique des vallées, dans lequel $k_c \rightarrow \infty$.

De même que dans le modèle de R.Brunetti & C.Jacoboni [BRU89], les vallées sont supposées périodiques, avec une période égale au vecteur d'onde maximum dans la direction considérée. La surface décrite par les extrémités de l'ensemble des plus grands vecteurs d'onde, pour toutes les orientations possibles, constitue la frontière de la vallée.

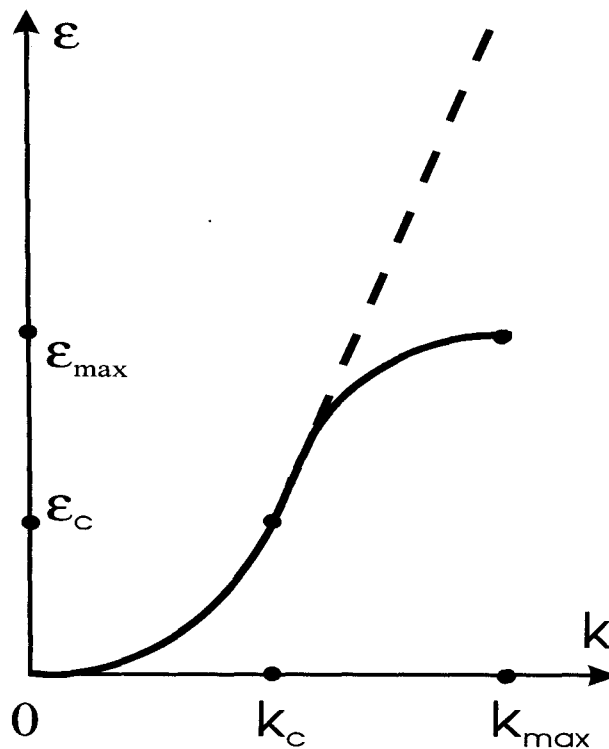


Figure II-1. Relation de dispersion locale en vallée dans une direction pour laquelle il existe un maximum principal relativement au fond de vallée.

La relation de dispersion locale en vallée avec le modèle proposé est comparée à celle obtenue en pointillés avec le modèle classique des vallées.

La RDV du modèle proposé permet de calculer directement le vecteur d'onde en fonction de l'énergie. Elle permet également de calculer analytiquement l'énergie en fonction du vecteur d'onde, puisque le second membre des RDL est un polynôme du troisième degré de l'énergie (du quatrième

degré dans certains cas). Les énergies sont donc les racines d'équations polynomiales dont les solutions usuelles sont présentées en annexe II.

Les paramètres de bande apparaissant dans une RDV, sont déterminés en tenant compte de considérations de continuité à l'énergie de croisement des RDL dans une direction contenant un maximum principal, et par des caractéristiques de bande du matériau: diagramme de bande et/ou données matériau du modèle classique des vallées, et caractéristiques de densité d'états réelle.

Les équations de continuités du vecteur d'onde et de sa dérivée par rapport à l'énergie sont présentées en annexe III. Elles permettent d'établir une expression assez simple des coefficients $\tilde{\alpha}$, et $\tilde{\beta}$ en fonction des paramètres de bande, m^* , α , β , ω , ϵ_c ou $k_{\max}$, $\epsilon_{\max}$, et $\tilde{m}^*$. Ce sont ces derniers paramètres qui sont ajustés aux caractéristiques de bande du matériau, trouvées dans la littérature.

La formulation des relations de dispersion locales donne une expression analytique assez simple de la densité d'états:

$$\hat{D}(\hat{\epsilon}) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2\hat{m}_d^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{d\hat{\gamma}(\hat{\epsilon})}{d\epsilon} \sqrt{\hat{\gamma}(\hat{\epsilon})} \quad (\text{II-2})$$

où $\hat{m}_d^*$ est la masse de densité d'états à l'extremum de bande considéré.

L'application de la densité d'états (II-2) à l'ensemble des vallées, permet de calculer une densité d'états globale voisine de la densité d'états réelle.

REMARQUES.

Les coefficients $\tilde{\alpha}$ et $\tilde{\beta}$, s'expriment analytiquement en fonction des autres grandeurs de SDB du modèle, d'après l'annexe III, à l'aide du changement de variable (II-3), par les relations (II-4)

et (II-5) respectivement.

$$\eta_c = \tilde{\epsilon}_c \frac{\gamma'(\epsilon_c)}{\gamma(\epsilon_c)} \quad (\text{II-3})$$

$$\tilde{\alpha} = \begin{cases} \frac{\eta_c - 1 + (\eta_c - 3)\beta\tilde{\epsilon}_c^2}{(2 - \eta_c)\tilde{\epsilon}_c}, & \text{si } \eta_c \neq 2 \\ \frac{1}{\tilde{\epsilon}_c} \left(\frac{m^*}{\tilde{m}^*} \frac{\gamma(\epsilon_c)}{\tilde{\epsilon}_c} - 2 \right), & \text{si } \eta_c = 2 \end{cases} \quad (\text{II-4})$$

$$\tilde{\beta} = \frac{1}{\tilde{\epsilon}_c^2} \left(1 + \frac{m^*}{\tilde{m}^*} \frac{\gamma(\epsilon_c)}{\tilde{\epsilon}_c} (\eta_c - 2) \right) \quad (\text{II-5})$$

Une relation de la forme $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \gamma(\varepsilon)$, permet d'exprimer analytiquement la masse effective

en fonction de l'énergie d'après l'annexe IV: $m^*(\varepsilon) = \frac{\gamma'(\varepsilon)^3}{\gamma'(\varepsilon)^2 - 2\gamma(\varepsilon)\gamma''(\varepsilon)} m^*$.

Avec $\gamma(\varepsilon) = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon + \beta\varepsilon^2)$, la masse effective peut présenter un point de discontinuité dont l'énergie est simplement calculable analytiquement par l'expression établie en annexe V.

II-I.1.2) FORMULATION EN VALLÉE CENTRALE Γ_1 .

II-I.1.2.1) RELATION DE DISPERSION EN VALLEE CENTRALE Γ_1 .

La vallée centrale étendue Γ_1 est décrite par le minimum d'énergie Γ_1 situé au centre de la zone de Brillouin, et par les points intermédiaires entre ce minimum et chacun des maxima d'énergie associé à chacun des axes cristallographiques principaux $\delta = \Lambda, \Delta$, et Σ .

La relation de dispersion a pour expression:

$$\frac{\hbar^2 \hat{k}^2}{2\hat{m}_\delta^*} = \hat{\gamma}_\delta(\hat{\varepsilon})$$

$$\text{avec } \begin{cases} \hat{\gamma}_\delta(\hat{\varepsilon}) = \hat{\varepsilon}(1 + \hat{\alpha}_\delta \hat{\varepsilon} + \hat{\beta}_\delta \hat{\varepsilon}^2) \\ \hat{k}_i = |\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_{0\delta i}| \\ \hat{\varepsilon} = |\varepsilon - \varepsilon_{0\delta}| \end{cases}, \text{ et } \begin{cases} \hat{x} = x \text{ et } (\mathbf{k}_{0\delta}; \varepsilon_{0\delta}) = (0; 0) & \text{pour } 0 < k \leq k_c \\ \hat{x} = \tilde{x} \text{ et } (\mathbf{k}_{0\delta}; \varepsilon_{0\delta}) = (\bar{\mathbf{k}}_{\max \delta}; \bar{\varepsilon}_{\max \delta}) & \text{pour } k_{c\delta} < k \leq \bar{k}_{\max \delta} \\ k_{c\delta} = \frac{\bar{k}_{\max \delta}}{2} \end{cases}$$

Le point $(\bar{\mathbf{k}}_{\max \delta}; \bar{\varepsilon}_{\max \delta})$ est le maximum dans la direction du vecteur d'onde $\mathbf{k}$, et $\bar{k}_{\max \delta}$ est le module du vecteur d'onde maximum dans la direction principale δ associée à $\mathbf{k}$.

A partir de la connaissance de la relation de dispersion le long de chacune des trois directions principales, une façon assez simple de reconstituer la RDV dans toutes les directions, consiste, pour un vecteur d'onde donné, à considérer la relation de dispersion associée à la direction principale $\delta = \Lambda, \Delta$ ou Σ , la plus proche de l'orientation du vecteur d'onde.

Soit $\tilde{\mathbf{k}}$ le vecteur d'onde $\mathbf{k}$ ramené dans le premier quadrant ($k_X \geq 0, k_Y \geq 0, k_Z \geq 0$):

$$\tilde{\mathbf{k}} = (|k_X|, |k_Y|, |k_Z|)$$

La direction principale δ associée au vecteur d'onde $\mathbf{k}$, est telle que: $\bar{k}_\delta = \text{Sup}(\bar{k}_\Lambda, \bar{k}_\Delta, \bar{k}_\Sigma)$, où les termes du second membre représentent les projections du vecteur d'onde $\tilde{\mathbf{k}}$ le long des directions principales Λ, Δ , et Σ . Leur expression est donnée par:

$$\begin{cases} \tilde{k}_\Lambda = \frac{1}{\sqrt{3}}(|k_X| + |k_Y| + |k_Z|) \\ \tilde{k}_\Delta = |k_Z| \\ \tilde{k}_\Sigma = \frac{1}{\sqrt{2}}(|k_Y| + |k_Z|) \end{cases}$$

REMARQUES.

Considérons la relation de dispersion le long d'une direction principale de symétrie δ . L'utilisation de l'une ou l'autre des trois expressions de la relation de dispersion implique qu'il existe un secteur angulaire dans lequel sont situés les états associés à la direction δ .

Si l'on suppose pour simplifier que la vallée centrale est isotrope, il faut introduire dans la RDLi, un coefficient de non-parabolicité ω d'ordre 3 (transformant γ_δ en polynôme de degré 4), pour traduire la forte densité d'états à haute énergie.

II-I.1.2.2) DENSITÉ D'ÉTATS EN VALLÉE Γ_1 .

Le calcul de la densité d'états en vallée Γ_1 est compliqué à haute énergie à cause de l'anisotropie des directions principales. Il est toutefois possible d'en déterminer une expression semi-empirique prenant en compte les caractéristiques de SDB dans ces directions. La densité d'états obtenue est une moyenne pondérée de chaque densité d'états $\hat{D}_\delta(\varepsilon)$, exprimée par la relation (II-2), qu'on aurait en supposant la vallée isotrope, avec comme relation de dispersion, l'expression considérée le long de la direction principale $\delta = \Lambda, \Delta$, ou Σ . La densité d'états en vallée Γ_1 a pour expression générique approchée au voisinage des extrema:

$$\hat{D}_\Gamma(\hat{\varepsilon}) = \frac{\sum_{\delta=\Lambda, \Delta, \Sigma} M_\delta \cdot \hat{D}_\delta^2(\hat{\varepsilon}) \cdot \Theta(\hat{\varepsilon}_{c\delta} - \hat{\varepsilon})}{\sum_{\delta=\Lambda, \Delta, \Sigma} M_\delta \cdot \hat{D}_\delta(\hat{\varepsilon})}, \text{ où } \Theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x \leq 0 \\ 1 & \text{pour } x > 0 \end{cases}$$

et M_δ est la multiplicité de la direction δ ($M_\Lambda = 8$, $M_\Delta = 6$, et $M_\Sigma = 12$).

II-I.1.2.3) MODALITÉS DE CHOIX DES PARAMÈTRES DE STRUCTURE DE BANDE EN VALLÉE CENTRALE Γ_1 .

Le point Γ_1 , est situé au centre de la zone de Brillouin. Son énergie de fond de vallée est trouvée dans la littérature dans le cadre du modèle classique des vallées, ou bien elle est donnée par le diagramme de bande.

Le maximum principal ($\bar{\epsilon}_{\max \delta}$; $\bar{k}_{\max \delta}$) situé dans la direction δ est également fourni par le diagramme de bande. La masse effective y est isotrope: $m_{\delta}^* = m_{\Gamma}^*$. Elle est trouvée dans la littérature ou ajustée au diagramme de bande.

Le coefficient de non-parabolicité du premier ordre de fond de vallée est donné par la méthode **K.p**:

$$\alpha = \frac{1}{E_{0\Gamma}} \left(1 - \frac{m_{\Gamma}^*}{m_0} \right)^2$$

Les coefficient de non-parabolicité du second ordre β_{δ} , (éventuellement celui du troisième ordre ω), ainsi que la masse effective au voisinage du maximum principal, $\tilde{m}_{\delta}^*$, sont ajustés au diagramme de bande à l'aide de la relation de dispersion.

II-I.1.3) FORMULATION EN VALLÉES LATÉRALES L1, X1 ET X3.

Les vallées étendues L1, X1, et X3 sont respectivement définies par les minima L1, X1, et X3, ainsi que par les points intermédiaires entre ces minima et les maxima d'énergie de bande situés aux points W. Ces vallées fournissent l'essentiel de la contribution à la densité d'états globale à haute énergie. Leur description réaliste est donc particulièrement importante.

II-I.1.3.1) DESCRIPTION AUX POINTS PRINCIPAUX ASSOCIÉS AUX VALLÉES L1, X1 ET X3.

II-I.1.3.1.1) ANISOTROPIE DE BANDE AU VOISINAGE D'UN POINT L1, X1 OU X3.

De nombreux modèles classiques de type vallée, font l'hypothèse que les états de fond de vallées latérales peuvent être approchés avec une symétrie sphérique de la RDV. Ils utilisent par conséquent une masse effective unique pour toutes les directions. Cette masse est identique à la masse de densité d'états de la vallée, m_d^* .

Pour rendre compte de façon plus précise de la SDB le long de l'axe cristallographique associé à la vallée, la relation de dispersion locale en fond de vallée (RDLi) est approchée par une expression présentant une symétrie elliptique, avec une symétrie de révolution autour de l'axe cristallographique associé à la vallée.

REMARQUE.

En réalité l'axe principal est un axe de symétrie d'ordre supérieur à 1, et la RDLi présente une anisotropie dans la direction transverse.

Dans le modèle nous admettrons que l'axe cristallographique principal associé à un minimum L ou X est un axe d'ordre 1 dans l'approximation d'une symétrie ellipsoïdale de révolution par rapport à cet axe. A une énergie donnée, tous les états situés dans un plan affine transverse à cet axe appartiennent à un cercle. Il y a donc isotropie de la relation de dispersion en fond de vallée transversalement à l'axe principal.

Même l'hypothèse moins simplificatrice d'une forme ellipsoïdale des isoénergies de fond de vallée latérale revient donc quand même à réaliser un moyennage des états situés dans les directions transverses à l'axe cristallographique principal associé à la vallée.

II-I.1.3.1.2) ANISOTROPIE DE BANDE AU VOISINAGE DES MAXIMA W.

Dans les matériaux III-V, les points principaux W ont pour particularité d'être les maxima de plus haute énergie de bande. Pour modéliser tous les états de la structure de bande, il faut en particulier modéliser la relation de dispersion au voisinage de ces points.

Comme en témoigne la zone de Brillouin reproduite à la figure II-2, à un point L peuvent être associés six points W, et à un point X peuvent en être associés quatre. Les points W peuvent être représentés sur un cercle situé dans le plan affine transverse à un axe cristallographique principal Λ ou Δ portant respectivement un point L ou X. Les vallées latérales L et X, étendues aux hautes énergies, ont donc en commun que les maxima W puissent leur être associés.

Supposons que la RDLs au voisinage d'un maximum W ait la même formulation qu'au voisinage d'un minimum. L'annexe VI montre que l'utilisation d'une densité d'états réaliste introduit nécessairement une anisotropie particulière de la relation de dispersion. Elle montre aussi qu'en supposant la RDLi elliptique, sa symétrie doit être de révolution pour que les maxima W soient bien localisés sur un cercle. Leur distribution y est uniforme dans le modèle.

La prise en compte de l'anisotropie particulière due à la localisation des points W, produit un déplacement de la frontière des états de plus grand vecteur d'onde vers les plus petits vecteurs d'onde. C'est ce que montre la figure II-3 représentant une section de la frontière d'une vallée latérale avec (courbe en trait plein) et sans (courbe en tirets) prise en compte de cette anisotropie. La section est réalisée dans un plan contenant l'axe principal associé à la vallée. La symétrie de révolution autour de cet axe permet de reconstituer la frontière complète.

La frontière de la vallée sans prise en compte réaliste des points W est un ellipsoïde dont tous les points ont l'énergie des points W. Il y a donc surestimation du nombre d'états de haute énergie.

La figure II-4 montre la dépendance angulaire des états accessibles en fonction de l'énergie dans le modèle de SDB proposé. En pointillé sont figurées les intersections, avec un plan contenant l'axe principal, des ellipsoïdes d'isoénergies qu'on aurait si à l'énergie considérée, toutes les directions étaient accessibles; en traits pleins, sont présentées les intersections avec les parties utiles des ellipsoïdes d'isoénergie.

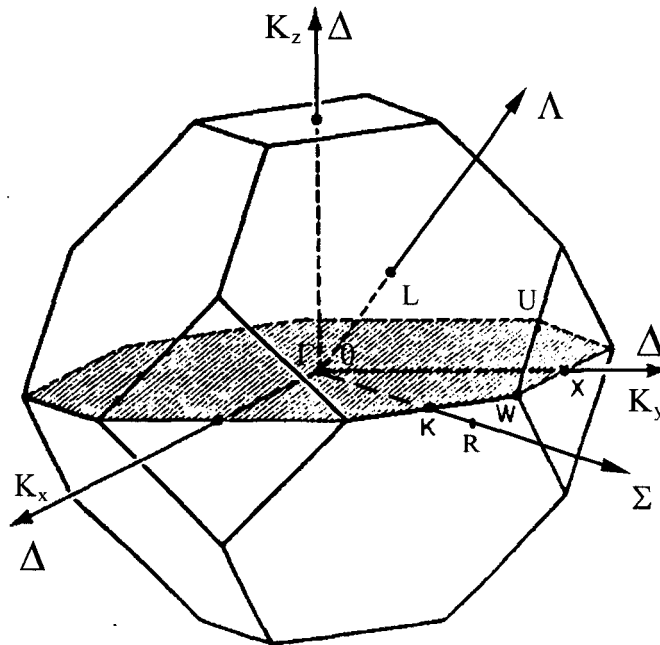


Figure II-2: zone de Brillouin et plan ΓXW en grisé contenant les points de plus haute énergie W.

Pour une énergie donnée, inférieure à l'énergie du pic de densité d'états ε_{cv} , toutes les orientations sont accessibles (cas (a)). Pour une énergie intermédiaire entre ε_{cv} et l'énergie maximale de bande $\bar{\varepsilon}_{\max v}$ correspondant à l'énergie d'un point W, seuls sont accessibles les états vus du minimum de la vallée sous un angle solide de $4\pi \cos(\beta)$ Steradian (cas (b)).

A l'énergie maximale (cas (c)), seuls les états pour lesquels $\beta = \pi/2$, sont accessibles. Ces états correspondent aux points W. Ils sont uniformément répartis sur un cercle. L'angle solide sous lequel ils sont vus vaut 0 Steradian.

Réciproquement l'énergie maximale $\varepsilon = \varepsilon_{\max v}$ accessible dépend de l'orientation via l'angle β . Elle varie de l'énergie ε_{cv} au pic de densité d'états, à l'énergie maximale de bande $\bar{\varepsilon}_{\max v}$.

La frontière de la vallée est la surface décrite par les extrémités des plus grands vecteurs d'ondes dont l'énergie associée $\varepsilon_{\max v}(\beta)$ s'accroît à mesure que ces vecteurs s'éloignent de l'axe principal pour tendre vers les états W; l'angle β par rapport à l'axe principal s'écarte alors de 0 ou π pour tendre vers $\pi/2$.

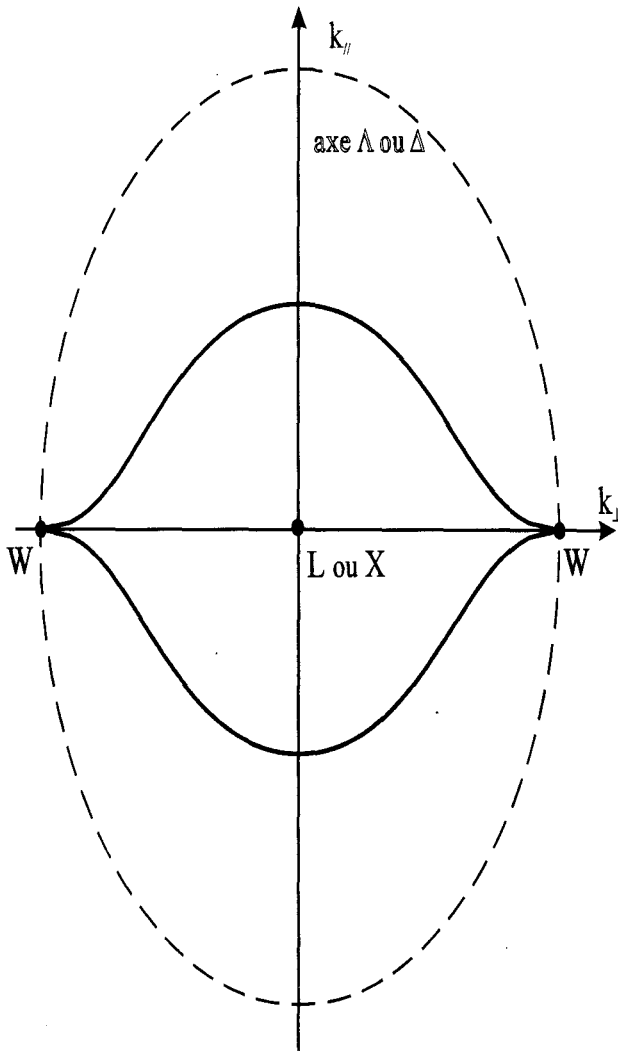


Figure II-3. Intersection de la frontière d'une vallée latérale avec un plan contenant la direction principale associée à la vallée, avec (trait plein) et sans (tirets) prise en compte de l'anisotropie associée à la localisation des points de plus haute énergie W (anisotropie de haute énergie).

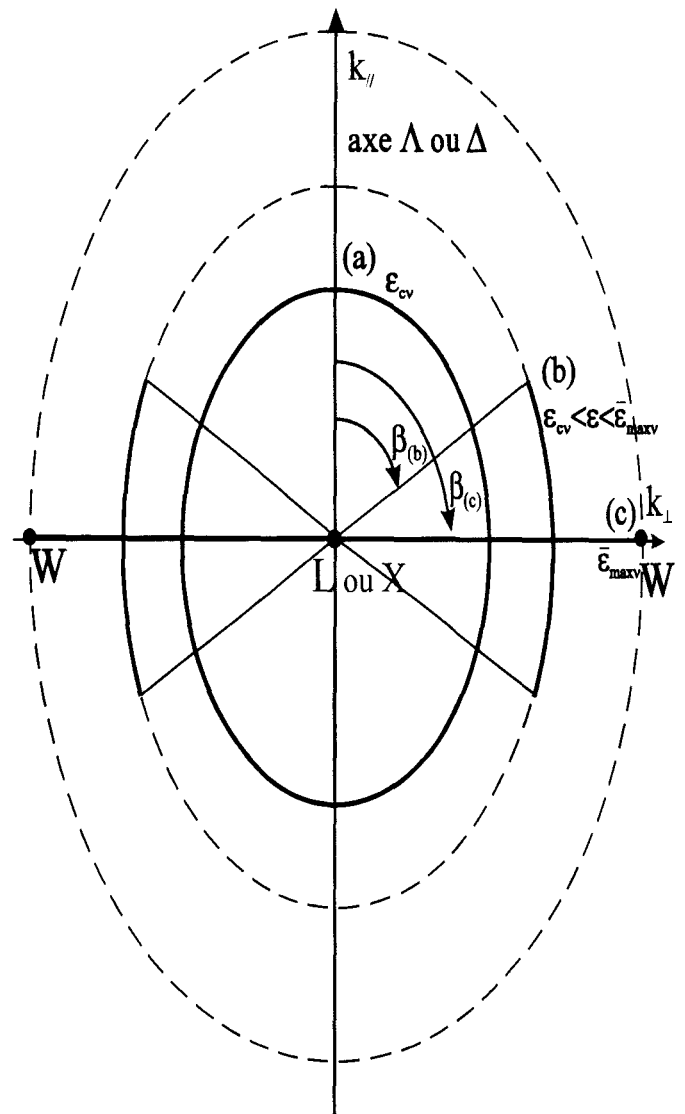


Figure II-4. Variation de l'angle β maximal par rapport à l'axe principal sous lequel sont visibles des états d'énergie $\epsilon_{cv} \leq \epsilon \leq \bar{\epsilon}_{\max v}$ (traits pleins). - tirets: états qu'on aurait en absence d'anisotropie liée aux points W.

II-I.1.3.2)RELATION DE DISPERSION EN VALLÉES LATÉRALES L1, X1 ET X3

La relation de dispersion en vallée latérale $v = L1, X1$ ou $X3$ s'exprime en coordonnées sphériques par:

$$\frac{\hbar^2 \hat{k}^2}{2\hat{m}_v^*} = \hat{\gamma}_v(\hat{\varepsilon}),$$

$$\text{avec } \begin{cases} \hat{k}_i = |k_i - k_{0vi}| \\ \hat{\varepsilon} = |\varepsilon - \varepsilon_{0v}| \end{cases}, \text{ et } \begin{cases} \hat{x} = x, (\mathbf{k}_{0v}; \varepsilon_{0v}) = (\mathbf{0}; 0), & \text{pour } 0 < k \leq k_{cv} \\ \hat{x} = \tilde{x}, (\mathbf{k}_{0v}; \varepsilon_{0v}) = (\bar{\mathbf{k}}_{\max v}; \bar{\varepsilon}_{\max v}) & \text{pour } k_{cv} < k \leq k_{\max v} \\ k_{cv} = \frac{\bar{k}_{\max v}}{2} \end{cases}.$$

Dans l'expression de la relation de dispersion en vallée latérale, les différents termes peuvent s'expliciter de la façon suivante:

- pour les vallées $X1$ et $L1$ nous avons $\hat{\gamma}_v(\hat{\varepsilon}) = \hat{\varepsilon}(1 + \alpha_v \hat{\varepsilon} + \beta_v \hat{\varepsilon}^2)$.
- Pour les vallées $X3$, la représentation de la seconde bande de conduction dans un modèle multi-vallées équivalentes, implique la prise en compte, dans le terme γ_v de la RDLi, d'un coefficient de non-parabolicité de fond de vallée ω_v d'ordre 3, pour traduire l'incorporation à ces vallées, des états de haute énergie qui ne sont pas de symétrie X : $\gamma_v(\varepsilon) = \varepsilon(1 + \alpha_v \varepsilon + \beta_v \varepsilon^2 + \omega_v \varepsilon^3)$. La RDLs y a la même forme qu'en vallées $L1$ et $X1$.
- d'après l'annexe VII, la masse effective dans une direction quelconque s'exprime en fonction des masses effectives longitudinales $\hat{m}_{//v}^*$ et transverses $\hat{m}_{\perp v}^*$, et de l'angle β par rapport à la direction principale associée à la vallée par:

$$\hat{m}_v^* = \frac{1}{\frac{\sin^2(\beta)}{\hat{m}_{\perp v}^*} + \frac{\cos^2(\beta)}{\hat{m}_{//v}^*}}$$

- le point $(\mathbf{k}; \varepsilon)_v$ de la vallée v , peut s'exprimer par rapport au point central $\Gamma 1$: $(\mathbf{k}; \varepsilon)_v = (\mathbf{K} - \mathbf{K}_{0v}; E - E_{0v})$, où $(\mathbf{K}_{0v}; E_{0v})$ est le minimum de vallée v .
- le point $(\bar{\mathbf{k}}_{\max v}; \bar{\varepsilon}_{\max v})$ dans la direction du vecteur d'onde $\mathbf{k}$, est situé sur l'ellipsoïde virtuel d'isoénergie $\bar{\varepsilon}_{\max v}$, qu'on aurait en absence d'anisotropie liée à la localisation des points W : $\bar{\varepsilon}_{\max v} = E_{\max v} - E_{0v}$, avec $E_{\max v}$ l'énergie maximale de la bande à laquelle appartient la vallée v .
- le point $(\mathbf{k}_{\max v}; \varepsilon_{\max v})$ dans la direction du vecteur d'onde $\mathbf{k}$, est situé sur la frontière de la vallée. D'après l'annexe VI, son énergie $\varepsilon_{\max v}$ augmente à mesure que le cosinus directeur de $\mathbf{k}$ avec la direction principale, tend vers 0, ce qui correspond à l'orientation vers un point W :

$$(\mathbf{k}_{\max v}; \varepsilon_{\max v}) = (\bar{\mathbf{k}}_{\max v} - \tilde{\mathbf{k}}(\tilde{\varepsilon}_{\max v}, \psi, \varphi); \bar{\varepsilon}_{\max v} - \tilde{\varepsilon}_{\max v})$$

où ψ et φ sont les angles en coordonnées elliptiques, et $\tilde{\varepsilon}_{\max v}$ est la valeur absolue de l'énergie par rapport à l'énergie maximale de bande.

$$\tilde{\varepsilon}_{\max v} = \tilde{\gamma}_v^{-1} \left(\frac{4|\cos(\psi)|\tilde{\gamma}(\tilde{\varepsilon}_{\text{dpic}})}{(1 + \sqrt{|\cos(\psi)|})^2} \right)$$

Dans cette dernière expression, $\tilde{\gamma}_v^{-1}(y) = x$ correspond à l'inversion de la relation $\tilde{\gamma}_v(x) = y$, qui se ramène ici à l'équation du troisième degré

$$x(1 + \tilde{\alpha}_v x + \tilde{\beta}_v x^2) - \frac{4|\cos(\psi)|\tilde{\gamma}(\tilde{\varepsilon}_{\text{dpic}})}{(1 + \sqrt{|\cos(\psi)|})^2} = 0$$

La racine de cette équation du troisième degré est l'énergie $\tilde{\varepsilon}_{\max v}$.

II-I.1.3.3) DENSITÉ D'ÉTATS EN VALLÉES LATÉRALES L1, X1 ET X3.

La densité d'états en vallée v est calculée à partir de la masse de densité d'états $\hat{m}_{dv}^* = (\hat{m}_{//v}^* \hat{m}_{\perp v}^{*2})^{1/3}$ par l'expression générique (II-2):

$$\hat{D}_v(\hat{\varepsilon}) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2\hat{m}_{dv}^*}{\hbar^2} \right)^{2/3} \frac{d\hat{\gamma}_v(\hat{\varepsilon})}{d\hat{\varepsilon}} \sqrt{\gamma_v(\hat{\varepsilon})}$$

II-I.1.3.4) MODALITÉS DE CHOIX DES PARAMÈTRES DE BANDE.

Les valeurs des paramètres de bande du modèle sont fixées dans un premier temps en fonction des paramètres-matériau du modèle classique des vallées et des caractéristiques de la densité d'états. Dans un second temps, l'expression des RDV permettant un calcul de la densité d'états globale et du nombre total d'états, ces résultats seront comparés à la densité d'états réelle. Pour un matériau dont la valeur de la masse longitudinale est publiée, une comparaison des relations de dispersion le long des directions principales avec celles du diagramme de bande sera réalisée.

Les valeurs initialement estimées, seront corrigées pour satisfaire au mieux aux différentes caractéristiques de bande.

Le modèle a été défini, il peut maintenant être appliqué aux matériaux GaAs et InP.

REMARQUE.

Le rapport des masses effectives $m_v^* / \tilde{m}_v^*$ apparaissant dans l'expression des coefficients $\tilde{\alpha}_v$ et $\tilde{\beta}_v$ est celui de deux masses effectives de même nature d'après l'annexe III. L'absence de valeurs dans la littérature pour les masses $\tilde{m}_{//v}^*$, et $\tilde{m}_{\perp v}^*$, propres au modèle, conduit à choisir le rapport,

$m_{dv}^* / \tilde{m}_{dv}^*$, de la masse de densité d'états de fond de vallée, m_{dv}^* , à la masse de densité d'états au voisinage des points W de plus haute énergie associés à la vallée, $\tilde{m}_{dv}^*$. Cette dernière masse est choisie identique pour toutes les vallées d'une bande à partir de la densité d'états réelle au voisinage de l'énergie maximale de bande atteinte aux points W.

II-I.2) APPLICATION DU MODÈLE À GaAs.

II-I.2.1) VALEURS DES PARAMÈTRES DE BANDE DE GaAs.

II-I.2.1.1) CHOIX DES VALEURS DES PARAMÈTRES DE BANDE DE GaAs.

Les valeurs des paramètres de structure de bande (SDB) sont choisies en fonction de caractéristiques de bande fournies dans la littérature: densité d'états (DOS) calculée à partir d'une structure de bande réelle de type pseudo-potentiel empirique, valeurs de paramètres matériaux du modèle classique des vallées et/ou du diagramme de bande.

II-I.2.1.1.1) CHOIX DES PARAMÈTRES EN VALLÉE CENTRALE Γ_1 DE GaAs.

Les paramètres de bande relatifs à la courbure de la vallée centrale ont été ajustés de manière à retrouver la relation de dispersion le long des trois directions principales Λ , Δ , et Σ suivant le diagramme de bande de M.V.Fischetti [FIS88].

Le point central Γ_1 , origine des énergies, est situé à 1.423 eV au-dessus de la bande de valence à 300°K d'après J.Blakemore [BLA82]. C'est le point de plus basse énergie des bandes de conduction.

La valeur de la masse effective de fond de vallée est prise égale à celle de M.V.Fischetti [FIS88] dans le cadre du modèle classique des vallées: $m^* = 0.063 m_0$.

Le long d'un axe Δ , le vecteur d'onde tiré du diagramme de bande de M.V.Fischetti [FIS88] correspondant au maximum d'énergie $\varepsilon_{\max \Delta} = 2.07$ eV, vaut $k_{\max \Delta} = 0.31 \times 10^8 / \text{cm}$. Dans ces conditions la valeur de β qui ajuste au mieux le diagramme de bande dans cette direction vaut $\beta_{\Delta} = 0.07 \text{ eV}^{-2}$. En raisonnant de la même façon pour un axe Λ , le maximum étant situé en ($k_{\max \Lambda} = 0.30 \times 10^8 / \text{cm}$; $\varepsilon_{\max \Lambda} = 1.11$ eV), le coefficient de non parabolicité β_{Λ} trouvé vaut $\beta_{\Lambda} = 0.8 \text{ eV}^{-2}$. Enfin, dans une direction Σ le maximum étant situé en ($k_{\max \Sigma} = 0.62 \times 10^8 / \text{cm}$; $\varepsilon_{\max \Sigma} = 2.25$ eV), le coefficient de non parabolicité β trouvé vaut $\beta_{\Sigma} = 0.66 \text{ eV}^{-2}$.

II-I.2.1.1.2) CHOIX DES PARAMÈTRES EN VALLÉES LATÉRALES L1 ET X1 .

Le point L1 est situé en bordure de zone de Brillouin en $\sqrt{\frac{3}{4}} \left(\frac{2\pi}{a} \right)$, et le point X1 est situé au voisinage de la bordure de zone de Brillouin en $0.91 \left(\frac{2\pi}{a} \right)$ [FIS91]. Ces valeurs permettent de déterminer avec une certaine précision les paramètres de fond de vallée sur le diagramme de bande. Les énergies inter-vallées Γ 1-L1 et Γ 1-X1 sont prises voisines de celles obtenues par M.V.Fischetti [FIS91]. Le choix de l'énergie de fond de vallée s'est porté sur la valeur expérimentale de 0.284 eV obtenue par D.E.Aspnes [ASP76] et citée par J.Blakemore [BLA82]. En vallée X1, on prend exactement la valeur de 0.447 eV fournie par M.V.Fischetti [FIS91] qui la tient également d'une mesure expérimentale.

Les valeurs des masses de densités d'états de fond de vallées latérales L1 et X1 ont été choisies proches de celles trouvée dans la littérature.

En vallée L1, on a choisi $0.27 m_0$, valeur supérieure à celle de $0.222 m_0$ utilisée par D.E.Aspnes [ASP76] puis par M.A.Littlejohn [LIT77] mais voisine de celle choisie à $0.277 m_0$ par T.Wang & K.Hess [WAN85] ($m_{dL1}^* = \left(m_{//L1}^* m_{\perp L1}^{*2} \right)^{1/3}$ avec $m_{//L1}^* = 1.47 m_0$ et $m_{\perp L1}^* = 0.12 m_0$).

En vallée X1 nous choisissons la valeur de K.F.Brennan & D.H.Park [BRE88] prise égale à $0.43 m_0$. On peut remarquer que cette valeur est voisine de $0.41 m_0$, la valeur expérimentale de G.D.Pitt [PIT70] et utilisée par D.E.Aspnes [ASP76], mais s'écarte nettement de celle à $0.58 m_0$ ajustée par M.A.Littlejohn [LIT77] à la caractéristique de vitesse de dérive stationnaire aux environs de 100 kV/cm.

Les valeurs des coefficients de non-parabolicité du premier ordre α sont fixées égales à celles fournies par M.A.Littlejohn [LIT77]: $\alpha_{L1} = 0.461 \text{ eV}^{-1}$, et $\alpha_{X1} = 0.204 \text{ eV}^{-1}$.

L'énergie au premier pic de densité d'états est voisine de 1.7 eV [BRE84] [BUD92]. L'énergie maximale dans la bande est fixée à 4.4 eV.

Les valeurs des coefficients de non-parabolicité du second ordre β_{L1} , et β_{X1} , sont ajustées de manière à trouver à la fois une densité d'états globale en première bande d'allure correcte, et un nombre total d'états en première bande $N_{1,\infty}$ voisin du nombre réel total d'états dans une bande, de $4.43 \cdot 10^{22} / \text{cm}^3 \left(\frac{8}{a^3} \right)$, avec $a = 5.653 \text{ \AA}$: $N_{1,\infty} = 4.42 \cdot 10^{22} / \text{cm}^3$.

Enfin, les valeurs des masses longitudinales $m_{//L1}^* = 1.3 m_0$, et $m_{//X1}^* = 0.9 m_0$, β_{X1} , sont ajustées au diagramme de bande de M.V.fischetti [FIS88].

II-1.2.1.1.3)CHOIX DES PARAMÈTRES EN VALLÉES LATÉRALES X3 DE GaAs.

Le point X3 est situé en bordure de zone de Brillouin en $1\left(\frac{2\pi}{a}\right)$.

En deuxième bande de conduction, l'énergie inter-vallée Γ 1-X3 retenue est celle de J.Blakemore [BLA82]: 0.88 eV.

Pour restituer correctement la densité d'états en fond de vallée, on doit prendre $m_d^* = 0.3 m_0$ pour la masse de densité d'états.

Les diagrammes de bande fournis par J.Blakemore [BLA82] et M.V.Fischetti [FIS88][FIS91], ainsi que l'énergie du second pic de densité d'états permettent d'en déduire les paramètres de bande en fond de seconde bande.

La forme parabolique de la deuxième bande de conduction bien au delà du voisinage immédiat d'un point X3, permet d'imposer pour les coefficients de non-parabolicité α et β : $\alpha = 0 \text{ eV}^{-1}$ et $\beta = 0 \text{ eV}^{-2}$. A énergie élevée il convient de tenir compte du coefficient de non-parabolicité ω . Pour bien restituer le pic de DOS situé à environ 3.4 eV d'après J.Bude & K.Hess [BUD92], il convient de prendre $\omega = 0.53 \text{ eV}^{-3}$.

Après l'énergie au pic de densité d'états, une énergie maximale de 5.5 eV permet d'assez bien reconstituer la DOS pour les très hautes énergies.

Le nombre total d'états calculés dans la bande vaut alors $4.49 \times 10^{22} / \text{cm}^3$ pour un nombre théorique réel d'états de $4.43 \times 10^{22} / \text{cm}^3$.

Enfin, la valeur de la masse longitudinale (le long d'un axe Δ dans cette bande) est ajustée à $m_{//}^* = 0.4 m_0$, à la partie concernée des diagrammes de SDB de J.Blakemore [BLA82], et de M.V.Fischetti [FIS91].

II-I.2.1.2) TABLEAUX DES PARAMÈTRES DE BANDE DE GaAs.

Nous présentons pages suivantes les valeurs des paramètres de structure de bande (SDB), nécessaires à l'étude du transport dans le matériau GaAs en volume.

Le tableau II-1 présente les paramètres de SDB en vallées latérales L1, X1 de la première bande, et en vallées X3 décrivant la seconde bande de conduction.

A partir des paramètres de SDB, il est possible de déduire d'autres grandeurs de bande; c'est le cas de la masse effective transverse qui se déduit de la masse effective de densité d'états et de la masse effective longitudinale.

Le tableau II-2 présente les paramètres de bande de la vallée centrale Γ_1 de la première bande de conduction.

Ils sont pris en considérant la relation de dispersion le long de chacune des trois directions principales Λ , Δ , et Σ .

En outre, une grandeur de SDB dérivée des paramètres de SDB est présentée: le coefficient de non-parabolicité de fond de vallée du premier ordre α qui se déduit de la masse effective de fond de vallée et de l'énergie de bande interdite par une formule de la méthode **K.p**.

Le tableau II-3 présente les paramètres de SDB en supposant la vallée centrale Γ_1 isotrope.

Les coefficients de non-parabolicité β et ω ont été ajustés à la densité d'états dans cette vallée, calculée par la relation semi-empirique du modèle en supposant la vallée anisotrope.

PARAMÈTRES DE STRUCTURE DE BANDE DE CONDUCTION DE GaAs À 300°K

II-I.2.1.2.1)PARAMÈTRES DE BANDE DE GaAs EN VALLÉES LATÉRALES
L1, X1 (PREMIÈRE BANDE) ET X3 (SECONDE BANDE).

n° de bande	1		2
Vallée v	L1	X1	X3
Paramètres de bande			
Multiplicité de la vallée M_v	4	3	3
Energie par rapport au fond de la première bande de conduction $\Delta E_{\Gamma-L-v}$ (eV)	0.284 [BLA82]	0.447 [FIS91]	0.88 [BLA82]
Masse effective de densité d'états m_{dv}^* (m_0)	0.27	0.43 [BRE88]	0.30
Masse effective longitudinale $m_{//v}^*$ (m_0)	1.3	0.90	0.40
Masse effective transverse $m_{\perp v}^*$ (m_0)	$\sqrt{\frac{m_{dL1}^{*3}}{m_{//L1}^*}} = 0.123$	$\sqrt{\frac{m_{dL1}^{*3}}{m_{//X1}^*}} = 0.297$	$\sqrt{\frac{m_{dX3}^{*3}}{m_{//X3}^*}} = 0.260$
Non-parabolicité alpha α_v (eV ⁻¹)	0.461 [LIT77]	0.204 [LIT77]	0.0
Non-parabolicité bêta β_v (eV ⁻²)	0.25	0.0	0.0
Non-parabolicité oméga ω_v (eV ⁻³)	0.0	0.0	0.053
Masse de densité d'états à l'énergie maximale $\tilde{m}_{dv}^*$ (m_0)	0.1		0.1
Energie au pic de densité d'états E_{cv} (eV)	1.7		3.4
Energie maximale de bande $E_{max v}$ (eV)	4.4		5.5

Tableau II-1.

II-I.2.1.2.2)PARAMÈTRES DE BANDE DE GaAs EN VALLÉE CENTRALE
 Γ_1 (PREMIÈRE BANDE).

Direction principale δ Paramètre de bande	Λ	Δ	Σ
Multiplicité de l'axe cristallographique M_δ	8	6	12
Energie de bande interdite E_{gap} (eV)	1.423 [BLA82]		
Masse effective m^* (m_0)	0.063 [FIS91]		
Non-parabolicité alpha α (eV ⁻¹)	$\frac{\left(1 - \frac{m^*}{m_0}\right)^2}{E_{\text{gap}}} = 0.617$		
Non-parabolicité bêta β_δ (eV ⁻²)	0.8	0.07	0.66
Non-parabolicité oméga ω_δ (eV ⁻³)	0.0		
Masse effective à l'énergie maximale $\tilde{m}_\delta^*$ (m_0)	0.0805	0.0040	0.20
Vecteur d'onde à l'énergie maximale $k_{\text{max}\delta}$ (10 ¹⁰ / m)	0.30	0.31	0.62
Energie maximale $\epsilon_{\text{max}\delta}$ (eV)	1.11	2.07	2.25

Tableau II-2.

II-I.2.1.2.3) PARAMÈTRES DE BANDE DE GaAs EN VALLÉE CENTRALE
 Γ_1 (PREMIÈRE BANDE) APPROCHÉE PAR UNE RELATION DE DISPERSION ISOTROPE.

Direction principale δ Paramètre de bande	Λ	Δ	Σ
Multiplicité de l'axe cristallographique M_δ	8	6	12
Energie de bande interdite E_{gap} (eV)	1.423 [BLA82]		
Masse effective $m^* (m_0)$	0.063 [FIS91]		
Non-parabolicité alpha $\alpha \text{ (eV}^{-1}\text{)}$	$\frac{\left(1 - \frac{m^*}{m_0}\right)^2}{E_{\text{gap}}} = 0.617$		
Non-parabolicité bêta $\beta_\delta \text{ (eV}^{-2}\text{)}$	0.2		
Non-parabolicité oméga $\omega_\delta \text{ (eV}^{-3}\text{)}$	0.265		
Masse effective à l'énergie maximale $\tilde{m}_\delta^* (m_0)$	0.176		
Vecteur d'onde à l'énergie maximale $k_{\delta \text{ max}} (10^{10} / \text{m})$	0.63		
Energie maximale $\epsilon_{\delta \text{ max}} \text{ (eV)}$	2.25		

Tableau II-3.

II-I.2.2) DENSITÉS D'ÉTATS ÉLECTRONIQUES DE GaAs.

La densité d'états est calculée à partir du modèle de structure de bande (SDB) proposé avec les paramètres de bande précédemment fournis. La densité d'états (DOS) du modèle est comparée avec des DOS de la littérature. La contribution des différentes vallées à la densité d'états globale est ensuite présentée.

II-I.2.2.1) DENSITÉ D'ÉTATS GLOBALE DE GaAs.

La figure II-5 présente la DOS dans GaAs, obtenue à partir de la structure de bande calculée par la méthode du pseudo-potentiel empirique sur une ou plus de deux bandes, et par le modèle proposé sur deux bandes.

Dans le modèle bi-bandes proposé, le nombre total d'états est calculé par la méthode d'intégration numérique de Simpson. Il vaut, pour la première bande et la seconde bande de conduction, respectivement $4.42 \times 10^{22} / \text{cm}^3$, et $4.49 \times 10^{22} / \text{cm}^3$. Ces deux valeurs sont toutes deux assez voisines de la valeur théorique, pour chacune des deux bandes, de $4.43 \times 10^{22} / \text{cm}^3$.

Dans la mesure où l'allure générale de la DOS réelle est bien respectée, l'erreur sur le nombre total d'états disponibles qui est ici inférieure à 2 %, peut donner une idée de l'erreur sur la DOS.

Jusque vers 0.8 eV, la densité d'états obtenue à l'aide du modèle, est confondue avec celle de M.V.Fischetti [FIS88], tout en étant intermédiaire entre les DOS de J.Bude & K.Hess [BUD92], et celle mono-bande de K.Brennan & K.Hess [BRE84]. A partir de cette valeur, la DOS du modèle s'approche d'avantage de celle du modèle de K.Brennan & K.Hess [BRE84] jusqu'au premier maximum. A partir de 0.88 eV, intervient la contribution de la seconde bande de conduction dont la faible contribution jusqu'au premier maximum de densité d'états, permet de comparer la DOS globale à la DOS mono-bande. A partir de l'énergie de ce premier pic de DOS, il convient de comparer la DOS réelle avec celle calculée, en prenant en compte plusieurs bandes. La figure II-5 montre que globalement, la DOS du modèle de SDB proposé est intermédiaire entre celle de M.V.Fischetti [FIS88], et celle de J.Bude & K.Hess [BUD92].

La DOS calculée par J.Bude & K.Hess [BUD92] au voisinage du second maximum de densité d'états, vers 3.4 eV, est notablement plus forte que celle des autres auteurs. Cela semble provenir de la prise en compte par J.Bude & K.Hess des bandes situées au delà de la seconde bande de conduction. Par contre, il semblerait que M.V.Fischetti [FIS88] sous-estime la densité d'états globale aux hautes énergies, bien que cet auteur fasse intervenir plus de deux bandes dans le calcul de la DOS globale.

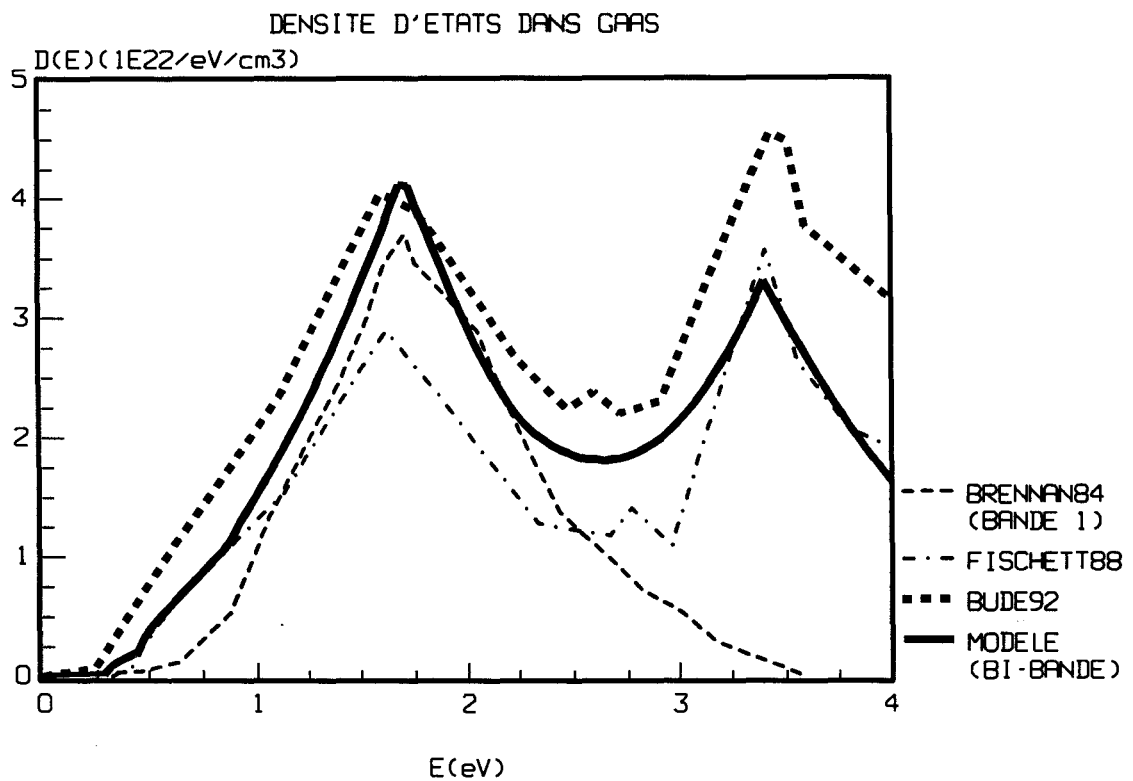


Figure II-5. Densité d'états (DOS) de GaAs calculée avec le modèle de structure de bande (SDB) des vallées étendues, en comparaison avec des DOS de la littérature calculées à partir d'une SDB de type pseudo-potentiel empirique.

- trait plein: DOS calculée à partir du modèle
- tirets gras: calcul de J.Bude & K.Hess [BUD92]
- traits mixtes: calcul de M.V.Fischetti [FIS88]
- tirets fins: calcul de K.Brennan & K.Hess [BRE84] limité à la première bande

II-I.2.2.2)CONTRIBUTION DES VALLÉES À LA DENSITÉ D'ÉTATS DANS GaAs.

La figure II-6 présente le détail de la DOS dans chaque bande. La DOS est répartie, pour la première bande, entre les trois types de vallées contributives du modèle proposé, Γ_1 , L1, et X1, et pour la seconde bande, entre les vallées X3.

L'expression donnant la DOS en vallées latérales L1, X1, et X3 est du type de celle utilisée pour une relation de dispersion du type de R.Brunetti & C.Jacoboni [BRU89], mais en considérant des coefficients de non-parabolicité d'ordres supérieurs.

En première bande et aux hautes énergies, la DOS en vallées latérales domine nettement celle en vallée centrale. La DOS en vallées L1 dépasse de plus en plus celle des autres vallées de la première bande jusqu'au premier pic de DOS à 1.7 eV. A partir de cette énergie l'écart de contribution à la DOS globale des différentes vallées de la première bande s'amenuise.

La contribution à la DOS de la première bande devient voisine de celle en deuxième bande vers 2.5 eV. La densité d'états en première bande devient faible par rapport à celle en deuxième bande à partir de 3 eV, puis négligeable à partir de 3.5 eV.

II-I.2.2.3)DENSITÉ D'ÉTATS EN VALLÉE CENTRALE Γ_1 DANS GaAs.

La figure II-7 présente la contribution à la DOS globale de la vallée centrale Γ_1 (ou DOS en vallée Γ_1) obtenue à l'aide de l'expression semi-empirique du modèle de SDB proposé prenant en compte les trois directions principales.

La DOS en vallée Γ_1 ainsi calculée est, par rapport au modèle classique des vallées, près de deux fois plus forte vers 1.2 eV, et entre 3 et 4 fois plus forte vers 1.7 eV. A partir de cette valeur l'écart se réduit pour s'annuler vers 2.1 eV, à cause de la non prise en compte par l'ancien modèle de la décroissance de la DOS réelle.

Il a été présenté également la DOS obtenue en supposant la vallée centrale parabolique et isotrope. Un coefficient de non-parabolicité du premier ordre α fut introduit à la fin des années 60 pour mieux décrire la bande à des énergies de quelques centaines de meV. La prise en compte d'un coefficient de non-parabolicité du second ordre β anisotrope est aujourd'hui justifiée par la forte non-parabolicité et la forte anisotropie des vallées à des énergies d'au moins 0.5eV, largement dépassées lorsque se produit l'ionisation par choc.

Le calcul semi-empirique obtenu en prenant en compte les trois directions principales peut être approché par un calcul classique de type R.Brunnetti & C.Jacoboni [BRU89] en considérant la vallée isotrope, mais en prenant en compte un coefficient de non parabolicité ω du troisième ordre.

Dans le modèle classique des vallées, la DOS en vallée centrale croît indéfiniment. Dans le modèle de SDB proposé, la DOS décroît à partir d'environ 1.7 eV puis s'annule à l'énergie maximale en vallée Γ_1 , qui est atteinte le long d'une direction Σ .

La forte valeur de la DOS du modèle proposé des vallées étendues, par rapport à celle du modèle classique des vallées, au voisinage du pic de DOS, s'explique par la prise en compte de la relation de dispersion fortement non-parabolique dans les directions Σ .

II-1.2.3) ISOÉNERGIES DANS UN PLAN ΓXW DE LA ZONE DE BRILLOUIN DANS GaAs.

L'intersection des surfaces d'isoénergies avec un plan ΓXW constitue des courbes contenant les points de plus hautes énergies W. Elles sont présentées d'une part dans la première bande de conduction, et d'autre part dans la seconde bande. Elles ont été tracées en trait plein du minimum au maximum d'énergie de bande, tandis que la frontière des vallées a été tracée en pointillés.

II-1.2.3.1) ISOÉNERGIES EN PREMIÈRE BANDE DE CONDUCTION DANS GaAs.

La figure II-8 présente les isoénergies dans un plan ΓXW des vallées Γ_1 et X_1 de la première bande de conduction, centrées aux points Γ et X de la zone de Brillouin réelle ($\Gamma X = 2\pi / a$).

En vallée centrale, le modèle impose une variation discontinue de la frontière, correspondant à la prise en compte: soit de la relation de dispersion (RD) le long d'une direction principale Δ (direction ΓX), l'énergie variant de 0 à 2.07, soit de la RD le long d'une direction Σ (direction ΓK), l'énergie variant de 0 à 2.25 eV. Les courbes d'isoénergies sont des arcs de cercle dans les directions Δ et Σ , dont la réunion à basse énergie forme un cercle car la RD y est quasiment isotrope.

En vallées X_1 les courbes d'isoénergies sont des ellipses, de 0.447 eV, énergie de fond de vallée, jusqu'à 1.7 eV, énergie au pic de densité d'états. Au-delà de cette dernière énergie, ce sont des arcs d'ellipses dont la longueur diminue à mesure que l'énergie tend vers l'énergie des maxima de bande W, situés vers 4.4 eV.

Les points W du modèle sont situés un peu au-delà des points W réels.

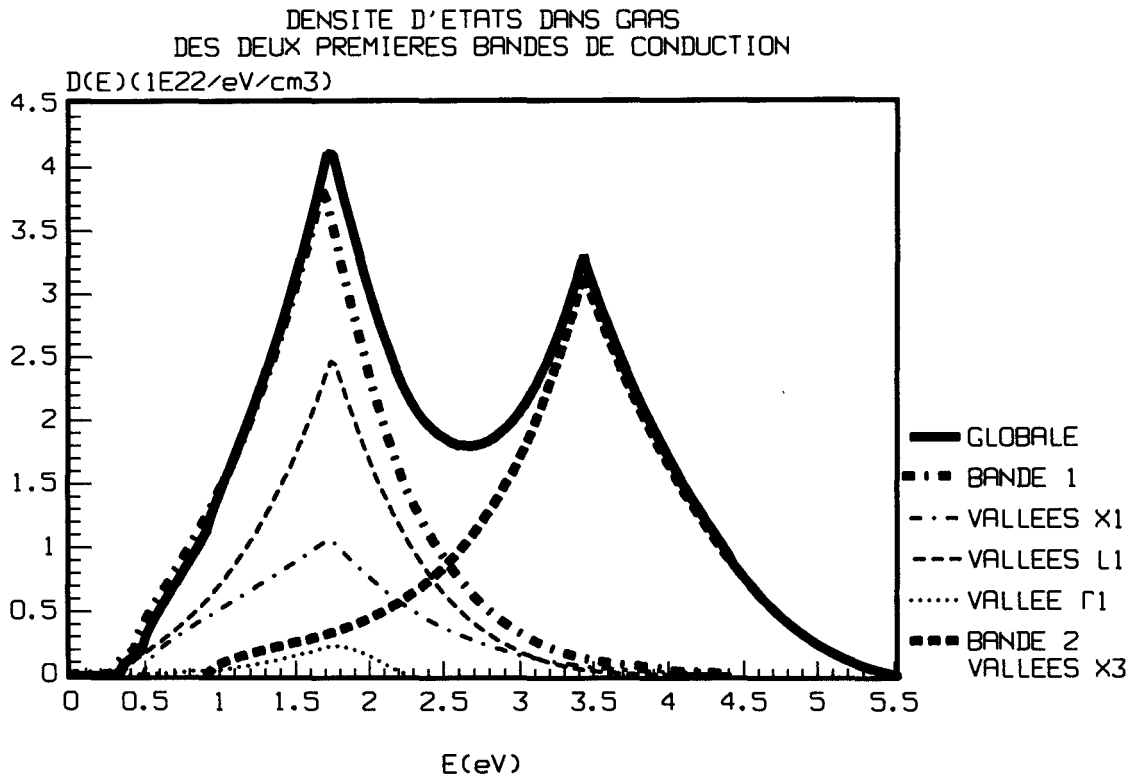


Figure II-6. Contribution à la densité d'états globale (trait plein) des vallées et des bandes.
- traits mixtes gras: première bande (constituée des vallées vallées étendues X1 en traits mixte fins, L1 en tirets fins, et Γ 1 en pointillés fins)
- tirets gras: seconde bande (constituée des vallées étendues X3)

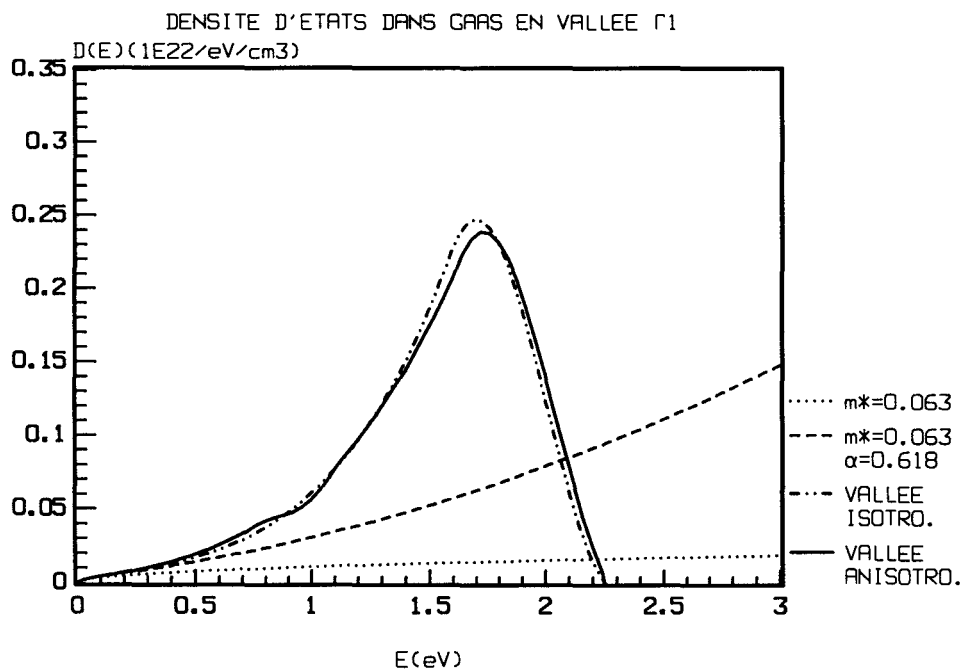


Figure II-7. Densité d'états en vallée centrale.

Modèle classique des vallées avec $m^* = 0.063 m_0$: - pointillés: vallées parabolique; - tirets: vallées non-paraboliques avec $\alpha = 0.618 / \text{eV}$.

Modèle des vallées étendues: - trait plein: prise en compte des relations de dispersion le long des 3 directions principales; - traits mixtes: hypothèse d'une vallée isotrope avec ajustement des coeff. de non-parabolicité sur la densité d'états en tenant compte des 3 directions principales.

II-I.2.3.2) ISOÉNERGIES EN DEUXIÈME BANDE DE CONDUCTION DANS GaAs.

La figure II-9 présente les isoénergies dans un plan ΓXW de la deuxième bande de conduction, représentée par des vallées X_3 , centrées aux points X de la zone de Brillouin réelle ($\Gamma X = 2\pi/a$). Les isoénergies ont été tracées du minimum au maximum d'énergie dans la bande.

Les courbes d'isoénergie sont des ellipses, de 0.88 eV, énergie de fond de vallée, jusqu'à 3.4 eV, énergie au pic de densité d'états. Au-delà de cette dernière énergie, ce sont des arcs d'ellipses dont la longueur diminue à mesure que l'énergie tend vers l'énergie des maxima de bande W situés vers 5.5 eV.

Les points W du modèle sont situés bien au-delà des points W réels par comparaison à la première bande de conduction. Cela s'explique par la prise en compte uniquement des minima de symétrie X dans cette bande, comme auparavant R. Brunetti & C. Jacoboni [BRU89] ou T. Vogelsang & W. Hänsch [VOG91] pour leur modélisation de la première bande de conduction du Silicium.

II-I.2.4) COURBES DE DISPERSION LE LONG DES DIRECTIONS PRINCIPALES DANS GaAs. COMPARAISON AVEC LA LITTÉRATURE.

II-I.2.4.1) COURBES DE DISPERSION EN VALLÉE CENTRALE Γ_1 DANS GaAs.

La vallée centrale Γ_1 est la vallée de plus basse énergie.

La figure II-10 représente la relation de dispersion en vallée centrale de la première bande de conduction le long des trois directions principales Λ ($\langle 111 \rangle$), Δ ($\langle 100 \rangle$), et Σ ($\langle 110 \rangle$), calculée par M.V. Fischetti [FIS88]. Les trois relations de dispersion sont représentées dans un même plan de manière à pouvoir être comparées les unes aux autres. Sont également représentées, les relations de dispersion du modèle qui, comme on peut le constater, ajuste parfaitement les courbes calculées par M.V. Fischetti [FIS88], ainsi que la relation de dispersion obtenue par le modèle classique des vallées avec les paramètres de M.A. Littlejohn [LIT77]. Cette dernière courbe est une approximation de la relation de dispersion le long d'un axe Δ , joignant le point Γ à un point X .

Comme la courbure de bande est plus forte le long de la direction Δ , on en déduit que la considération de cette relation de dispersion à hautes énergies, sous-estime la densité d'états.

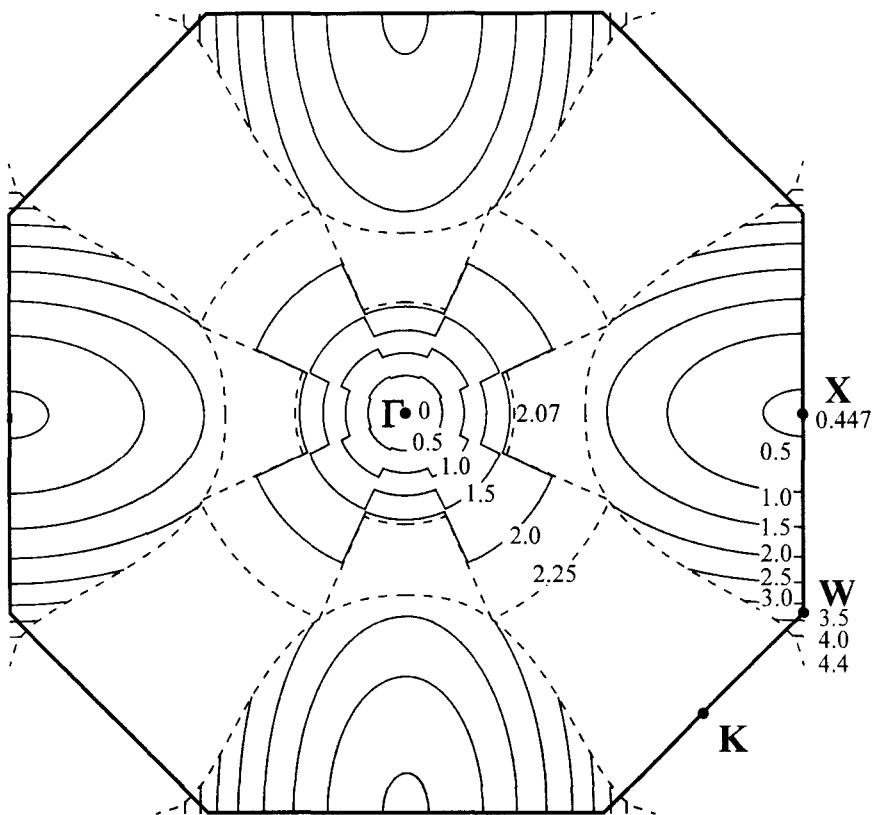


Figure II-8. Isoénergies dans un plan ΓXW de GaAs, en première bande de conduction (traits pleins). Les tirets sont la frontière d'une vallée.

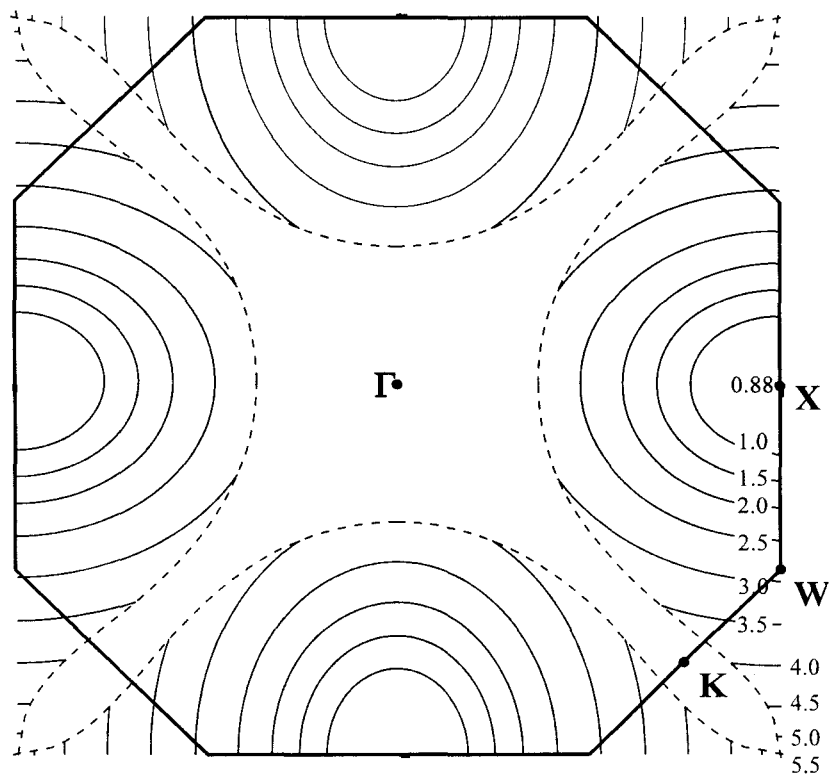


Figure II-9. Isoénergies dans un plan ΓXW de GaAs, en seconde bande de conduction (traits pleins). Les tirets sont la frontière d'une vallée.

II-I.2.4.2) COURBES DE DISPERSION EN VALLÉES LATÉRALES L1 DANS GaAs.

La vallée latérale de plus basse énergie est la vallée L1.

La figure II-11 représente la relation de dispersion le long de l'axe principal Λ d'une vallée L1.

La courbe de M.V.Fischetti [FIS88] a été obtenue par la méthode du pseudo-potentiel.

Les paramètres de bande, $E_{L1} = 0.323 \text{ eV}$, $m_{//L1}^* = 1.538 m_0$ [FIS88][FIS91] et $\alpha_{L1} = 0.40 \text{ eV}^{-1}$ [FIS91] ont été fournies par l'auteur pour une simulation Monte-Carlo de type vallées classiques. Les valeurs $m_{//L1}^* = 1.47 m_0$ et $\alpha_{L1} = 0.44 \text{ eV}^{-1}$ ont été fournies par T.Wang & K.Hess [WAN85] également dans le cadre du modèle classique des vallées.

La courbe du nouveau modèle utilise comme paramètre de bande de basse énergie: $m_{//L1}^* = 1.3 m_0$, $\alpha_{L1} = 0.461 \text{ eV}^{-1}$, et un coefficient de non-parabolicité du second ordre $\beta_{L1} = 0.25 \text{ eV}^{-2}$ pour mieux ajuster la caractéristique de SDB réelle.

La caractéristique du nouveau modèle ainsi que celles de l'ancien présentent des états d'énergie supérieures à celle du maximum le long de l'axe principal Λ , réellement situé vers 1.1 eV. L'existence de ces états est inhérente à l'ancien modèle qui permet théoriquement à des électrons d'atteindre des énergies infinies.

A la différence du modèle classique des vallées, le modèle proposé présente un maximum le long de l'axe principal, situé à 1.7 eV, énergie au pic de densité d'états dans la bande.

On peut voir que le modèle classique des vallées ainsi que le modèle proposé approchent très bien la relation de dispersion pratiquement jusqu'au maximum réel d'énergie le long de l'axe Λ , et situé vers 1.1 eV. A partir de cette énergie, le modèle classique des vallées surestime l'énergie en fonction du vecteur d'onde par rapport au modèle des vallées étendues.

II-I.2.4.3) COURBES DE DISPERSION EN VALLÉES LATÉRALES X1 DANS GaAs.

La vallée X1 est la vallée de plus haute énergie du modèle classique trois vallées.

La figure II-12 présente la relation de dispersion le long de l'axe principal Δ d'une vallée X1. Elle a été obtenue par M.V.Fischetti [FIS88] à l'aide de la méthode du pseudo-potentiel. Les valeurs $E_{X1} = 0.447 \text{ eV}$, $m_{//X1}^* = 1.987 m_0$ [FIS88][FIS91] et $\alpha_{X1} = 0.55 \text{ eV}^{-1}$ [FIS91] ont été fournies par l'auteur pour une simulation Monte-Carlo de type vallées classiques. Les valeurs

$E_{X1} = 0.52 \text{ eV}$, $m_{//X1}^* = 1.58 m_0$ et $\alpha_{X1} = 0.36 \text{ eV}^{-1}$ ont été fournies par T.Wang & K.Hess [WAN85] également dans le cadre du modèle classique des vallées.

La courbe du nouveau modèle utilise comme paramètre de SDB de basse énergie: $E_{X1} = 0.447 \text{ eV}$, $m_{//X1}^* = 0.9 m_0$, $\alpha_{X1} = 0.204 \text{ eV}^{-1}$, et un coefficient de non-parabolicité du second ordre $\beta_{X1} = 0.25 \text{ eV}^{-2}$, pour mieux ajuster la relation de dispersion réelle. La caractéristique du modèle proposé ne présente pas d'états au-delà de 1.7 eV dans une direction principale Δ , énergie correspondant au pic de densité d'états bien qu'il existe en réalité des états jusque vers 2.1 eV. Les résultats du modèle classique des vallées sous-estiment nettement l'énergie en fonction du vecteur d'onde à partir de 1 eV, contrairement à ceux du modèle des vallées étendues qui permet de bien approcher la caractéristique réelle.

II-1.2.4.4) COURBES DE DISPERSION EN VALLÉES LATÉRALES X3 DANS GaAs.

La figure II-13 présente la relation de dispersion calculée par M.V.Fischetti [FIS88] et J.Blakemore [BLA82] en deuxième bande de conduction dans une direction Δ au voisinage d'un point X3. Remarquons que le premier auteur place l'énergie de fond de vallée à 0.747 eV, tandis que le second la situe à 0.88 eV.

La courbe de dispersion obtenue à l'aide du modèle approche assez bien les deux calculs dus à la méthode du pseudo-potentiel empirique. Les paramètres de bande de basse énergie utilisés dans le modèle proposé sont $E_{X3} = 0.88 \text{ eV}$, $m_{//X3}^* = 1.3 m_0$, $\alpha_{X3} = 0 \text{ eV}^{-1}$, $\beta_{X3} = 0 \text{ eV}^{-2}$, et $\omega_{X3} = 0.053 \text{ eV}^{-3}$. La nullité des coefficients de non-parabolicité du premier et du second ordre α_{X3} et β_{X3} du modèle des vallées étendues est due à la forme quasi-parabolique de la relation de dispersion de 0.88 eV jusque vers 1.5 eV.

II-1.2.4.5) PREMIERS POINTS DE CHANGEMENT DE SIGNE DE LA MASSE EFFECTIVE EN VALLÉES DANS GaAs.

Le tableau II-4 présente l'énergie pour chaque vallée, des premiers points de changement de signe de la masse effective. Elle est donnée par rapport au fond de la première bande de conduction.

Ces valeurs donnent une idée des énergies à partir desquelles le rayon de courbure de bande subit une accentuation appréciable pouvant influencer le transport électronique en champ fort.

Ces énergies sont déterminées graphiquement, mais peuvent être simplement calculées relativement au fond de vallée en supposant que l'énergie de croisement de la relation de dispersion

est infinie. Pour $\beta > 0$ et $\omega = 0$, l'énergie au point d'inflexion relativement au fond de vallée vaut alors:

$$\varepsilon_1 = \sqrt{\frac{2\sqrt{3} - 3}{3\beta}}.$$

On remarque qu'en vallée centrale et en vallées L1, la modification de courbure apparaît le plus tôt. En deuxième bande, elle apparaît à haute énergie vers 2.9 eV. En vallées X1, la masse effective garde un signe positif sur pratiquement tout le domaine énergétique. En réalité il existe un point d'inflexion bien plus bas, vers 2 eV, comme le montre la relation de dispersion réelle.

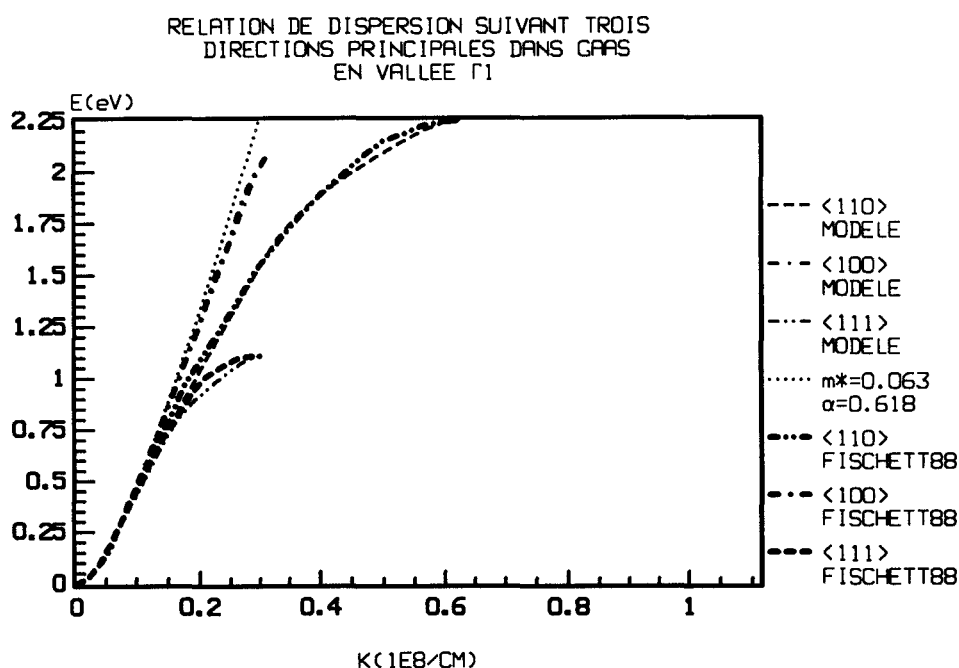


Figure II-10. Relation de dispersion au voisinage du point Γ_1 , le long des trois directions principales Λ ($\langle 111 \rangle$), Δ ($\langle 100 \rangle$), et Σ ($\langle 110 \rangle$). Modèle classique des vallées avec $m^*=0.063 m_0$ et $\alpha=0.618/\text{eV}$: - pointillés. Méthode du pseudo-potentiel calculée par M.V.Fischetti [FIS88]:- traits mixtes gras doubles pointillés: $\langle 110 \rangle$; -traits mixtes gras: $\langle 100 \rangle$; tirets gras: $\langle 111 \rangle$. Calcul par le modèle des vallées étendues: - tirets fins: $\langle 100 \rangle$; traits mixtes fins: $\langle 110 \rangle$; traits mixtes doubles fins: $\langle 111 \rangle$. Les deux caractéristiques dans la direction Δ sont confondues.

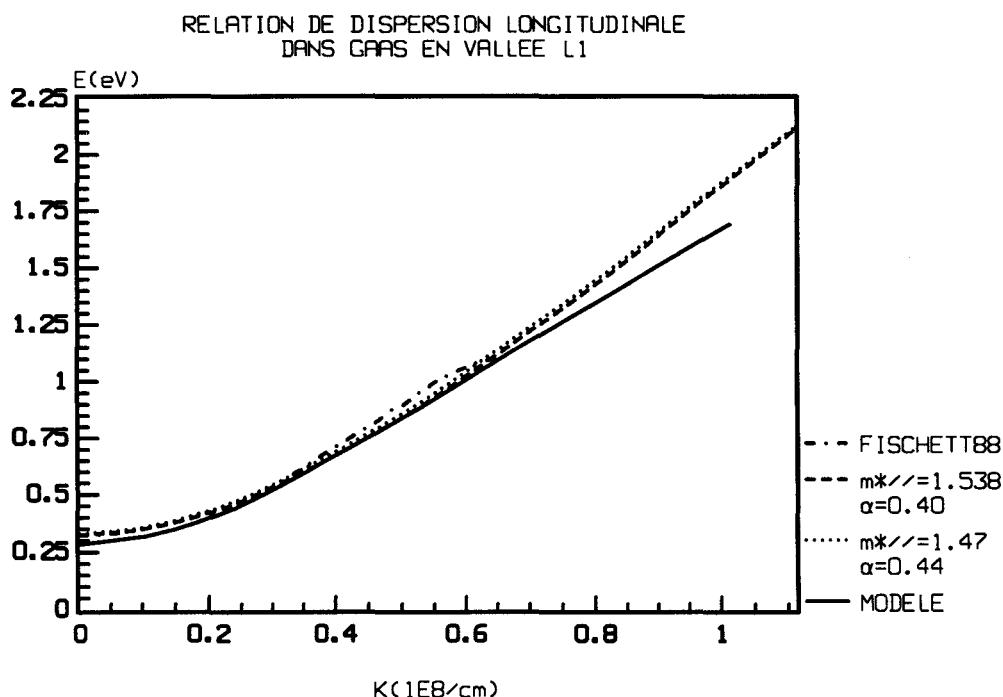


Figure II-11. Relation de dispersion au voisinage d'un point L_1 le long de la direction principale Λ associée. Modèle des vallées étendues: - trait plein. Modèle classique des vallées: - pointillés: T.Wang & K.Hess [WAN85] ($m^* = 1.47 m_0$ et $\alpha = 0.44 / \text{eV}$); - tirets: M.V.Fischetti [FIS91] ($m^* = 1.538 m_0$ et $\alpha = 0.40 / \text{eV}$). Méthode du pseudo-potentiel calculée par M.V.Fischetti [FIS88]: - traits mixtes.

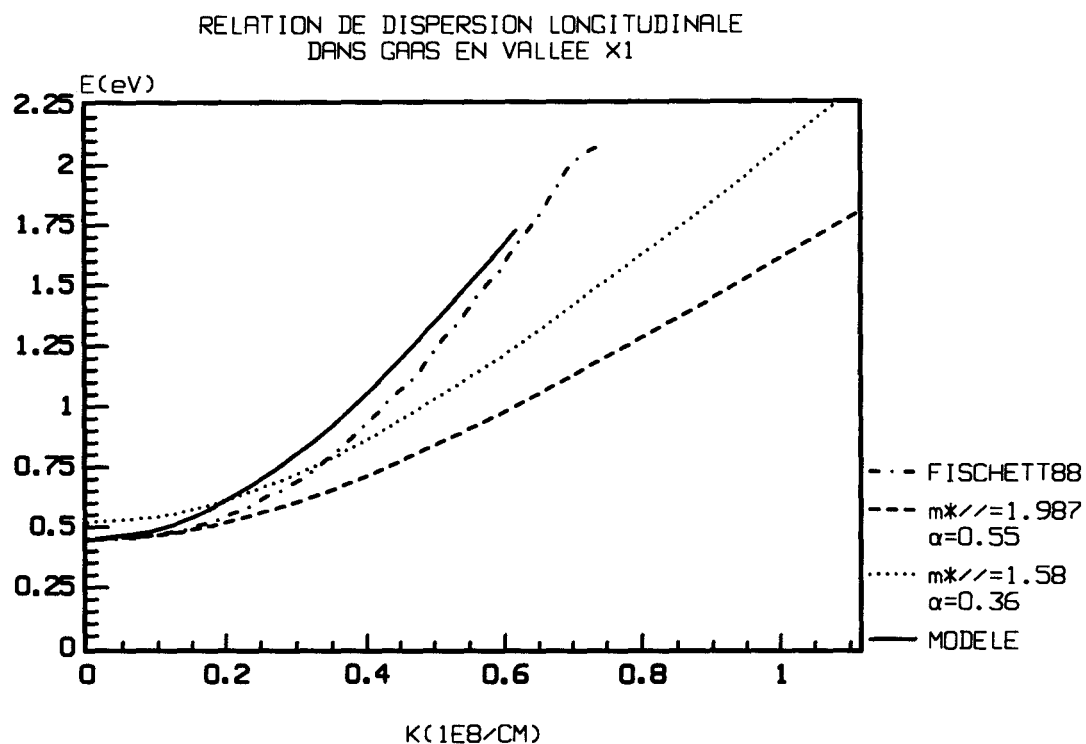


Figure II-12. Relation de dispersion au voisinage du point X1 le long de la direction principale Δ associée. Modèle des vallées étendues: - trait plein. Modèle classique des vallées: - pointillés: T.Wang & K.Hess [WAN85] ($m^* = 1.58 m_0$ et $\alpha = 0.36 / \text{eV}$); - tirets: M.V.Fischetti [FIS91] ($m^* = 1.987 m_0$ et $\alpha = 0.55 / \text{eV}$). Méthode du pseudo-potentiel calculée par M.V.Fischetti [FIS88]: - traits mixtes.

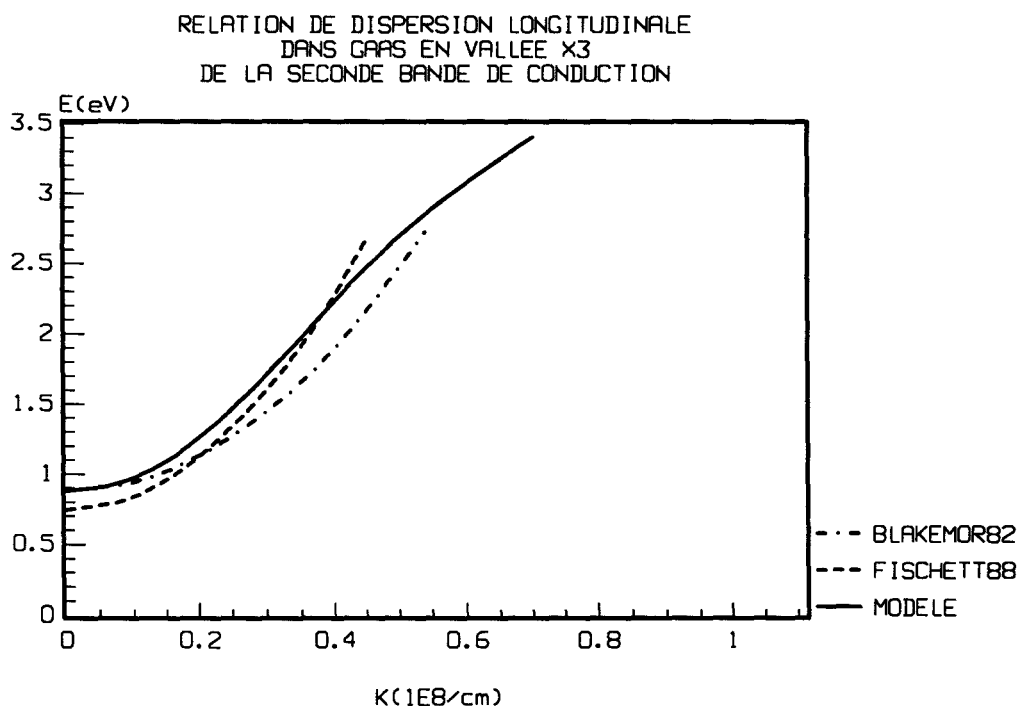


Figure II-13. Relation de dispersion au voisinage d'un point X3 dans la direction principale Δ associée. Modèle des vallées étendues: trait plein. Méthode du pseudo-potentiel: - tirets: M.V.Fischetti [FIS88]; - traits mixtes: J.Blakemore [BLA82].

direction principale vallée	Λ	Δ	Σ
$\Gamma 1$	0.17	0.58	0.19
L1	0.59		
X1	4.21		
X3	2.85		

Tableau II-4. Energie (eV), par rapport au fond de la première bande de conduction, des premiers points de changement de signe de la masse effective en vallées.

II-I.2) APPLICATION DU MODÈLE DE STRUCTURE DE BANDE À InP.

II.I.2.1) VALEURS DES PARAMÈTRES DE BANDE DE InP.

II.I.2.1.1) CHOIX DES VALEURS DES PARAMÈTRES DE BANDE DANS InP.

II.I.2.1.1.1) CHOIX DES PARAMÈTRES DE BANDE EN VALLÉE $\Gamma 1$ DE InP.

Les paramètres de bande relatifs à la courbure de bande en vallée centrale, sont ajustés au diagramme de bande de M.V.Fischetti [FIS91] le long des trois directions principales Λ , Δ , et Σ .

Le point central $\Gamma 1$ a pour énergie 1.34 eV à 300°K [FAU80]. C'est le point de plus basse énergie.

La masse effective de fond de vallée est prise égale à celle utilisée par R.Fauquembergue [FAU80] dans le cadre du modèle classique des vallées: $m^* = 0.078 m_0$.

Le long d'un axe Δ , le vecteur d'onde tiré du diagramme de bande de M.V.Fischetti [FIS88] correspondant au maximum d'énergie $\varepsilon_{\max \Delta} = 2.38$ eV, vaut $k_{\max \Delta} = 0.42 \times 10^8 / \text{cm}$. Dans ces conditions la valeur de β qui ajuste au mieux le diagramme de bande dans cette direction vaut $\beta_{\Delta} = 0.20 \text{ eV}^{-2}$. En raisonnant de la même façon pour un axe Λ , le maximum étant situé en ($k_{\max \Lambda} = 0.37 \times 10^8 / \text{cm}$; $\varepsilon_{\max \Lambda} = 1.7$ eV), le coefficient de non parabolicité β_{Λ} trouvé vaut $\beta_{\Lambda} = 0.60 \text{ eV}^{-2}$. Enfin, dans une direction Σ le maximum étant situé en ($k_{\max \Sigma} = 0.71 \times 10^8 / \text{cm}$; $\varepsilon_{\max \Sigma} = 2.49$ eV), le coefficient de non parabolicité β trouvé vaut $\beta_{\Sigma} = 0.55 \text{ eV}^{-2}$.

C.1.2.2)CHOIX DES PARAMÈTRES DE BANDE EN VALLÉES L1 ET X1 DE InP.

Les énergies de fond de vallées ainsi que les masses effectives de densité d'états des vallées L1 et X1 ont été fixées identiques à celles utilisées par R.Fauquembergue [FAU80]: $E_{L1} = 0.61 \text{ eV}$, $m_{L1}^* = 0.4 m_0$ et $E_{X1} = 0.8 \text{ eV}$, $m_{X1}^* = 0.4 m_0$.

L'énergie correspondant au maximum de densité d'états avoisine 1.7 eV , d'après la courbe de densité d'états en première bande de K.Brennan & K.Hess [BRE84].

L'énergie de maximum de bande a été fixée à 4.0 eV .

Les paramètres de bande intermédiaires, $\alpha_{v=L1, \text{ ou } X1}$ et $\beta_{v=L1, \text{ ou } X1}$, sont ajustés de manière à retrouver une allure correcte de la densité d'états globale en première bande pour avoir un nombre total d'états accessibles $N_{1,\infty}$ avoisinant $3.96 \times 10^{22} / \text{cm}^3$ ($\frac{8}{a^3}$, avec $a = 5.87 \text{ \AA}$). Compte tenu du fait que l'allure générale de la densité d'états (DOS) réelle est respectée, avec un nombre total d'états calculés de $N_{1,\infty} = 3.94 \times 10^{22} / \text{cm}^3$, on peut estimer que l'erreur sur la DOS est faible.

Les masses effectives longitudinales en vallées L1 et X1, sont ajustées à la courbure de bande du diagramme de bande calculé par la méthode du pseudo-potentiel par M.V.Fischetti [FIS91]. Les masses effectives longitudinales sont prises identiques à celles utilisées pour GaAs: $m_{//L1}^* = 1.3 m_0$, et $m_{//X1}^* = 0.9 m_0$.

II-1.3.1.2.3)CHOIX DES PARAMÈTRES EN VALLÉES X3 DE InP.

A partir de l'énergie de fond de vallée X1, $E_{X1} = 0.8 \text{ eV}$ [FAU80], et de l'écart énergétique entre la vallée X1 et la vallée X3, $\Delta E_{X1-X3} = 0.2 \text{ eV}$, obtenue d'après un diagramme de bande calculé par la méthode du pseudo-potentiel [VIN88], on en déduit l'énergie de fond de deuxième bande: $E_{X3} = 1.0 \text{ eV}$.

L'allure parabolique au voisinage du fond de bande permet d'annuler les coefficients de non-parabolicité du premier ordre α_{X3} , et du second ordre β_{X3} : $\alpha_{X3} = 0 \text{ eV}^{-1}$, et $\beta_{X3} = 0 \text{ eV}^{-2}$.

L'énergie maximale de bande a été fixée à 5.0 eV , et la masse de densité d'états au sommet de bande, vue des points X3, a été fixée comme dans GaAs à $\tilde{m}_{dX3}^* = 0.1 m_0$.

A des énergies assez éloignées d'un fond de vallée X3, il faut tenir compte d'un coefficient de non-parabolicité du troisième ordre ω_{X3} , dont la valeur est ajustée de manière à trouver un nombre total d'états accessibles $N_{2,\infty}$ voisin de la valeur réelle de $3.96 \times 10^{22} / \text{cm}^3$. En fixant $\omega_{X3} = 0.12 \text{ eV}^{-3}$, on trouve $N_{2,\infty} = 3.92 \times 10^{22} / \text{cm}^3$.

II.1.2.1.1) TABLEAUX DES PARAMÈTRES DE BANDE DANS InP.

Nous présentons dans les pages suivantes les valeurs des principaux paramètres de bande, nécessaires à l'étude du transport dans le matériau InP en volume. De ces paramètres, on peut en déduire d'autres grandeurs de bande par des relations analytiques: ce sont les grandeurs dérivées.

Le tableau II-5 présente les principaux paramètres de bande en vallées latérales L1, X1 de la première bande, et X3 de la seconde bande.

La grandeur dérivée présentée est la masse effective transverse qui se déduit de la masse effective de densité d'états et de la masse effective longitudinale.

Remarquons que la seconde bande de conduction est entièrement décrite dans une approximation multi-vallées équivalentes X3 étendues sur toute la bande.

Le tableau II-6 présente les principaux paramètres de bande de la vallée centrale Γ_1 de la première bande de conduction.

Ils sont pris en considérant la relation de dispersion le long de chacune des trois directions principales Λ , Δ , et Σ .

La grandeur de bande dérivée présentée est le coefficient de non-parabolicité de fond de vallée du premier ordre α , qui se déduit de la masse effective de fond de vallée et de l'énergie de bande interdite par une formule de la méthode **K.p**.

PARAMÈTRES DE STRUCTURE DE BANDE DE CONDUCTION DE InP À 300°K

II-I.3.1.1.1)PARAMÈTRES DE BANDE DE InP EN VALLÉES LATÉRALES
L1, X1 (PREMIÈRE BANDE) ET X3 (SECONDE BANDE).

n° de bande	1		2
Vallée v	L1	X1	X3
Paramètre de bande			
Multiplicité de la vallée M_v	4	3	3
Energie par rapport au fond de la première bande de conduction $\Delta E_{\Gamma 1-v}(\text{eV})$	0.61 [FAU80]	0.8 [FAU80]	1.0
Masse effective de densité d'états $m_{dv}^*(m_0)$	0.4 [FAU80]	0.4 [FAU80]	0.2
Masse effective longitudinale $m_{//v}^*(m_0)$	1.3	0.9	0.2
Masse effective transverse $m_{\perp v}^*(m_0)$	$\sqrt{\frac{m_{dL1}^{*3}}{m_{//L1}^*}} = 0.222$	$\sqrt{\frac{m_{dL1}^{*3}}{m_{//X1}^*}} = 0.267$	$\sqrt{\frac{m_{dX3}^{*3}}{m_{//X3}^*}} = 0.2$
Non-parabolicité alpha $\alpha_v(\text{eV}^{-1})$	0.6	0.204 [FAU80]	0
Non-parabolicité bêta $\beta_v(\text{eV}^{-2})$	0.25	0	0
Non-parabolicité oméga $\omega_v(\text{eV}^{-3})$	0	0	0.12
Masse de densité d'états à l'énergie maximale $\tilde{m}_{dv}^*(m_0)$	0.1		0.1
Energie au pic de densité d'états $E_{cv}(\text{eV})$	1.7		3.4
Energie maximale $E_{\max v}(\text{eV})$	4.0		5.0

Tableau II-5.

II-I.3.1.1.2)PARAMÈTRES DE BANDE DE InP EN VALLÉE CENTRALE
 Γ_1 (PREMIÈRE BANDE).

Direction principale δ Paramètre de bande	Λ	Δ	Σ
Multiplicité de l'axe cristallographique M_δ	8	6	12
Energie de bande interdite E_{gap} (eV)	1.34 [FAU80]		
Masse effective m_δ^* (m_0)	0.078 [FAU80]		
Non-parabolicité alpha α_δ (eV $^{-1}$)	$\frac{\left(1 - \frac{m^*}{m_0}\right)^2}{E_{\text{gap}}} = 0.634$		
Non-parabolicité bêta β_δ (eV $^{-2}$)	0.60	0.20	0.55
Non-parabolicité oméga ω_δ (eV $^{-3}$)	0.0		
Masse effective à l'énergie maximale $\tilde{m}_\delta^*$ (m_0)	0.114	0.0053	0.194
Vecteur d'onde à l'énergie maximale $k_{\text{max } \delta}$ (10^{10} / m)	0.37	0.42	0.71
Energie maximale $\epsilon_{\text{max } \delta}$ (eV)	1.7	2.38	2.49

Tableau II-6.

II-I.3.2) DENSITÉS D'ÉTATS ÉLECTRONIQUES DANS InP.

II-I.3.2.1) DENSITÉ D'ÉTATS GLOBALE DANS InP

La figure II-14 présente la densité d'états dans InP, obtenue à partir de la structure de bande calculée par la méthode du pseudo-potential empirique sur une ou plus de deux bandes, et par le modèle proposé sur deux bandes.

La densité d'états globale fait nettement apparaître les deux maxima principaux correspondant aux maxima de densité d'états des deux premières bandes.

La densité d'états calculée par le modèle de bande, s'approche de celle obtenue par T.Vinchon [VIN88] et K.F.Brennan & K.Hess [BRE84].

La densité d'états (DOS) calculée sur plusieurs bandes par M.V.Fischetti [FIS91], s'écarte très nettement des autres, même à des énergies où la seconde bande n'intervient pas (avant 1 eV). On peut l'expliquer par la nette différence d'énergie de fond de vallées latérales L1 et X1, pris par M.V.Fischetti [FIS91], qui les situe respectivement à 0.832 eV et 1.492 eV, au lieu de 0.6 eV et 0.8 eV.

Dans le modèle bi-bandes proposé, le nombre total d'états est calculé par la méthode d'intégration numérique de Simpson. Il vaut, pour la première bande et la seconde bande de conduction, respectivement $3.94 \times 10^{22} / \text{cm}^3$, et $3.92 \times 10^{22} / \text{cm}^3$. Ces deux valeurs sont toutes deux très voisines de la valeur théorique, pour chacune des deux bandes, de $3.96 \times 10^{22} / \text{cm}^3$.

Dans la mesure où l'allure générale de la DOS réelle est bien respectée, l'erreur sur le nombre total d'états disponibles qui est ici inférieure à 1%, peut donner une idée de l'erreur sur la DOS.

II-I.3.2.2) CONTRIBUTION DES VALLÉES À LA DENSITÉ D'ÉTATS GLOBALE DANS InP.

La figure II-15 donne le détail de la densité d'états dans chaque bande. La densité d'états est répartie, pour la première bande, entre les trois types de vallées du modèle, Γ 1, L1, et X1, et pour la seconde bande, entre les vallées X3.

L'expression donnant la densité d'états en vallées latérales L1, X1, et X3 est du même type de celle utilisée pour une relation de dispersion du type de R.Brunetti & C.Jacoboni [BRU89], mais en considérant des coefficients de non-parabolicité d'ordre supérieur.

En première bande et aux hautes énergies, la densité d'états en vallées latérales domine nettement celle en vallée centrale. La densité d'états en vallées L domine celle des autres vallées jusque vers 2.5 eV où elle devient égale à celle en deuxième bande. A partir de 3 eV, la densité d'états en première bande devient négligeable par rapport à celle en deuxième bande.

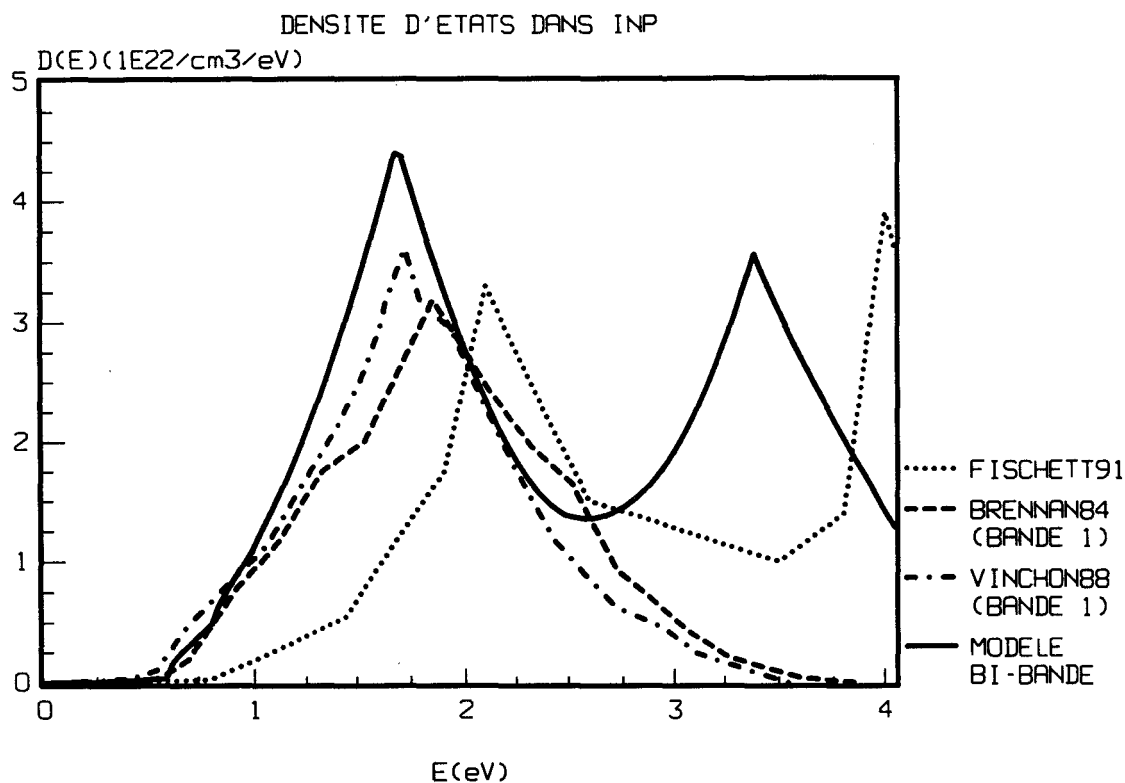


Figure II-14. Densité d'états dans InP. Calcul issu d'une structure de bande (SDB) de type pseudo-potential: - pointillés: calcul de M.V.Fischetti [FIS91]; - tirets: calcul de K.Brennan [BRE84] limité à la première bande; - traits mixtes: calcul de T.Vinchon [VIN88]; - trait plein: calcul à partir de la SDB des vallées étendues aux deux premières bandes.

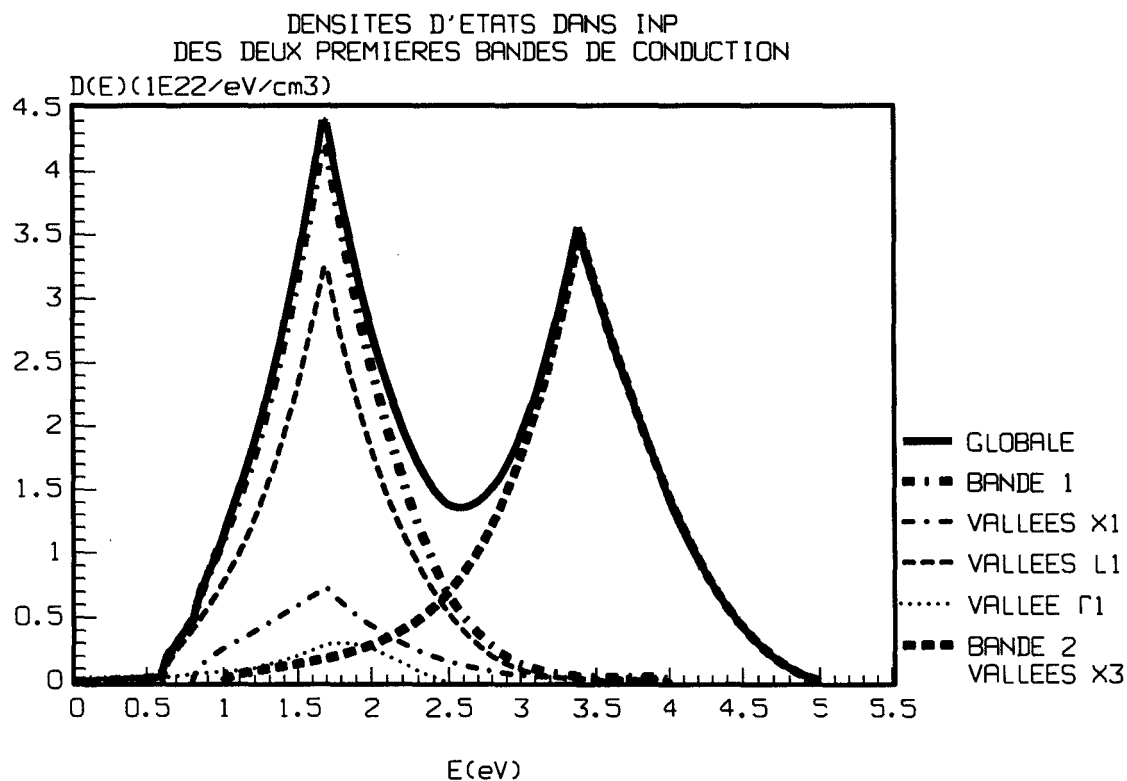


Figure II-15. Contribution à la densité d'états, des bandes (bande 1: traits mixtes gras; bande 2: tirets gras) et des vallées constitutives (Γ_1 : pointillés; L1: tirets fins; X1: traits mixtes fins; X3: idem bande 2).

II-I.3.3)ISOÉNERGIES DANS UN PLAN Γ XW DE InP.

L'intersection des surfaces d'isoénergies avec un plan Γ XW constitue des courbes contenant les points de plus hautes énergies W. Elles sont présentées d'une part dans la première bande de conduction, et d'autre part dans la seconde bande. Elles ont été tracées en trait plein du minimum au maximum d'énergie de bande, tandis que la frontière des vallées a été tracée en pointillés.

II-I.3.3.1)ISOÉNERGIES EN PREMIÈRE BANDE DE CONDUCTION DANS InP.

La figure II-16 présente les isoénergies dans un plan Γ XW des vallées Γ 1 et X1 de la première bande de conduction, centrées aux points Γ et X de la zone de Brillouin réelle (Γ X = $2\pi/a$).

En vallée centrale, le modèle impose une variation discontinue de la frontière, correspondant à la prise en compte: soit de la relation de dispersion (RD) le long d'une direction principale Δ (direction Γ X), l'énergie variant de 0 eV à 2.38 eV, soit de la RD le long d'une direction Σ (direction Γ K), l'énergie variant de 0 eV à 2.49 eV. Les courbes d'isoénergies sont des arcs de cercle dans les directions Δ et Σ , dont la réunion à basse énergie forme un cercle car la RD y est quasiment isotrope.

En vallées X1 les courbes d'isoénergies sont des ellipses, de 0.8 eV, énergie de fond de vallée, jusqu'à 1.7 eV, énergie au pic de densité d'états. Au-delà de cette dernière énergie, ce sont des arcs d'ellipses dont la longueur diminue à mesure que l'énergie tend vers l'énergie des maxima de bande W, situés vers 4 eV.

Les points W du modèle sont quasiment situés à la même distance des minima X1 que les points W réels.

II-I.3.3.2)ISOÉNERGIES EN DEUXIÈME BANDE DE CONDUCTION DANS InP.

La figure II-17 présente les isoénergies dans un plan Γ XW de la deuxième bande de conduction, représentée par des vallées X3, centrées aux points X de la zone de Brillouin réelle (Γ X = $2\pi/a$). Les isoénergies ont été tracées du minimum au maximum d'énergie dans la bande.

Les courbes d'isoénergie sont des ellipses, de 1 eV, énergie de fond de vallée, jusqu'à 3.4 eV, énergie au pic de densité d'états. Au-delà de cette dernière énergie, ce sont des arcs d'ellipses dont la longueur diminue à mesure que l'énergie tend vers l'énergie des maxima de bande W situés vers 5eV.

Les point W du modèle sont situés bien au-delà des points W réels par comparaison à la première bande de conduction. Cela s'explique par la prise en compte uniquement des minima de symétrie X dans cette bande, comme auparavant R.Brunetti & C.Jacoboni [BRU89] ou T.Vogelsang & W.Hänsch [VOG91] pour leur modélisation de la première bande de conduction du Silicium.

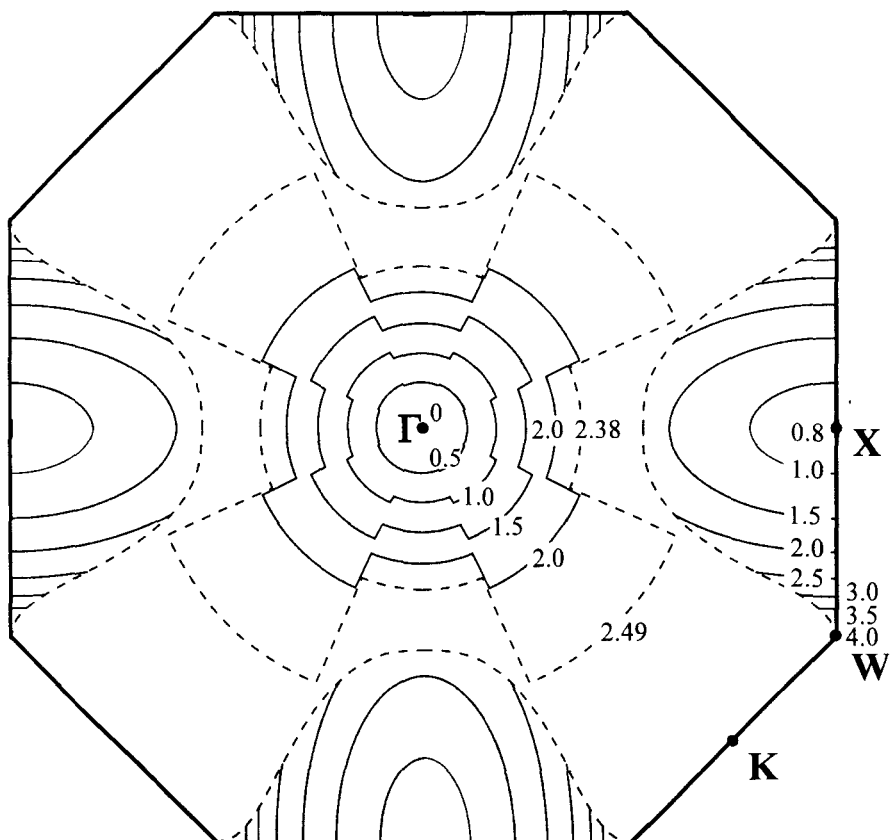


Figure II-16. Isoénergies dans un plan ΓXW de InP, en première bande de conduction (traits pleins). Les tirets sont la frontière d'une vallée.

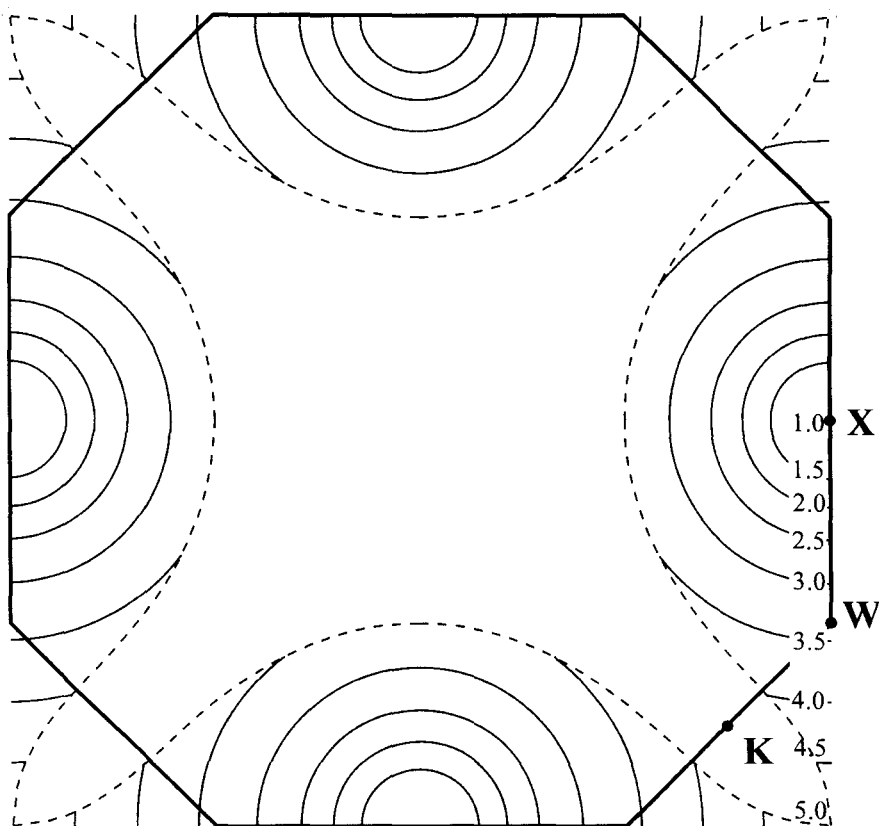


Figure II-17. Isoénergies dans un plan ΓXW de InP, en seconde bande de conduction (traits pleins). Les tirets sont la frontière d'une vallée.

II-II)LES INTERACTIONS DANS LE MODÈLE DE STRUCTURE DE BANDE PROPOSÉ.

II-II.1)DESCRIPTION GÉNÉRALE DES INTERACTIONS.

II-II.1.1)LES INTERACTIONS AUTRES QUE L'IONISATION PAR CHOC.

II-II.1.1.1)HYPOTHÈSES ET MÉCANISMES D'INTERACTION ENVISAGÉS.

Le matériau à grand gap de type N est considéré à la température ambiante de 300°K.

Les lacunes, défauts ponctuels, et dislocations, sont négligés.

Dans notre étude à l'énergie thermique, tous les donneurs sont supposés être ionisés; la concentration d'électrons de conduction est donc la même que celle des atomes d'impuretés donneuses. La concentration de ces impuretés est prise égale à $10^{15} / \text{cm}^3$. Cette valeur est suffisamment faible, pour qu'on puisse négliger la contribution des électrons de conduction à l'interaction électron de conduction-électron de conduction. La contribution à cette interaction des électrons de conduction provenant de la bande de valence à l'issue de l'ionisation par choc, est également négligée. L'interaction électron de conduction-électron de conduction est donc négligée.

Le matériau étant à grand gap, le transfert d'un électron de valence dans la bande de conduction par effet tunnel dans l'espace réciproque peut être négligé.

L'effet tunnel dans l'espace réciproque [KAN59] entre les deux premières bandes de conduction s'ajoute à l'interaction interbandes avec échange de phonons. Etant donné la faible densité d'états au point de transfert de l'espace réciproque par cet effet, il nous semble légitime de négliger ce mécanisme.

Les mécanismes de génération-recombinaison sont négligés.

Les interactions prises en compte dans le matériau cristallin étudié sont les suivantes:

- phonons: acoustiques, optiques, optiques polaires et intervallées (et/ou interbandes)
- impuretés ionisées
- piézo-électricité
- ionisation par choc

II-II.1.1.2)PROBABILITÉS D'INTERACTION.

D'après la règle d'Or de Fermi, la probabilité d'interaction par unité de temps est proportionnelle à la densité d'états (DOS) disponible. Comme la probabilité d'interaction est proportionnelle à la DOS, nous allons utiliser les expressions de W.Fawcett & al. [FAW70] et de A.Kaszynski [KAS79] établies dans le cadre du modèle classique des vallées, en y substituant simplement la DOS obtenue dans ce modèle, par la DOS plus réaliste du modèle de structure de bande des vallées étendues proposé au chapitre II-I.

Rappelons que les probabilités d'interaction obtenues à partir des expressions habituelles de W.Fawcett & al. [FAW70], D.L.Rode [ROD75] et A.Kaszynski [KAS79], sont calculées dans le cadre du modèle classique des vallées considérant un phonon moyen échangé pour chaque interaction sur phonon. Ces probabilités ne dépendent que de l'énergie.

II-II.1.1.3)CHOIX DES PARAMÈTRES D'INTERACTION HORS IONISATION PAR CHOC.

Dans la première bande de conduction et à basse énergie, tous les paramètres d'interaction, autres que les potentiels de déformation intervallées, sont choisis dans la littérature. Les potentiels de déformation intra-première-bande sont ajustés à la caractéristique de dérive stationnaire du matériau.

Dans la seconde bande de conduction, ne disposant pas de données-matériau concernant les paramètres d'interaction pour les interactions autres que l'ionisation par choc dans GaAs [STO94], ces paramètres sont fixés de manière à trouver à haute énergie, une section efficace totale de diffusion réaliste, via la probabilité totale de diffusion sur phonons. A haute énergie, comparativement à l'ionisation par choc et à l'interaction sur phonons intervallées, les autres interactions ont, en général, des probabilités plus faibles de plus d'un ordre de grandeur. Par conséquent, en vallées X3, elles sont choisies, identiques à celles existantes en vallées X1.

Les paramètres d'interaction à déterminer sont les potentiels de déformations: potentiel de déformation intra-seconde-bande (potentiel de déformation intervallées à l'intérieur de la seconde bande), et constante de couplage interbande.

Le potentiel de déformation intra-seconde-bande est fixé dans un premier temps de manière à retrouver une probabilité totale du même ordre de grandeur que la probabilité totale sur phonons publiée dans la littérature [SHI81][FIS88][BUD92]. Il est ensuite corrigé à partir de la valeur précédemment fixée, en même temps que sera ajustée la constante de couplage interbande, de telle sorte que l'ajustement de ces deux paramètres à deux valeurs expérimentales du coefficient d'ionisation par choc, fournisse une caractéristique correcte du coefficient d'ionisation.

II-II.1.2) L'IONISATION PAR CHOC.

II-II.1.2.1) EXPRESSION DE LA PROBABILITÉ D'IONISATION PAR CHOC.

L'expression de la probabilité d'ionisation par choc utilisée dans la simulation, est celle de M.Stobbe & al. [STO94]. Elle est calculée en fonction de l'énergie E_{v_1} de l'électron de conduction primaire en bande v_1 , et s'exprime par:

$$P_{ii}(E_{v_1}) = P \left[E_{v_1} - E_{th}^{Sto} \right]^a \quad (II-7)$$

Dans la probabilité d'ionisation (II-7), les mêmes paramètres, P , a , et E_{th}^{Sto} , sont appliqués pour les deux premières bandes de conduction.

Les paramètres de Stobbe sont ajustés à la caractéristique obtenue avec l'expression moyennée de N.Sano & A.Yoshii [SAN95], s'exprimant essentiellement en fonction de la densité d'états (DOS), et de l'énergie E_{v_2} de l'électron de valence '2' par:

$$P_{ii}(E_{v_1}) = C_{ii} \int dE D(E) D(E_{v_1} + E_{v_2} - E) \quad (II-8)$$

Comme l'indique la figure II-18, représentant la probabilité d'ionisation de Si, GaAs, InAs, et $Ga_{0.47}In_{0.53}As$, les calculs de N.Sano & A.Yoshii [SAN95], montrent que la plupart des matériaux semiconducteurs ont des probabilités d'ionisation très voisines à haute énergie. Cette propriété va permettre d'ajuster le facteur multiplicatif C_{ii} pour les différents matériaux.

La même probabilité d'ionisation par choc sera appliquée pour les bandes 1 et 2.

La figure II-19 présente l'énergie E_{v_2} du trou généré '2' (électron de valence avant ionisation) en fonction de l'énergie E_{v_1} de l'électron primaire '1', dans GaAs, Si, $In_{0.53}Ga_{0.47}As$, et InAs, dans l'ordre des gaps décroissants, d'après N.Sano & A.Yoshii [SAN95].

Pour les différents matériaux, l'énergie $E_{v_2}(E_{v_1})$ du trou généré peut s'exprimer par:

$$E_{v_2} = -E_{gap} - s \times (E_{v_1} - E_{th}^{San}) \quad (II-9)$$

Dans l'expression (II-9), E_{th}^{San} est l'énergie de seuil doux, prise égale au gap par les auteurs:

$$E_{th}^{San} = E_{gap}$$

A haute énergie, là où la statistique est la meilleure, les pentes ' s ' de la fonction $E_{v_2}(E_{v_1})$ sont sensiblement les mêmes pour des matériaux de gap voisin. On remarque que la valeur de ' s ' diminue lorsque le gap diminue.

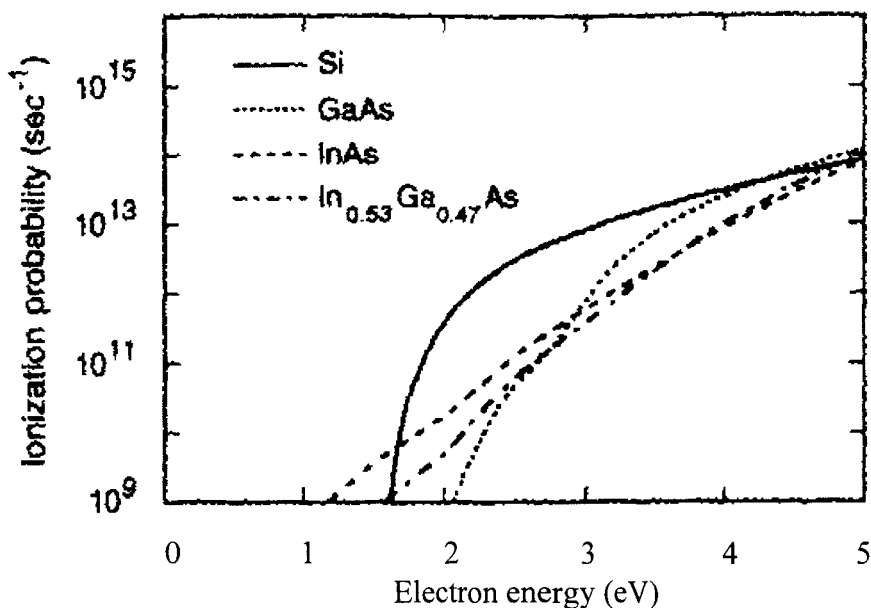


Figure II-18. Probabilité d'ionisation par choc pour les matériaux Si, GaAs, InAs, $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, d'après N.Sano & A.Yoshii [SAN95].

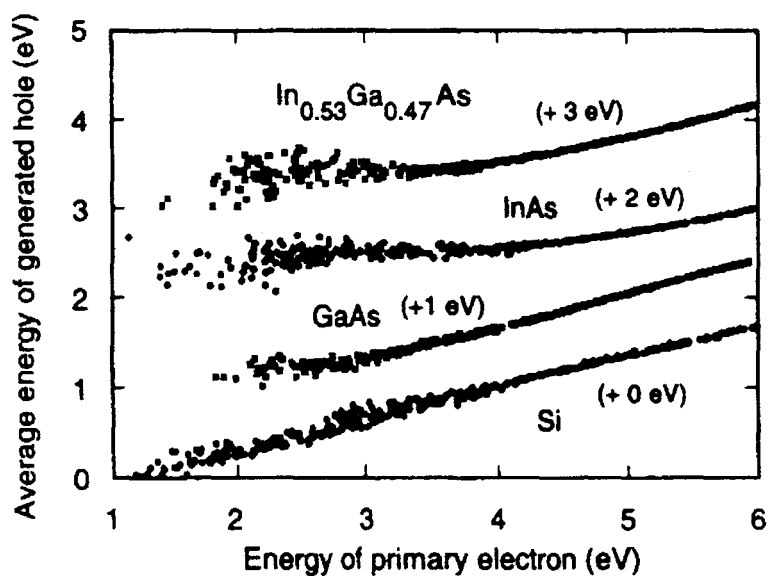


Figure II-19. Energie du trou généré (avec un décalage énergétique entre parenthèses pour distinguer les courbes) en fonction de l'énergie de l'électron de conduction primaire, dans Si, GaAs, InAs, et $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, d'après N.Sano & A.Yoshii [SAN95].

II-II.1.2.2)APPLICATION AU MATÉRIAU GaAs.

La probabilité d'ionisation par choc dans le matériau GaAs a été assez bien étudiée par M.Stobbe & al. [STO94]. Comme N.Sano & A.Yoshii [SAN95], trouvent des résultats proches de ceux obtenus par Stobbe, les valeurs de paramètres de Stobbe & al. pour ce matériau seront utilisées telles quelles à 300°K:

$$\begin{cases} E_{th}^{Sto} = 2.1 \text{ eV} \\ a = 4 \\ P = 2 \times 10^{12} \text{ eV}^{-a} \text{ s}^{-1} \end{cases}$$

En utilisant le gap du modèle, l'énergie de seuil doux de la formule de Sano, égale au gap vaut: $E_{th}^{San} = 1.424 \text{ eV}$.

Les pentes pour les matériaux à grand gap GaAs et Si étant assez voisines, la même valeur de 's' pour GaAs que pour Si est choisie: $s=0.4$. Compte tenu de la densité d'états du modèle des vallées étendues; la valeur de C_{ii} trouvée est:

$$C_{ii} = 4.0 \times 10^{-31} \text{ eVcm}^6/\text{s}$$

II-II.1.2.3)APPLICATION AU MATÉRIAU InP.

Pour InP, ne disposant pas de paramètres récents nous avons utilisé la formule de N.Sano & A.Yoshii avec $E_{th}^{San} = E_{gap} = 1.34 \text{ eV}$, et $C_{ii} = 8.0 \times 10^{-31} \text{ eVcm}^6/\text{s}$.

Ne disposant pas de la possibilité de déterminer la grandeur 's' par des résultats de la littérature, InP et GaAs ayant des gaps voisins, la même valeur de 's' que dans GaAs a été prise: $s=0.4$.

Les paramètres de la formule de M.Stobbe & al. [STO94] sont ajustés pour retrouver la probabilité d'ionisation par choc de N.Sano & A.Yoshii [SAN95]. Ils valent:

$$\begin{cases} E_{th}^{Sto} = 0.5 \text{ eV} \\ a = 10 \\ P = 4 \times 10^7 \text{ eV}^{-a} \text{ s}^{-1} \end{cases}$$

Les grands écarts entre les différentes énergies de seuil, E_{th}^{San} , et E_{th}^{Sto} , traduisent le caractère de seuil doux qui rend douteuse la notion même d'énergie de seuil d'ionisation [BUD92].

II-II.1.2.4)TABLEAU RÉCAPITULATIF DES PARAMÈTRES D'IONISATION DE GaAs ET DE InP ET COURBES DE PROBABILITÉ D'IONISATION.

Le tableau II-8 récapitule les paramètres d'ionisation par choc avec l'expression de M.Stobbe & al. [STO94], et avec celle de N.Sano & A.Yoshii [SAN95].

La figure II-20 représente la probabilité (ou taux) d'ionisation par choc dans GaAs et InP

matériau paramètres	GaAs	InP
$E_{th}^{San} = E_{gap} \text{ (eV)}$	1.424	1.34
s	0.4	0.4
$C_{ii} \text{ (} 10^{-31} \text{ eVcm}^6/\text{s})$	4	8
$E_{th}^{Sto} \text{ (eV)}$	2.1	0.5
a	4	10
$P \text{ (} 10^{12} \text{ eV}^{-a} \text{s}^{-1})$	2	4×10^{-5}

Tableau II-8. Paramètres d'ionisation par choc de GaAs et InP, des expressions de N.Sano & A.Yoshii [SAN95] (E_{th}^{San} , s, C_{ii}), et de M.Stobbe & al. [STO94] (E_{th}^{Sto} , a, P).

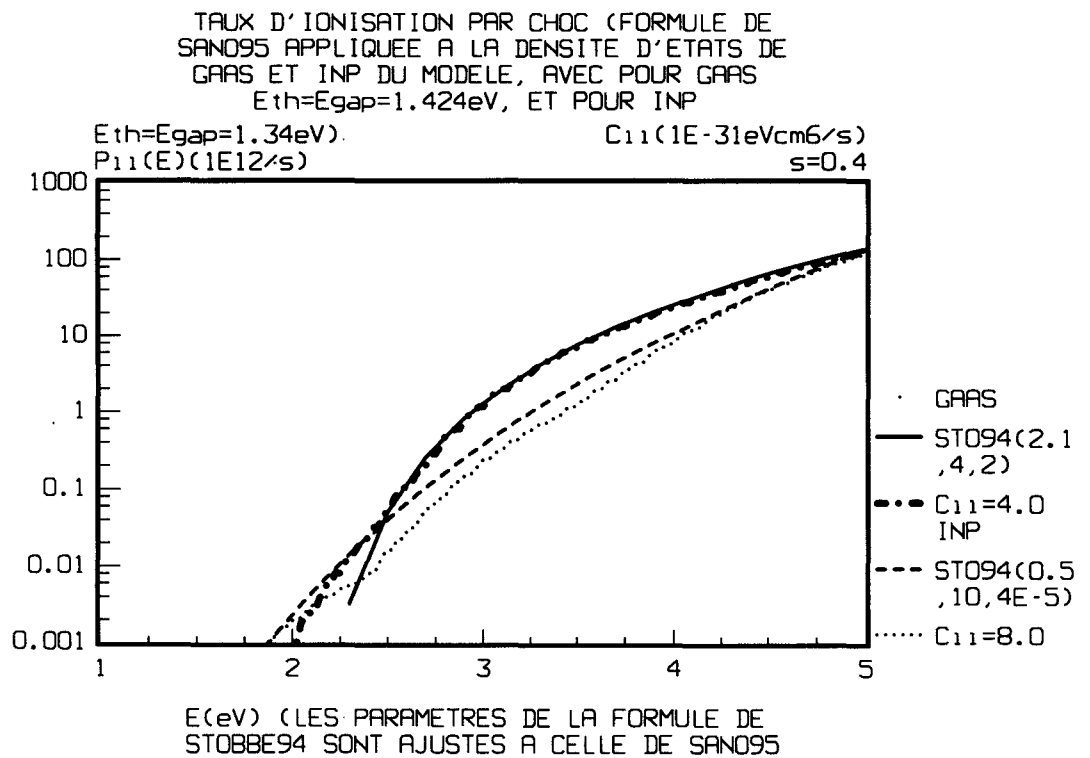


Figure II-20. Probabilité d'ionisation par choc dans GaAs et InP. Pour GaAs:- trait plein: expression analytique de M.Stobbe & al. [STO94] avec: ($E_{th}^{Sto} = 2.1 \text{ eV}$; $a = 4$; $P = 2 \times 10^{12} \text{ eV}^{-a} \text{s}^{-1}$). - traits mixtes: fonction-intégrale de N.Sano & A.Yoshii [SAN95] avec ($C_{ii} = 4.0 \times 10^{-31} \text{ eVcm}^6 / \text{s}$; $E_{th}^{San} = E_{gap} = 1.424 \text{ eV}$; $s=0.4$). Pour InP: -tirets: expression analytique de M.Stobbe & al. avec ($E_{th}^{Sto} = 0.5 \text{ eV}$; $a = 10$; $P = 4 \times 10^7 \text{ eV}^{-a} \text{s}^{-1}$). -pointillés: fonction intégrale de N.Sano & A.Yoshii avec ($C_{ii} = 8.0 \times 10^{-31} \text{ eVcm}^6 / \text{s}$; $E_{th}^{San} = E_{gap} = 1.34 \text{ eV}$; $s=0.4$).

obtenue avec les paramètres du tableau II-8. On remarque que pour GaAs les caractéristiques calculées avec la formule de Stobbe et avec celle de Sano, sont confondues.

II-II.1.2.5) TRAITEMENT DE L'IONISATION PAR CHOC.

Le traitement de l'ionisation par choc permet d'obtenir l'état énergétique des particules impliquées dans le mécanisme d'ionisation. Lorsque l'électron provoque une ionisation il perd au moins l'énergie de la bande interdite d'après le principe de conservation de l'énergie. Nous allons déterminer une expression approchée de l'énergie finale de l'électron ionisant à partir des énergies moyennes des électrons secondaires grâce une simulation complète sur le Silicium, réalisée par T.Kunikiyo & al. [KUN94], en paramétrisant leurs résultats en fonction de l'énergie de bande interdite et de l'énergie de seuil d'ionisation par choc du matériau étudié. Ces auteurs obtiennent une relation linéaire entre les énergies de particules mises en jeu dans l'ionisation par choc:

$$\begin{cases} E_{v_2} = -E_{\text{gap}} - s \times (E_{v_1} - E_{\text{th}}) \\ E_{v_4} = h \times (E_{v_1} - E_{\text{th}}) \end{cases} \quad \text{(II-10)}$$

$$\begin{cases} E_{v_2} = -E_{\text{gap}} - s \times (E_{v_1} - E_{\text{th}}) \\ E_{v_4} = h \times (E_{v_1} - E_{\text{th}}) \end{cases} \quad \text{(II-11)}$$

où, v_i désigne la vallée de l'électron 'i', et les indices '2' et '4' désignent respectivement, l'électron de la bande de valence laissant la place à un trou, et l'électron de conduction secondaire, état final de l'électron de valence. L'indice '1' désigne l'électron de conduction primaire ou électron ionisant. L'indice '3' désignant l'énergie de l'électron ionisant après ionisation, l'application de la conservation de l'énergie s'écrit:

$$E_{v_1} + E_{v_2} = E_{v_3} + E_{v_4} \quad \text{(II-12)}$$

La variation d'énergie de l'électron ionisant s'écrit donc:

$$\Delta E_{v_1} = E_{v_3} - E_{v_1} = E_{v_2} - E_{v_4} \quad \text{(II-13)}$$

On déduit des relations (II-10), (II-11), (II-12), et (II-13), l'expression de son énergie perdue:

$$\Delta E_{v_1} = -E_{\text{gap}} - (s + h) \times (E_{v_1} - E_{\text{th}}) \quad \text{(II-14)}$$

Après une ionisation, la réduction d'énergie de l'électron de conduction ionisant, donnée par la relation (II-14), peut s'accompagner d'un changement de vallée. L'électron est alors placé dans la vallée accessible de plus haute énergie de telle sorte qu'un électron ionisant dans la seconde bande aboutisse préférentiellement dans cette bande plutôt que dans la première.

L'orientation du vecteur d'onde est choisie de manière aléatoire, dans le domaine des états disponibles.

L'évolution de l'énergie de l'électron de valence en fonction de celle de l'électron de conduction primaire étant sensiblement la même pour les matériaux à grand gap, il est possible d'utiliser les mêmes valeurs de s et de h pour ces matériaux. Le matériau de référence choisi est le

Silicium, pour lequel, rappelons-le, N.Sano & A.Yoshii [SAN95] ont trouvé $s=0.4$. Ces auteurs n'ayant pas donné de valeurs pour h , nous prendrons celle obtenue à partir des résultats de T.Kunikiyo & al.[KUN94]: $h=0.2$. Ces valeurs de s et h seront appliquées pour les matériaux GaAs et InP.

II-II.2)LES PROBABILITÉS EN VALLÉES DANS GaAs.

II-II.2.1)TABLEAU DES PARAMÈTRES D'INTERACTION DANS GaAs.

Les jeux de paramètres ont été séparés en deux tableaux, de manière à isoler les paramètres non directement dépendant des vallées $\Gamma 1$, L1, X1, et X3, de ceux qui en dépendent directement.

Le tableau II-9 présente les propriétés du matériau massif. Elles sont caractérisées par les paramètres suivants: le paramètre de maille ' a ', la densité du matériau ' ρ ', la constante piézoélectrique ' C_{piez} ', l'énergie de phonon optique polaire ' $\hbar\omega_{\text{op}}$ ', la vitesse du son ' V_s ', la constante diélectrique statique ' κ_s ', et la constante diélectrique optique ' κ_{∞} '.

Le tableau II-10 présente les paramètres dépendants explicitement des vallées. Ce sont: les potentiels de déformation intervallées $D_{v_i-v_f}$, où ' v_i ' est la vallée de l'électron avant interaction, et ' v_f ', sa vallée après interaction, les énergies de phonon intervallées ' $\hbar\omega_{v_i-v_f}$ ', le potentiel de déformation acoustique ' $\Phi_{a\delta}$ ' où ' δ ' est la vallée de l'électron avant et après interaction, l'énergie de phonon optique non polaire ' $\hbar\omega_{\text{npo}\delta}$ ', et les paramètres d'ionisation ' $E_{\text{th}\delta}$ ', ' a ', et ' P ', de la formule de M.Stobbe & al. [STO94].

Paramètre de maille a (Å)	5.65 [BRE88]
Densité ρ (g / cm ³)	5.36 [LIT77]
Constante piézo-électrique C_{piez} (C / m ²)	0.052[BOU91]
Energie du phonon optique polaire $\hbar\omega_{\text{op}}$ (meV)	35.36[LIT77]
Vitesse du son V_S (10 ³ m / s)	5.24[LIT77]
Constante diélectrique statique κ_S (κ_0)	12.90[LIT77]
Constante diélectrique optique κ_∞ (κ_0)	10.92 [LIT77]

Tableau II-9. Propriétés du matériau massif dans GaAs.

n° de bande	1			2
Vallée δ	$\Gamma 1$	L1	X1	X3
Paramètres				
Pot. de déformation inter - vallées (10 ¹⁰ eV/m)				
$D_{\Gamma 1-\delta}$	-	$D_{L1-\Gamma 1}$	$D_{X1-\Gamma 1}$	$D_{X3-\Gamma 1}$
$D_{L1-\delta}$	9	10	D_{X1-L1}	D_{X3-L1}
$D_{X1-\delta}$	9	5	11	D_{X3-X1}
$D_{X3-\delta}$	5.5			6.0
Energie de phonon inter - vallées (meV)				
$\hbar\omega_{\Gamma 1-\delta}$	-	$\hbar\omega_{L1-\Gamma 1}$	$\hbar\omega_{X1-\Gamma 1}$	$\hbar\omega_{X3-\Gamma 1}$
$\hbar\omega_{L1-\delta}$	27.8 [LIT77]	29.0 [LIT77]	$\hbar\omega_{X1-L1}$	$\hbar\omega_{X3-L1}$
$\hbar\omega_{X1-\delta}$	29.9 [LIT77]	27.3 [LIT77]	23.9 [FAU80]	$\hbar\omega_{X3-X1}$
$\hbar\omega_{X3-\delta}$	$\hbar\omega_{X1-\Gamma 1}$	$\hbar\omega_{X1-L1}$	$\hbar\omega_{X1-X1}$	$\hbar\omega_{X1-X1}$
Pot. de déformation acoustique $\Phi_{a\delta}$ (eV)	7 [LIT77]	5 [FIS91]		Φ_{aX1}
Pot. de déform. optique non pol. $\Phi_{\text{npo}\delta}$ (10 ¹⁰ eV/m)	0 [LIT77]	3 [LIT77]	0 [LIT77]	$\Phi_{\text{npo}X1}$
Energie de phonon non polaire $\hbar\omega_{\text{npo}\delta}$ (meV)	34.3 [FAU80]			$\hbar\omega_{\text{npo}X1}$
Par. d'ionisation de Stobbe [$E_{\text{th}\delta}$; a_δ ; p_δ] (eV; -; 10 ¹⁰ eV·a _s ⁻¹)	[2.1;4;200]			[2.1;4;200] [STO94]

Tableau II-10. Paramètres-matériau dépendant des vallées dans GaAs.

II-II.2.2) COURBES DES PROBABILITÉS DANS GaAs.

Les probabilités d'interaction en fonction de l'énergie en vallées Γ_1 , L1, et X1 de la première bande, et en vallées X3 de la seconde bande, sont représentées respectivement sur les figures II-17 à II-21. Nous avons représenté les interactions:

- piézo-électrique
- sur phonons acoustiques
- sur phonons intervalles
- sur phonons optiques non-polaires (vallées L1)
- sur phonons optiques polaires
- sur impuretés ionisées
- sur électrons de valence par ionisation par choc

, ainsi que l'interaction résultante hormis la contribution de l'ionisation par choc.

II-II.2.2.1) PROBABILITÉS EN VALLÉES Γ_1 , L1 ET X1 (PREMIÈRE BANDE).

La figure II-21 présente les probabilités d'interaction dans la vallée centrale Γ_1 . Les probabilités d'interaction intervalles dominent toutes les autres interactions à partir de 0.5 eV. La très faible probabilité d'ionisation en vallée centrale est due à la fois à la douceur du seuil d'ionisation, et à la limitation à 2.25 eV de l'énergie maximale dans cette vallée.

Les figures II-22 et II-23 présentent les probabilités en vallées latérales L1 et X1. L'énergie peut y atteindre la valeur maximale de 4.4 eV, ce qui permet à la probabilité d'ionisation d'atteindre, à partir de 3 eV, des valeurs du même ordre de grandeur que les interactions telles que: interaction piézo-électrique, sur impuretés, sur phonons acoustiques, sur phonons optiques polaires. Mais même à 3 eV, elle est encore nettement plus faible que les probabilités d'interaction sur phonons intervalles. Elle devient du même ordre que ces dernières, vers 4 eV.

Dans les vallées L1 et X1, le second maximum de probabilité d'interaction est dû au couplage avec la seconde bande de conduction.

II-II.2.2.2) PROBABILITÉS EN VALLÉES X3 (DEUXIÈME BANDE).

La figure II-24 présente les probabilités d'ionisation en deuxième bande de conduction. L'interaction sur impuretés domine en fond de vallée, mais entre 0.9 eV et 1 eV, elle baisse brutalement, et tout comme les autres interactions, devient négligeable par rapport aux probabilités d'interactions intervalles. L'ionisation par choc devient comparable à l'interaction de plus faible amplitude, l'interaction piézo-électrique, vers 3 eV. C'est seulement vers 4 eV, qu'elle devient du

même ordre de grandeur que les autres interactions, exceptées les probabilités sur phonons intervallées, auxquelles elle devient comparable vers 4.5 eV.

Le premier maximum de probabilité d'interaction est dû au couplage avec la première bande de conduction.

II-II.2.3) COMPARAISON AVEC LA LITTÉRATURE.

II-II.2.3.1) COMPARAISON AVEC LA PROBABILITÉ DE J.BUDE & K.HESS [BUD92].

La probabilité moyenne d'interaction en fonction de l'énergie d'un électron est calculée par intégration sur l'ensemble des vecteurs d'onde et bandes possibles, compte tenu de la distribution réelle de porteurs dans le semiconducteur. Comme à haute énergie l'interaction sur phonons domine, certains auteurs parlent de probabilité totale d'interaction sur phonons ("total phonon scattering rate") car elle regroupe la totalité des interactions sur phonons. Cette probabilité d'interaction peut être utilisée dans l'approximation mono-phonon qui considère une seule interaction moyenne avec un unique phonon moyen.

Dans le modèle des vallées, la probabilité totale d'interaction dans une vallée est la somme de toutes les probabilités d'interaction dans cette vallée. A une énergie donnée la somme des probabilités d'interaction sur phonons en vallées ne donne pas une probabilité moyenne d'interaction, car celle-ci dépend de la fonction de distribution qui n'est pas connue a priori. Toutefois une connaissance approchée de la densité d'états (DOS) des différentes vallées peut donner une idée sur la répartition des porteurs entre ces vallées, et donc sur la probabilité moyenne d'interaction.

La figure II-25 présente la probabilité totale d'interaction d'un électron dans les deux premières bandes du modèle proposé des vallées étendues $\Gamma 1$, L1, X1, et X3, comparée à la probabilité moyenne de diffusion sur phonons de J.Bude & K.Hess [BUD92] obtenue par un ajustement au coefficient d'ionisation par choc.

Les trois maxima de la probabilité moyenne sur phonons de J.Bude & K.Hess sont dus aux maxima de DOS des trois premières bandes. Dans le domaine des énergies supérieures à 1 eV, la probabilité moyenne de J.Bude & K.Hess, oscille autour d'une valeur moyenne de 2×10^{14} /s [BUD92], avec des pics de 3×10^{14} /s.

On peut remarquer une forte valeur de la probabilité d'interaction en vallée centrale à partir de 1 eV, due au couplage avec les vallées latérales L1 et X1. Comme aux énergies élevées, la DOS dans la première bande est plus faible, la contribution de cette vallée à la probabilité totale moyenne

PROBABILITE D'INTERACTION DANS GAZ
DANS LA PREMIERE BANDE DE CONDUCTION
EN VALLEE Γ_1 ETENDUE

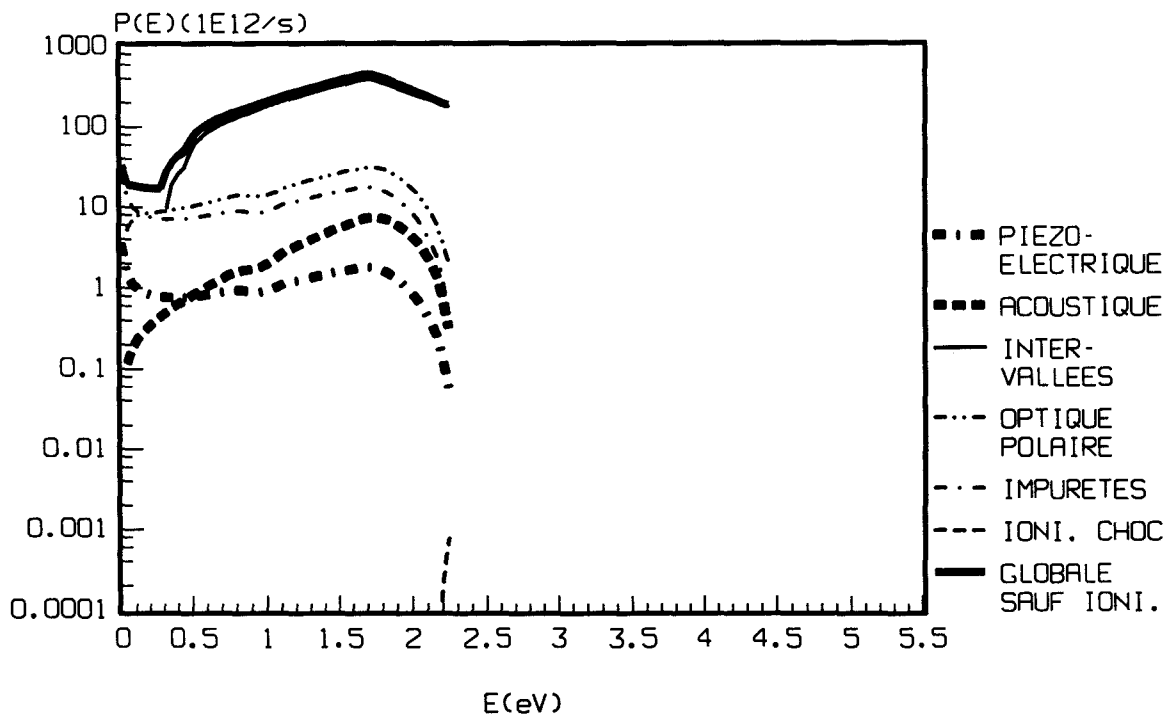


Figure II-21.

PROBABILITE D'INTERACTION DANS GAZ
DANS LA PREMIERE BANDE DE CONDUCTION
EN VALLEES L_1 ETENDUES

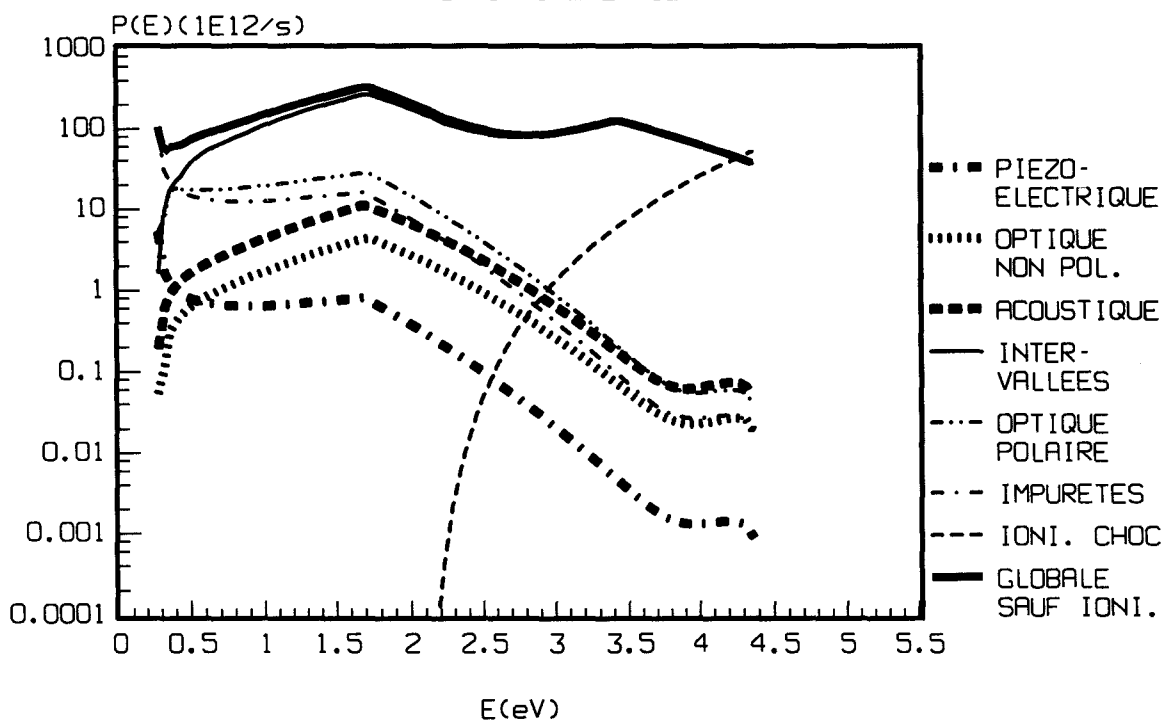


Figure II-22.

PROBABILITE D'INTERACTION DANS GAZ
DANS LA PREMIERE BANDE DE CONDUCTION
EN VALLEES X1 ETENDUES

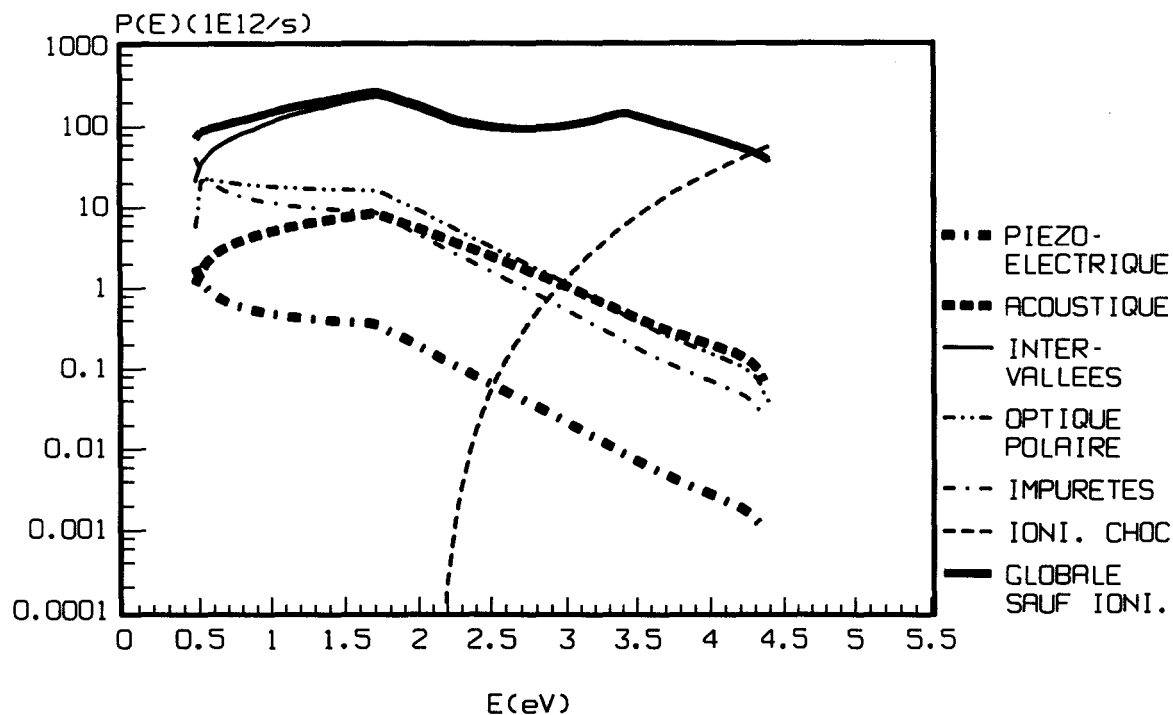


Figure II-23.

PROBABILITE D'INTERACTION DANS GAZ
DANS LA SECONDE BANDE DE CONDUCTION
(VALLEES X3 ETENDUES)

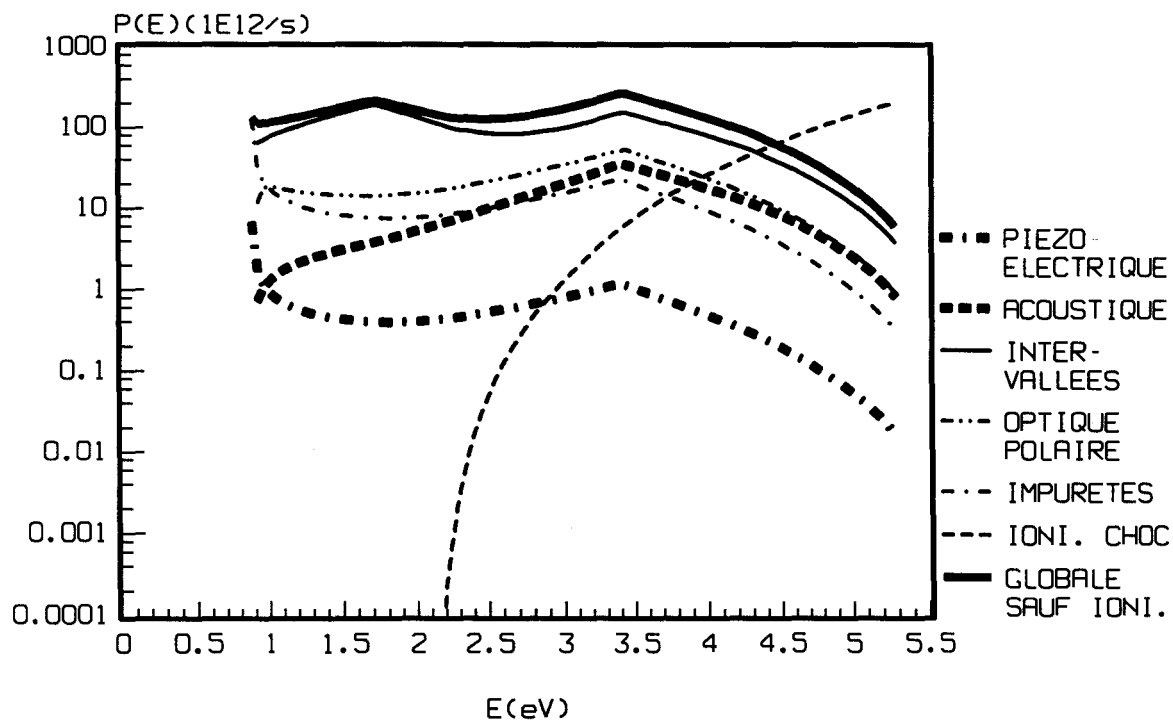


Figure II-24.

est faible par rapport à celle des vallées latérales L1 et X1 de la première bande et X3 de la seconde bande, toutes ces vallées ayant des probabilités assez voisines jusqu'aux environs de 2.5 eV. Leur valeur moyenne est donc également voisine. Les probabilités totales en vallées latérales, et donc la probabilité moyenne dans le modèle des vallées étendues, sont assez voisines de la probabilité moyenne de J.Bude & K.Hess.

A partir de 2.5 eV, les probabilités totales d'interactions en vallées L1 et X1 sont encore voisines mais près de deux fois plus faibles que celle en vallées X3, mais sont par contre assez voisines de la probabilité moyenne de J.Bude & K.Hess. A ces énergies, les probabilités en vallées L1 et X1 sont essentiellement dues au couplage avec la seconde bande.

Comme aux hautes énergies, la DOS dans la seconde bande domine en ne décroissant qu'à partir de 3.4 eV, la plupart des électrons se trouvent en deuxième bande, et la contribution à la probabilité moyenne d'interaction est essentiellement due aux électrons de cette bande. Les probabilités de J.Bude & K.Hess sont pratiquement identiques à celles qu'on obtient jusque 4 eV. A partir de cette énergie la comparaison n'est plus vraiment possible à cause de l'influence de la troisième bande de conduction, non prise en compte dans le modèle.

En conclusion, le modèle des vallées étendues fournit des probabilités comparables à celles de J.Bude & K.Hess dans la gamme d'énergie exposée.

II-II.2.3.2) COMPARAISON DE LA PROBABILITÉ DE J.BUDE & K.HESS [BUD92] AVEC CELLE DE H.SHICHIJO & K.HESS [SHI81].

La figure II-26 présente la probabilité totale d'interaction sur phonons d'après H.Shichijo & K.Hess [SHI81], et celle de J.Bude & K.Hess [BUD92]. H.Shichijo & K.Hess limitent la simulation du transport électronique à la première bande calculée par la méthode du pseudopotentiel, c'est ce qui explique la limitation à 3 eV de leur représentation de la probabilité. Leur probabilité totale est calculée en sommant les probabilités intervallées de M.A.Littlejohn [LIT77], et en supposant une décroissance quadratique à partir de 1.5 eV. Il semblerait que la surestimation de leur probabilité d'interaction, déjà signalée par F.Capasso & al. [CAP81], avec un pic à 4.5×10^{14} /s soit due à l'addition arithmétique des probabilités en vallées, sans prise en compte de la distribution réelle des porteurs.

Comme les probabilités obtenues avec le modèle sont proches de celles de J.Bude & K.Hess, la comparaison des probabilités du modèle avec celles de H.Shichijo & K.Hess, est équivalente à la comparaison des probabilités de J.Bude & K.Hess avec celles de H.Shichijo & K.Hess.

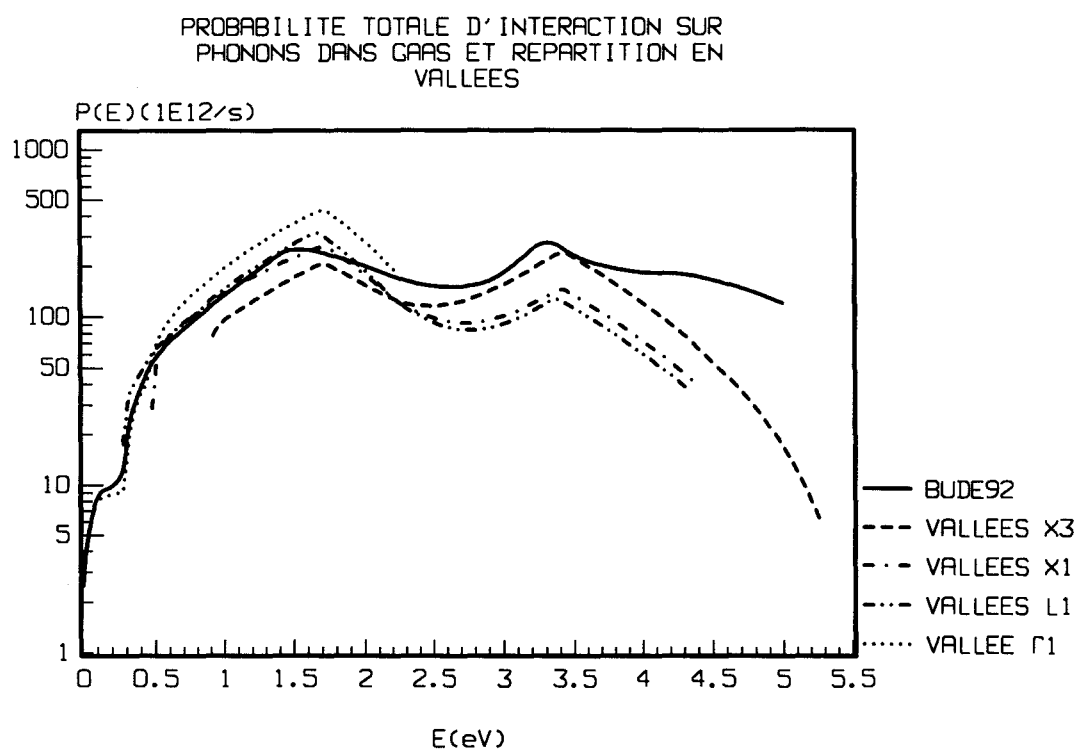


Figure II-25. Probabilité totale sur phonons d'un électron, dans les deux premières bandes du modèle proposé, des vallées Γ_1 (pointillés), L1 (traits mixtes doubles), X1 (traits mixtes simples, et X3 (tirets), comparée à la probabilité totale de diffusion sur phonons (trait plein) de J.Bude & K.Hess [BUD92].

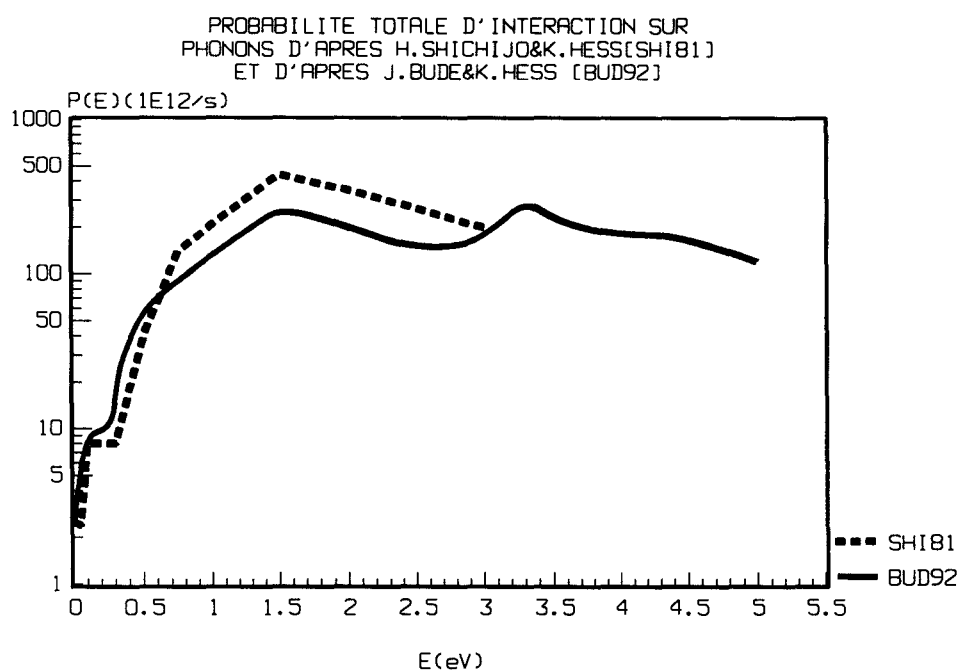


Figure II-26. Probabilité totale d'interaction sur phonons, d'après J.Bude & K.Hess [BUD92] (trait plein) et d'après H.Shichijo & K.Hess [SHI81] (tirets).

II-II.3)PROBABILITÉS EN VALLÉES DANS InP.

II-II.3.1)TABLEAU DES PARAMÈTRES D'INTERACTIONS DANS InP.

Les jeux de paramètres ont été séparés en deux tableaux de manière à isoler les paramètres non directement dépendant des vallées, évalués au tableau II-11, et qui sont les propriétés du matériau massif, de ceux en dépendants directement et évalués au tableau II-12. La description des paramètres est la même que dans GaAs.

II-II.3.2)COURBES DES PROBABILITÉS DANS InP.

Les probabilités d'interaction en fonction de l'énergie dans InP en vallées $\Gamma 1$, L1, et X1 de la première bande, et en vallées X3 de la seconde bande, sont représentées respectivement sur les figures II-27 à II-30. Ce sont les interactions:

- piézo-électrique
- sur phonons acoustiques
- sur phonons intervallées
- sur phonons optiques non-polaires (vallées L1 uniquement)
- sur phonons optiques polaires
- sur impuretés ionisées
- sur électrons de valence par ionisation par choc

, ainsi que l'interaction résultante hormis la contribution de l'ionisation par choc.

II-II.3.2.1)PROBABILITÉS EN VALLÉES $\Gamma 1$, L1 ET X1 (PREMIÈRE BANDE).

La figure II-27 présente les probabilités d'interaction dans la vallée centrale $\Gamma 1$. Aux énergies élevées, les probabilités d'interaction inter-vallées dominent toutes les autres interactions à partir de 0.8 eV. La très faible probabilité d'ionisation en vallée centrale est due à la fois à la douceur du seuil d'ionisation et à la limitation à 2.49 eV de l'énergie maximale dans cette vallée.

Le maximum de la probabilité d'interaction, d'environ 7×10^{14} / s, est situé à environ 1.7 eV

Les figures II-28 et II-29 présentent les probabilités en vallées latérales L1 et X1. L'énergie peut y atteindre la valeur maximale de 4 eV, ce qui permet à la probabilité d'ionisation d'atteindre, à partir de 3 eV, des valeurs du même ordre de grandeur que les interactions telles que: interaction piézo-électrique, sur impuretés, sur phonons acoustiques, sur phonons optiques polaires. Mais même à 3 eV, elle est encore nettement plus faible que les probabilités d'interaction sur phonons intervallées. Elle devient à peine du même ordre que ces dernières, vers 4 eV.

Dans les deux vallées, le second maximum de probabilité d'interaction est dû au couplage avec la seconde bande de conduction.

II-II.3.2.2)PROBABILITÉS EN VALLÉES LATÉRALES X3 (SECONDE BANDE).

La figure II-30 présente les probabilités d'ionisation en deuxième bande de conduction.

L'interaction sur impuretés domine en fond de vallée, mais à partir de 1.1 eV, elle diminue brutalement, et tout comme les autres interactions, exceptée l'interaction sur phonons acoustiques et sur phonons optiques polaires, elle devient négligeable par rapport aux probabilités d'interactions inter-vallées. Aux plus hautes énergies, les plus fortes probabilités d'interactions sont dues à l'interaction sur phonons acoustiques, sur phonons optiques polaires, et sur phonons intervallées. A ces énergies, ces trois interactions sont assez voisines.

Vers 2.4 eV, la probabilité d'ionisation par choc devient voisine de la plus faible probabilité d'interaction qui est la probabilité d'interaction piézo-électrique. C'est seulement vers 4.5 eV, qu'elle devient voisine des plus fortes probabilités d'interaction.

Le premier maximum de probabilité d'interaction est dû au couplage avec la première bande de conduction.

Paramètre de maille a (Å)	5.87 [FAU80]
Densité ρ (g / cm ³)	4.83 [FAU80]
Constante piézo-électrique C_{piez} (C / m ²)	0.0134 [FAU80]
Energie du phonon optique polaire $\hbar\omega_{\text{op}}$ (meV)	43.2 [FAU80]
Vitesse du son V_S (10 ³ m / s)	5.16 [FAU80]
Constante diélectrique statique K_S (κ_0)	12.5 [FAU80]
Constante diélectrique optique K_∞ (κ_0)	9.56 [FAU80]

Tableau II-11. Propriétés du matériau massif InP.

n° de bande	1			2
Vallée δ	$\Gamma 1$	L1	X1	X3
Paramètres				
Pot. de déformation inter - vallées (10 ¹⁰ eV/m)				
$D_{\Gamma 1-\delta}$	-	$D_{L1-\Gamma 1}$	$D_{X1-\Gamma 1}$	$D_{X3-\Gamma 1}$
$D_{L1-\delta}$	13.7 [FAU80]	5.6 [FAU80]	D_{X1-L1}	D_{X3-L1}
$D_{X1-\delta}$	12.5 [FAU80]	8.4 [FAU80]	9.9 [FAU80]	D_{X3-X1}
$D_{X3-\delta}$	4.0			6.0
Energie de phonon inter - vallées (meV)				
$\hbar\omega_{\Gamma 1-\delta}$	-	$\hbar\omega_{L1-\Gamma 1}$	$\hbar\omega_{X1-\Gamma 1}$	$\hbar\omega_{X3-\Gamma 1}$
$\hbar\omega_{L1-\delta}$	33.7 [FAU80]	33.7 [FAU80]	$\hbar\omega_{X1-L1}$	$\hbar\omega_{X3-L1}$
$\hbar\omega_{X1-\delta}$	33.7 [FAU80]	33.7 [FAU80]	23.9 [FAU80]	$\hbar\omega_{X3-X1}$
$\hbar\omega_{X3-\delta}$	$\hbar\omega_{X1-\Gamma 1}$	$\hbar\omega_{X1-L1}$	$\hbar\omega_{X1-X1}$	$\hbar\omega_{X1-X1}$
Pot. de déformation acoustique $\Phi_{a\delta}$ (eV)	7 [FAU80]	12 [FAU80]	11 [FAU80]	Φ_{aX1}
Pot. de déform. optique non pol. $\Phi_{\text{npo}\delta}$ (10 ¹⁰ eV/m)	0 [FAU80]	6.7 [FAU80]	0 [FAU80]	$\Phi_{\text{npo}X1}$
Energie de phonon non polaire $\hbar\omega_{\text{npo}\delta}$ (meV)	43 [FAU80]			$\hbar\omega_{\text{npo}X1}$
Par. d'ionisation de Stobbe [$\varepsilon_{\text{th}\delta}; a_\delta; p_\delta$] (eV; -; 10 ¹⁰ eV ⁻¹ s ⁻¹)	[0.5; 10; 0.001]			[0.5; 10; 0.001]

Tableau II-12. Paramètres-matériau dépendant des vallées dans InP.

PROBABILITE D'INTERACTION DANS INP
DANS LA PREMIERE BANDE DE CONDUCTION
EN VALLEE Γ_1 ETENDUE

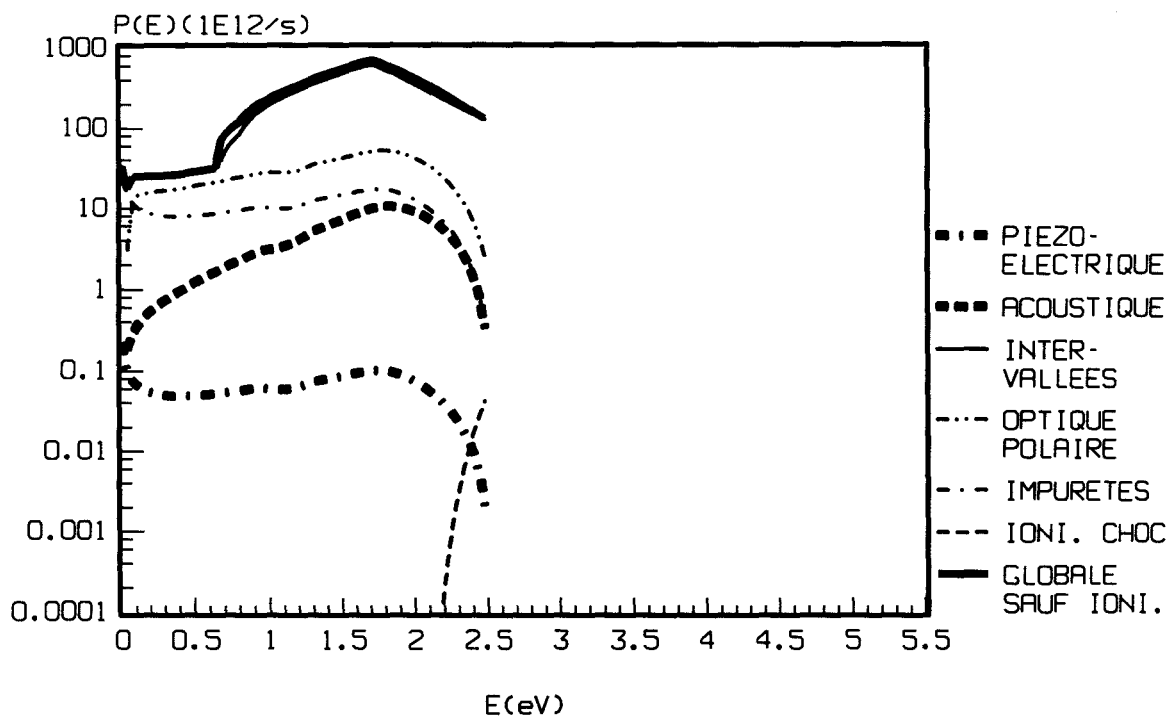


Figure II-27.

PROBABILITE D'INTERACTION DANS INP
DANS LA PREMIERE BANDE DE CONDUCTION
EN VALLEES L_1 ETENDUES

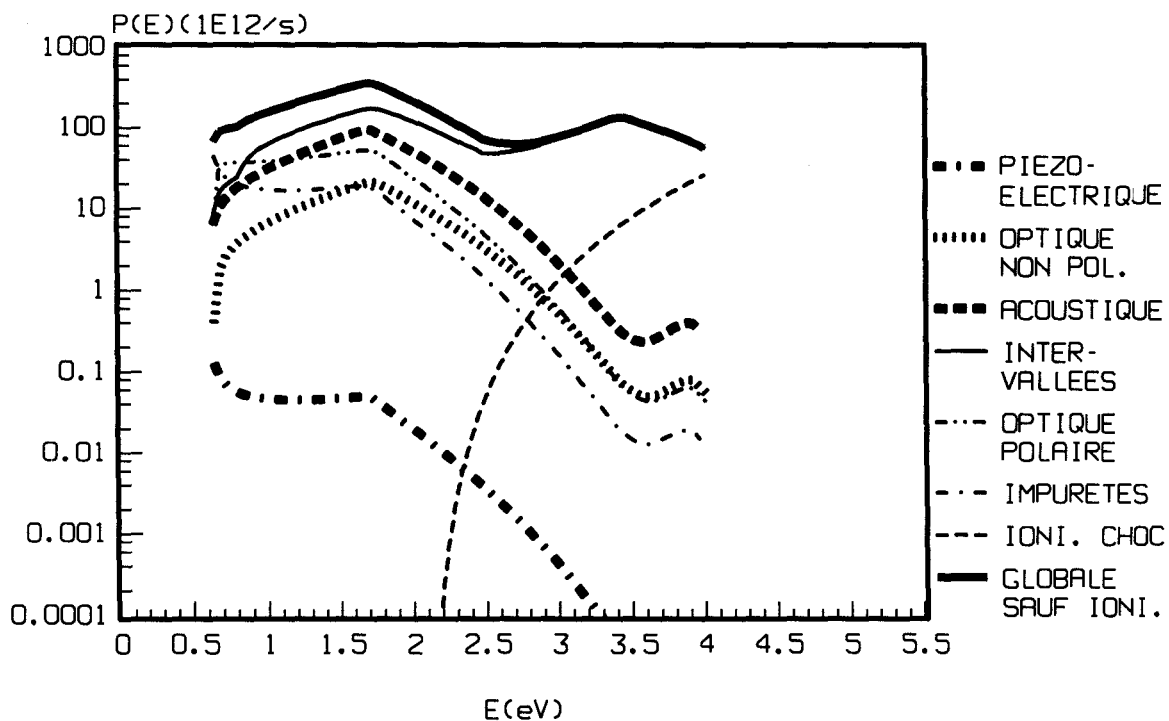


Figure II-28.

PROBABILITE D'INTERACTION DANS INP
DANS LA PREMIERE BANDE DE CONDUCTION
EN VALLEES X1 ETENDUES

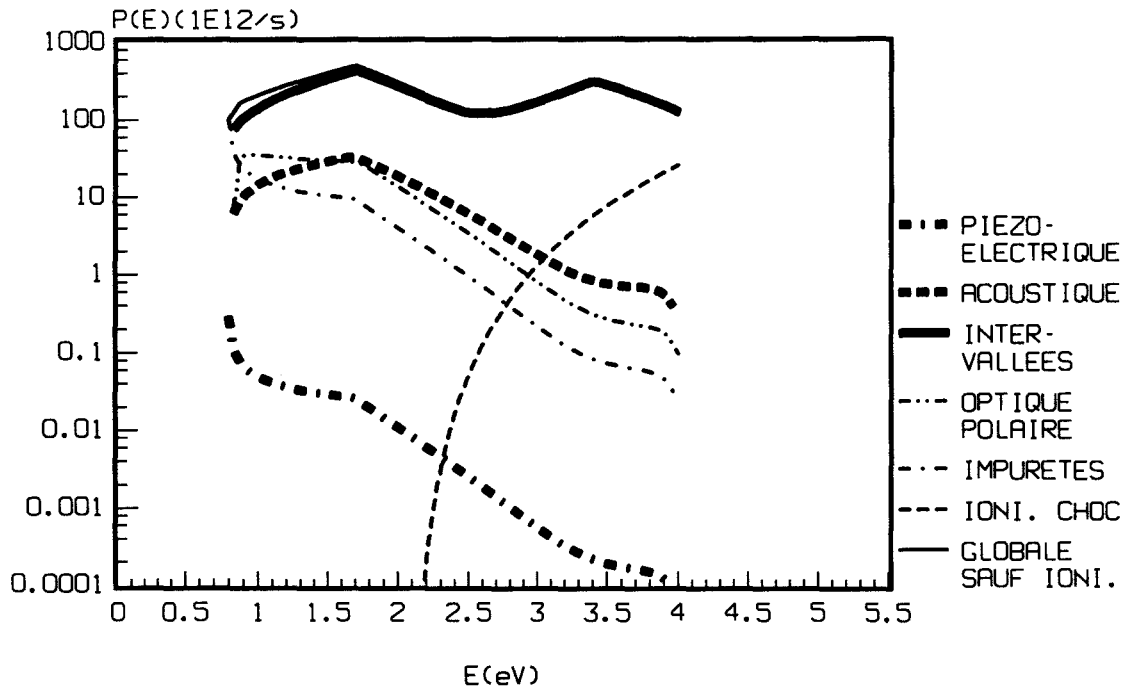


Figure II-29.

PROBABILITE D'INTERACTION DANS INP
DANS LA SECONDE BANDE DE CONDUCTION
(VALLEES X3 ETENDUES)

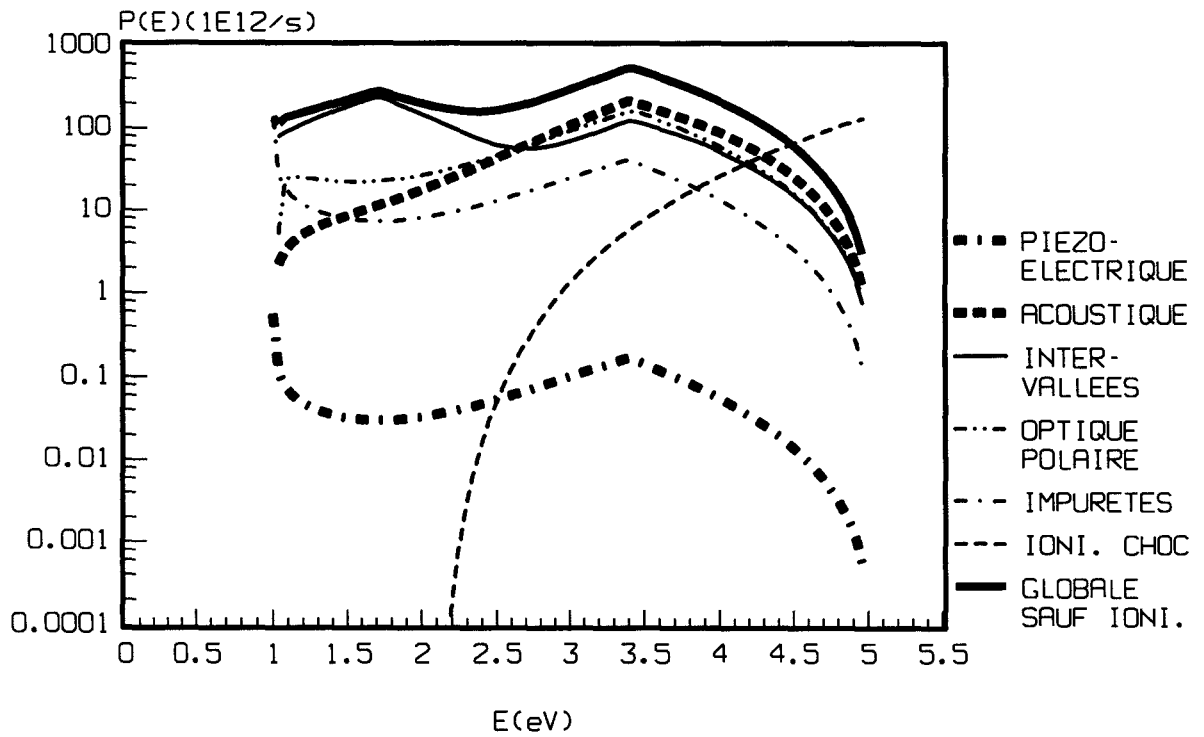


Figure II-30.

II-III) LA MISE EN OEUVRE DU MODÈLE DANS LA MÉTHODE MONTE-CARLO.

L'étude portant sur le transport dans la matériau massif, nous avons vu dans le chapitre I, que les phénomènes de transport peuvent être entièrement décrits dans l'espace réciproque.

Le transport électronique dans un matériau cristallin semiconducteur de type N est essentiellement dû aux électrons situés en bande de conduction. Nous avons vu qu'il est caractérisé à la fois par l'action des forces extérieures dues au champ appliqué, et par les mécanismes de collision dus à la présence du réseau cristallin. La simulation du transport électronique est réalisée à l'aide de la simulation Monte-Carlo également exposée de manière générale au chapitre I.

Dans la simulation réalisée, le temps est discrétisé en pas réguliers dont la durée Δt est faible devant la durée de vol libre qui sépare deux interactions successives. La simulation du comportement de chaque électron au cours du temps consiste alors en une succession de traitements élémentaires à chaque pas de temps. Le traitement commence par la phase de vol libre où l'électron n'est soumis qu'à l'action du champ, et se termine éventuellement par une interaction instantanée due à une collision.

Le transport électronique, donc le traitement de la simulation Monte-Carlo, dépend de la structure de bande (SDB), tant au niveau du vol libre que de l'interaction instantanée.

Le chapitre I a montré que la prise en compte réaliste de la SDB à haute énergie nécessite une description correcte des états W de plus haute énergie, ce qui a été réalisé dans le modèle de SDB des vallées étendues. L'anisotropie de haute énergie qui en résulte doit être prise en compte dans le choix du vecteur d'onde final après interaction. Le problème de la sélection du vecteur d'onde après interaction due à l'anisotropie de SDB aux hautes énergies a été signalé par X.Wang & al. [WAN93] pour le Silicium.

Le § II-III.1 décrit la mise en oeuvre de la simulation Monte-Carlo, et le § II-III.2 présente brièvement, pour les matériaux GaAs et InP, des grandeurs statistiques liées au temps dans la simulation.

II-III.1) TRAITEMENT DE LA MÉTHODE MONTE-CARLO.

II-III.1.1) VOL LIBRE. ACTION DU CHAMP EXTÉRIEUR APPLIQUÉ.

Le champ électrique extérieur est appliqué le long d'une direction principale de l'espace réciproque.

Son action tend à orienter le vecteur d'onde électronique dans sa direction. L'évolution du vecteur d'onde $\mathbf{K}$ en fonction du champ extérieur $\mathbf{F}$, suit l'équation du mouvement:

$$\frac{d\mathbf{K}}{dt} = \frac{q\mathbf{F}}{\hbar} \quad (\text{II-15})$$

L'intégration de cette équation du mouvement est réalisée à chaque pas de temps Δt .

De manière générale dans l'étude du matériau massif, l'état de l'électron est caractérisé par son vecteur d'onde $\mathbf{K}$ dans l'espace réciproque relativement au centre de la zone de Brillouin, et par son énergie E par rapport à celle du point central Γ_1 situé en première bande de conduction. Il s'agit de l'état absolu de l'électron.

Le modèle de SDB proposé au chapitre II est le modèle dit des vallées étendues car il étend aux hautes énergies, le modèle classique des vallées. C'est un modèle de type vallée où le vecteur d'onde et l'énergie peuvent être aisément déterminés relativement au fond de vallée.

Un minimum principal de la zone de Brillouin est un minimum d'énergie situé en $\mathbf{K}_0$ dans l'espace réciproque, et dont l'énergie E_0 dépend de la bande occupée. Un état dont l'énergie est calculée relativement au minimum de la vallée associée est un état relatif. L'état absolu ($\mathbf{K}, E$) peut donc se déduire de l'état relatif ($\mathbf{k}, \varepsilon$) par:

$$\begin{cases} E = E_0(v_b) + \varepsilon \\ \mathbf{K} = \mathbf{K}_0(v_b, n) + \mathbf{k} \end{cases} \quad (\text{II-16})$$

où n est le numéro de la vallée de multiplicité M_{v_b} , repérée par la valeur v_b , et où b est l'indice cristallographique de bande.

En vallée centrale, de multiplicité $M_{\Gamma_b} = 1$, l'état absolu est confondu avec l'état relatif. En vallées latérales de multiplicité $M_{v_b} > 1$, l'état absolu n'est pas confondu avec l'état relatif.

D'après la deuxième relation du système (II-16), l'équation du mouvement (II-15), s'exprime en fonction du vecteur d'onde relativement au fond de vallée par:

$$\frac{d\mathbf{k}}{dt} = \frac{q\mathbf{F}}{\hbar} \quad (\text{II-17})$$

L'intégration de l'équation du mouvement (III-17) donne: $\mathbf{k}_f = \mathbf{k}_i + \frac{q\mathbf{F}}{\hbar} \Delta t$

où $\mathbf{k}_i$ et $\mathbf{k}_f$ sont respectivement les vecteurs d'onde avant et après l'action du champ.

L'équation du mouvement (II-17) ne peut s'appliquer que si le vecteur d'onde $\mathbf{k}$ et le champ extérieur appliqué $\mathbf{F}$, sont exprimés dans le même repère, en l'occurrence le repère de la vallée. Il faut donc exprimer le champ $\mathbf{F}$ dans le repère relatif de la vallée. Pour cela, seule la connaissance de l'orientation du vecteur d'onde au minimum $\mathbf{K}_0(v_b, n)$, est nécessaire. L'annexe VIII donne les expressions du champ dans les différentes vallées L et X. L'action du champ dépend donc du type de la vallée, et, en vallées latérales, du numéro de la vallée occupée.

Etant donné le caractère périodique et anisotrope particulier à hautes énergies des vallées dans le modèle proposé, un champ fort peut produire une modification suffisante du vecteur d'onde pour produire une sorte de processus Umklapp au niveau de la vallée. Le vecteur d'onde $\mathbf{k}_f$ sera alors modifié, et le nouveau vecteur d'onde vaudra: $\mathbf{k}_f' = \mathbf{k}_f + \mathbf{g}$, avec $\mathbf{g}$ vecteur d'onde ramenant l'électron dans la "première zone de vallée", par analogie avec la première zone de Brillouin dans la structure de bande réelle.

Une fois que le vecteur d'onde de l'électron est déterminé après l'action du champ, son énergie peut être calculée par le modèle de SDB, $\varepsilon = \varepsilon_{v_b}(\mathbf{k})$.

L'état de l'électron étant déterminé à l'issue du pas de temps, il est possible de savoir si une interaction a lieu grâce aux probabilités d'interaction qui s'expriment en fonction de l'énergie relative $\varepsilon_{v_b}(\mathbf{k})$.

II-III.1.2) ACTION DES INTERACTIONS.

II-III.1.2.1) OCCURENCE D'UNE INTERACTION.

Après l'action du champ à l'issue d'un pas de temps, il faut savoir si une interaction s'est produite. La vérification d'une telle éventualité nécessite de connaître la loi de probabilité de l'interaction. Le chapitre II a donné une façon assez simple d'exprimer les probabilités du modèle classique des vallées à partir de la densité d'états réelle calculée avec le modèle de structure de bande des vallées étendues. Ces probabilités dépendent de l'énergie relative en fond de vallée: $\varepsilon = \varepsilon_{v_b}(\mathbf{k})$. Rappelons qu'en vallée centrale, il y a un choix de l'expression de la relation de dispersion à appliquer en fonction de l'orientation du vecteur d'onde.

Pour savoir si une interaction a lieu, un nombre aléatoire est tiré dans un intervalle unitaire dans lequel sont rangées successivement les différentes probabilités. La valeur tirée permet de déterminer si une interaction a lieu ou pas, et, dans le premier cas, de déterminer sa nature.

Lorsqu'une interaction se produit, l'état final de l'électron dépend de son état initial, de la structure de bande (SDB) du semiconducteur, et de la nature de l'interaction.

II-III.1.2.2)EFFET D'UNE INTERACTION.

II-III.1.2.2.1)MODIFICATION DE L'ENERGIE.

Une interaction est élastique lorsqu'il n'y a pas modification de l'énergie de l'électron à l'issue de cette interaction. Une interaction est inélastique dans le cas contraire. L'énergie échangée, $\Delta\epsilon$, dépend alors de la nature de l'interaction. Cette énergie varie de l'ordre de quelques dizaines de milli-électronvolt (meV) pour les interactions sur phonon par exemple, à plusieurs électronvolt (eV) pour l'ionisation par choc, phénomène de haute énergie.

Pour traiter des mécanismes comme l'ionisation par choc, fortement inélastiques, ou les interactions sur phonons intervalles, qui dépendent de l'énergie totale, il faut connaître l'énergie par rapport à une référence unique, en l'occurrence ici l'énergie absolue E . La connaissance de l'énergie de fond de vallée E_0 s'impose donc.

II-III.1.2.2.2)MODIFICATION DU VECTEUR D'ONDE.

Toutes les collisions provoquent une modification plus ou moins importante de l'orientation du vecteur d'onde et de son module. Lorsque la nouvelle orientation du vecteur d'onde est conditionnée par une loi de distribution non uniforme, l'interaction est non-randomisante. Elle est randomisante dans le cas contraire. C'est le cas de l'interaction sur phonons intervalles. Lorsqu'une telle interaction se produit, la prise en compte de l'orientation des vallées nécessite de déterminer la vallée finale par un tirage aléatoire parmi les vallées accessibles.

REMARQUES.

Lorsqu'on suppose que les vallées sont à symétrie sphérique il n'est pas nécessaire, au cours d'une interaction intervalles, d'effectuer de changement de repère du champ extérieur, car toutes les directions sont équivalentes.

MODIFICATION DE L'ORIENTATION DU VECTEUR D'ONDE.

A des énergies où toutes les orientations sont accessibles, l'utilisation de la loi de distribution angulaire du vecteur d'onde déterminée dans le cadre du modèle classique des vallées, permet de trouver un vecteur dévié réellement existant dans les limites topologiques de la vallée. A des énergies élevées, ce n'est pas nécessairement le cas. Comme à ces énergies la contribution à la densité d'états (DOS) de la vallée centrale Γ_1 est négligeable par rapport à celle des vallées latérales, le nombre d'électrons y atteignant ces énergies sera faible. On peut donc, pour simplifier, appliquer la même loi de distribution angulaire en vallée centrale que dans le modèle classique des vallées. Par contre, la contribution des vallées latérales à la DOS étant importante, il est a priori

nécessaire de prendre en compte une déviation correcte du vecteur d'onde dans ces vallées, en prenant en compte l'anisotropie de haute énergie due à la localisation des points W.

Après une interaction, le vecteur d'onde initial est dévié, et le vecteur d'onde final s'exprime dans le repère propre du vecteur d'onde initial en fonction des angles $\Delta\beta$ et $\Delta\chi$. L'angle $\Delta\beta$ correspond à la déviation du vecteur d'onde dans le plan contenant l'axe principal associé à la vallée et le vecteur d'onde initial. L'angle $\Delta\chi$ est l'angle azimutal autour du vecteur d'onde initial.

DÉVIATION DU VECTEUR D'ONDE AUX BASSES ÉNERGIES.

Aux basses énergies, c'est-à-dire avant l'énergie de croisement des deux expressions de la relation de dispersion en vallée, l'angle azimutal $\Delta\chi$ fait l'objet d'un tirage uniforme dans l'intervalle $[-\pi; +\pi]$.

L'angle de déviation $\Delta\beta$ est déterminé par une loi de distribution angulaire dans l'intervalle $[0; \pi]$, dépendant de la nature de l'interaction, de la vallée et de l'énergie de l'électron. Elle est identique à la loi de distribution du modèle classique des vallées, avec pour paramètres de fond de vallée: la masse effective de densité d'états m_{dv}^* et le coefficient de non-parabolicité α_v . De manière générale, cette loi de distribution n'est pas uniforme. C'est le cas de la distribution angulaire de l'interaction optique polaire, ou de la distribution angulaire de l'interaction acoustique étudiée par A.Kaszinski [KAS79].

La figure II-31 représente le vecteur d'onde initial $\mathbf{k}_i$, et le vecteur d'onde final $\mathbf{k}_f$ après une telle interaction.

DÉVIATION DU VECTEUR D'ONDE AUX HAUTES ÉNERGIES.

Aux hautes énergies la nouvelle orientation du vecteur d'onde dans le cadre du modèle des vallées étendues est plus compliquée qu'aux basses énergies, car il faut tenir compte de l'anisotropie de haute énergie due aux points W en vallées latérales L et X. Nous avons vu au chapitre II-I, que cette anisotropie se traduit dans le modèle des vallées étendues par le fait que pour un électron dont l'énergie dépasse typiquement l'énergie au pic de densité d'états, toutes les orientations du vecteur d'onde ne sont pas possibles. Seuls sont autorisés les états électroniques pour lesquels l'angle du vecteur d'onde par rapport à l'axe principal après interaction, appartient à l'intervalle:

$$I = [\beta_{\text{lim}}(\epsilon); \pi - \beta_{\text{lim}}(\epsilon)]$$

avec $\beta_{\text{lim}} \in [0; \frac{\pi}{2}]$. L'angle β_{lim} est le demi-angle au sommet d'un cône à deux nappes symétriques par rapport au centre de la vallée, et contenant les orientations accessibles à l'énergie considérée.

L'utilisation de la loi de distribution angulaire de l'angle de déviation $\Delta\beta$, du modèle classique des vallées, peut être effectuée à condition de restreindre la variation angulaire de l'angle azimutal $\Delta\chi$ à l'intervalle $[-\Delta\chi_{\text{lim}}; +\Delta\chi_{\text{lim}}]$ avec $\Delta\chi_{\text{lim}} \in [0; \pi]$, de manière à ce que l'angle β après interaction appartienne bien à l'intervalle I, comme l'indique la figure II-32 qui décrit le mécanisme dans le demi-espace supérieur.

L'annexe IX montre que l'angle limite $\Delta\chi_{\text{lim}}$ peut s'exprimer en fonction de l'angle β avant interaction, de l'angle de déviation $\Delta\beta$, et de l'angle limite β_{lim} après interaction, par la relation analytique suivante:

$$\Delta\chi_{\text{lim}} = \text{Arc cos} \left(\frac{\cos(\beta) \cos(\Delta\beta) - \cos(\beta_{\text{lim}})}{\sin(\beta) \sin(\Delta\beta)} \right)$$

L'expression en fonction de l'énergie, de l'angle limite $\beta_{\text{lim}v}$, par rapport à l'axe cristallographique principal associé à une vallée latérale v , est donnée en annexe VI:

$$\sin(\beta_{\text{lim}v}) = \frac{\sin(\psi_{\text{lim}v})}{\sqrt{1 + \left(\frac{\tilde{m}_{//v}^*}{\tilde{m}_{\perp v}^*} - 1 \right) \cos^2(\psi_{\text{lim}v})}}, \text{ avec } \cos(\psi_{\text{lim}v}) = \frac{1}{\left(2 \sqrt{\frac{\tilde{\gamma}(\tilde{\epsilon}_{cv})}{\tilde{\gamma}(\tilde{\epsilon})}} - 1 \right)^2}$$

L'angle de déviation $\Delta\beta$ est déterminé à partir de la même fonction de distribution angulaire qu'à basse énergie.

Que ce soit aux basses ou aux hautes énergies, l'orientation en vallée du vecteur d'onde après interaction est exprimée en coordonnées sphériques (β, θ) , à l'aide d'un changement de repère.

MODULE DU VECTEUR D'ONDE APRÈS INTERACTION.

Le modèle de SDB proposé donnant une expression analytique assez simple de la relation de dispersion en coordonnées sphériques, le nouveau vecteur d'onde de l'électron est directement déterminé à partir de son énergie et de son orientation au moyen des changements de variables appropriés.

II-III.2.3) ORGANIGRAMME DE LA SIMULATION MONTE-CARLO.

Le schéma II-1 récapitule, sous la forme d'un organigramme, le déroulement de la simulation Monte-Carlo.

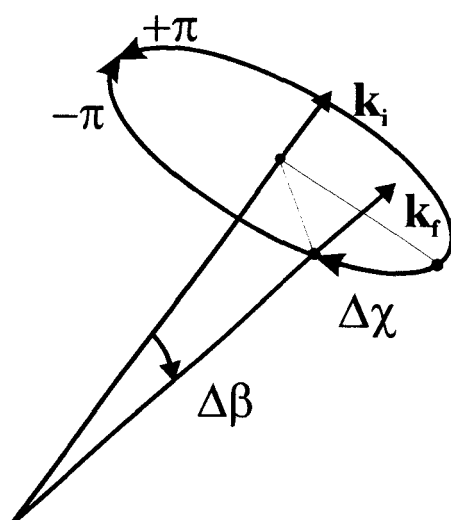


Figure II-31. Vecteur d'onde initial $\mathbf{k}_i$ et vecteur d'onde final $\mathbf{k}_f$ après une interaction en vallée centrale, ou à basse énergie en vallées latérales. L'angle de déviation $\Delta\beta$ suit une loi de distribution angulaire dépendant de l'interaction subie. L'angle azimutal $\Delta\chi$ est distribué uniformément dans l'intervalle $[-\pi; +\pi]$.

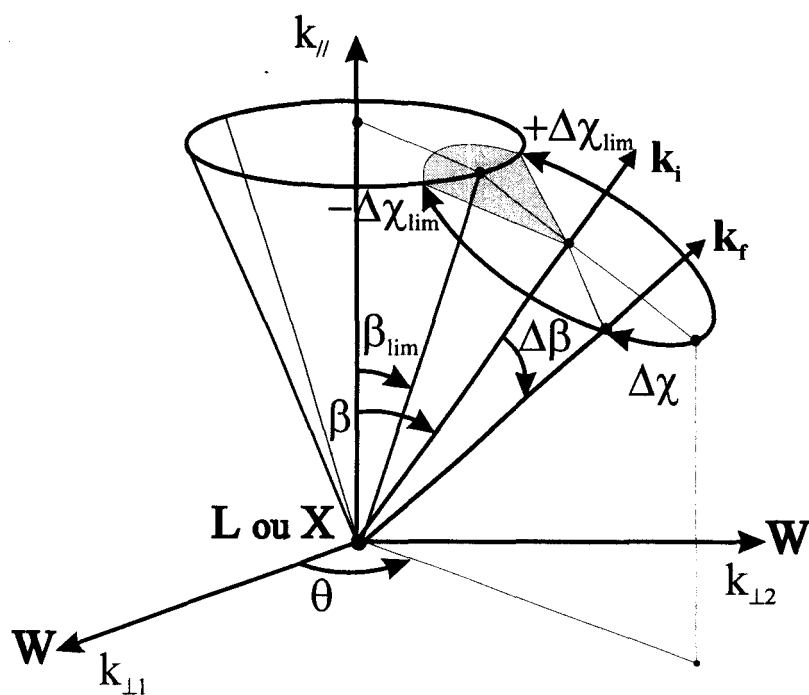
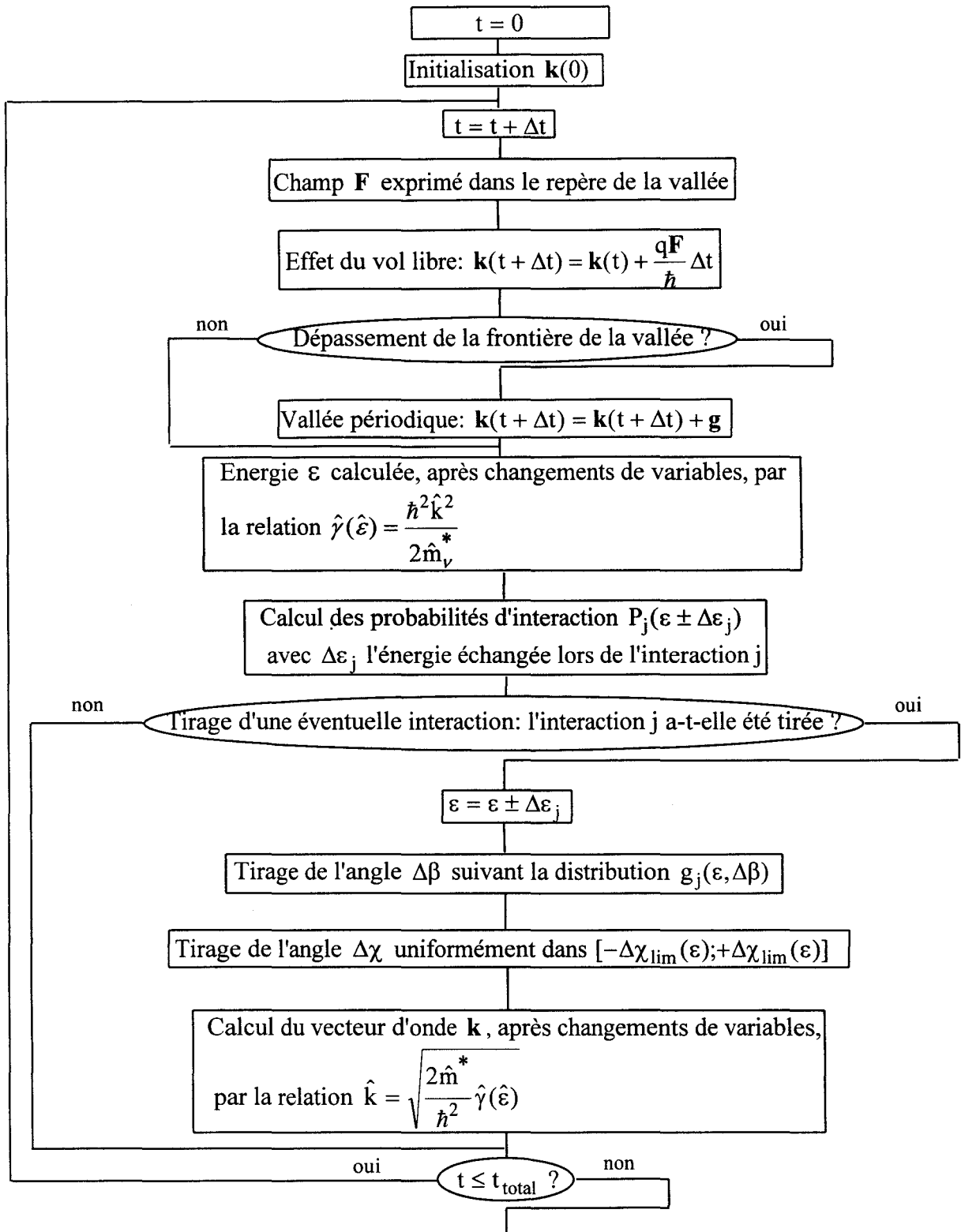


Figure II-32. Nouvelle orientation du vecteur d'onde après interaction à haute énergie en vallée latérale L ou X, dans le modèle des vallées étendues.

Le vecteur d'onde initial $\mathbf{k}_i$, est repéré par les angles sphériques (β, θ) . A haute énergie, les orientations dans le secteur grisé sont inaccessibles. La restriction au domaine $[-\Delta\chi_{\text{lim}}; +\Delta\chi_{\text{lim}}]$ de l'angle azimutal $\Delta\chi$ de réorientation du vecteur d'onde après interaction $\mathbf{k}_f$, est due à la prise en compte des points W.



Shéma II-1. Organigramme de la simulation Monte-Carlo avec le modèle des vallées étendues.

II-III.2) STATISTIQUE LIÉE AU TEMPS DANS LA SIMULATION.

Pour une bonne statistique, il convient d'optimiser le nombre total d'évènements donc le rapport $N t_{\text{total}} / \Delta t$, où t_{total} est la durée de simulation, N le nombre d'électrons, et Δt la durée du pas de temps. Dans une simulation matériau où le principe de l'ergodisme s'applique, un seul électron peut être simulé. L'optimisation de t_{total} et de Δt a été surtout réalisée en champs ionisants de 250 kV/cm à 500 kV/cm. Elle consiste à prendre la valeur la plus faible possible de la durée totale de simulation et la plus forte possible de la durée du pas de temps tout en ayant une bonne statistique. En particulier, en champ fort, la durée de simulation doit être assez longue pour observer suffisamment d'ionisations.

Les figures II-30 et II-31 montrent l'évolution du pas de temps et de la durée de simulation avec le champ extérieur appliqué.

La simulation utilise un pas de temps constant pour chaque valeur du champ électrique appliqué. Le pas de temps ne doit pas être trop court sinon l'électron réalisera un nombre excessif de phases de vol libre sans interaction, ce qui sera coûteux en temps calcul. D'un autre côté, si le pas de temps est trop long la statistique sera d'emblée mauvaise du fait de la non prise en compte d'interactions pouvant survenir pendant ce pas de temps.

Les figures II-32 et II-33 présentent la fréquence moyenne de collision par pas de temps, dans GaAs et InP, obtenue à l'aide de la simulation Monte-Carlo. Le pas de temps, $DT = \Delta t$, et la durée totale de simulation, $T = t_{\text{total}}$ ont été prises identiques dans les deux matériaux, excepté à 250 kV/cm. La durée plus longue de simulation pour ce champ dans InP, est due à l'absence d'évènements ionisants observés lorsqu'on prend la même durée que dans GaAs. On doit donc augmenter la durée de simulation dans InP afin d'y améliorer la statistique pour l'ionisation par choc. Cela est dû au plus faible coefficient d'ionisation dans InP par rapport à GaAs.

Dans la gamme de champ choisi, la fréquence des interactions varie trop fortement pour pouvoir prendre un pas de temps optimal identique pour tous les champs. Un pas de temps variable est choisi. Il est ajusté pour obtenir une fréquence moyenne d'interaction de l'ordre d'une interaction tous les dix pas de temps. On remarque dans InP, que la fréquence des collisions est sensiblement identique à celle obtenue dans GaAs.

REMARQUE.

A statistique identique, une simulation multi-électrons a fourni le même résultat qu'une simulation mono-électron. Par la suite nous utiliserons une simulation mono-électron.

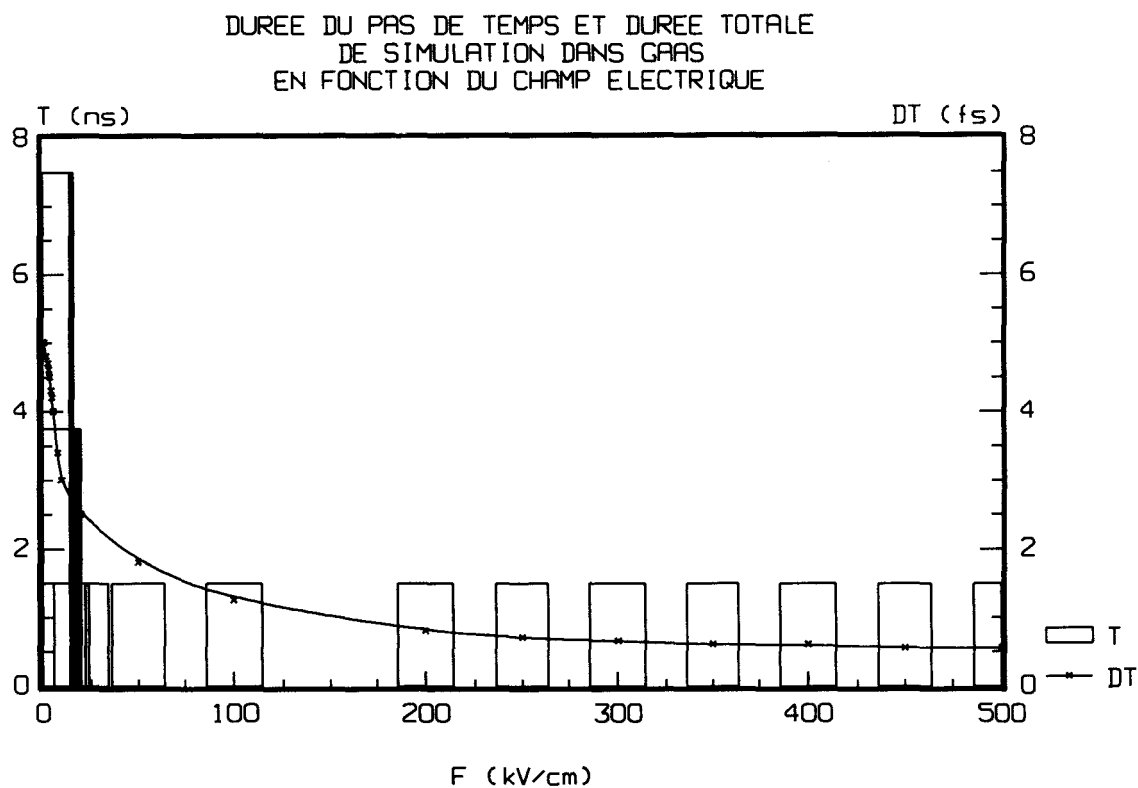


Figure II-30. Evolution du pas de temps et de la durée de simulation avec le champ extérieur appliqué dans GaAs.

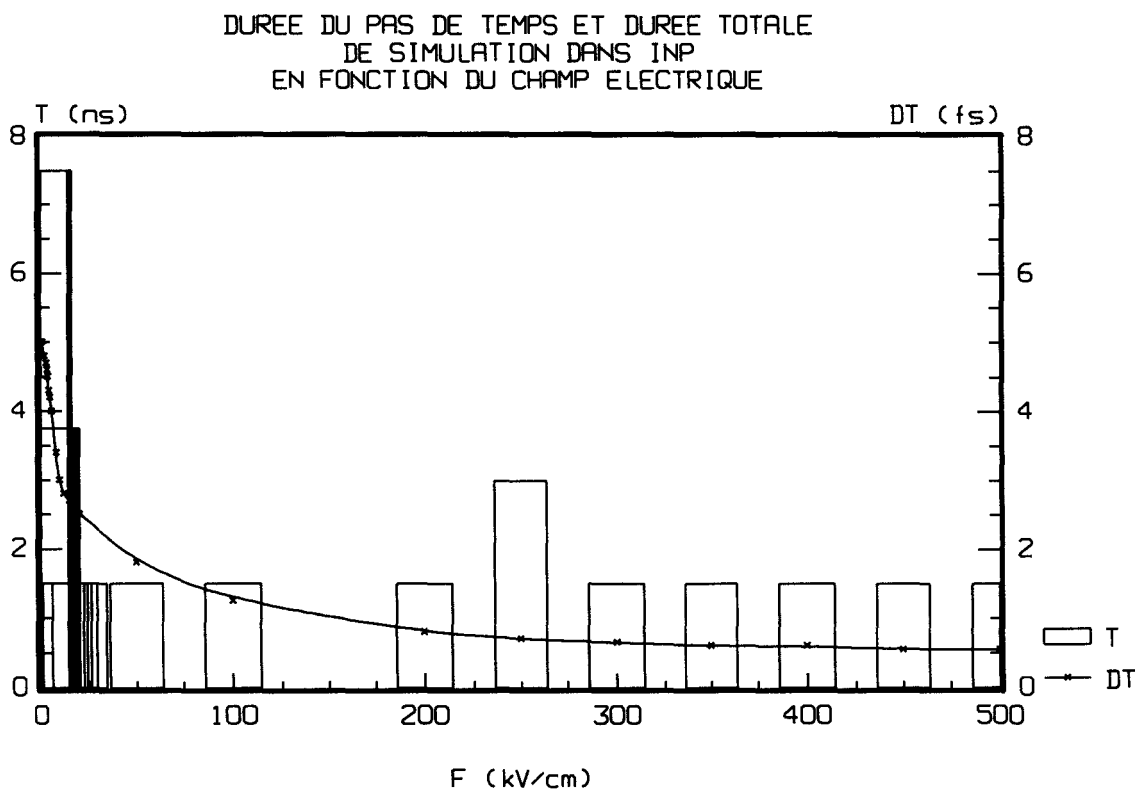


Figure II-31. Evolution du pas de temps et de la durée de simulation avec le champ extérieur appliqué dans InP.

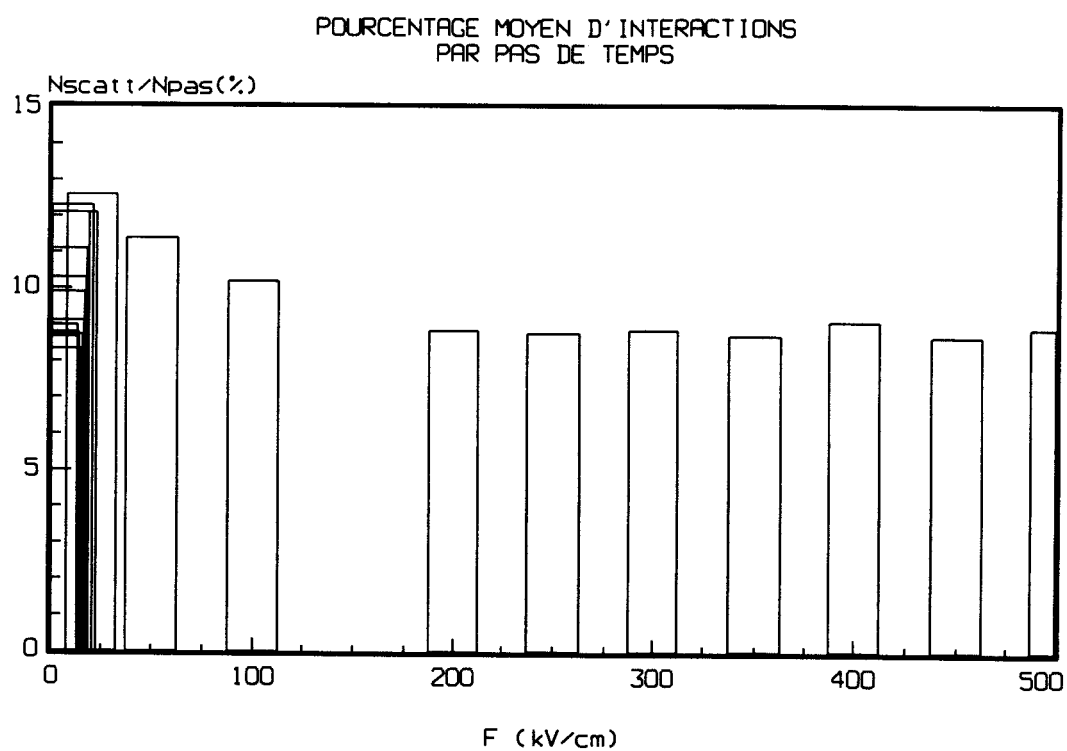


Figure II-32. Fréquence moyenne de collision par pas de temps, obtenue à l'aide de la simulation Monte-Carlo dans GaAs.

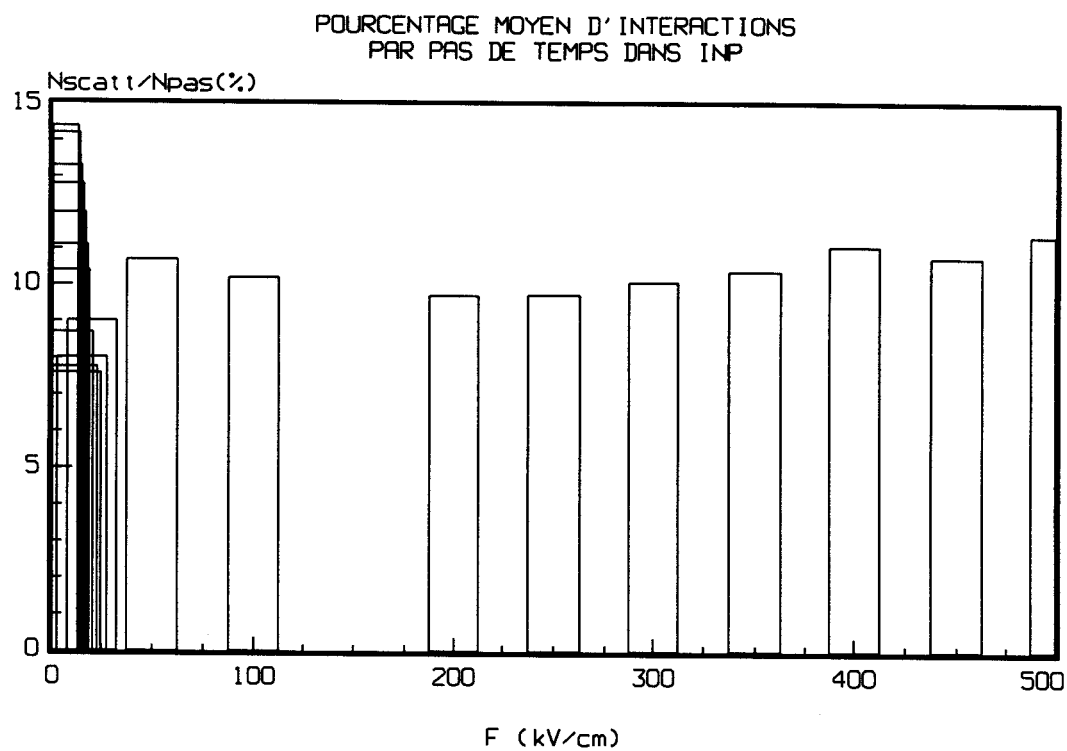


Figure II-33. Fréquence moyenne de collision par pas de temps, obtenue à l'aide de la simulation Monte-Carlo dans InP.

BIBLIOGRAPHIE.

- [ASP76]: D.E.Aspnes, Phys. Rev. B 14 n°12, 5331 (1976).
- [BLA82]: J.Blakemore, J. Appl. Phys. 53 n°10, 123 (1982).
- [BRE84]: K.F.Brennann & K.Hess, Sol. State Electron. 27 n°4, 347 (1984).
- [BRE88]: K.F.Brennan & D.H.Park, J. Appl. Phys. 63 n°10, 5004 (1988).
- [BRU89]: R.Brunetti & C.Jacoboni, Solid State Electron.32 n°12, 1663 (1989).
- [BUD92]: J.Bude & K.Hess, J. Appl. Phys. 72 n°8, 3554 (1992).
- [BUD92']: J.Bude, K.Hess, G.J.Iafrate, Phys. Rev. B 45, n°19, 10958 (1992).
- [CAP81]: F.Capasso & al., IEEE Electron. Dev. Letters EDL-2 n°11, 295 (1981).
- [FAU80]: R.Fauquembergue, Rapport de contrat DRET, Faculté des Sciences, Lille (1980).
- [FAW70]: W.Fawcett & al., J. Chem. Phys. Chem. Solids 31, 1963 (1970).
- [FIS88]: M.V.Fischetti, Phys. Rev. B 38, n°14, 9721 (1988).
- [FIS91]: M.V.Fischetti, IEEE Trans. Elec. Dev. 38 n°3, 634 (1991).
- [KAN59]: E.O.Kane, J. Phys. Chem. Solids 12, 181 (1959).
- [KAS79]: A.Kaszynski, Thèse de doctorat, Lille (1979).
- [KUN94]: T.Kunikiyo & al., J. Appl. Phys. 75 n°1, 297 (1994).
- [LIT77]: M.A.Littlejohn, J. Appl. Phys. 48 n°114, 4587 (1977).
- [PIT70]: G.Pitt, Phys. Rev. B1, 4144 (1970).
- [SAN95]: N.Sano & A.Yoshii, J. Appl. Phys. 77 n°5, 2020 (1995).
- [SHI81]: H. Shichijo & K.Hess, Phys. Rev. B 23 n°8, 4197 (1981).
- [STO94]: M.Stobbe & al., Phys. Rev. B 49 n°7, 4494 (1994).
- [VIN88]: T.Vinchon, D.E.A. Lille (1988).
- [VOG91]: T.Vogelsang & W.Hänsch, J.Appl. Phys. 7 n°3, 1493 (1991).
- [WAN85]: T.Wang & K.Hess, J. Appl. Phys. 57 n°12, 5336 (1985).
- [WAN93]:X.Wang & al., J. Appl. Phys 73 n°7, 3339 (1993).

CHAPITRE III

ÉTUDE DU TRANSPORT ÉLECTRONIQUE DANS LES MATÉRIAUX GaAs et InP MASSIFS

CHAPITRE III

ÉTUDE DU TRANSPORT ÉLECTRONIQUE DANS LES MATÉRIAUX GaAs et InP MASSIFS

SOMMAIRE DU CHAPITRE III

INTRODUCTION.....	III-4
--------------------------	--------------

III-I)ÉTUDE DU TRANSPORT ÉLECTRONIQUE DANS GaAs ..III-6

III-I.1)DISTRIBUTION DES PORTEURS ET POPULATION

ÉLECTRONIQUE MOYENNE EN VALLÉES DANS GaAs..... III-6

III-I.1.1)DISTRIBUTION ÉNERGÉTIQUE À BAS CHAMP DANS GaAs.....III-6

III-I.1.2)DISTRIBUTION ÉNERGÉTIQUE EN CHAMP FORT DANS GaAs.....III-7

III-I.1.3)POPULATION ÉLECTRONIQUE MOYENNE EN VALLÉES DANS GaAs.III-12

III-I.2)ÉNERGIE MOYENNE DANS GaAs..... III-14

III-I.2.1)COMPARAISON AVEC UNE SIMULATION NE PRENANT EN COMPTE
QUE LA PREMIÈRE BANDE DE CONDUCTION DANS GaAs.....III-14

III-I.2.2)CONTRIBUTION DES VALLÉES À L'ÉNERGIE MOYENNE DANS GaAs.....III-16

III-I.3)IONISATION PAR CHOC DANS GaAs. III-19

III-I.3.1)COEFFICIENT D'IONISATION PAR CHOC DANS GaAs.....III-19

III-I.3.2)COMPARAISON DU COEFFICIENT D'IONISATION AVEC ET SANS
PRISE EN COMPTE DE LA SECONDE BANDE DE CONDUCTION DANS GaAs.III-20

III-I.3.3)FRÉQUENCE DE L'IONISATION PAR CHOC DANS GaAs.III-22

III-I.3.4)DISTRIBUTION ET ÉNERGIE MOYENNE DES ÉLECTRONS
IONISANTS DANS GaAs.....III-23

III-I.3.5)EFFET DE L'ANISOTROPIE SUR LE COEFFICIENT D'IONISATION
DANS GaAs.....III-24

III-I.4)VITESSE DE DÉRIVE STATIONNAIRE DANS GaAs..... III-28

III-I.4.1)INFLUENCE DE LA PRISE EN COMPTE DE L'IONISATION
PAR CHOC DANS GaAs.III-28

III-I.4.2)CONTRIBUTION DES VALLÉES À LA VITESSE DE DÉRIVE DANS GaAs...III-28

III-I.4.3)COMPARAISON AVEC L'EXPÉRIENCE DANS GaAs.III-31

III-I.4.4)COMPARAISON AVEC UNE SIMULATION NE PRENANT EN COMPTE QUE LA
PREMIÈRE BANDE DE CONDUCTION DANS GaAs.....III-31

III-I.5)LIBRE PARCOURS MOYEN DANS GaAs. III-34

III-I.5.1)DISTANCE DE LIBRE PARCOURS MOYEN DANS GaAs.....III-34

III-I.5.2)TEMPS DE LIBRE PARCOURS MOYEN DANS GaAs.III-35

III-I.6)CONCLUSION. VALIDATION DU MODÈLE DE STRUCTURE DE BANDE DES VALLÉES ÉTENDUES..... III-37

III-II)ÉTUDE DU TRANSPORT ÉLECTRONIQUE DANS InP ...III-38

III-II.1)DISTRIBUTION DES DES PORTEURS ET POPULATION ÉLECTRONIQUE MOYENNE EN VALLÉES DANS InP..... III-38

III-II.1.1)DISTRIBUTION ÉNERGÉTIQUE À BAS CHAMPS DANS InP.....III-38

III-II.1.2)DISTRIBUTION ÉNERGÉTIQUE EN CHAMPS FORTS DANS InP.III-39

III-II.1.3)POPULATION ÉLECTRONIQUE MOYENNE EN VALLÉES DANS InP.....III-43

III-II.2)ÉNERGIE MOYENNE DANS InP..... III-45

III-II.2.1)ÉNERGIE MOYENNE.III-45

III-II.2.2)CONTRIBUTION DES VALLÉES À L'ÉNERGIE MOYENNE DANS InP.III-46

III-II.3)IONISATION PAR CHOC DANS InP. III-48

III-II.3.1)COEFFICIENT D'IONISATION PAR CHOC DANS InP.III-48

III-II.3.2)FRÉQUENCE DE L'IONISATION PAR CHOC DANS InP.III-50

III-II.3.3)DISTRIBUTION ET ÉNERGIE MOYENNE DES ÉLECTRONS IONISANTS DANS InP.III-51

III-II.4)VITESSE DE DÉRIVE STATIONNAIRE DANS InP..... III-52

III-II.4.1)COMPARAISON AVEC L' EXPÉRIENCE DANS InP.....III-54

III-II.4.2)COMPARAISON AVEC UNE SIMULATION NE PRENANT EN COMPTE QUE LA PREMIÈRE BANDE DE CONDUCTION DANS InP.III-54

III-II.4.3)CONTRIBUTION DES VALLÉES À LA VITESSE DE DÉRIVE DANS InP.III-56

III-II.5)LIBRE PARCOURS MOYEN DANS InP..... III-58

III-II.5.1)DISTANCE DE LIBRE PARCOURS MOYEN DANS InPIII-58

III-II.5.2)TEMPS DE LIBRE PARCOURS MOYEN DANS InPIII-58

CONCLUSION.III-59

BIBLIOGRAPHIE.....III-61

INTRODUCTION.

Ce chapitre présente les caractéristiques physiques en régime stationnaire, des bas champs aux champs fortement ionisants, obtenues à l'aide de la simulation Monte-Carlo et utilisant le modèle de structure de bande (SDB) et les probabilités d'interaction, présentés aux chapitres II. Ces caractéristiques sont principalement la population électronique en vallées, l'énergie moyenne, le coefficient d'ionisation par choc, la vitesse de dérive, la distance et le temps de libre parcours moyen.

Les paragraphes III-I et III-II sont respectivement consacrés à GaAs et à InP.

Le matériau GaAs étant mieux connu, certaines caractéristiques de transport, comme des résultats de nature qualitative valables pour la plupart des III-V, ne sont détaillés que pour ce matériau. Compte tenu de ces restrictions, l'organisation du paragraphe III-II consacré à InP, suit globalement la même décomposition que celui consacré à GaAs.

La simulation du transport de GaAs, réalisée avec un champ électrique extérieur appliqué, orienté dans une direction Δ ($\langle 100 \rangle$) ou Λ ($\langle 111 \rangle$), donnant des résultats voisins, dans tout ce qui suit, les résultats correspondent à une orientation du champ dans une direction Δ .

Comme on l'a vu au chapitre I, toutes les grandeurs physiques découlent de la fonction de distribution. Comme la plupart des grandeurs physiques dépendent de l'énergie, il est pratique de considérer la distribution énergétique, moyenne de la fonction de distribution sur les états disponibles, ainsi que la population électronique moyenne.

Les paragraphes III-I.1 et III-II.1 présentent les distributions énergétiques et la population électronique moyenne, en détaillant particulièrement ces caractéristiques en champs forts. Dans GaAs, les distributions énergétiques pour différents champs forts sont comparées à celles obtenues par la simulation de J.Bude & K.Hess [BUD92] prenant en compte la structure de bande réelle et des probabilités d'interaction également réelles y compris pour l'ionisation par choc. Le détail des contributions des différentes vallées permet de connaître l'influence de la seconde bande de conduction sur les électrons les plus énergétiques.

L'énergie moyenne des électrons est une grandeur assez mal connue en champs forts dans les III-V.

Les paragraphes III-I.2 et III-II.2 présentent l'énergie moyenne avec la contribution des vallées des deux premières bandes de conduction. Dans GaAs, l'énergie moyenne globale est

L'un des principaux phénomènes physiques en champ fort est l'ionisation par choc. Le coefficient d'ionisation par choc donne une idée de l'amplitude du phénomène d'ionisation, principal phénomène physique en champ fort. La méconnaissance de valeurs de paramètres matériaux relatifs à la seconde bande sera levée, par un ajustement de ces grandeurs au coefficient d'ionisation par choc expérimental.

Les paragraphes III-I.3 et III-II.3 présentent le coefficient d'ionisation par choc dans GaAs et InP. La distribution des électrons ionisants est présentée ainsi que leur énergie moyenne.

L'influence sur le coefficient d'ionisation par choc de l'anisotropie de haute énergie de la SDB, due à la prise en compte réaliste des maxima de bande W, est étudiée dans GaAs par comparaison avec les résultats de la même simulation mais en l'absence de la prise en compte de cette anisotropie, c'est à dire en supposant les vallées à symétrie purement elliptique jusqu'à l'énergie maximale.

La vitesse de dérive stationnaire est une grandeur physique mesurable expérimentalement pour des champs n'excédant pas, en pratique, guère plus de 200 kV/cm. Comme l'ionisation par choc se déroule précisément à des champs bien supérieurs à 200 kV/cm que ce soit dans GaAs ou InP, la modélisation correcte du transport dans cette gamme de champs est nécessaire pour connaître l'évolution de la vitesse de dérive pour ces très forts champs.

Les vitesses de dérive stationnaire de GaAs et InP sont présentées respectivement aux paragraphes III-I.4 et III-II.4. Dans GaAs, l'influence des phénomènes de haute énergie est étudiée par comparaison avec d'autres simulations modélisant la SDB en se limitant à la première bande de conduction. Le rôle de la prise en compte de la seconde bande de conduction sur la vitesse de dérive peut ainsi être précisé.

La distance et surtout le temps de libre parcours moyen sont des grandeurs rarement publiées. Elles sont présentées au paragraphes III-I.5 et III-II.5. Dans GaAs, la distance de libre parcours moyen est comparée aux résultats de H.Shichijo & K.Hess [FIS81] utilisant la structure de bande réelle, mais limitée à la première bande de conduction.

III-I)ÉTUDE DU TRANSPORT ÉLECTRONIQUE DANS GaAs.

III-I.1)DISTRIBUTION DES PORTEURS ET POPULATION ÉLECTRONIQUE MOYENNE EN VALLÉES DANS GaAs.

Les distributions énergétiques des électrons sont présentées, d'une part pour des champs non ionisants ou bas champs, et d'autre part pour des champs forts, ionisants ou proches d'être ionisants, pour lesquelles la distribution énergétique est particulièrement détaillée. La population électronique moyenne est enfin présentée en fonction du champ.

III-I.1.1)DISTRIBUTION ÉNERGÉTIQUE À BAS CHAMP DANS GaAs.

La figure III-1 présente la distribution énergétique bas champ à 1 kV/cm et à 4 kV/cm. La caractéristique de la distribution énergétique à 1 kV/cm est de type Maxwell-Boltzmann, avec une décroissance exponentielle à énergie élevée. A 4 kV/cm la distribution n'est plus du type Maxwell-Boltzmann. Elle est déformée à cause du transfert des électrons en vallées L1.

La figure III-2 présente l'étalement de la distribution énergétique du côté des hautes énergies lorsque le champ appliqué passe de 10 kV/cm à 100 kV/cm, champs intermédiaires entre les bas champs et les champs forts. La largeur de la distribution énergétique mesurée à 0.001 /eV passe ainsi de 0.6 eV pour 10kV/cm, à 1.6 eV pour 100 kV/cm. Cet étalement énergétique est dû à l'accentuation, avec le champ, du transfert des électrons de la vallée centrale Γ_1 vers les vallées latérales L1.

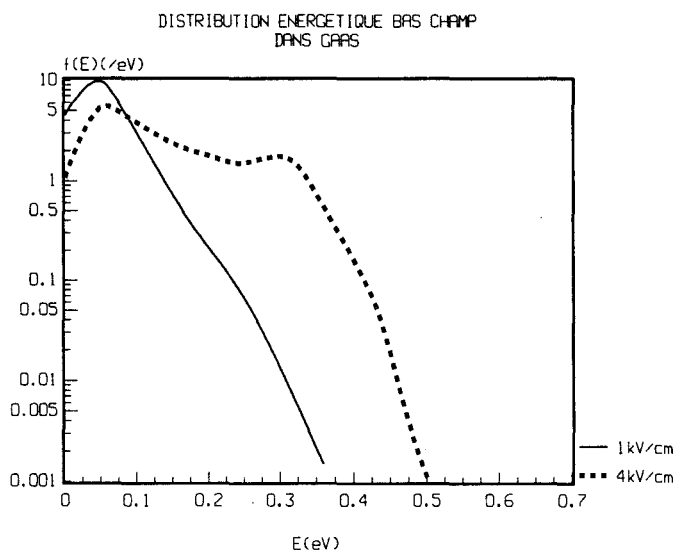


Figure III-1. Distribution énergétique bas champ à 1kV/cm (trait plein) et à 4 kV/cm (tirets).

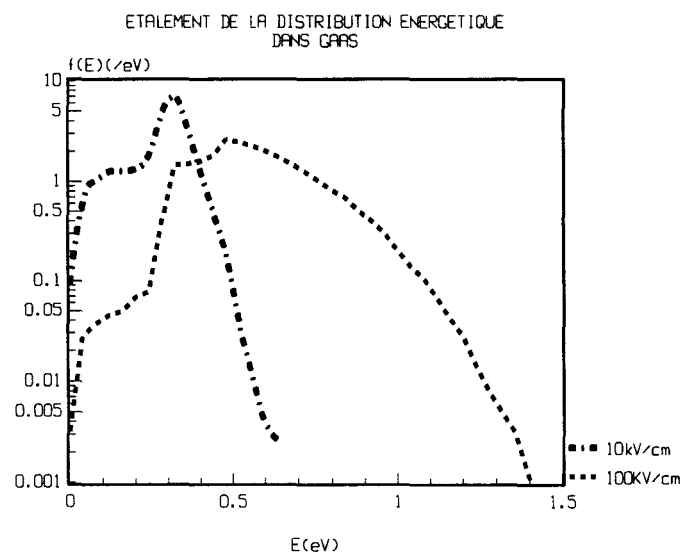


Figure III-2. Étalement de la distribution énergétique pour des champs de 10 kV/cm (traits mixtes) et 100 kV/cm (tirets), intermédiaires entre les bas champs et les champs forts.

III-I.1.2) DISTRIBUTION ÉNERGÉTIQUE EN CHAMP FORT DANS GaAs.

Expérimentalement [BUL83], les phénomènes d'ionisation par choc sont observés, dans GaAs, pour des champs couvrant une gamme de valeurs allant de plus de 200 kV/cm à environ 500kV/cm. Le champ de 200 kV/cm est une valeur limite inférieure pour laquelle pratiquement aucun événement ionisant n'est observé. Le champ élevé de 500 kV/cm correspond à une valeur située peu avant le champ de claquage d'environ 600kV/cm.

III-I.1.2.1) DISTRIBUTION AVEC ET SANS IONISATION PAR CHOC À 200 kV/cm ET 500 kV/cm.

La figure III-3 présente la distribution énergétique dans l'Arséniure de Gallium, avec et sans prise en compte du phénomène d'ionisation par choc pour des champs électriques de 200kV/cm et 500kV/cm. A 200kV/cm, les deux caractéristiques sont confondues, ce qui s'explique par l'absence d'événements ionisants. A 500kV/cm, champ fortement ionisant, on constate que la prise en compte de l'ionisation par choc se traduit par une diminution de l'énergie maximale accessible, par contre, l'écart énergétique des caractéristiques avec et sans ionisation par choc s'accroît lorsque l'énergie augmente.

Comme aux hautes énergies, d'après N.Sano & A.Yoshii [SAN95], les différentes probabilités d'ionisation sont voisines pour la plupart des matériaux semiconducteurs d'intérêt pratique, on peut s'attendre à ce que pour de tels matériaux, le comportement global de la distribution énergétique, suive des évolutions semblables.

La figure III-4, présente la distribution énergétique d'une simulation Monte-Carlo multi-bandes réelles dans de Silicium, réalisée par H.Kunikiyo & al. [KUN94], avec et sans prise en compte du phénomène d'ionisation par choc, pour des champs électriques de 200kV/cm et 500kV/cm. Pour chacun de ces champs, on constate un décalage énergétique de la fonction de distribution avec et sans ionisation par choc qui augmente avec l'énergie. En outre, ce décalage énergétique augmente également avec le champ.

La comparaison des figures III-3 et III-4 montre que le décalage énergétique de la fonction de distribution avec et sans ionisation par choc, suit des évolutions comparables dans GaAs et Si.

En conclusion, l'ionisation par choc se traduit par une légère troncature de la distribution énergétique du côté des hautes énergies, s'accroissant avec le champ. Cet effet s'explique par la probabilité d'ionisation par choc qui s'accroît fortement avec l'énergie, l'ionisation s'accompagnant d'une forte réduction d'énergie. Ainsi, lorsque le champ augmente, l'énergie des électrons augmente, ce qui accroît le nombre d'événements ionisants, et donc la perte d'énergie due à l'ionisation.

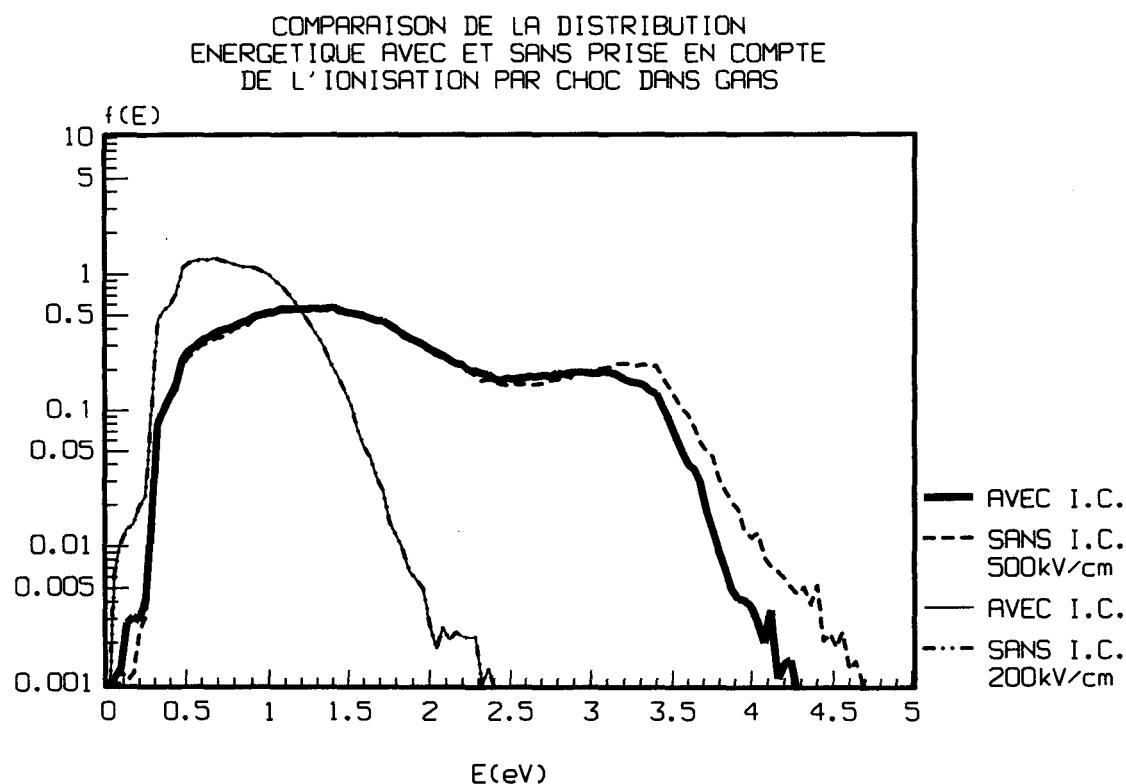


Figure III-3. Distribution énergétique avec et sans ionisation par choc (I.C.) dans GaAs, à 200 kV/cm (avec I.C. en trait plein fin, et sans I.C. en traits mixtes fins), et à 500 kV/cm (avec I.C. en trait plein gras, et sans I.C. en tirets gras).

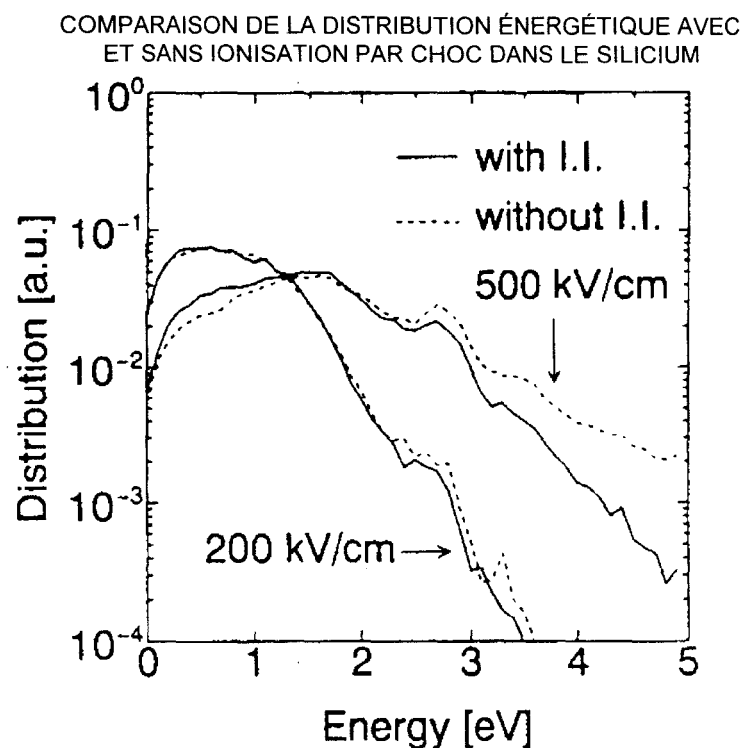


Figure III-4. Distribution énergétique dans le Silicium avec (trait plein) et sans (tirets) ionisation par choc dans Si, à 200 kV/cm et à 500kV/cm, d'après une simulation Monte-Carlo de T.Kunikiyo & al. [KUN94].

III-I.1.2.2) CONTRIBUTION DES VALLÉES À LA DISTRIBUTION ÉNERGÉTIQUE À 500kV/cm DANS GaAs.

La figure III-5 présente la contribution des vallées à la distribution énergétique à 500 kV/cm dans GaAs.

La plus haute énergie atteinte en vallée centrale se situe vers 1.7 eV, dépassant le maximum de 1.1eV accessible dans une direction Λ , mais inférieur aux maxima de 2.1 eV et 2.3 eV accessibles respectivement dans les directions Δ et Σ .

En première bande de conduction, la vallée centrale Γ_1 est nettement moins peuplée que les vallées latérales à partir de 0.6 eV, à cause de la forte densité d'états locale qui règne dans ces vallées. Les vallées L1 demeurent davantage peuplées que les vallées X1, à cause d'une plus forte densité d'états dans les premières. Aux énergies les plus élevées, les deux sous-distributions se rejoignent car les masses effectives au voisinage des maxima sont les mêmes vues des points L et X.

A partir de 2.3 eV, il y a inversion de la population électronique entre les deux premières bandes de conduction au profit de la seconde bande. A 2.8 eV, cette dernière bande contient déjà 90% des électrons de cette énergie.

III-I.1.2.3) RÉPARTITION DES ÉLECTRONS DANS LA SECONDE BANDE (VALLÉES X3 ÉTENDUES) DANS GaAs.

La figure III-6 présente les contributions à la distribution énergétique, de trois secteurs angulaires de 30° chacun, repérés par rapport à la direction principale associée à une vallée X3.

On constate une troncature de la distribution à haute énergie lorsque les électrons s'approchent de l'axe principal. L'anisotropie de la structure de bande à haute énergie, localisant les états de plus hautes énergies W dans un plan transverse à l'axe principal, explique la troncature vers les hautes énergies de la distribution lorsque les électrons s'éloignent de ce plan en se rapprochant de l'axe principal.

La comparaison des sous-distributions montre que les électrons ont tendance à privilégier le secteur intermédiaire de 30° à 60°, et le secteur de 60° à 90°, perpendiculaire à la direction principale, à celui de 0° à 30° autour de la direction principale. Il existe approximativement un facteur 2 entre la sous-distribution le long du secteur principal [0;30[et celle des deux autres secteurs. La faible anisotropie de fond de vallée ne peut pas à elle seule expliquer un tel écart dans la distribution spatiale des électrons entre la direction principale et les directions transversales. On peut expliquer que les directions transverses à l'axe principal ont tendance, en moyenne, à être privilégiées par le fait que le moyennage concerne les 6 demi-vallées X3 équivalentes. En effet, comme le champ est appliqué dans une direction $\langle 100 \rangle$, les axes principaux des 2 demi-vallées

situées le long des axes $\langle 100 \rangle$ et $\langle \bar{1}00 \rangle$, sont parallèles au champ, mais ceux des 4 autres demi-vallées en sont perpendiculaires. Les états transverses à l'axe principal d'une vallée X3 indifférenciée, sont donc à peu près 2 fois plus favorisés que les états parallèles.

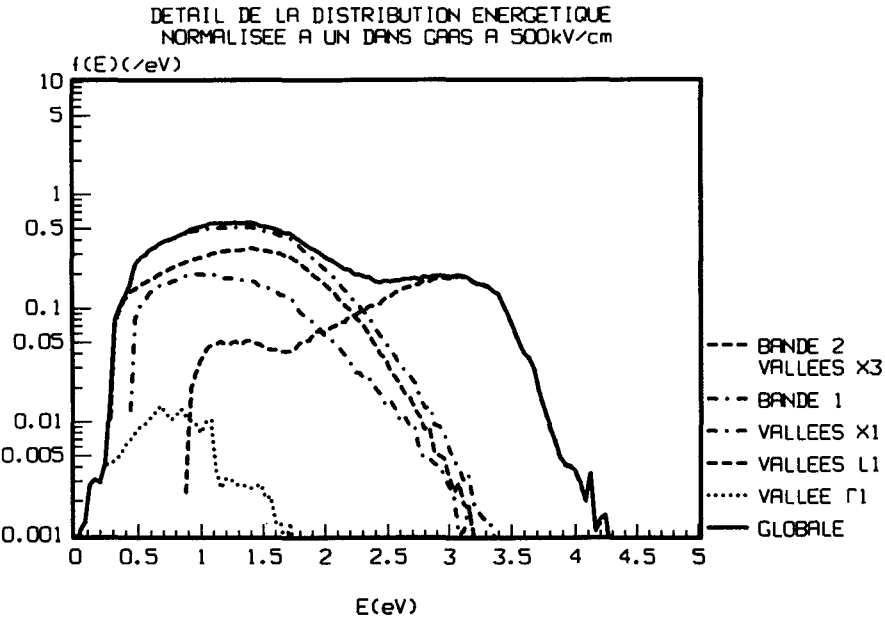


Figure III-5. Répartition entre vallées et bandes de la distribution énergétique dans GaAs à 500 kV/cm. La distribution globale (trait plein) comprend la sous-distribution en première bande (traits mixtes gras) (dont celle des vallées $\Gamma 1$ (pointillés), L1 (tirets fins), et X1 (traits mixtes fins)), et celle en seconde bande (vallées X3) (tirets gras).

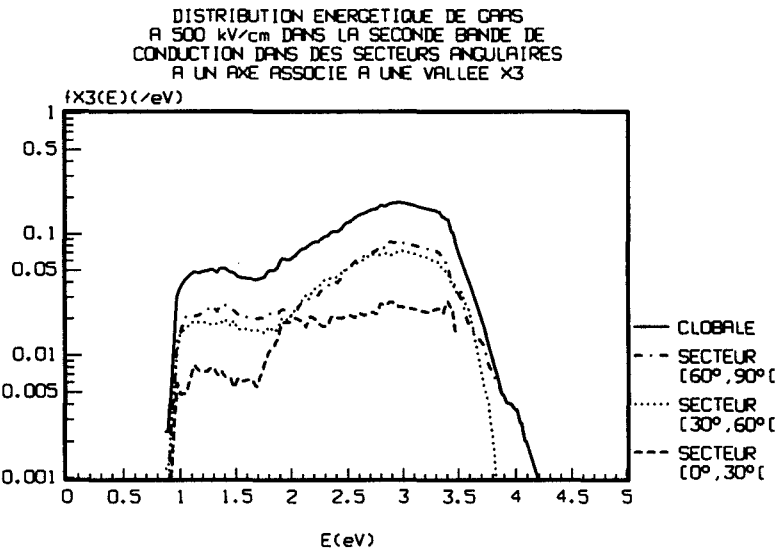


Figure III-6. Répartition angulaire de la distribution énergétique globale (trait plein) dans la seconde bande de conduction (vallées X3) de GaAs, à 500 kV/cm. L'orientation moyenne comptée par rapport à l'axe principale, est divisées en trois secteurs angulaire autour de l'axe principal: 0° à 30° (tirets), 30° à 60° (pointillés), et 60° à 90° (traits mixtes).

III-I.1.2.4) COMPARAISON DES DISTRIBUTIONS ÉNERGÉTIQUES EN CHAMPS FORTS AVEC UNE SIMULATION UTILISANT UNE STRUCTURE DE BANDE RÉELLE DANS GaAs.

La figure III-7 présente la distribution énergétique normalisée à un, pour quatre champs forts ionisants ou quasi-ionisants de 200 kV/cm, 300 kV/cm, 400 kV/cm et 500 kV/cm.

A 200 kV/cm on remarque qu'au delà du maximum de la distribution énergétique, situé vers 0.7 eV, cette dernière présente une décroissance exponentielle.

A 300 kV/cm le peuplement de la seconde bande provoque un étalement de la distribution énergétique du côté des hautes énergies avec un écrasement aux basses énergies, à cause de la conservation du nombre total d'électrons.

A 400 kV/cm et à 500 kV/cm, les effets observés à 300 kV/cm s'accroissent car le champ fournit de plus en plus d'énergie aux électrons. L'effet est renforcé par la densité d'états qui devient très faible vers 3 eV dans la première bande comparée à la deuxième bande; le transfert électronique s'effectue ici en direction des vallées X3 de la seconde bande.

La largeur de la distribution énergétique augmente avec le champ à cause de l'énergie de plus en plus importante apportée par le champ.

L'examen des queues de distributions à haute énergie pour des champs de 300 kV/cm, 400 kV/cm, et 500 kV/cm montre une diminution de plus en plus forte et une accentuation du rapprochement des distributions énergétiques lorsque le champ appliqué augmente.

On peut l'expliquer par la saturation de l'énergie maximale accessible causée par l'ionisation par choc de plus en plus intense lorsque le champ, donc l'énergie des électrons, augmente. En effet, la probabilité d'ionisation par choc augmente fortement avec l'énergie, ce qui augmente d'autant la probabilité de perdre de l'énergie pour les électrons qui parviennent aux plus hautes énergies. En particulier, l'examen de la probabilité d'ionisation par choc dans la seconde bande au chapitre II, montre qu'entre 4.5 et 5 eV, cette probabilité dépasse si fortement la probabilité sur phonons que les quelques électrons atteignant de telles énergies ont de fortes chances d'ioniser.

A haute énergie, lorsque les champs deviennent de plus en plus intenses, la saturation énergétique des électrons est donc due à la réaction de blocage en énergie causée par l'ionisation par choc.

La comparaison des figures II-7 et II-8 montre que les distributions issues du modèle de structure de bande (SDB) des vallées étendues sont voisines de celles issues d'une SDB réelle.

REMARQUE.

La probabilité d'ionisation par choc réelle provoque une troncature de la distribution énergétique, due à la forte amplitude de la probabilité d'ionisation par choc aux hautes énergies. Dans une simulation mono-bande de type H.Shichijo & K.Hess [SHI81], il n'y a plus d'états au delà de 2.5 eV. Cela implique une troncature de la distribution énergétique à 500 kV/cm de près de 2 eV par rapport à celle de la présente simulation. Avec une énergie de seuil dur à 1.7 eV dans la formule de L.V.Keldysh [KEL65], la probabilité d'ionisation est fortement surestimée à partir de 2 eV. On aboutit donc à une nette anticipation de la coupure brutale de la fonction de distribution, ce qui s'explique par l'absence d'états au delà de 2.5 eV.

III-I.1.3) POPULATION ÉLECTRONIQUE MOYENNE EN VALLÉES DANS GaAs.

La figure III-9 représente la population électronique moyenne par vallée, ' N_b / N_t ' (N_t est le nombre total d'électrons et N_b le nombre d'électrons en vallées considérées), en fonction du champ, en vallées Γ_1 , L1, et X1, de la première bande, et en vallées X3 de la seconde bande.

Lorsque leur énergie est suffisante, les électrons d'une vallée peuvent peupler la vallée supérieure. Par conservation du nombre total de porteurs, la vallée de départ se dépeuple.

Jusqu'à 4 kV/cm, pratiquement seule la vallée centrale Γ_1 est peuplée par des électrons de basse énergie. A partir de ce champ, l'augmentation de l'énergie moyenne des électrons permet de plus en plus à ces derniers de transférer en vallées latérales L1, de plus basse énergie (0.284 eV [BLA82]).

Entre 8 kV/cm et 10 kV/cm, l'inversion des populations électroniques entre la vallée centrale Γ_1 , et les vallées satellites L1 de forte masse effective, permet d'expliquer la mobilité différentielle négative propre à la plupart des matériaux III-V. La décroissance de la population en vallée centrale se poursuit jusqu'aux champs les plus élevés, cette vallée comprenant, à 500 kV/cm, environ 1 % de la population totale. Entre 30 kV/cm et 50 kV/cm, la population des vallées L1 s'accroît jusqu'à un maximum d'environ 75 % du total des électrons, puis décroît jusqu'à une valeur palier de 60 % pour un champ de 100 kV/cm. La population redécroît à partir de 300 kV/cm, pour constituer vers 500kV/cm, environ 50% du total des électrons.

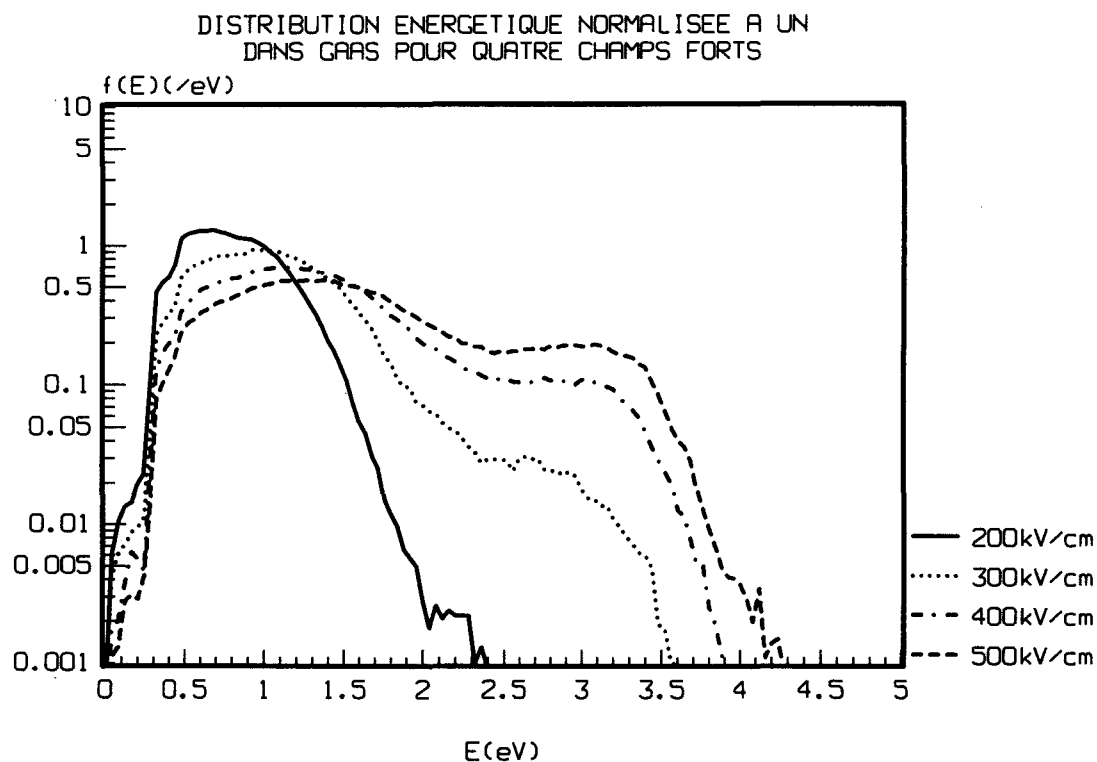


Figure III-7. Distribution énergétique normalisée à un dans GaAs, obtenue à l'aide de la simulation Monte-Carlo utilisant le modèle bi-bande des vallées étendues, pour quatre champs forts: 200 kV/cm (trait plein), 300 kV/cm (pointillés), 400 kV/cm (traits mixtes), et 500 kV/cm (tirets).

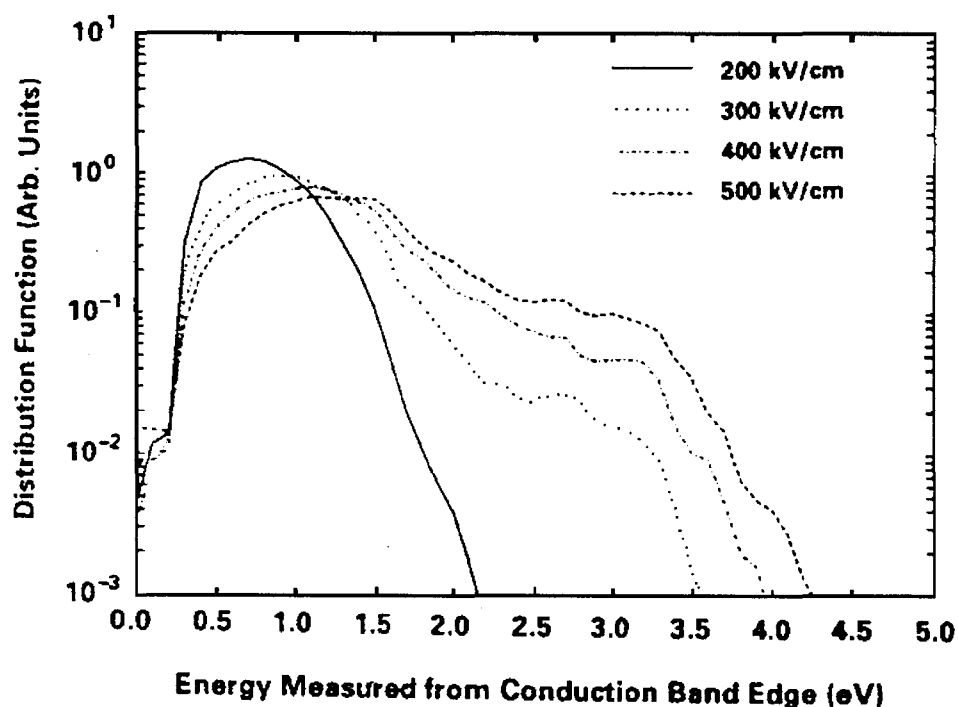


Figure III-8. Distribution énergétique dans GaAs, d'après une simulation Monte-Carlo de J.Bude & K.Hess [BUD92] utilisant la structure de bande réelle, pour quatre champs forts: 200 kV/cm (trait plein), 300 kV/cm (pointillés), 400 kV/cm (traits mixtes), et 500 kV/cm (tirets).

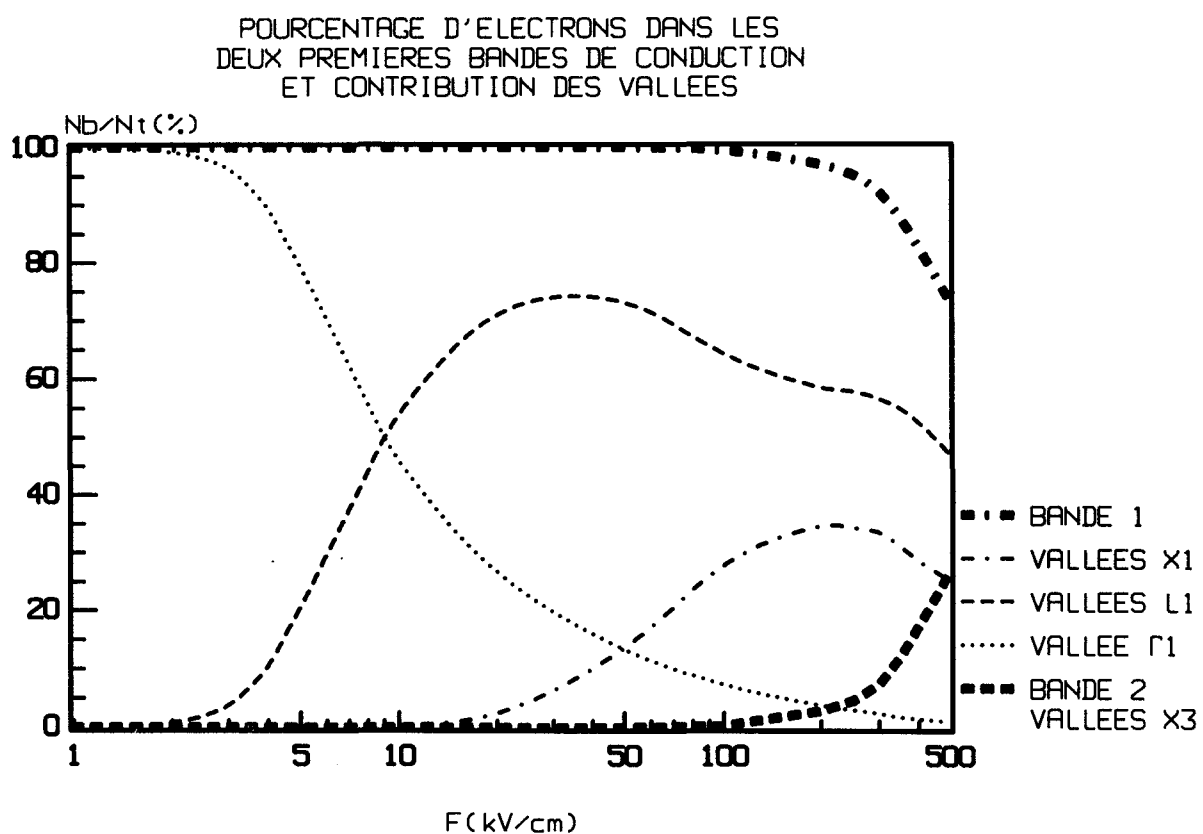


Figure III-9. Contribution à la population électronique moyenne dans GaAs, de la bande 1 (traits mixtes gras) (vallées Γ 1 (pointillés), L1 (tirets fins), X1 (traits mixtes fins)), et de la bande 2 (tirets gras) (vallées X3).

Le peuplement des vallées latérales X1 commence à partir d'environ 20 kV/cm. Vers 50kV/cm, la population de ces vallées, totalise environ 10 % de la population globale, égale à celle de la vallée centrale. La population des vallées X1, s'accroît jusqu'à un maximum de 35 % de la population globale à 200 kV/cm, puis décroît jusqu'à 25 % de la population totale à 500 kV/cm.

Jusqu'à 200 kV/cm, les électrons peuplent quasi exclusivement la première bande.

Le peuplement de la seconde bande de conduction devient significatif avec environ 5 % des électrons vers 250 kV/cm. De 300 kV/cm à 500 kV/cm, la population électronique en seconde bande de conduction s'accroît brutalement en passant respectivement d'un peu plus de 5 % à environ 25 % du total des électrons. Ainsi, à 500 kV/cm, la population de la seconde bande de conduction dépasse-t-elle, en première bande, la population de la vallée centrale Γ_1 , égale celle des vallées X1, mais n'atteint pas celle des vallées L1.

III-I.2) ÉNERGIE MOYENNE DANS GaAs.

III-I.2.1) COMPARAISON AVEC UNE SIMULATION NE PRENANT EN COMPTE QUE LA PREMIÈRE BANDE DE CONDUCTION DANS GaAs.

La figure III-10 représente l'énergie moyenne simulée prenant en compte une structure de bande réaliste incluant la seconde bande de conduction, ainsi que l'énergie moyenne simulée par H.Shichijo & K.Hess [SHI81] utilisant la structure de bande réelle en ne tenant compte que de la première bande de conduction.

De manière générale, l'accroissement du champ fournit aux électrons une énergie supplémentaire qui provoque l'augmentation de l'énergie moyenne.

La comparaison rapide des deux simulations montre que les allures générales des deux courbes sont identiques, mais avec un net écart en champs forts.

A 5 kV/cm la simulation Monte-Carlo réalisée fournit une énergie moyenne voisine de 0.2eV, alors que H.Shichijo & K.Hess [SHI81] obtiennent environ 0.3 eV. A 10 kV/cm, l'énergie moyenne obtenue approche 0.3 eV, tandis que la simulation de H.Shichijo & K.Hess [SHI81], fournit une valeur voisine de 0.4 eV. De 10 kV/cm à 50 kV/cm, ces auteurs obtiennent une énergie moyenne quasiment constante, avec un très faible accroissement amenant l'énergie moyenne légèrement au dessus de 0.4 eV à 50 kV/cm. A ce champ les deux simulations donnent des résultats identiques.

A partir de 50 kV/cm, les deux simulations fournissent des résultats qui s'écartent de plus en plus à mesure que le champ augmente; la présente simulation incluant la deuxième bande donne des énergies de plus en plus élevées par rapport à la simulation se limitant au transport dans la première bande. Ainsi à 100 kV/cm, la simulation réalisée fournit une énergie moyenne voisine de 0.6 eV tandis que celle, mono-bande de H.Shichijo & K.Hess [SHI81] donne une énergie moyenne voisine de 0.5 eV. A ce champ, l'écart relatif n'est pas encore très important, et il est même moins important qu'à bas champ.

A 200 kV/cm, la simulation réalisée fournit une énergie moyenne voisine de 0.8 eV, ce qui fait passer à 0.2 eV, l'écart énergétique entre les deux courbes.

A 500 kV/cm, la simulation donne une énergie moyenne située entre 1.6 eV et 1.7 eV, tandis que celle de H.Shichijo & K.Hess [SHI81] fournit une énergie moyenne ne dépassant pas 0.9 eV.

Ces écarts s'expliquent par la non prise en compte de la seconde bande de conduction, dans la simulation de H.Shichijo & K.Hess [SHI81], de même que dans celles de M.V.Fischetti [FIS88][FIS91]. Ces auteurs négligent la probabilité de transition entre les deux premières bandes de conduction, donc le transport dans la seconde bande. Comme dans ces simulations, seule intervient la densité d'états (DOS) due à la première bande, décroissante dès 1.7 eV, cela a pour conséquence de limiter le nombre d'électrons pouvant accéder aux plus hautes énergies. Cela explique l'obtention d'énergies moyennes bien plus faibles qu'en réalité.

III-I.2.2)CONTRIBUTION DES VALLÉES À L'ÉNERGIE MOYENNE DANS GaAs.

La figure III-11 représente l'énergie moyenne globale, et la contribution à l'énergie moyenne, des différentes vallées et des bandes que ces vallées constituent.

La contribution à l'énergie moyenne dépend du peuplement des vallées, qui lui-même dépend de la courbure de la structure de bande en vallée. Plus la vallée s'écarte de la forme parabolique (plus le rayon de courbure augmente), plus l'accès aux hautes énergies est difficile. C'est le cas dans toute vallée à mesure que l'énergie augmente.

La vallée centrale contribue quasi exclusivement à l'énergie moyenne jusqu'à 4 kV/cm.

A partir de 4 kV/cm, interviennent les vallées latérales L1, dont la contribution égale celle de la vallée centrale vers 6 kV/cm. A partir de ce champ, la contribution de la vallée centrale va en décroissant lorsque le champ augmente, à cause du peuplement des vallées latérales au détriment de la vallée centrale. La contribution à l'énergie des vallées latérales L1, augmente avec le champ à

mesure qu'elles se peuplent. On observe une stabilisation vers 50 kV/cm, lorsqu'intervient le peuplement des vallées latérales X1.

En champs forts au voisinage de 200 kV/cm, l'énergie moyenne vaut 0.8 eV. A cette énergie, la densité d'états en vallées L1 est plus forte que celle en vallées X1, à cause d'un plus fort rayon de courbure de bande, d'une énergie de fond de vallée plus basse, et d'une plus grande multiplicité des vallées L1. Ceci explique que même en champs forts, la contribution des vallées X1 ne finisse pas par surpasser celle des vallées L1, malgré une plus forte masse effective en fond de vallée X1.

La contribution de la seconde bande, représentée par des vallées X3 situées à 0.88 eV [BLA82], est nulle jusqu'à 200 kV/cm. Ces vallées commencent à se peupler entre 200 kV/cm et 300 kV/cm.

L'énergie moyenne due aux vallées X3, augmente assez fortement entre 300 kV/cm et 500kV/cm, à cause de la forme quasi-parabolique de la bande au voisinage d'un minimum X3.

On remarque que la contribution de la première bande de conduction à l'énergie moyenne du modèle bi-bandes, est très proche de l'énergie moyenne obtenue par H.Shichijo & K.Hess [SHI81] qui ne tiennent compte que du transport dans cette bande.

L'examen de la contribution de la seconde bande de conduction montre que l'écart entre les énergies moyennes globales obtenues par les deux simulations, est due à la prise en compte du transport dans la seconde bande.

ENERGIE MOYENNE DANS GaAs
AVEC UN MODELE DE STRUCTURE DE BANDE SUR
DEUX BANDES ET UN AUTRE SUR UNE BANDE

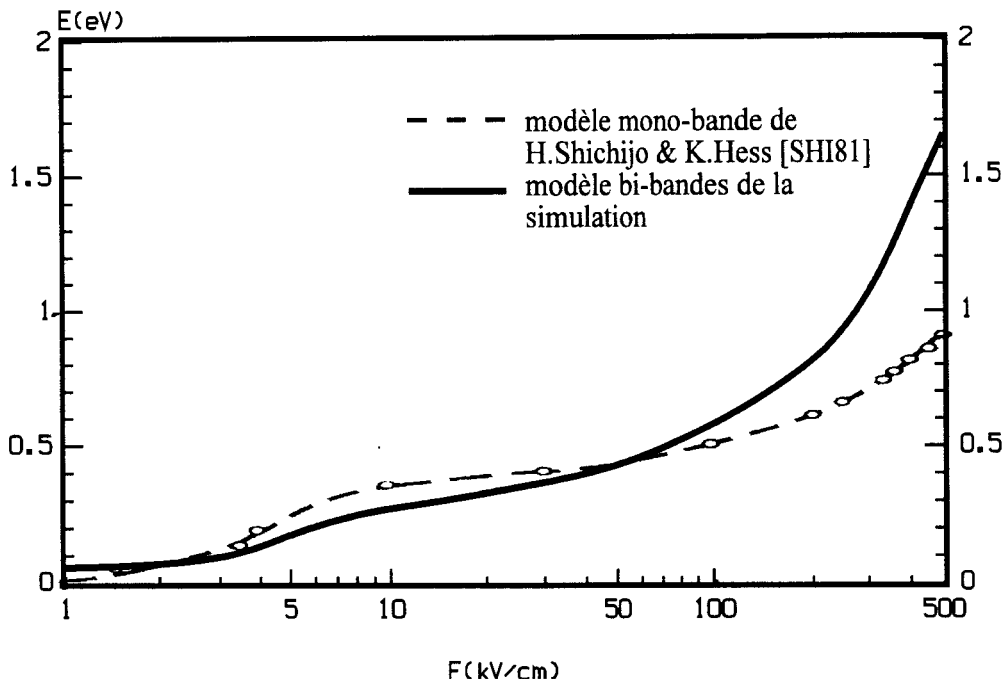


Figure III-10. Energie moyenne dans GaAs, dans la simulation utilisant le modèle bi-bandes des vallées étendues (trait plein), et dans la simulation de H.Shichijo & K.Hess [SHI81] utilisant un modèle mono-bande de la structure de bande réelle (tirets).

ENERGIE MOYENNE DANS GaAs
ET CONTRIBUTIONS CORRESPONDANTES
DES DIFFERENTES VALLEES ETENDUES

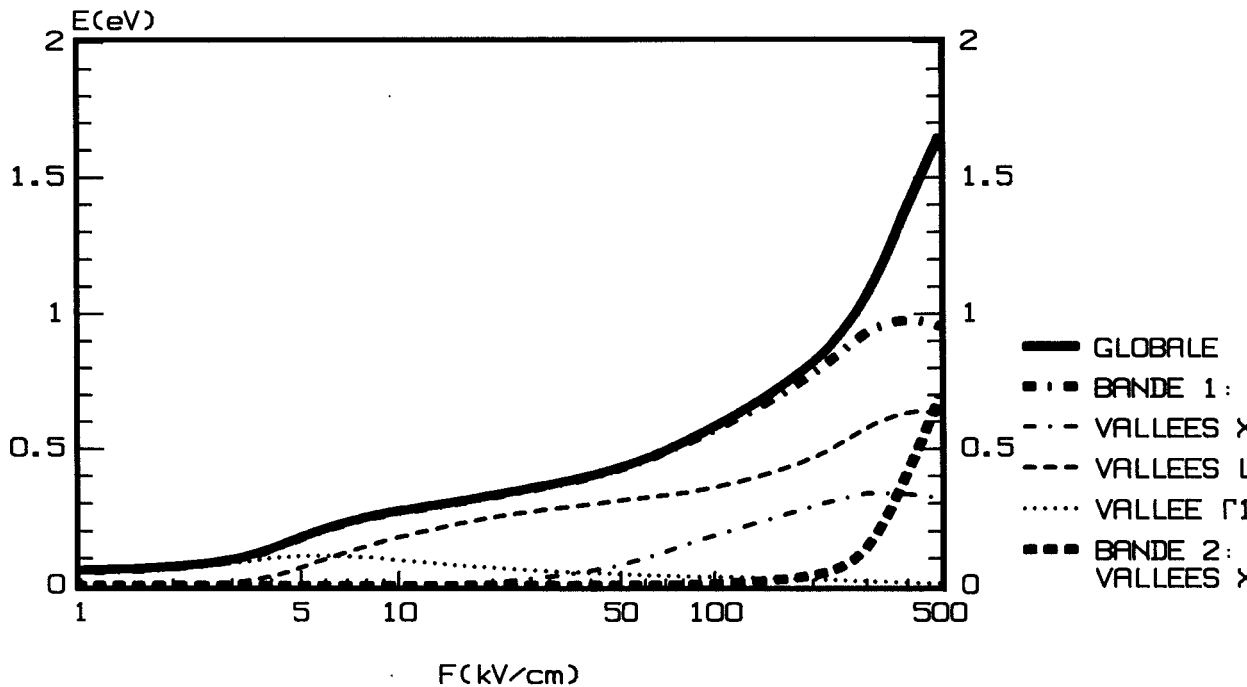


Figure III-11. Energie moyenne (trait plein) dans GaAs, et contribution de la bande 1 (traits mixtes gras) (vallées Γ 1 (pointillés), L1 (tirets fins), X1 (traits mixtes fins), ainsi que de la bande 2 (tirets gras) (vallées X3).

III-I.3) IONISATION PAR CHOC DANS GaAs.

Le coefficient d'ionisation par choc est l'une des rares grandeurs accessibles à l'expérience en champ ionisant dans GaAs. C'est la connaissance de cette grandeur physique qui permet de déterminer le couplage entre les deux premières bandes, via un potentiel de déformation inter-bandes, ainsi que le potentiel de déformation intra-seconde-bande. Ces deux grandeurs ont été ajustées à partir de deux points de la caractéristique expérimentale du coefficient d'ionisation par choc correspondant aux champs de 250kV/cm et 500 kV/cm.

III-I.3.1) COEFFICIENT D'IONISATION PAR CHOC DANS GaAs.

En champ fort, une simulation doit retrouver la caractéristique de coefficient d'ionisation par choc expérimentale. C'est ce qui a été réalisé avec la caractéristique expérimentale de G.Bulman & al. [BUL83].

Le coefficient d'ionisation par choc de la simulation de J.Bude & K.Hess [BUD92] utilisant une structure de bande réelle avec des probabilités d'interaction réalistes, est comparée à notre simulation ainsi qu'à la caractéristique expérimentale de G.Bulman.

La figure III-12 compare la caractéristique de coefficient d'ionisation par choc calculée, à celle, expérimentale de G.Bulman & al. [BUL83], et à la caractéristique de simulation de J.Bude & K.Hess [BUD92]. Compte tenu de la dispersion des mesures de coefficient d'ionisation par choc [SHI81], nous pouvons constater que ces trois caractéristiques sont assez proches les unes des autres. La caractéristique obtenue avec le modèle de bande proposé, est légèrement plus proche de la caractéristique expérimentale, que ne l'est celle de J.Bude & K.Hess [BUD92].

A 250 kV/cm ($\frac{1}{F} = 4$ cm/MV) le coefficient d'ionisation par choc simulé vaut environ 800/cm. celui simulé par J.Bude & K.Hess [BUD92] vaut environ 200/cm et le coefficient d'ionisation expérimental vaut environ 2000/cm. Ces écarts s'expliquent par le faible nombre d'électrons ionisants rendant la statistique moins bonne pour un nombre identique d'événements considérés.

A 500 kV/cm ($\frac{1}{F} = 2$ cm/MV), le coefficient d'ionisation par choc simulé vaut entre 50000/cm et 60000/cm, celui simulé par J.Bude & K.Hess [BUD92], ainsi que l'expérimental, valent environ 50000/cm.

Comme nous avons vu que les distributions obtenues sont également proches de celles de J.Bude & K.Hess [BUD92], nous pouvons en déduire qu'il y a une intime corrélation entre le coefficient d'ionisation par choc et la distribution énergétique. On aurait ainsi tout aussi bien pu ajuster les paramètres de bandes évoqués plus haut au coefficient d'ionisation par choc qu'à la distribution énergétique, pour les deux champs considérés.

III-I.3.2) COMPARAISON DU COEFFICIENT D'IONISATION PAR CHOC AVEC ET SANS PRISE EN COMPTE DE LA SECONDE BANDE DE CONDUCTION DANS GaAs.

La figure III-13 compare, dans la simulation Monte-Carlo utilisant des probabilités d'ionisation par choc et d'interaction sur phonons réalistes, le coefficient d'ionisation par choc avec et sans couplage entre les deux premières bandes.

La non prise en compte de la seconde bande de conduction aboutit à une sous-estimation du coefficient d'ionisation par choc.

Pour expliquer le faible coefficient d'ionisation obtenu en négligeant le transport dans la seconde bande de conduction, nous allons vérifier, lorsqu'on tient compte du transport dans cette bande, que la proportion d'électrons ionisants est bien plus faible dans la première bande que dans la seconde.

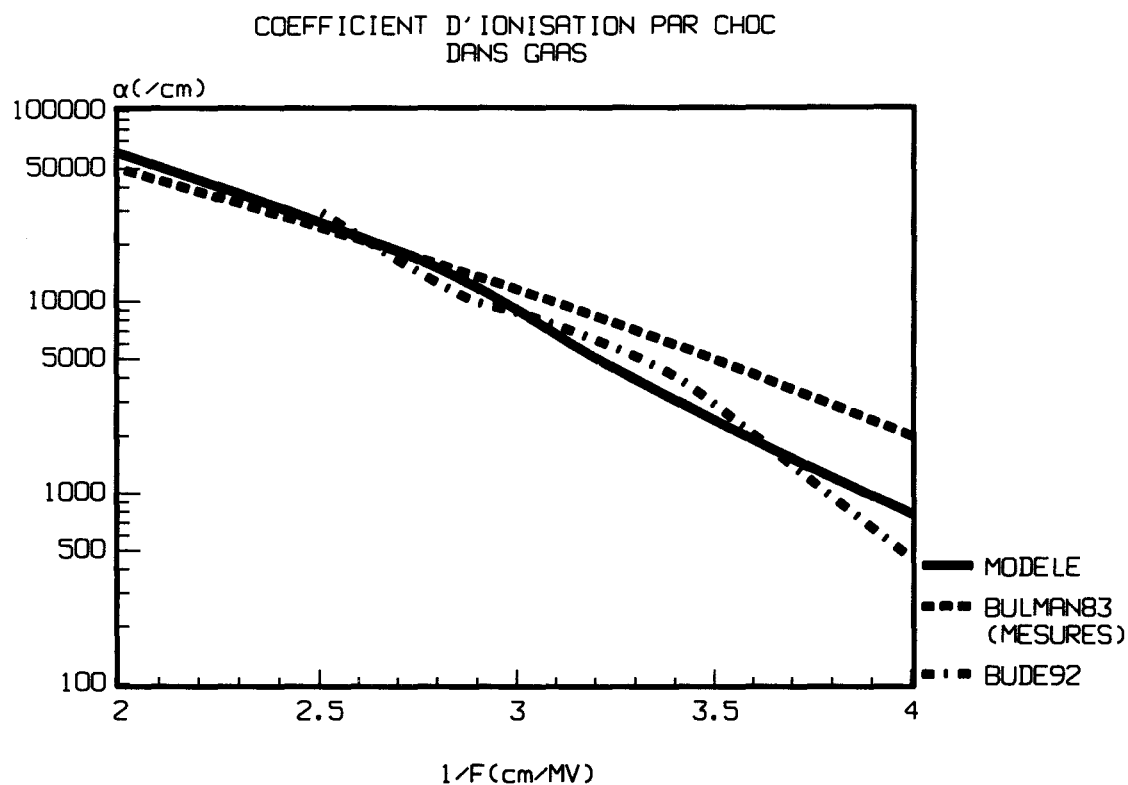


Figure III-12. Coefficient d'ionisation par choc dans GaAs, simulé (présente simulation en traits plein, et simulation de J.Bude & K.Hess [BUD92] en traits mixtes), et expérimental (par G.Bulman & al. [BUL83] en tirets).

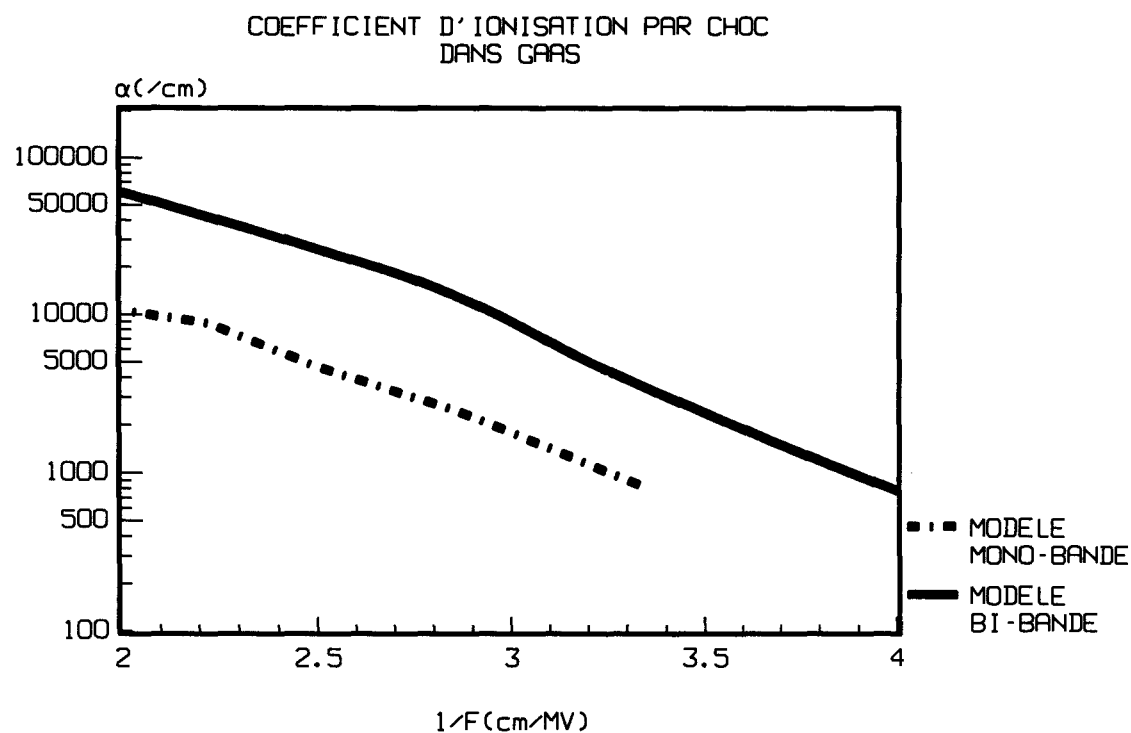


Figure III-13. Coefficient d'ionisation par choc dans GaAs, avec (trait plein) et sans (traits mixtes) couplage entre les deux premières bandes de conduction.

III-I.3.3) FRÉQUENCE DE L'IONISATION PAR CHOC DANS GaAs.

La figure III-14 présente la fréquence d'ionisation par choc (nombre d'ionisations par choc par unité de temps) dans GaAs, et le détail pour les deux premières bandes de conduction.

La fréquence de l'ionisation par choc fait apparaître le caractère d'évènement rare de l'ionisation, ainsi que la prépondérance de la fréquence d'ionisation en seconde bande de conduction. Elle s'accroît fortement avec l'augmentation du champ.

A 250 kV/cm, la fréquence de l'ionisation par choc vaut près de 5 ns^{-1} . Sur la durée de simulation de 1.5 ns, seulement 8 ionisations se sont produites, dont aucune en première bande. L'erreur commise est assez forte à cause du faible nombre d'évènements ionisants pour ce champ.

A 500 kV/cm, la fréquence de l'ionisation par choc vaut près de 450 ns^{-1} . Elle est essentiellement due à la seconde bande. En première bande, la fréquence d'ionisation ne vaut que 10 ns^{-1} . Sur la durée de la simulation de 1.5ns, un peu moins de 700 ionisations se sont produites, dont seulement une quinzaine en première bande.

Etant donné que, dans la simulation, la probabilité d'ionisation par choc est la même dans les deux bandes, la faible fréquence d'ionisation dans la première bande par rapport à la seconde bande provient du plus faible nombre d'électrons de haute énergie dans la première bande. Le rapport de la fréquence d'ionisation en seconde bande à la fréquence globale d'ionisation donne donc le pourcentage d'électrons ionisants dû à la seconde bande. Ainsi, pour tous les champs, au moins 95% des électrons qui ionisent proviennent de la seconde bande de conduction.

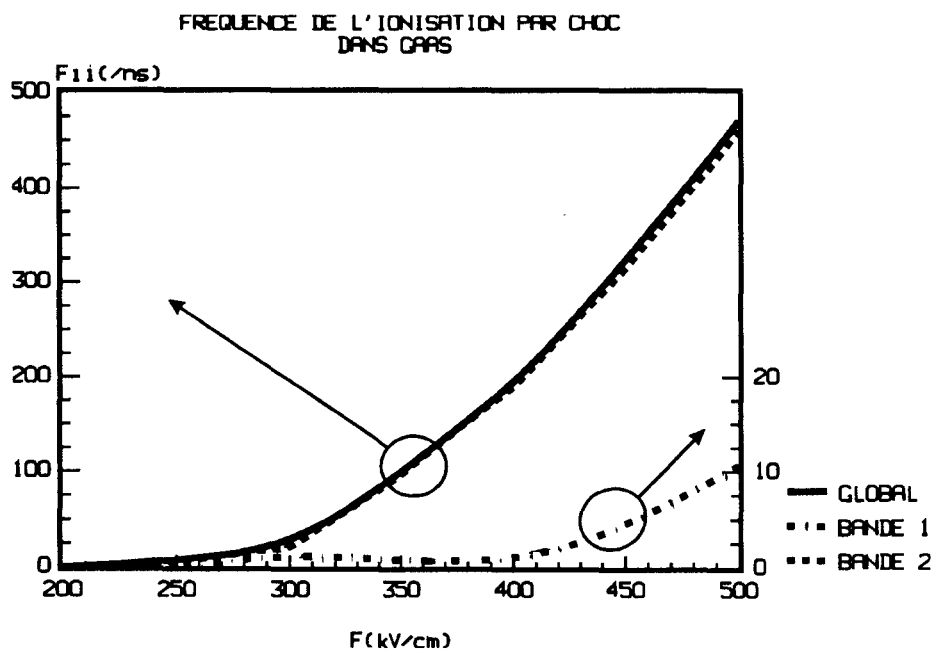


Figure III-14. Fréquence de l'ionisation par choc dans GaAs (trait plein), et contribution de la bande 1 (trait mixte) et de la bande 2 (tirets).

III-I.3.4) DISTRIBUTION ET ÉNERGIE MOYENNE DES ÉLECTRONS IONISANTS DANS GaAs.

III-I.3.4.1) DISTRIBUTION ÉNERGÉTIQUE DES ÉLECTRONS IONISANTS À 400 kV/cm ET À 500 kV/cm.

La distribution en énergie des électrons ionisants renseigne sur l'énergie de seuil effective d'ionisation par choc. La figure III-15 présente la distribution énergétique normalisée à un des électrons ionisants pour les deux champs ionisants de 400 kV/cm et 500 kV/cm.

La comparaison des deux distributions montre un déplacement de la distribution vers les hautes énergies lorsqu'on passe de 400 kV/cm à 500 kV/cm.

De manière générale on peut constater que les deux caractéristiques sont assez bruitées, à cause du faible nombre d'électrons ionisants.

La distribution à 500 kV/cm, pour laquelle la statistique est meilleure, présente une forme assez nettement gaussienne.

Compte tenu de la statistique de la simulation, l'énergie des électrons ionisants observés, s'étend d'environ 2.5 eV, à près de 4.5 eV.

Si l'on considère l'importance des erreurs statistiques, au voisinage de 2.5 eV, la forme gaussienne de la distribution énergétique réelle devrait théoriquement permettre à une faible proportion d'électrons d'ioniser au voisinage de l'énergie de seuil de 2.1 eV, définie par la probabilité d'ionisation de la formule de M.Stobbe & al. [STO94], et utilisée dans la simulation.

L'importante largeur énergétique de la distribution des électrons ionisants, environ 2 eV, caractérise la douceur du seuil d'ionisation par choc. Les électrons ionisants sont très énergétiques puisqu'ils ont des énergies comprises entre 2.5 eV et 4.5 eV, et qu'à peine 10% d'entre eux ont une énergie inférieure à 3 eV. Il est remarquable qu'à cette énergie, où le nombre d'électrons ionisants devient significatif, la probabilité d'ionisation par choc devient comparable à la probabilité totale sur phonons.

On peut constater qu'à 400 kV/cm, la distribution commence vers 2.7 eV au lieu de 2.5 eV. Cette différence s'explique par une plus mauvaise statistique à 400 kV/cm qu'à 500 kV/cm, donc à fortiori au voisinage de 2.5 eV où il y a peu d'électrons ionisants.

III-I.3.4.2) ÉNERGIE MOYENNE DES ÉLECTRONS IONISANTS POUR LES CHAMPS IONISANTS DE 250 kV/cm À 500 kV/cm.

La figure III-16 présente l'énergie moyenne des électrons ionisants, avec la contribution des deux premières bandes de conduction.

L'énergie moyenne des électrons ionisants augmente lentement de 3.1 eV à 3.4 eV entre 250kV/cm et 500kV/cm, c'est-à-dire loin de l'énergie de seuil d'ionisation proposée par M.V.Fischetti [FIS91] à 1.7 eV, ou de celle à 2.1 eV proposée par M.Stobbe & al. [STO94].

L'énergie moyenne d'ionisation en première bande est relativement imprécise à cause du faible nombre d'électrons contribuant à l'ionisation dans cette bande.

La faible variation de l'énergie moyenne des électrons ionisants s'explique par le phénomène d'ionisation par choc lui-même. En effet, plus le champ augmente plus augmente l'énergie des électrons en général et des électrons ionisants en particulier. Cet accroissement est ralenti par le nombre de plus en plus important d'électrons qui perdent de l'énergie à la suite de l'ionisation par choc.

III-I.3.5) EFFET DE L'ANISOTROPIE SUR LE COEFFICIENT D'IONISATION PAR CHOC DANS GaAs.

Le modèle de structure de bande (SDB) des vallées étendues rend compte de l'anisotropie des vallées. Le modèle permet également de supposer que les vallées sont à symétrie sphérique. La comparaison de deux simulations utilisant la même densité d'états (DOS) va permettre d'analyser l'influence de l'anisotropie sur le coefficient d'ionisation par choc.

III-I.3.5.1) COEFFICIENT D'IONISATION PAR CHOC AVEC ET SANS PRISE EN COMPTE DE L'ANISOTROPIE DE BASSE ÉNERGIE DANS GaAs.

Pour voir l'influence de l'anisotropie de basse énergie en vallée, dans le cas isotrope les modifications suivantes sont apportées aux paramètres de SDB du modèle anisotrope:

- en vallées latérales: les masses effectives longitudinales et transverses de fond de vallée sont remplacées par la masse de densité d'états, ce qui donne la même DOS que dans le cas anisotrope.
- en vallée centrale, les coefficients de non parabolicité de fond de vallée, qui normalement dépendent de l'orientation, sont fixés indépendamment de l'orientation de manière à restituer la DOS obtenue dans le cas anisotrope.

La figure III-17 présente les coefficients d'ionisation avec et sans prise en compte de l'anisotropie de basse énergie.

Lorsque l'on considère que les vallées sont isotropes à basse énergie, on observe une diminution du coefficient d'ionisation par choc, variant de 20 % à 50 %.

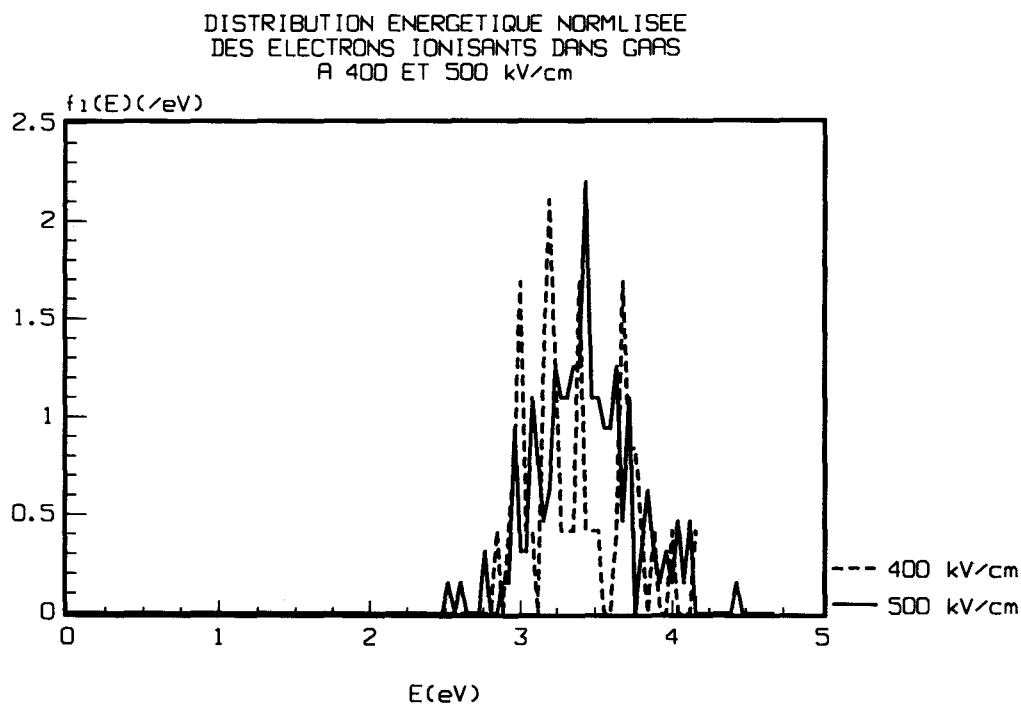


Figure III-15. Distribution énergétique des électrons ionisants normalisée à un dans GaAs, à 400 kV/cm (tirets) et 500 kV/cm (trait plein).

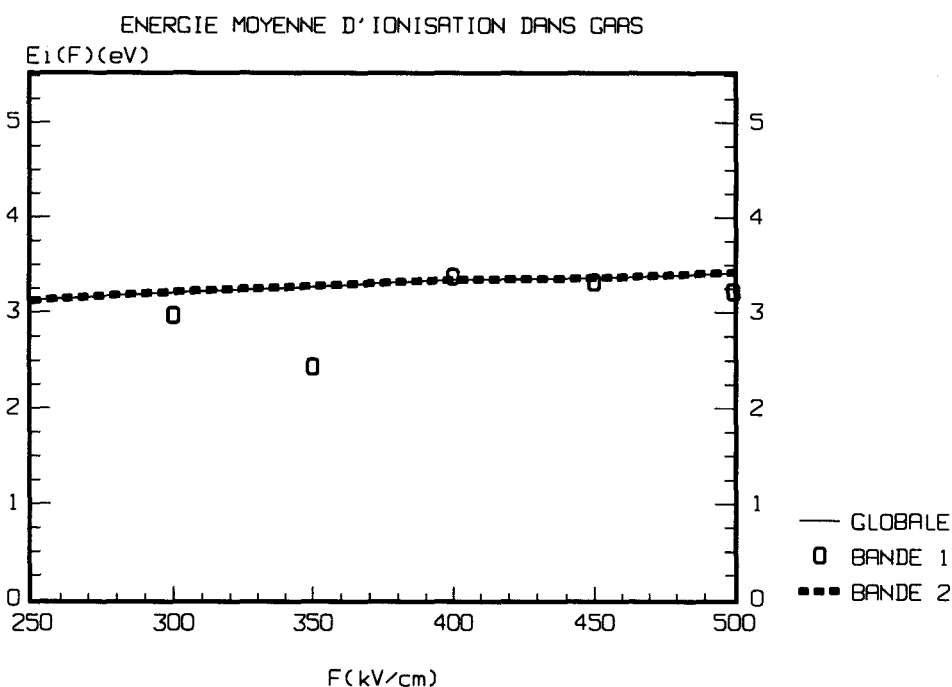


Figure III-16. Energie moyenne des électrons participant à l'ionisation par choc dans GaAs, globalement (trait plein), dans la seconde bande (tirets), dans la première bande (carrés). La dispersion de l'énergie moyenne en première bande est due au faible nombre d'électrons ionisants dans cette bande.

III-I.3.5.2) COEFFICIENT D'IONISATION PAR CHOC AVEC ET SANS PRISE EN COMPTE DE L'ANISOTROPIE DE HAUTE ÉNERGIE EN VALLÉE LATÉRALES DANS GaAs.

Rappelons que dans la structure de bande (SDB) réelle l'anisotropie de haute énergie correspond à la localisation des maxima de bande W associés aux vallées latérales L ou X. Après action du champ, un électron, dont l'orientation du vecteur d'onde est situé hors du domaine angulaire accessible associé à son énergie initiale, ne pourra pas atteindre des énergies aussi élevées qu'à l'intérieur du domaine. Au contraire, la non prise en compte de l'anisotropie de haute énergie implique que dans une direction quelconque, toutes les énergies sont accessibles (approximation utilisée par R.Brunetti & C.Jacoboni [BRU89] pour le Silicium).

Mise à part cette anisotropie, les deux simulations étant réalisées toutes choses égales par ailleurs, densité d'états comprise, la comparaison des coefficients d'ionisation par choc, va permettre de mettre en évidence l'influence de la non prise en compte de la localisation des points W sur l'ionisation.

La figure III-18 présente le coefficient d'ionisation par choc avec et sans prise en compte de l'anisotropie de haute énergie. On constate que la non prise en compte de l'anisotropie de haute énergie entraîne une valeur nettement plus forte du coefficient d'ionisation par choc. Pour les champs ionisants de 250 kV/cm à 500 kV/cm, le coefficient d'ionisation par choc est ainsi 4 à 5 fois plus fort sans prise en compte de l'anisotropie de haute énergie. L'anisotropie de haute énergie liée à la localisation des points W, a donc une influence très importante sur le coefficient d'ionisation par choc.

Comme nous l'avons vu au cours des paragraphes précédents, l'ionisation par choc est causée par des électrons très énergétiques. A haute énergie, la non prise en compte de l'anisotropie associée à la localisation des points W, se manifeste sur le coefficient d'ionisation par choc, car elle offre à des électrons déjà assez énergétiques, la possibilité d'atteindre des énergies encore plus élevées à la suite de la réorientation du vecteur d'onde sous l'action du champ appliqué. Cette surestimation de l'énergie des électrons provoque une surestimation de l'ionisation par choc.

EFFET DE L'HYPOTHESE DE VALLEES ISO-
TROPES A BASSE ENERGIE
SUR LE COEFFICIENT D'IONISATION PAR CHOC
DANS GAZS

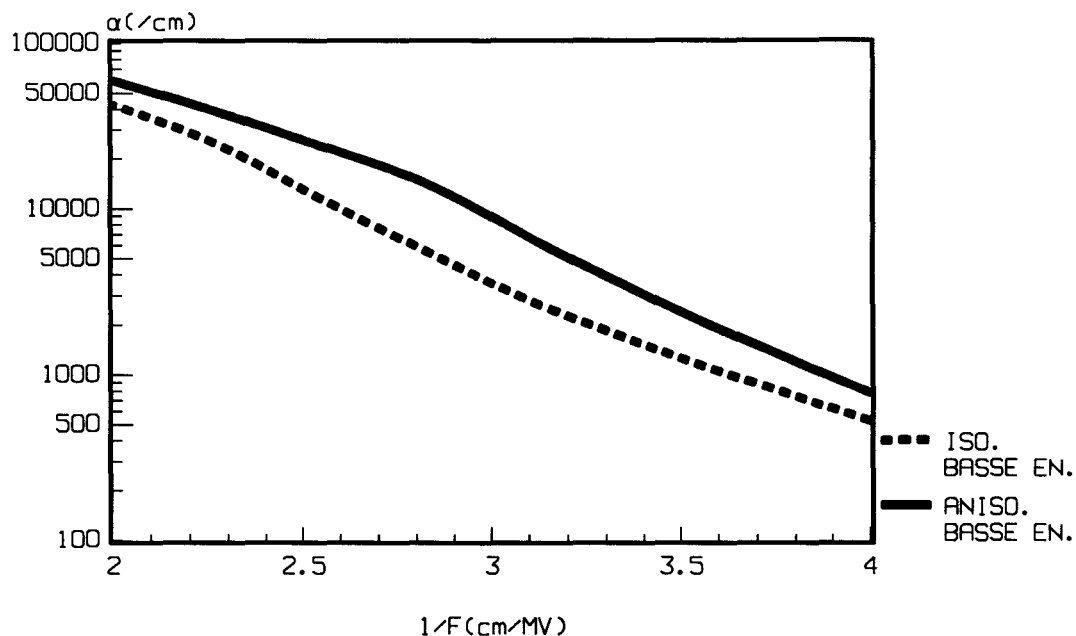


Figure III-17. Coefficient d'ionisation avec (trait plein) ou sans (tirets) prise en compte de l'anisotropie de basse énergie.

COEFFICIENT D'IONISATION PAR CHOC
AVEC ET SANS PRISE EN COMPTE DE
L'ANISOTROPIE DE HAUTE ENERGIE DANS GAZS

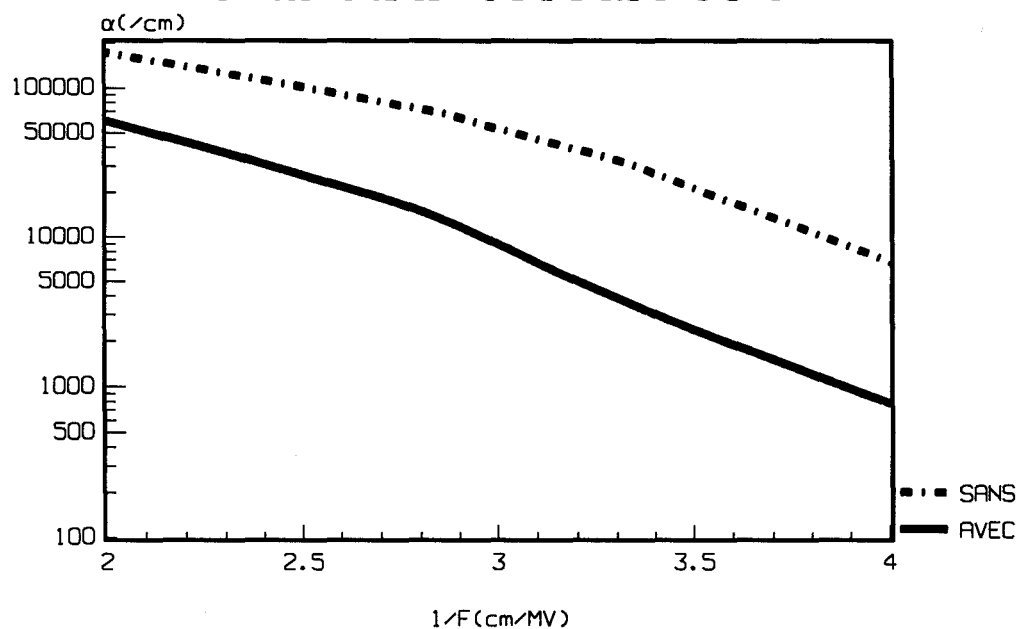


Figure III-18. Coefficient d'ionisation par choc avec (trait plein) et sans (traits mixtes) prise en compte de l'anisotropie de haute énergie liée à la localisation des points W.

III-I.4)VITESSE DE DÉRIVE STATIONNAIRE DANS GaAs.

III-I.4.1) VITESSE DE DÉRIVE STATIONNAIRE AVEC ET SANS PRISE EN COMPTE DE L'IONISATION PAR CHOC DANS GaAs.

La figure III-19 présente la vitesse de dérive avec et sans ionisation par choc.

Les deux caractéristiques sont confondues jusqu'à environ 300 kV/cm, à 0.7×10^7 cm / s où elle est minimale en l'absence d'ionisation. A partir de ce champ la caractéristique obtenue sans prise en compte de l'ionisation par choc continue sa décroissance, avec une vitesse de 0.6×10^7 cm / s pour 500 kV/cm, tandis que lorsque l'ionisation par choc est prise en compte, la vitesse de dérive augmente lentement à 0.8×10^7 cm / s pour ce même champ.

L'augmentation de la vitesse de dérive à partir de 300 kV/cm, coïncide avec l'apparition d'une valeur significative du coefficient d'ionisation par choc. On peut l'expliquer de la manière suivante: à champ fort, les électrons peuplent les états de haute énergie où la courbure de bande leur confère une faible vitesse de groupe. Lorsqu'un événement ionisant se produit l'électron perd une énergie supérieure à l'énergie de bande interdite ce qui l'amène à un état énergétique où le rayon de courbure de bande est moins accentué, ce qui augmente sa vitesse de groupe. La vitesse de dérive stationnaire s'en trouve augmentée, mais modérément étant donnée la faible proportion d'électrons impliqués dans l'ionisation par choc.

III-I.4.2)CONTRIBUTION DES VALLÉES À LA VITESSE DE DÉRIVE DANS GaAs.

La figure III-20 représente la vitesse de dérive en régime stationnaire dans GaAs (trait plein), obtenue à l'aide de la simulation Monte-Carlo, les autres courbes représentant les contributions des différentes vallées à cette vitesse.

Jusqu'à la vitesse pic vers 4 kV/cm, les électrons étant situés à basse énergie, seule la vallée centrale contribue à la vitesse de dérive.

Les vallées L1, vallées latérales de plus basse énergie, commencent à contribuer à la vitesse de dérive vers 4 kV/cm en provoquant la décroissance de la vitesse stationnaire globale.

Cet effet s'explique par la forte variation de masse effective des électrons qui transfèrent en vallées L1. Cette forte variation de masse effective s'accompagne d'une forte variation de la vitesse de groupe. En effet, en fond de vallées latérales où les électrons transfèrent la vitesse de groupe est très faible car le rayon de courbure est plus important.

Les vallées L1 apportent leur contribution maximale vers 50 kV/cm. A ce champ ces vallées contribuent aux deux-tiers de la vitesse totale.

Les vallées L1 apportent leur contribution maximale vers 50 kV/cm. A ce champ ces vallées contribuent aux deux-tiers de la vitesse totale.

Les vallées supérieures suivantes sont les vallées X1, qui commencent à contribuer à la vitesse de dérive à partir de 50 kV/cm. La contribution maximale est atteinte vers 300 kV/cm, mais elle est deux fois plus faible qu'en vallées L1.

La figure III-20 montre, une corrélation entre la contribution des vallées latérales et la réduction de la vitesse de dérive.

A partir de 300 kV/cm, on observe une décroissance peu marquée de la vitesse stationnaire due au peuplement des vallées latérales L1 et X1.

Les vallées contributives suivantes sont les vallées X3, de la seconde bande de conduction.

Leur contribution commence vers 300 kV/cm. Elle est égale à celle des vallées L1 vers 400kV/cm, puis devient supérieure pour des champs supérieurs.

L'augmentation de la vitesse à partir de 300 kV/cm semble à première vue, due aux électrons des vallées X3. Dans ce cas, cela proviendrait, à l'énergie de transfert, de la plus faible masse effective en vallées X3, que dans les autres vallées latérales.

L'absence d'augmentation de la vitesse de dérive sans prise en compte de l'ionisation par choc mais en tenant compte également de la seconde bande de conduction , d'après la figure III-19, montre que la prise en compte de cette bande ne suffit pas à expliquer l'augmentation de la vitesse de dérive. Cette augmentation est donc due à l'effet conjugué de l'ionisation par choc et du peuplement du fond de la seconde bande dans laquelle la contribution à la vitesse de dérive en fonction du champ est la plus forte à 500 kV/cm, bien que cette bande soit la moins peuplée même à ce champ.

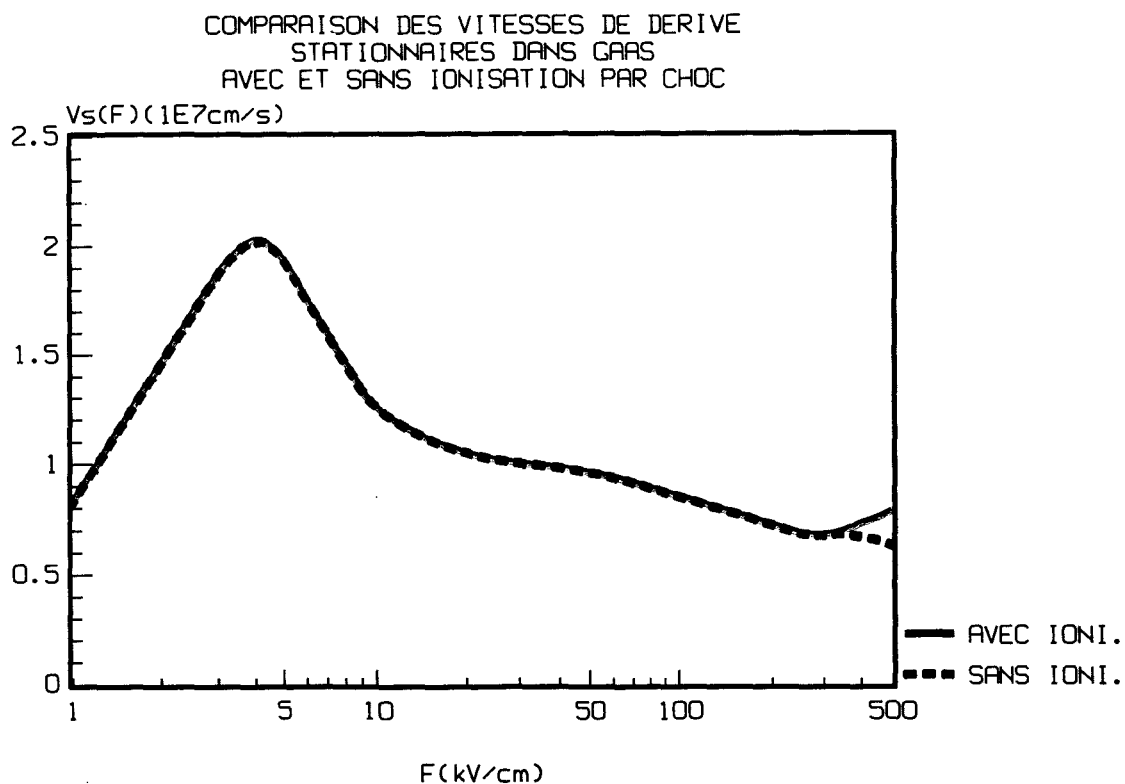


Figure III-19. Caractéristique de vitesse de dérive stationnaire dans GaAs avec (trait plein) et sans (tirets) prise en compte de l'ionisation par choc.

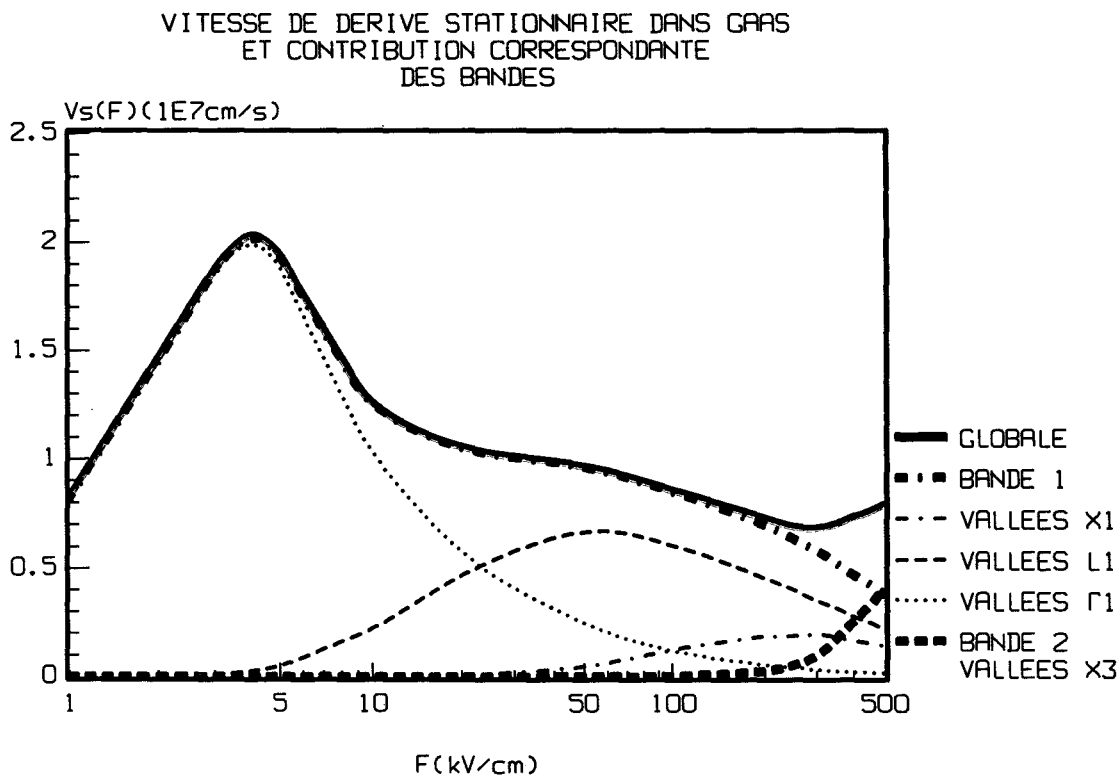


Figure III-20. Vitesse de dérive stationnaire dans GaAs (trait plein). Les autres courbes représentent les contributions des différentes vallées à la vitesse de dérive. Les traits gras mixtes regroupent les vallées de la première bande (vallées Γ 1, L1, X1), et les tirets gras celles de la seconde bande (vallées X3).

III-I.4.3)COMPARAISON AVEC L'EXPÉRIENCE DANS GaAs.

La figure III-21 présente la vitesse de dérive stationnaire dans GaAs expérimentale et simulée. La simulation est réalisée à l'aide de la méthode de Monte-Carlo utilisant le modèle des vallées étendues, appliqué aux deux premières bandes de conduction. La caractéristique expérimentale est due à J.G.Ruch & G.S.Kino [RUC68], jusqu'à 100 kV/cm, et à T.H.Windhorn & al. [WIN82], de 100 kV/cm à 240 kV/cm.

Pour les champs électriques ne dépassant pas 20 kV/cm, la vitesse simulée est légèrement supérieure à la vitesse expérimentale, sauf au voisinage du champ de 4 kV/cm correspondant à la vitesse pic, pour lequel la vitesse de dérive simulée est légèrement inférieure à la vitesse expérimentale.

Entre 20 kV/cm, et 50 kV/cm, la vitesse simulée décroît plus faiblement que la vitesse expérimentale. Par contre, entre 50 kV/cm et 200 kV/cm, la vitesse simulée est assez nettement décroissante, tandis que la vitesse expérimentale l'est plus faiblement. Les deux caractéristiques de vitesse se croisent vers 200 kV/cm.

Entre 200 kV/cm et 500 kV/cm, la vitesse de dérive simulée s'accroît sensiblement. L'absence de valeurs expérimentales au delà de 240 kV/cm, ne permet pas vérifier cet accroissement théorique.

III-I.4.4)COMPARAISON AVEC UNE SIMULATION NE PRENANT EN COMPTE QUE LA PREMIÈRE BANDE DE CONDUCTION DANS GaAs.

La figure III-22 présente la vitesse de dérive dans GaAs, simulée en considérant les deux premières bandes de conduction du modèle des vallées étendues, et simulée par H.Shichijo & K.Hess [SHI81], en ne considérant que la première bande de conduction.

Les deux caractéristiques de vitesse présentent des allures assez voisines, la simulation bi-bande donnant une vitesse de dérive légèrement plus forte que la simulation mono-bande de H.Shichijo & K.Hess.

Jusqu'à 10 kV/cm, la vitesse obtenue dans la simulation bi-bande est plus forte d'environ 0.1×10^7 cm / s. L'écart entre les deux caractéristiques de vitesse s'accroît, jusqu'à 50 kV/cm, pour atteindre à ce champ, un maximum de 0.3×10^7 cm / s.

Entre 50 kV/cm et 300 kV/cm, les deux caractéristiques se rapprochent pour quasiment se rejoindre vers 300 kV/cm.

Pour les champs ionisants de 300 kV/cm à 500 kV/cm, contrairement à la vitesse obtenue avec la simulation bi-bande, la caractéristique de vitesse obtenue avec la simulation de H.Shichijo & K.Hess, ne fait pas apparaître une augmentation de la vitesse de dérive, mais au contraire une diminution de cette vitesse.

Pour les champs ionisants de 300 kV/cm à 500 kV/cm, contrairement à la vitesse obtenue avec la simulation bi-bandes, la caractéristique de vitesse obtenue avec la simulation de H.Shichijo & K.Hess, ne fait pas apparaître une augmentation de la vitesse de dérive, mais au contraire une diminution de cette vitesse.

L'examen de la contribution de la seconde bande de conduction à la vitesse de dérive ayant mis en évidence le rôle essentiel de cette bande sur l'augmentation de la vitesse stationnaire, la décroissance de la vitesse observée par H.Shichijo & K.Hess, est due à la non prise en compte de la seconde bande. En effet, à haute énergie, lorsque le transport est limité à la première bande, à mesure que l'énergie des électrons augmente sous l'action du champ, le rayon de courbure de la bande augmente également, ce qui diminue la vitesse des électrons.

En conclusion, il y a un meilleur accord de la vitesse simulée en prenant en compte la seconde bande de conduction, avec la caractéristique expérimentale, qu'avec la simulation ne prenant en compte que la première bande. Toutefois, pour les champs ionisants d'au moins 300kV/cm, l'absence de résultats expérimentaux ne permet pas de vérifier l'accroissement théorique de la vitesse de dérive obtenue avec le modèle bi-bandes.

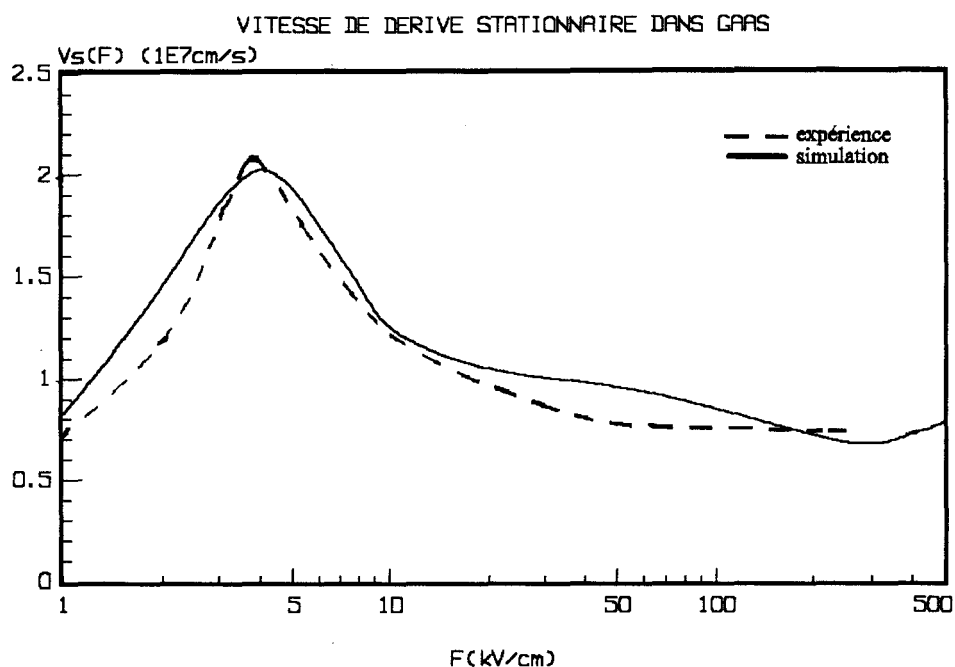


Figure III-21. Vitesse de dérive stationnaire dans GaAs obtenue à l'aide de la simulation Monte-Carlo bi-bande des vallées étendues (trait plein), en comparaison avec l'expérience (tirets) de J.G.Ruch & G.S.Kino [RUC68] pour les champs allant jusqu'à 100 kV/cm, et de T.H.Windhorn & al. [WIN82] pour les champs de 100 kV/cm à 240 kV/cm.

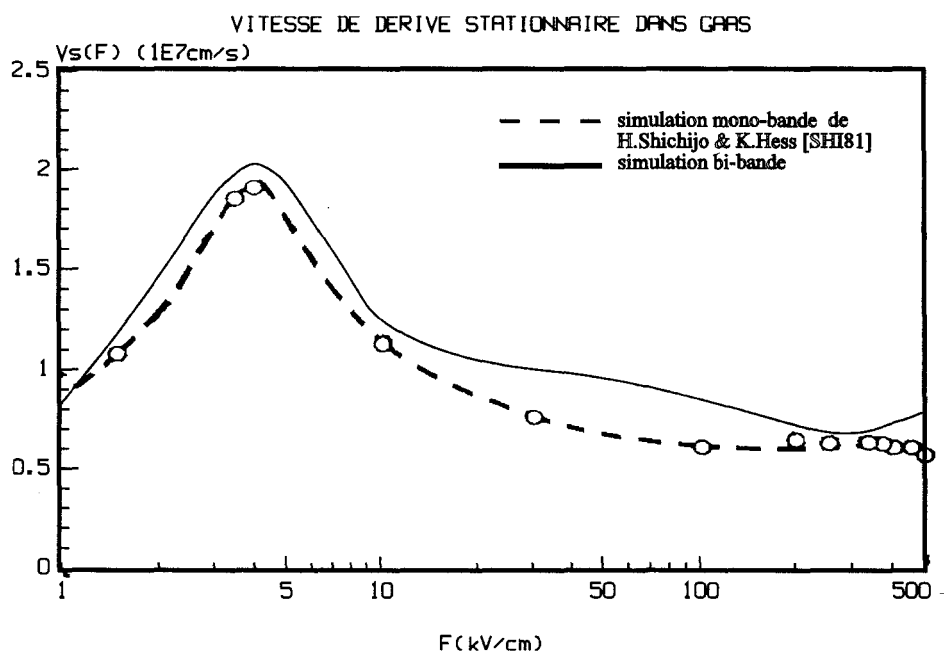


Figure III-22. Vitesse de dérive stationnaire dans GaAs, obtenue avec la simulation Monte-Carlo bi-bandes (trait plein), et à l'aide d'une simulation mono-bande de H.Shichijo & K.Hess [SHI81] (tirets).

III-I.5)LIBRE PARCOURS MOYEN DANS GaAs.

Le temps et la distance de libre parcours moyen, mesurent le nombre moyen d'interactions subies par un électron respectivement par unité de temps et de longueur qu'il parcourt dans l'espace réel.

La figure III-23 présente la distance de libre parcours moyen de la simulation comparée à une simulation Monte-Carlo de H.Shichijo & K.Hess [SHI81] utilisant une structure de bande réelle mais limitée à la première bande de conduction.

La distance de libre parcours moyen fournie par ces auteurs a été calculée pour des champs allant de 300 kV/cm à 500 kV/cm.

La figure III-24 présente la distance et le temps de libre parcours moyen sur une même figure.

III-I.5.1)DISTANCE DE LIBRE PARCOURS MOYEN DANS GaAs.

Jusqu'à la vitesse maximale à 4 kV/cm, le gain en énergie fourni par le champ, accroît la vitesse des électrons en vallée centrale, sans augmenter notablement les probabilités d'interaction, ce qui augmente la distance de libre parcours moyen.

A 4 kV/cm la distance de libre parcours moyen est à son maximum. Elle décroît ensuite régulièrement jusqu'à 300 kV/cm, puis elle remonte légèrement jusqu'à 500kV/cm.

On peut expliquer la diminution du libre parcours moyen jusqu'à 300 kV/cm par les interactions sur phonons: plus le champ augmente plus les électrons subissent d'interactions sur phonons et plus la distance de libre parcours moyen diminue.

La comparaison des distances de libre parcours moyen, avec et sans la prise en compte de la seconde bande à l'aide de la simulation mono-bande de H.Shichijo & K.Hess [SHI81], montre que les deux caractéristiques sont assez proches, avec toutefois un changement qualitatif à partir de 300kV/cm: leur distance de libre parcours moyen diminue, tandis que celle de la simulation augmente.

Nous pouvons attribuer l'augmentation de la distance de libre parcours moyen à partir de 300kV/cm à l'apparition d'un transport significatif en seconde bande de conduction. Comme au voisinage des points X3, la relation de dispersion est quasi-parabolique il y a moins d'interactions à cause d'une assez faible densité d'états (DOS). Les électrons qui s'y trouvent contribuent donc à augmenter la distance de libre parcours moyen.

III-I.5.2)TEMPS DE LIBRE PARCOURS MOYEN DANS GaAs.

Le temps de libre parcours moyen, quasi-constant jusqu'à environ 4 kV/cm à cause de la quasi constance de la probabilité totale d'interaction, possède une valeur pic d'environ 60 fs. Il diminue avec le champ jusqu'à 500 kV/cm.

La forte augmentation des collisions électrons-phonons explique ce comportement identique du temps de libre parcours moyen à celui de la distance de libre parcours moyen jusqu'à 300kV/cm.

A la différence de la distance de libre parcours moyen, le temps de libre parcours moyen ne réaugmente pas à partir de 300 kV/cm, mais diminue légèrement jusqu'à 500 kV/cm.

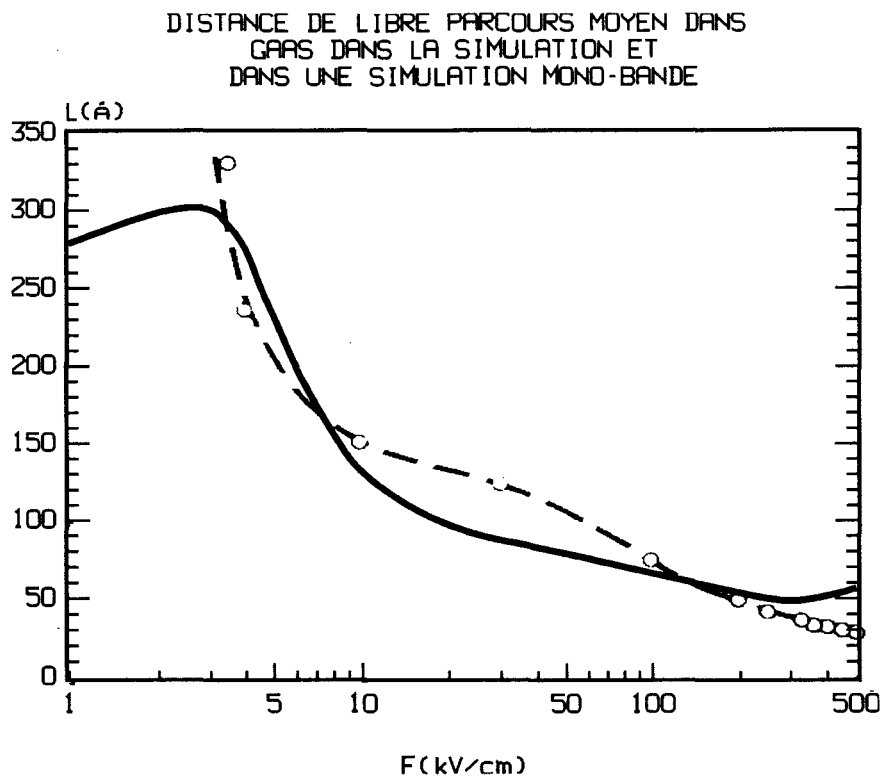


Figure III-23. Distance de libre parcours moyen dans la simulation (trait plein), et dans une simulation mono-bande réelle calculée par H.Shichijo & K.Hess [SHI81] (tirets).

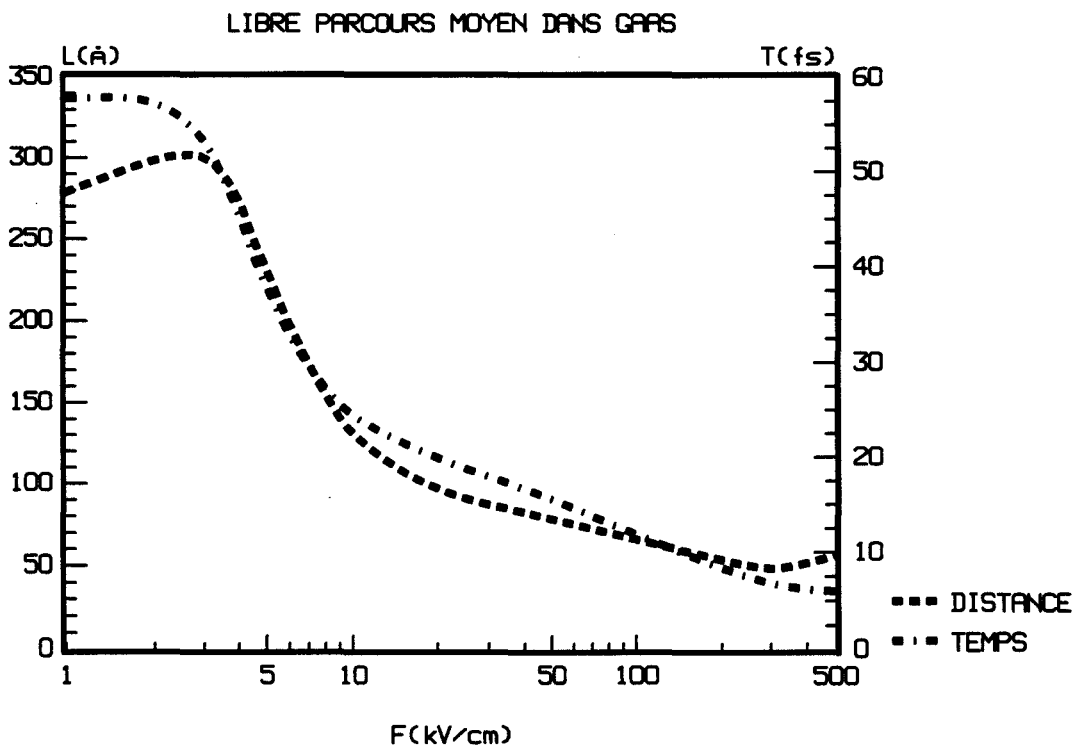


Figure III-24. Distance (tirets) et temps (traits mixtes) de libre parcours moyen simulés par la méthode de Monte-Carlo, dans GaAs, avec le modèle bi-bandes des vallées étendues.

III-I.6) CONCLUSION. VALIDATION DU MODÈLE DE STRUCTURE DE BANDE DES VALLÉES ÉTENDUES.

La simulation Monte-Carlo dans l'Arséniure de Gallium, utilisant le modèle de structure de bande des vallées étendues, prenant en compte les deux premières bandes de conduction, a permis de vérifier la validité de ce modèle, pour les raisons suivantes:

- 1)- le modèle des vallées étendues est proche de la réalité en fond de vallée, et son extension à haute énergie, fournit une densité d'états réaliste grâce à une assez bonne prise en compte de la localisation des maxima de bande W.
- 2)- les probabilités calculées à l'aide de ce modèle de bande sont proches de celles de la simulation de J.Bude & K.Hess [BUS92] utilisant la structure de bande réelle.
- 3)- la distribution énergétique de J.Bude & K.Hess [BUD92] est retrouvée pour des champs forts et ionisants de 200 kV/cm, 300 kV/cm, 400 kV/cm, et 500 kV/cm.
- 4)- la vitesse de dérive stationnaire est retrouvée sur toute la gamme de champ expérimentale disponible.
- 5)- la caractéristique de coefficient d'ionisation par choc est voisine de l'expérience de G.Bulman & al. [BUL83], ainsi que de la simulation de J.Bude & K.Hess [BUD92].

Le coefficient d'ionisation par choc étant fortement corrélé avec la distribution énergétique, la vérification des points 3) et 5) est équivalente.

Le modèle de structure de bande des vallées étendues peut donc être appliqué à d'autres matériaux III-V, comme InP.

III-II)ÉTUDE DU TRANSPORT ÉLECTRONIQUE DANS InP.

III-II.1)DISTRIBUTION DES PORTEURS ET POPULATION ÉLECTRONIQUE MOYENNE EN VALLÉES DANS InP.

III-II.1.1)DISTRIBUTION ÉNERGÉTIQUE À BAS CHAMPS.

La figure III-25 présente la distribution énergétique bas champ à 2 kV/cm et à 12 kV/cm. La caractéristique de la distribution énergétique à 2 kV/cm est de type Maxwell-Boltzmann, avec une décroissance exponentielle, à énergie élevée. A 12 kV/cm la distribution n'est plus du type Maxwell-Boltzmann. Elle est déformée à cause du transfert des électrons en vallées latérales L1.

La figure III-26 présente nettement l'étalement de la distribution énergétique du côté des hautes énergies lorsque le champ appliqué passe de 10 kV/cm à 100 kV/cm, champs intermédiaires entre les bas champs et les champs ionisants. La largeur de la distribution mesurée à 0.001/eV passe ainsi d'environ 0.6 eV pour 10 kV/cm, à 1.1eV pour 100 kV/cm. Lorsque le champ augmente, l'écrasement de la distribution, du côté des basses énergies, traduit le dépeuplement de la vallée centrale Γ_1 au profit des vallées latérales L1. Entre 10 kV/cm et 20 kV/cm, la distribution a un étalement plus important qu'entre 20 kV/cm et 100kV/cm, à cause du plus important transfert de la vallée centrale aux vallées latérales.

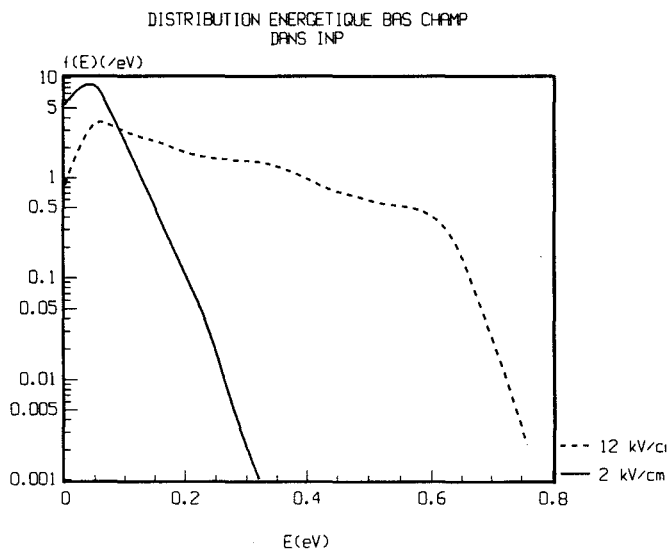


Figure III-25. Distribution énergétique dans InP à 2kV/cm (trait plein), et à 12 kV/cm (tirets).

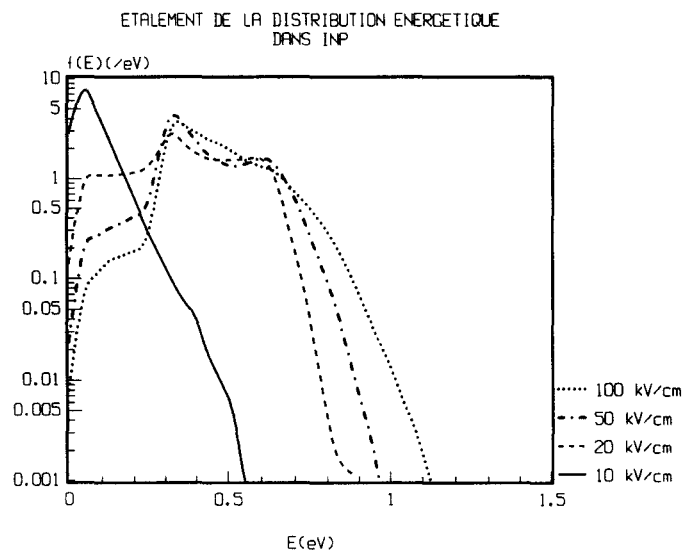


Figure III-26. Étalement de la distribution énergétique avec le champ. Distribution à 10 kV/cm en trait plein, 20kV/cm en tirets, 50kV/cm en traits mixtes et 100kV/cm en pointillés.

III-II.1.2)DISTRIBUTION ÉNERGÉTIQUE EN CHAMPS FORTS.

Dans un premier temps nous allons examiner l'influence de l'ionisation par choc sur la distribution énergétique en champs forts de 200 kV/cm et 500 kV/cm.

Nous allons ensuite présenter les distributions énergétiques pour quatre champs forts de 200kV/cm, 300 kV/cm, 400 kV/cm et 500 kV/cm.

III-II.1.2.1)DISTRIBUTION AVEC ET SANS IONISATION PAR CHOC À 200 kV/cm ET 500kV/cm DANS InP.

La figure III-27, présente la distribution énergétique avec et sans prise en compte de l'ionisation par choc pour des champs électriques de 200 kV/cm et 500 kV/cm.

A 200 kV/cm, l'absence ou la quasi absence d'évènements ionisants se traduit par l'identité des deux caractéristiques.

A 500 kV/cm, on constate que la prise en compte de l'ionisation par choc se traduit par une diminution de l'énergie maximale accessible dans InP.

III-II.1.2.2)DISTRIBUTIONS ÉNERGÉTIQUES EN CHAMPS FORTS DE 200 kV/cm, 300kV/cm, 400 kV/cm, ET 500 kV/cm DANS InP.

La figure III-28 présente la distribution énergétique pour quatre champs forts ionisants ou quasi ionisants de 200 kV/cm, 300 kV/cm, 400 kV/cm, et 500 kV/cm.

A 200 kV/cm on remarque qu'au delà du maximum de la distribution énergétique, situé vers 0.5 eV, cette dernière présente une décroissance exponentielle.

A 300 kV/cm le peuplement de la seconde bande provoque un étalement de la distribution énergétique du côté des hautes énergies avec un écrasement aux basses énergies, à cause de la conservation du nombre total d'électrons.

A 400 kV/cm et à 500 kV/cm, la seconde bande étant de plus en plus peuplée, les effets observés à 300 kV/cm s'accroissent.

La discussion sur les résultats qualitatifs concernant l'allure des distributions est la même que pour l'Arséniure de Gallium.

COMPARAISON DE LA DISTRIBUTION
ENERGETIQUE AVEC ET SANS PRISE EN COMPTE
DE L'IONISATION PAR CHOC DANS INP

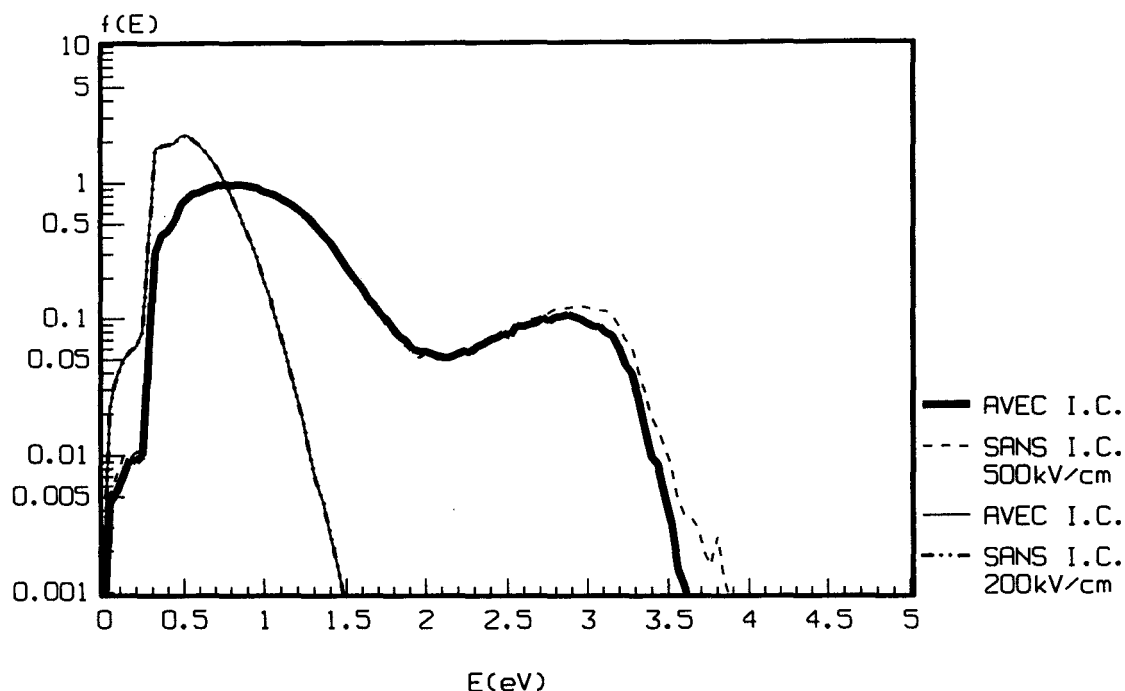


Figure III-27. Distribution énergétique avec et sans ionisation par choc (I.C.) dans InP, à 200kV/cm (avec I.C. en trait plein fin, et sans I.C. en traits mixtes fins confondus avec les précédents), et à 500 kV/cm (avec I.C. en trait plein gras., et sans I.C. en tirets).

DISTRIBUTION ENERGETIQUE NORMALISEE A UN
DANS INP POUR QUATRE CHAMPS FORTS

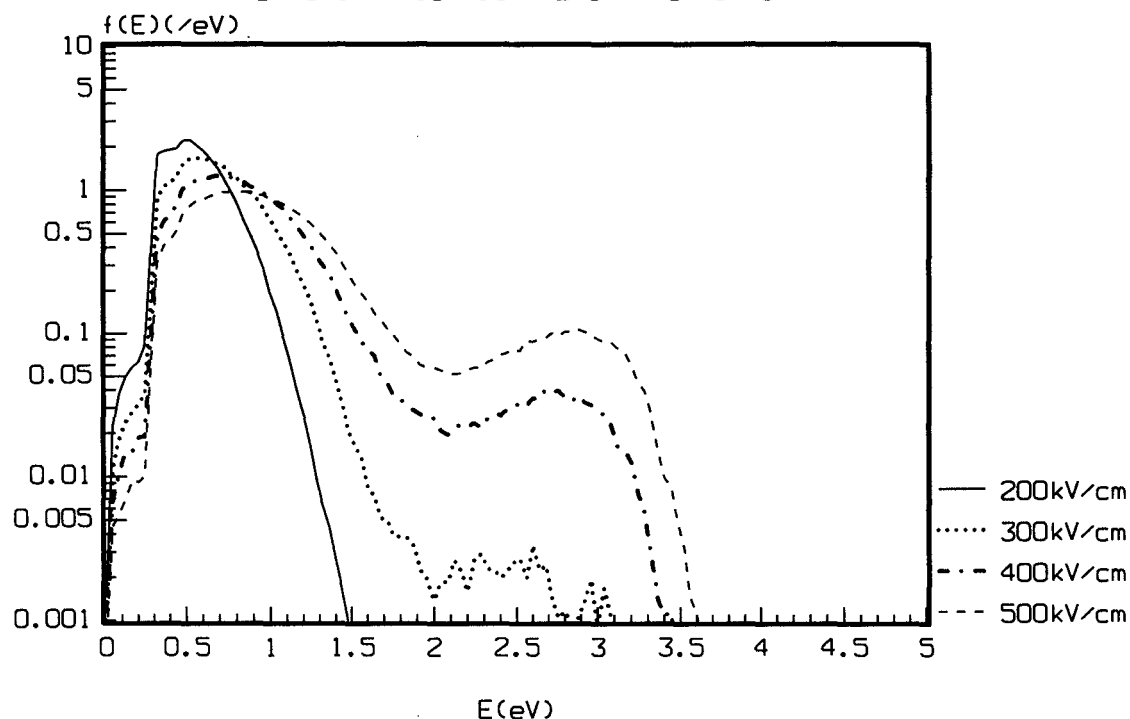


Figure III-28. Distribution énergétique dans InP pour quatre champs forts: 200kV/cm (trait plein), 300kV/cm (pointillés), 400kV/cm (traits mixtes), et 500kV/cm (tirets).

III-II.1.2.3)CONTRIBUTION DES VALLÉES À LA DISTRIBUTION ÉNERGÉTIQUE À 500kV/cm DANS InP.

La figure III-29 présente la contribution des vallées à la distribution énergétique à 500kV/cm dans InP.

La plus haute énergie atteinte en vallée centrale se situe vers 1.8 eV, dépassant légèrement le maximum de 1.7 eV accessible dans une direction Λ , mais inférieure aux maxima de 2.4 eV et 2.5eV accessibles respectivement dans les directions Δ et Σ .

En première bande de conduction, la vallée centrale Γ_1 est nettement moins peuplée que les vallées latérales à partir de 0.6 eV, à cause de la forte densité d'états locale qui règne dans ces vallées. Les vallées L1 demeurent davantage peuplées que les vallées X1, à cause d'une plus forte densité d'états. Aux énergies les plus élevées, les deux sous-distributions se rejoignent car les masses effectives au voisinage des maxima sont les mêmes vues des points L et X.

Aux environs de 2 eV, il y a inversion de la population électronique entre les deux premières bandes de conduction au profit de la seconde bande. A 2.3 eV, cette dernière bande contient déjà 90% des électrons de cette énergie.

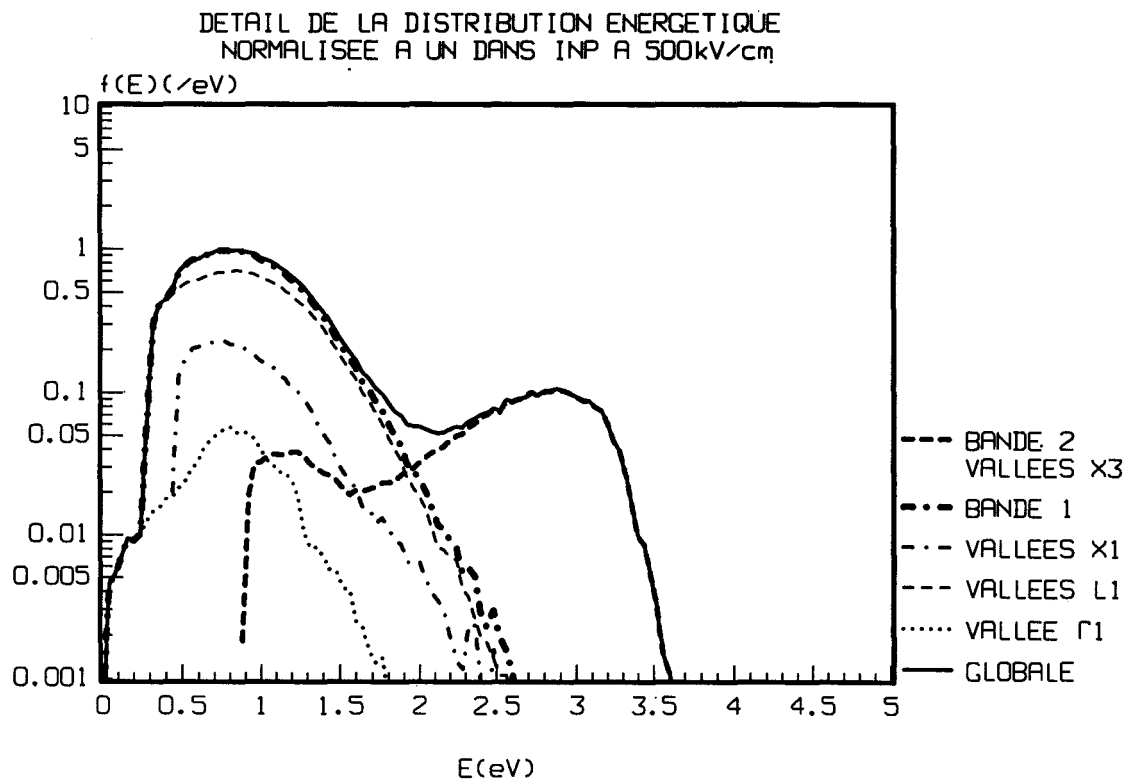


Figure III-29. Répartition entre vallées et bandes de la distribution énergétique dans InP à 500 kV/cm. La distribution globale (trait plein) comprend la sous-distribution en première bande (traits mixtes gras) (dont celle des vallées Γ_1 (pointillés), L1 (tirets fins), et X1 (traits mixtes fins)), et celle en seconde bande (vallées X3) (tirets gras).

III-II.1.2.4) RÉPARTITION DES ÉLECTRONS DANS LA SECONDE BANDE DANS InP.

La figure III-30 présente la répartition angulaire des électrons de la seconde bande de conduction dans une vallée X3 moyenne; la répartition des électrons de la deuxième bande de conduction est décomposée en trois sous-distributions correspondant chacune à un secteur angulaire de 30°, regroupant les états par rapport à la direction principale des vallées équivalentes X3.

La comparaison des sous-distributions montre que les électrons ont tendance à privilégier le secteur intermédiaire de 30° à 60°, et le secteur de 60° à 90°, perpendiculaire à la direction principale, à celui de 0° à 30° correspondant à la direction principale. La faible anisotropie de fond de vallée ne peut pas à elle seule expliquer un tel écart dans la distribution spatiale des électrons entre la direction principale et les directions transversales.

Il existe approximativement un facteur 2 entre la sous-distribution le long du secteur principal [0°;30°[et celle des deux autres secteurs. On peut l'expliquer par le fait que le moyennage concerne les 6 demi-vallées X3 équivalentes dont les 4 demi-vallées X3, perpendiculaires au champ $\langle 100 \rangle$ appliqué qui est parallèle aux 2 demi-vallées $\langle 100 \rangle$ et $\langle \bar{1}00 \rangle$. Les états sont moyennés par rapport à l'axe principal d'une vallée quelconque, donc les directions transverses sont à peu près 2 fois plus favorisées que les directions parallèles.

L'anisotropie de la structure de bande à hautes énergies, localisant les états de plus hautes énergies dans un plan transverse à l'axe principal, explique la troncature vers les hautes énergies de la distribution lorsqu'on s'éloigne de ce plan.

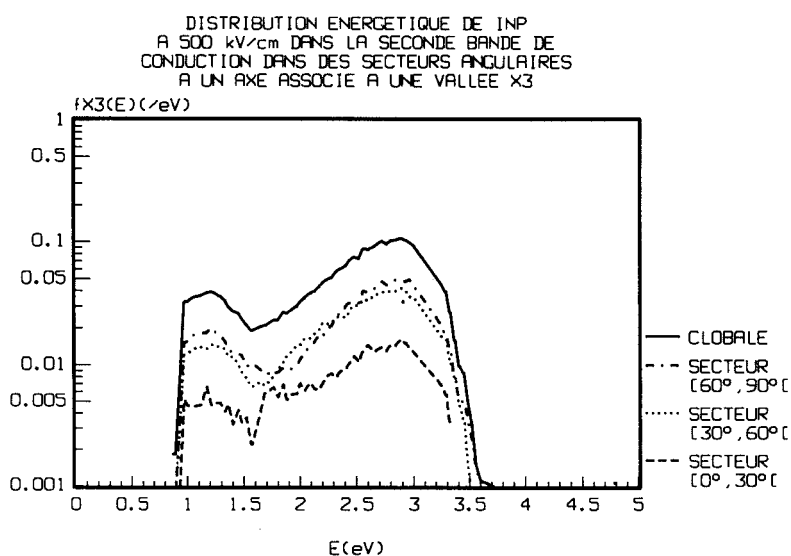


Figure III-II.30. Répartition angulaire de la distribution énergétique globale (trait plein) dans la seconde bande de conduction (vallées X3) de InP, à 500 kV/cm. L'orientation moyenne comptée par rapport à l'axe principale, est divisée en trois secteurs angulaire autour de l'axe principal: 0° à 30° (tirets), 30° à 60° (pointillés), et 60° à 90° (traits mixtes).

III-II.1.3) POPULATION ÉLECTRONIQUE MOYENNE EN VALLÉES DANS InP.

La figure III-31 représente la population électronique moyenne par vallée, ' N_b / N_t ' (N_t est le nombre total d'électrons et N_b le nombre d'électrons en vallées considérées), en fonction du champ, en vallées Γ_1 , L_1 , et X_1 , de la première bande, et en vallées X_3 de la seconde bande.

Pour des champs inférieurs à 12 kV/cm, seule la vallée centrale Γ_1 est peuplée par des électrons de basse énergie. A partir 12 kV/cm, l'augmentation du champ donc de l'énergie des électrons, permet à ceux-ci de transférer en vallées latérales L_1 de plus basses énergies (0.6 eV [FAU80]). La mobilité différentielle négative s'explique par le transfert en vallées L_1 de forte masse effective de fond de vallée.

Vers 50 kV/cm, les populations des vallées Γ_1 et L_1 s'inversent, et la décroissance de la population en vallée centrale se poursuit jusqu'aux champs les plus élevés. A 500 kV/cm, elle ne fournit plus qu'une contribution résiduelle d'environ 5 % du total. La population en vallées L_1 s'accroît jusqu'à un maximum d'environ 75 % du total des électrons, pour un champ d'environ 300 kV/cm, puis décroît jusqu'à 65 % de la population totale à 500 kV/cm.

Le peuplement des vallées latérales X_1 commence à partir d'environ 100 kV/cm. Vers 200 kV/cm, la population de ces vallées représente environ 10 % de la population globale, et c'est seulement vers 250 kV/cm, avec environ 10 % de la population totale, qu'elle égale celle de la vallée centrale. La population des vallées X_1 s'accroît lentement jusqu'à une valeur de saturation d'environ 15 % de la population globale à 300 kV/cm.

Jusqu'au champ de 300 kV/cm, les électrons peuplent quasi exclusivement la première bande.

Le peuplement de la seconde bande de conduction devient significatif avec environ 5 % des électrons entre 350 kV/cm et 400 kV/cm. A 500 kV/cm, la population électronique en seconde bande représente environ 10 % de la population totale. A ce champ, elle dépasse, en première bande, la population de la vallée centrale Γ_1 , mais pas celle des vallées X_1 , et encore moins celle des vallées L_1 .

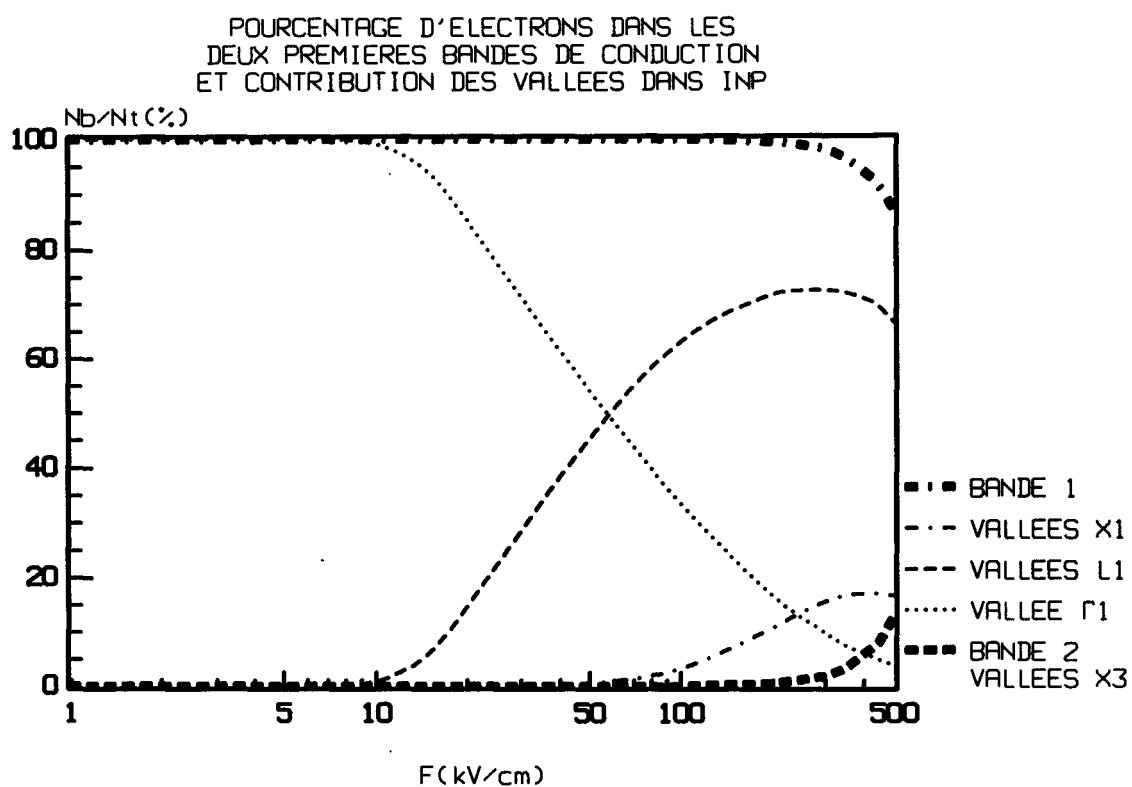


Figure III-31. Contribution à la population électronique moyenne dans InP, de la bande 1 (traits mixtes gras) (vallées Γ 1 (pointillés), L1 (tirets fins), X1 (traits mixtes fins)), et de la bande 2 (tirets gras) (vallées X3).

III-II.2) ÉNERGIE MOYENNE DANS InP.

Nous allons présenter l'énergie moyenne des électrons, puis la contribution des vallées à cette énergie moyenne.

III-II.2.1) ÉNERGIE MOYENNE.

La figure III-32, présente l'énergie moyenne dans InP, obtenue en prenant en compte une structure de bande réaliste incluant la seconde bande de conduction.

Dans deux domaines du champ appliqué, l'énergie moyenne présente un accroissement assez prononcé:

- gamme des champs variant d'environ 10 kV/cm à 20 kV/cm. Pour ces champs, l'énergie moyenne varie de 0.2 eV à 0.5 eV.
- gamme des champs variant de 300 kV/cm à 500 kV/cm. Pour ces champs, l'énergie moyenne varie de 1 eV à 1.4 eV.

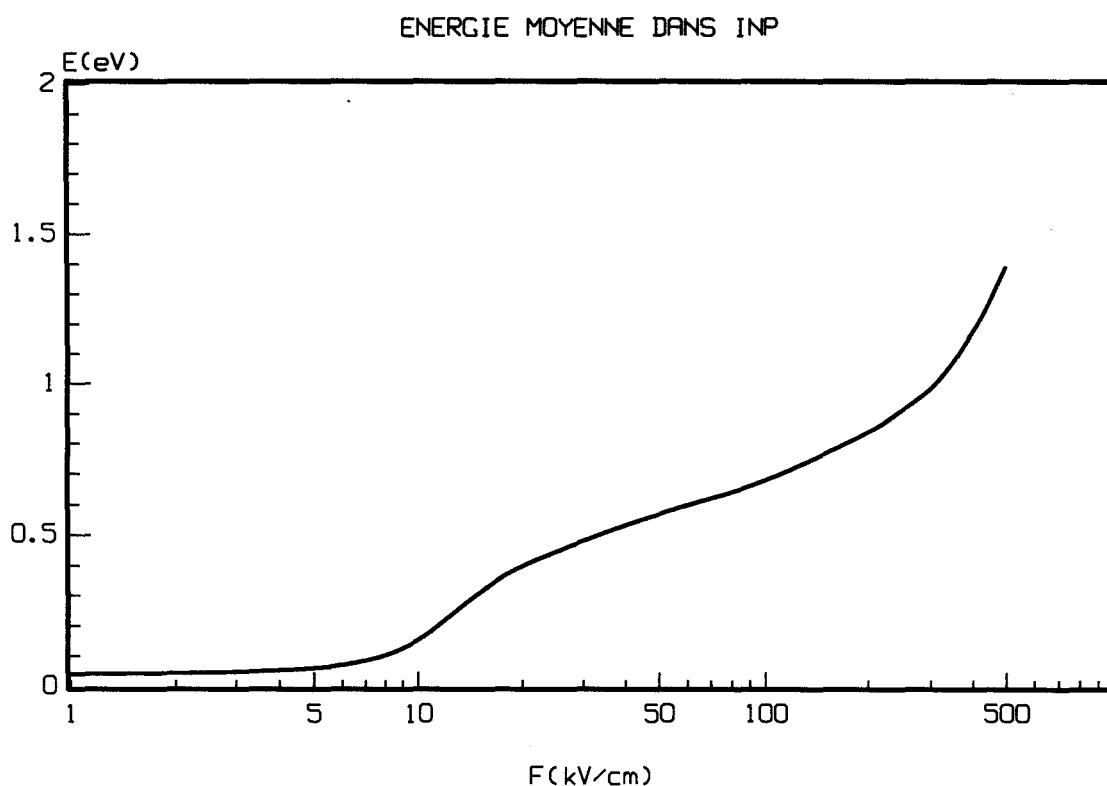


Figure III-32. Energie moyenne dans InP avec le modèle bi-bande des vallées étendues.

III-II.2.2) CONTRIBUTION DES VALLÉES À L'ÉNERGIE MOYENNE DANS InP.

La figure III-33 représente la contribution des différentes vallées à l'énergie moyenne. Cette contribution dépend de la courbure de bande et du peuplement de ces vallées. Plus la vallée s'écarte de la forme parabolique, et c'est le cas de toute vallée à mesure que l'énergie augmente à partir d'une énergie suffisamment élevée, plus l'accès aux hautes énergies sera difficile à cause de la diminution de la vitesse de groupe.

La vallée centrale contribue quasi exclusivement à l'énergie moyenne jusqu'à 12 kV/cm.

A partir de 12 kV/cm, interviennent les vallées latérales L1, dont la contribution égale celle de la vallée centrale vers 40 kV/cm. A partir de ce champ, la contribution de la vallée centrale va en décroissant, et celle des vallées latérales L1, augmente.

Les vallées X1 contribuent à l'énergie moyenne à partir de 100 kV/cm.

En champs forts au voisinage de 200 kV/cm, l'énergie moyenne vaut 0.8 eV. A ce champ, la contribution des vallées X1 est assez faible par rapport à celle des vallées L1. Mais même pour des champs supérieurs, la contribution des vallées X1 ne dépasse pas le tiers de la contribution des vallées L1.

La contribution de la seconde bande, représentée par des vallées X3, situées à environ 1 eV, est nulle jusqu'à 200 kV/cm. Elles commencent à se peupler entre 200 kV/cm et 300 kV/cm.

L'énergie moyenne en vallées X3 augmente assez fortement entre 300 kV/cm et 500 kV/cm, à cause de la forme parabolique des isoénergies au voisinage, même assez éloigné, d'un minimum X3.

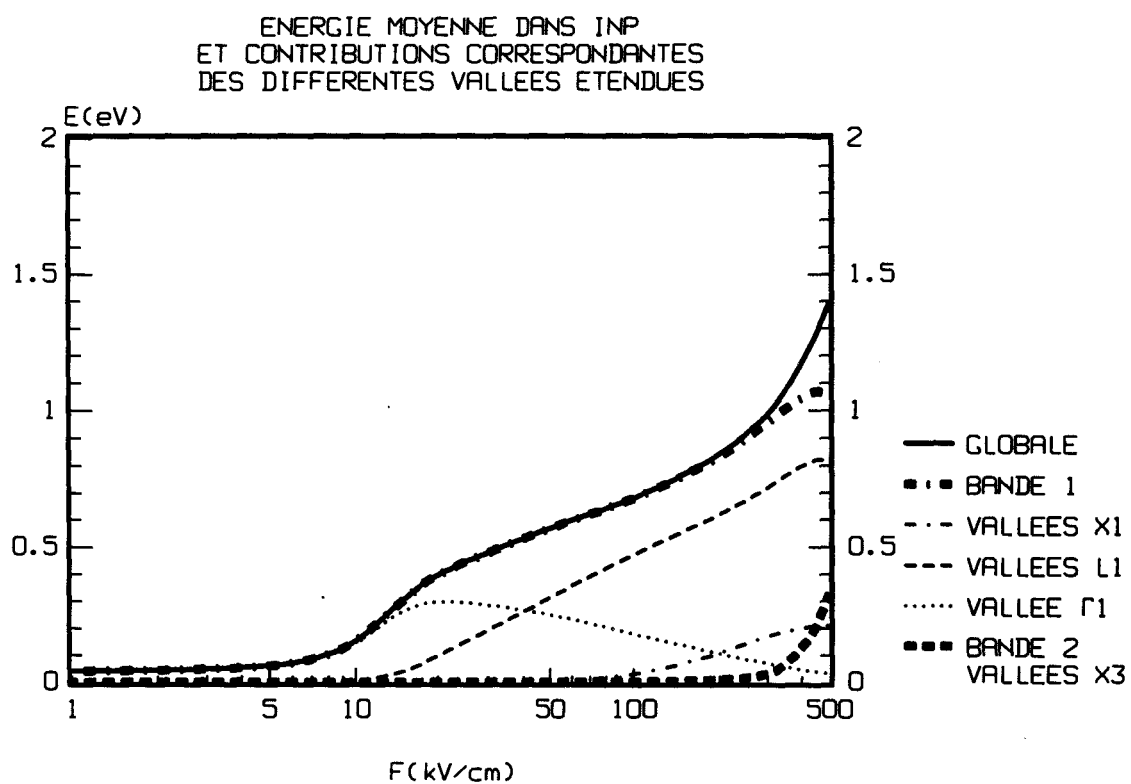


Figure III-33. Energie moyenne (trait plein) dans InP, et contribution de la bande 1 (traits mixtes gras) (vallées Γ_1 (pointillés), L1 (tirets fins), X1 (traits mixtes fins)), ainsi que de la bande 2 (tirets gras) (vallées X3).

III-II.3) IONISATION PAR CHOC DANS InP.

III-II.3.1) COEFFICIENT D'IONISATION PAR CHOC DANS InP.

Le coefficient d'ionisation par choc présenté à la figure III-34, est comparé au coefficient d'ionisation par choc expérimental de L.W.Cook & al. [COO82], puis au coefficient d'ionisation par choc obtenu à partir d'une simulation de K.Brennan & K.Hess [BRE83] utilisant la méthode de Monte-Carlo avec une structure de bande et des probabilités d'ionisation par choc et d'interaction sur phonons réelles mais limitées à la première bande.

Rappelons que la simulation Monte-Carlo effectuée utilise un modèle bi-bandes, avec une constante de couplage entre les deux premières bandes et un potentiel de déformation intra-seconde-bande ajustés au coefficient d'ionisation par choc de L.W.Cook & al. [COO82], à 250 kV/cm et à 500kV/cm.

Le coefficient d'ionisation par choc de notre simulation bi-bandes, est très proche du coefficient d'ionisation expérimental jusqu'à 350 kV/cm ($\frac{1}{F} = 2.9$ cm/MV), et à partir de 450 kV/cm ($\frac{1}{F} = 2.2$ cm/MV). Entre ces deux champs, le coefficient d'ionisation par choc présente un petit écart avec les résultats expérimentaux. On peut remarquer qu'à 500 kV/cm ($\frac{1}{F} = 2$ cm/MV) où la statistique est la meilleure, le coefficient d'ionisation par choc vaut entre 10000/cm et 15000/cm.

Le coefficient d'ionisation par choc de la simulation bi-bande présente un décalage d'environ 50 % avec celui calculé par la simulation mono-bande de K.Brennan & K.Hess, pour la plupart des champs, sauf pour les champs de 350 kV/cm à 450 kV/cm, pour lesquels, les deux caractéristiques coïncident.

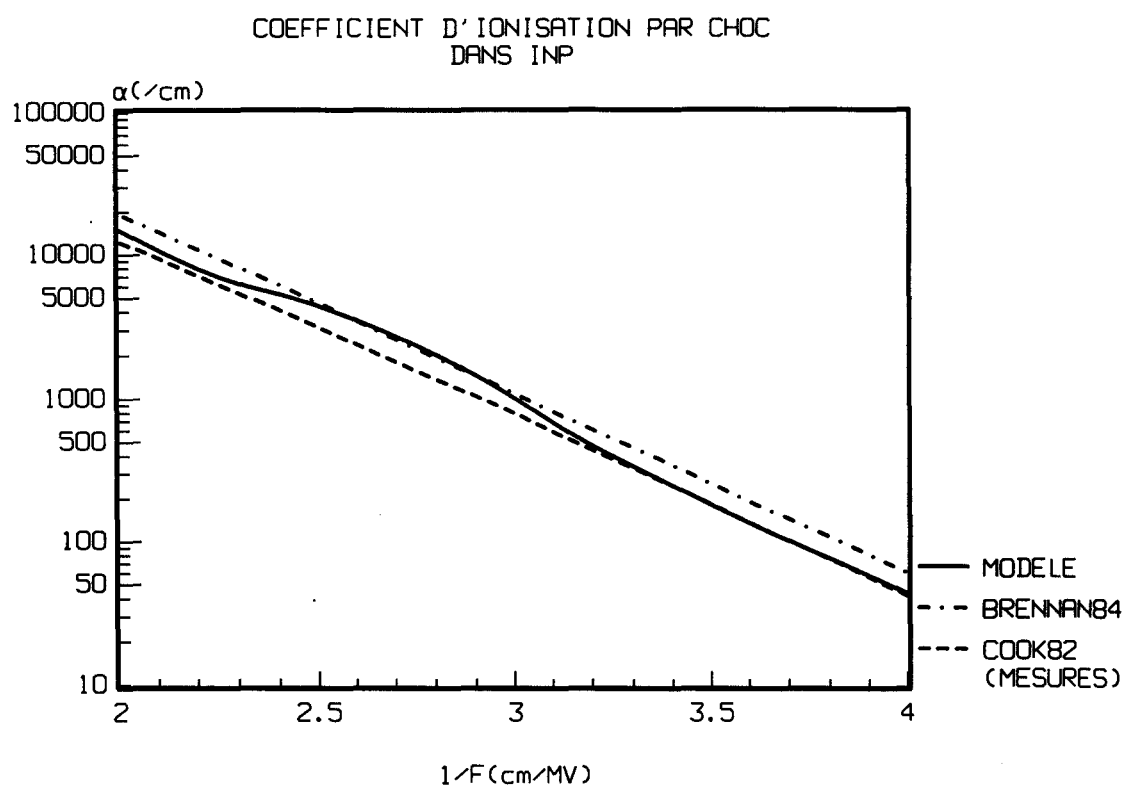


Figure III-34. Coefficient d'ionisation dans InP, simulé (simulation du modèle en trait plein, et simulation de K.Brennan & K.Hess [BRE84] en traits mixtes), et expérimental (par L.W.Cook & al. [COO82] en tirets).

III-II.3.2)FRÉQUENCE DE L'IONISATION PAR CHOC DANS InP.

La figure III-35 présente la fréquence d'ionisation par choc (nombre d'ionisations par choc par unité de temps) dans InP, et le détail pour les deux premières bandes de conduction.

La fréquence de l'ionisation par choc, exprimée par nanoseconde, fait apparaître le caractère d'évènement rare de l'ionisation, ainsi que la prépondérance de la fréquence de l'ionisation en seconde bande de conduction. Elle s'accroît fortement avec l'augmentation du champ.

A 300 kV/cm, la fréquence de l'ionisation par choc vaut près de 2 ns^{-1} . Sur la durée de simulation de 1.5 ns, seulement 3 ionisations se sont produites, dont aucune en première bande. L'erreur commise est très forte à cause du faible nombre d'évènements ionisants. A 500 kV/cm, la fréquence de l'ionisation par choc vaut près de 130 ns^{-1} . Elle est essentiellement due à la seconde bande. En première bande, la fréquence d'ionisation est cent fois plus faible. Sur la durée de la simulation de 1.5 ns, moins de 200 ionisations se sont produites au total.

Etant donné que la probabilité d'ionisation par choc est la même dans les deux bandes dans la simulation, la faible fréquence d'ionisation dans la première bande par rapport à la seconde bande provient du plus faible nombre d'électrons de haute énergie dans la première bande. Le rapport de la fréquence d'ionisation en seconde bande à la fréquence globale d'ionisation donne donc le pourcentage d'électrons ionisants dû à la seconde bande. Ainsi, pour tous les champs, au moins 99% des électrons qui ionisent proviennent de la seconde bande de conduction.

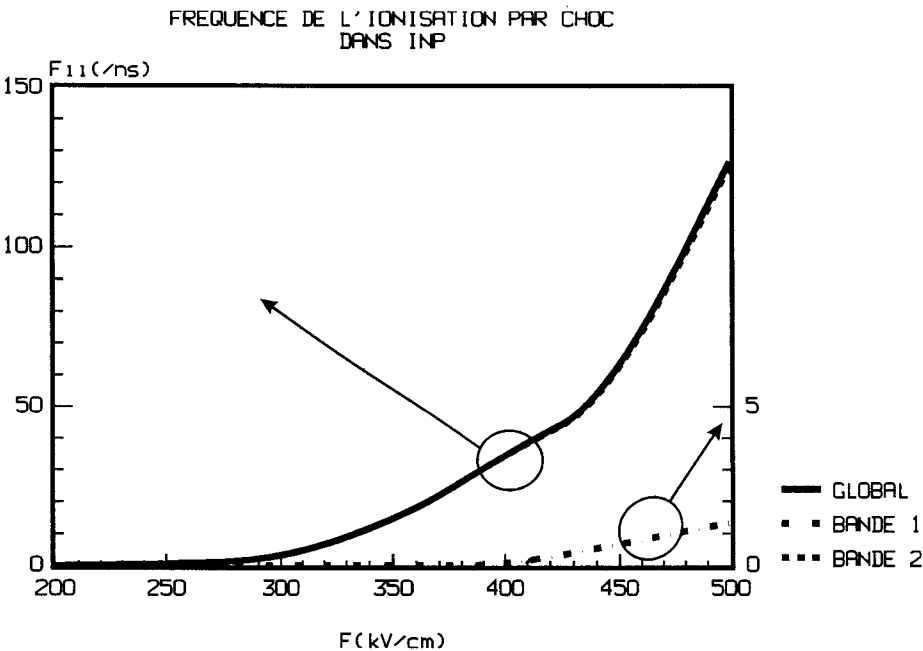


Figure III-35. Fréquence de l'ionisation par choc dans InP (trait plein), et contribution de la bande 1 (trait mixte) et de la bande 2 (tirets). La fréquence d'ionisation en seconde bande est quasiment confondue avec la fréquence globale.

III-II.3.3) DISTRIBUTION ET ÉNERGIE MOYENNE DES ÉLECTRONS IONISANTS DANS InP.

III-II.3.3.1) DISTRIBUTION ÉNERGÉTIQUE DES ÉLECTRONS IONISANTS À 400 kV/cm ET À 500 kV/cm.

La distribution en énergie des électrons ionisants renseigne sur l'énergie de seuil effective d'ionisation par choc. La figure III-36 présente la distribution énergétique normalisée à un des électrons ionisants pour les deux champs ionisants de 400 kV/cm et 500 kV/cm.

La comparaison des deux distributions montre un déplacement des queues de distribution vers les hautes énergies lorsqu'on passe de 400 kV/cm à 500 kV/cm. Nous avons vu que l'on peut observer un tel déplacement pour des électrons qui ne sont pas nécessairement ionisants. La figure III-37 montre qu'il en est en particulier de même pour les électrons ionisants.

De manière générale on peut constater que les deux caractéristiques sont assez bruitées, à cause du faible nombre d'électrons ionisants.

La distribution à 500 kV/cm, pour laquelle la statistique est meilleure, présente une forme assez nettement gaussienne.

Compte tenu de la statistique de la simulation, l'énergie des électrons ionisants observés, s'étend d'environ 2.4 eV, à près de 4.1 eV.

Si l'on considère l'importance des erreurs statistiques, au voisinage de 2.4 eV, la forme gaussienne de la distribution énergétique réelle devrait théoriquement permettre à une faible proportion d'électrons d'ioniser au voisinage de 1.7 eV, énergie de seuil de InP dans certaines simulations [FIS88].

L'importante largeur énergétique de la distribution des électrons ionisants, environ 1.7 eV, caractérise la douceur du seuil d'ionisation par choc. Les électrons ionisants sont très énergétiques puisqu'ils ont des énergies comprises entre 2.4 eV et 4.1 eV, et qu'à peine 10% d'entre eux ont une énergie inférieure à 2.8 eV. Il est remarquable qu'à cette énergie, où le nombre d'électrons ionisants devient significatif, la probabilité d'ionisation par choc devient comparable à la probabilité totale sur phonons.

On peut constater qu'à 400 kV/cm, la distribution commence vers 2.7 eV au lieu de 2.4 eV pour 500 kV/cm. Cette différence s'explique par une plus mauvaise statistique à 400 kV/cm qu'à 500 kV/cm, donc à fortiori au voisinage de 2.5 eV où il y a peu d'électrons ionisants.

III-II.3.3.2) ÉNERGIE MOYENNE DES ÉLECTRONS IONISANTS POUR LES CHAMPS IONISANTS DE 250 kV/cm À 500 kV/cm.

La figure III-37 présente l'énergie moyenne des électrons ionisants.

L'énergie moyenne des électrons ionisants est pratiquement constante, et augmente lentement avec le champ, de 2.9 eV à 3.2 eV entre 250 kV/cm et 500 kV/cm.

La faible variation de l'énergie moyenne des électrons ionisants s'explique par la saturation du transport électronique lorsque le champ devient de plus en plus fortement ionisant d'après la distribution présentée plus haut. Il y a une saturation de l'énergie maximale accessible donc une saturation de l'énergie moyenne d'ionisation par choc.

REMARQUES.

L'ionisation par choc se produit précisément à une énergie où elle devient suffisamment forte pour entrer en compétition avec la probabilité d'interaction sur phonons d'après le chapitre II.

La plus forte valeur de la distribution normalisée des électrons ionisants à 400 kV/cm, par rapport à ceux à 500 kV/cm est due à la normalisation à la même valeur unitaire des deux distributions. En effet, à 400 kV/cm, la statistique est moins bonne qu'à 500 kV/cm, donc la distribution s'écarte de la forme gaussienne pour se rapprocher d'une distribution de type Dirac, qui tend vers l'infini lorsqu'elle est normalisée à l'unité.

III-II.4) VITESSE DE DÉRIVE STATIONNAIRE DANS InP.

Les caractéristiques de vitesse de dérive stationnaire avec et sans ionisation par choc sont confondues sur tout le domaine de champ appliqué jusqu'au champ ionisant de 500 kV/cm. C'est la raison pour laquelle elles n'ont pas été représentées pour comparaison.

On peut expliquer la coïncidence des vitesses de dérive avec et sans ionisation, par le faible coefficient d'ionisation par choc obtenu même à ce champ, ce qui (contrairement à un autre matériau comme GaAs où le coefficient d'ionisation est 4 à 5 fois plus élevé) ne provoque pas de transferts suffisants à basse énergie pour modifier la caractéristique de vitesse.

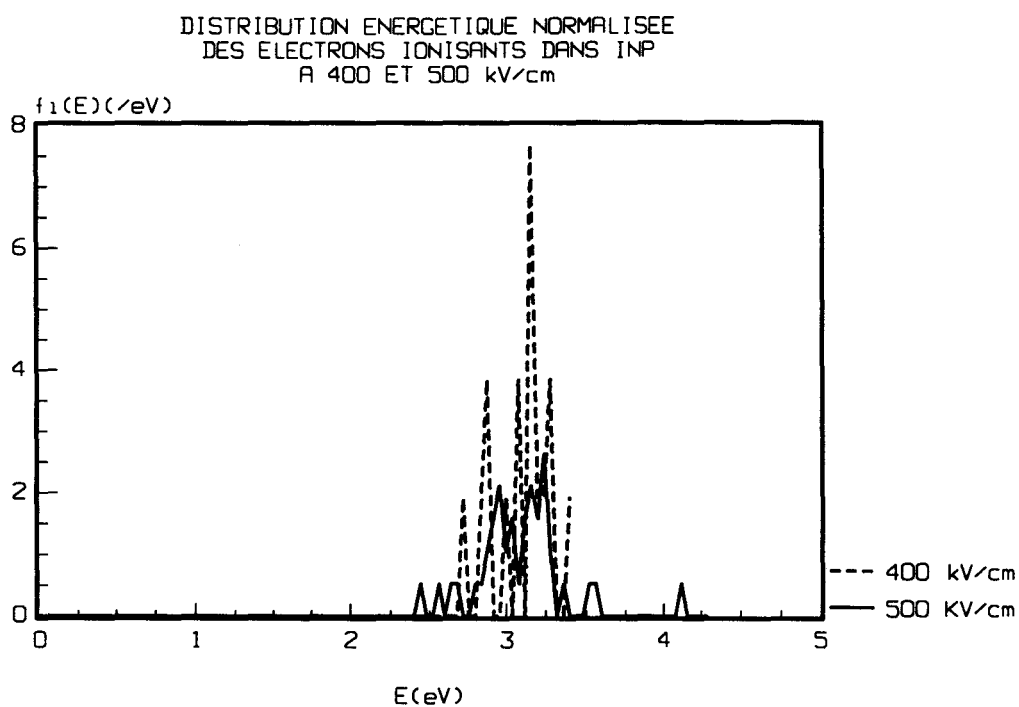


Figure III-36. Distribution énergétique des électrons ionisants, normalisée à un dans InP, à 400 kV/cm (tirets) et 500 kV/cm (trait plein).

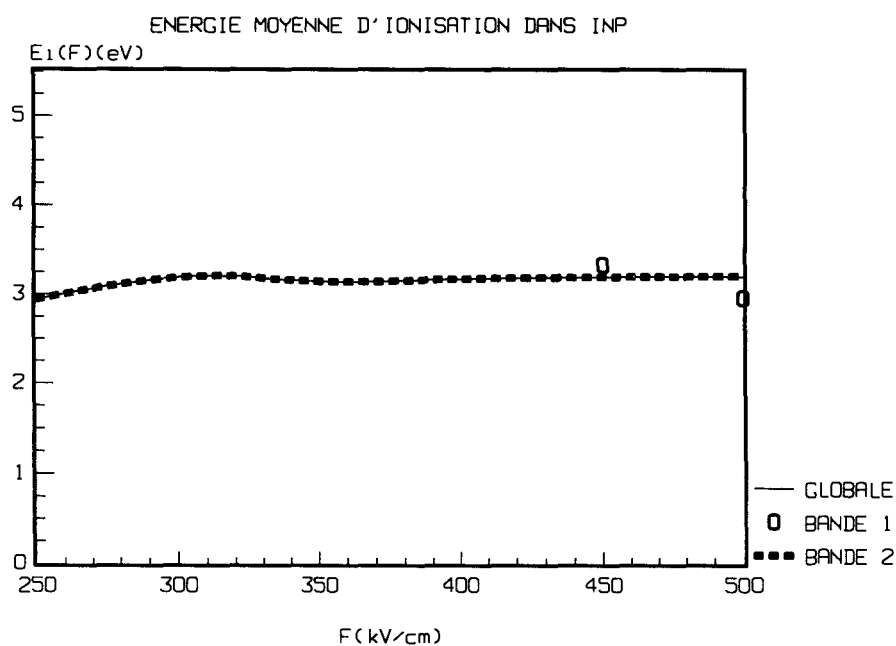


Figure III-37. Energie moyenne des électrons participant à l'ionisation par choc dans InP, globalement (trait plein fin), dans la seconde bande (tirets gras), dans la première bande (carrés).

III-IL.4.1)COMPARAISON AVEC L' EXPÉRIENCE DANS InP.

La figure III-38 présente la caractéristique de vitesse de dérive stationnaire à 300°K, d'une part calculée à l'aide de la simulation Monte-Carlo sur deux bandes, et d'autre part déterminée expérimentalement, de 30 kV/cm à 200 kV/cm, par T.H.Windhorn & al. [WIN83]. On peut constater que les deux caractéristiques sont assez voisines, la vitesse simulée étant légèrement supérieure à la caractéristique expérimentale.

La caractéristique simulée fait apparaître une vitesse pic de $2.7 \times 10^7 \text{ cm / s}$, vers 12 kV/cm.

A 50 kV/cm, la vitesse de dérive ne vaut plus qu'environ $1.2 \times 10^7 \text{ cm / s}$, puis elle décroît linéairement jusqu'à un minimum de $0.7 \times 10^7 \text{ cm / s}$ vers 300 kV/cm. De 300kV/cm à 500 kV/cm, la vitesse de dérive croît jusqu'à environ $0.9 \times 10^7 \text{ cm / s}$.

III-IL.4.2)COMPARAISON AVEC UNE SIMULATION NE PRENANT EN COMPTE QUE LA PREMIÈRE BANDE DANS InP.

La figure III-39 présente la caractéristique de vitesse de dérive stationnaire à 300°K, d'une part calculée à l'aide de la simulation Monte-Carlo bi-bandes, et d'autre part à l'aide de la simulation Monte-Carlo mono-bande de K.Brennan & K.Hess [BRE84], ces auteurs ayant considéré la structure de bande réelle limitée à la première bande.

Les deux caractéristiques sont en léger décalage l'une par rapport à l'autre jusqu'à 20 kV/cm, avec une vitesse pic de K.Brennan & K.Hess pour 10. kV/cm, anticipée d'environ 2 kV/cm par rapport à celle de la simulation bi-bandes.

Entre 20 kV/cm et 100 kV/cm, les modèles mono-bande et bi-bandes donnent des vitesses voisines.

A partir de 100 kV/cm la vitesse du modèle bi-bandes est légèrement supérieure à la vitesse du modèle mono-bande, puis la rejoint à 400 kV/cm.

La comparaison des deux simulations est intéressante en champs ionisants car elle fait apparaître un changement qualitatif de comportement de la caractéristique de vitesse. Dans le modèle mono-bande, la caractéristique de vitesse diminue à partir de 300 kV/cm alors que dans la simulation réalisée prenant en compte le transport dans la seconde bande, la vitesse augmente à partir de ce champ.

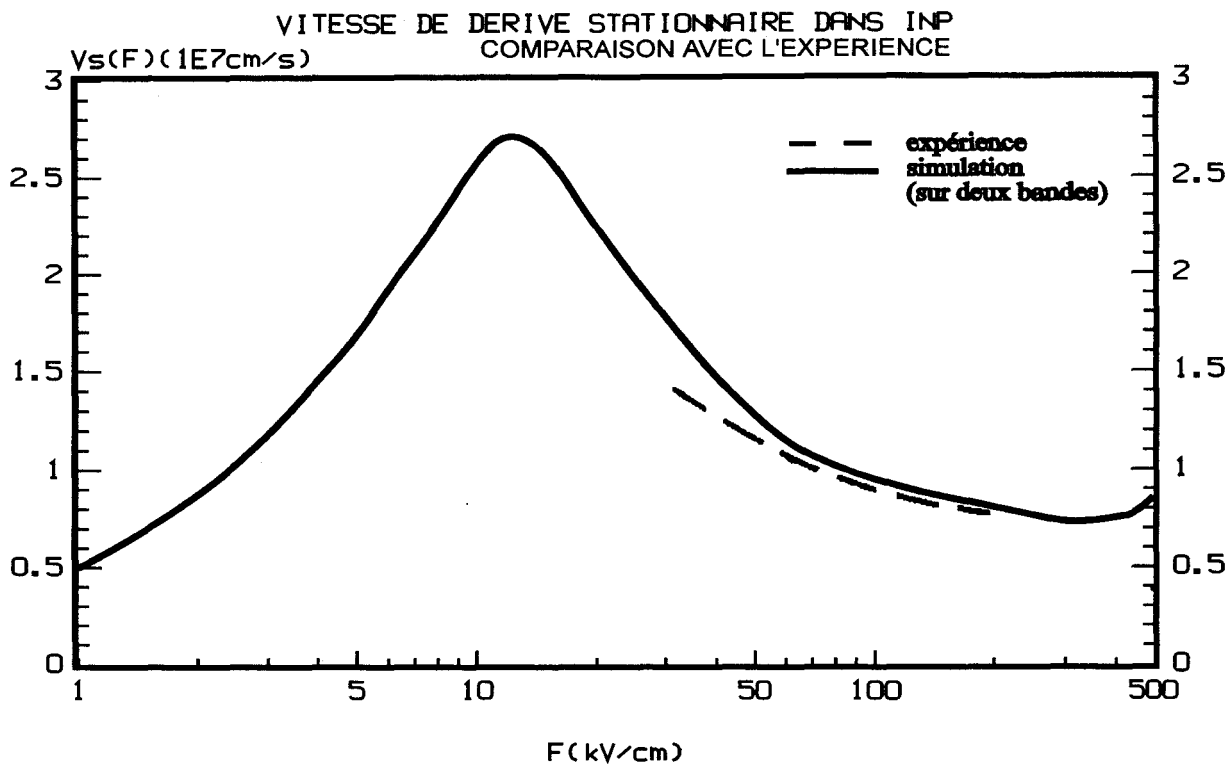


Figure III-38. Vitesse de dérive stationnaire à 300°K dans InP, obtenue par l'expérience (tirets) (T.H.Windhorn & al. [WIN83]) et par la simulation Monte-Carlo sur deux bandes (trait plein).

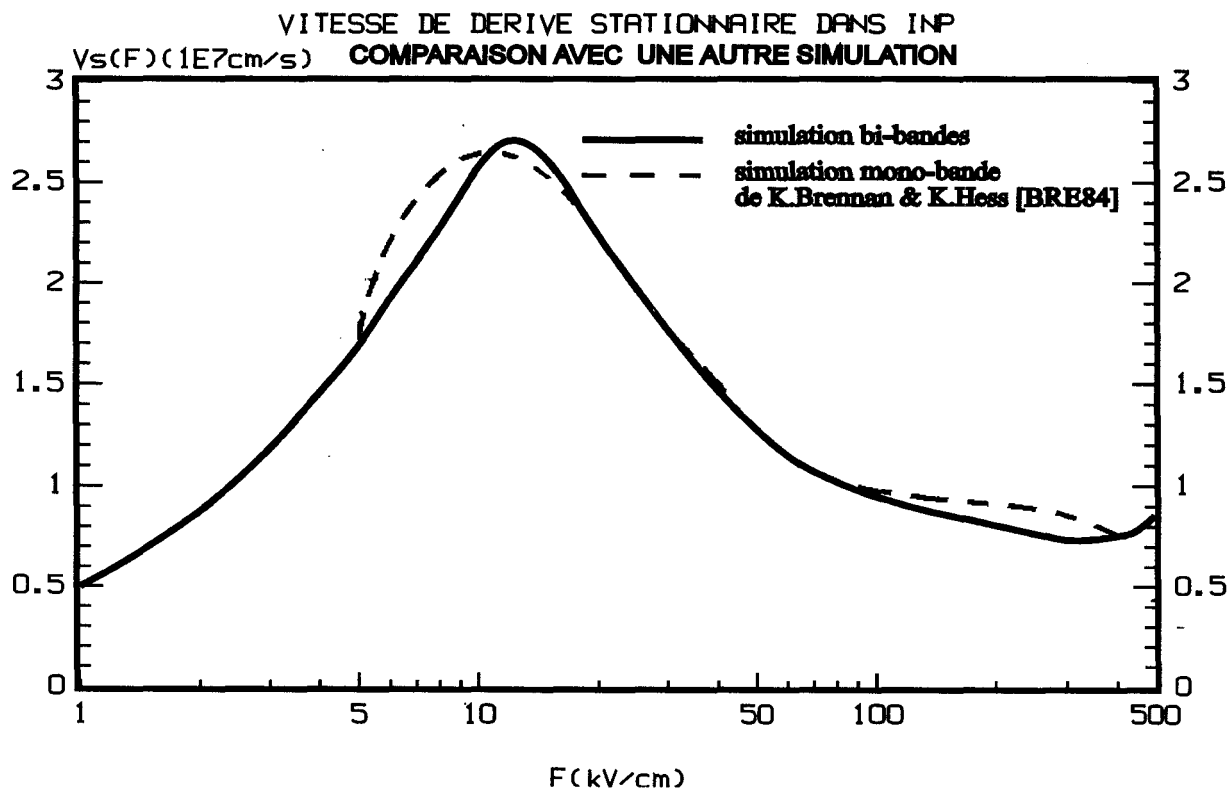


Figure III-39. Vitesse de dérive dans InP à 300°K, obtenue par la simulation Monte-Carlo sur deux bandes (trait plein), et par une simulation Monte-Carlo de K.Brennan & K.Hess [BRE84] sur une seule bande (tirets).

La différence de variation de la vitesse stationnaire des deux simulations à haute énergie, tient au fait que dans le modèle mono-bande, la masse effective devient très lourde aux énergies où se produit l'ionisation, typiquement entre 2 eV et 2.5 eV dans un tel modèle, où la distribution est tronquée aux énergies plus élevées à cause de la très forte probabilité d'ionisation par choc utilisée, qui surpasse largement la probabilité sur phonons.

III-II.4.3) CONTRIBUTION DES VALLÉES À LA VITESSE DE DÉRIVE DANS InP.

La figure III-40 représente la vitesse de dérive stationnaire dans InP (trait plein). Les autres courbes représentent les contributions des différentes vallées à la vitesse de dérive.

Jusqu'à la vitesse pic située vers 12 kV/cm, seule la vallée centrale Γ_1 contribue à la vitesse de dérive.

Les vallées L1, vallées latérales de plus basse énergie commencent à contribuer à la vitesse vers 20 kV/cm, pour atteindre une contribution maximale vers 200 kV/cm. A ce champ elles contribuent aux deux tiers de la vitesse totale.

Les vallées supérieures suivantes sont les vallées X1, dont l'influence commence à se faire sentir à partir de 200 kV/cm. La contribution maximale est atteinte vers 400 kV/cm, mais est quatre fois plus faible qu'en vallées L1. Les vallées contributives suivantes sont les vallées X3, de la seconde bande de conduction. Leur contribution commence vers 300 kV/cm, puis approche celle des vallées L1 à 500 kV/cm. Finalement ce sont les vallées L1 et X3 qui contribuent essentiellement à la vitesse en champs très forts.

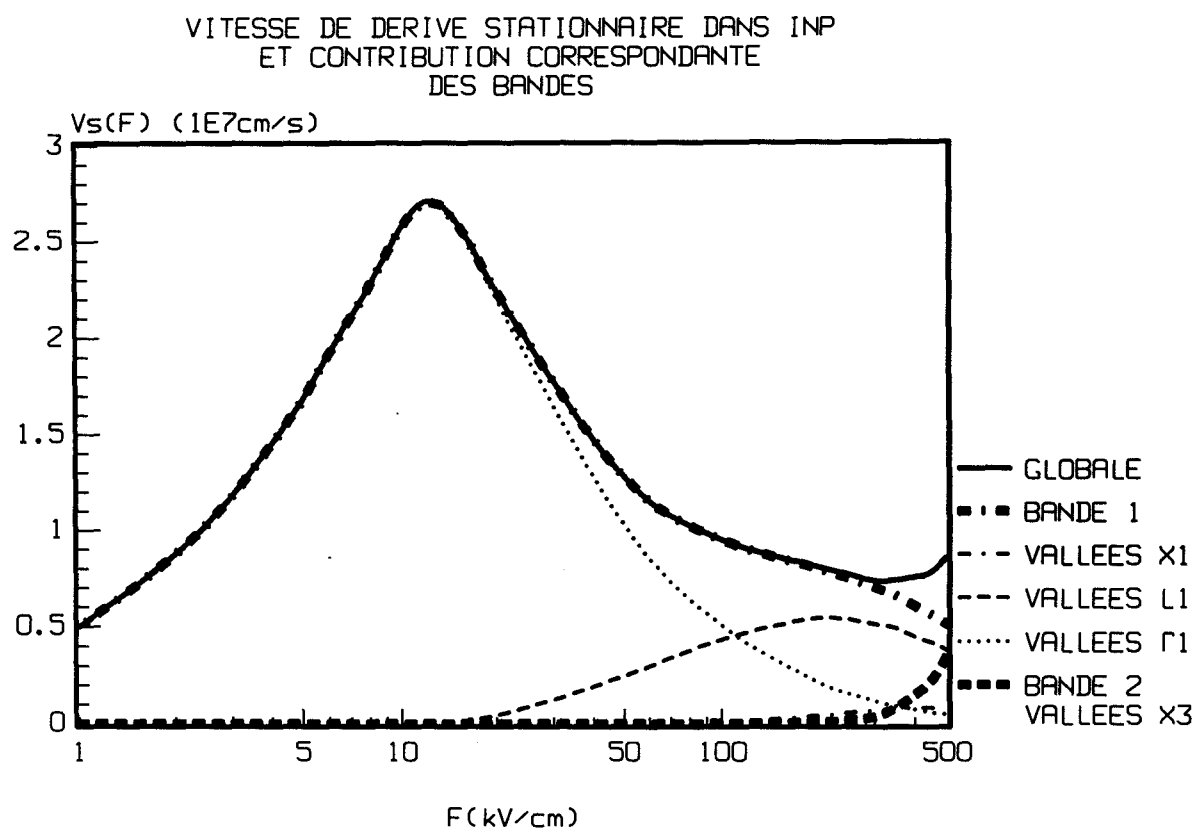


Figure III-40. Vitesse de d rive stationnaire dans InP (trait plein). Les autres courbes repr sentent les contributions des diff rentes vall es   la vitesse de d rive. Les traits gras mixtes regroupent les vall es de la premi re bande (vall es $\Gamma 1$, L1, X1), et les tirets gras celles de la seconde bande (vall es X3).

III-II.5)LIBRE PARCOURS MOYEN DANS InP.

Le temps et la distance de libre parcours moyen mesurent le nombre moyen d’interactions subies par un électron respectivement par unité de temps et de longueur qu’il parcourt dans l’espace réel.

La figure III-41 présente la distance et le temps de libre parcours moyen dans InP, sur un même graphique.

III-II.5.1)DISTANCE DE LIBRE PARCOURS MOYEN DANS InP.

La distance de libre parcours moyen est quasiment constante, avec une légère croissance jusqu'à 5 kV/cm.

A partir de 5 kV/cm, elle présente l'allure d'une courbe en cloche, avec une distance maximale de libre parcours moyen atteinte pour un champ de 12kV/cm.

A partir 12 kV/cm, la distance de libre parcours moyen décroît jusqu'à 300 kV/cm.

A partir de 300 kV/cm, la distance de libre parcours moyen est quasiment constante, et présente une très légère remontée, jusqu'au champ maximum de 500kV/cm.

III-II.5.2)TEMPS DE LIBRE PARCOURS MOYEN DANS InP.

Le temps de libre parcours moyen est quasiment constant jusqu'à 10 kV/cm.

A partir 10 kV/cm, et jusqu'au champ maximum de 500 kV/cm, le temps de libre parcours moyen décroît.

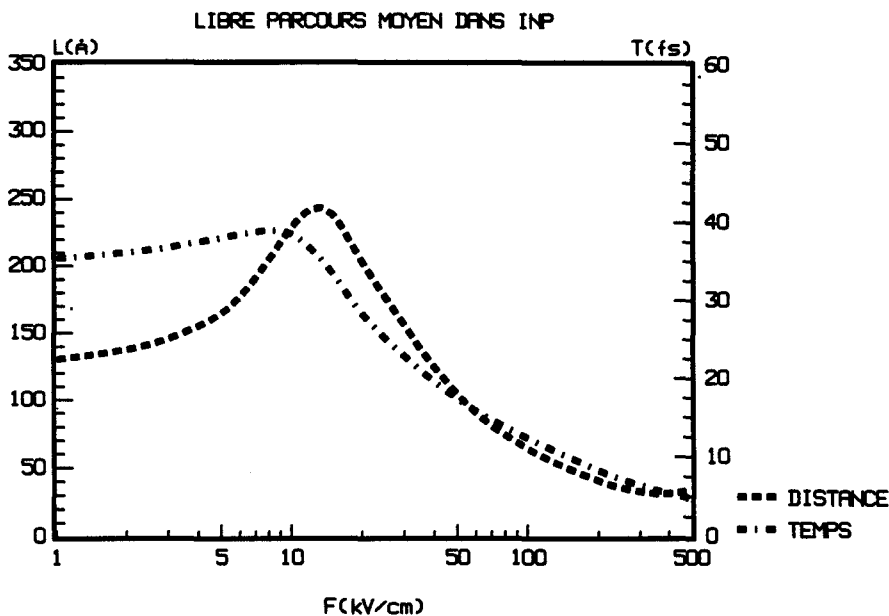


Figure III-41. Distance (tirets) et temps (traits mixtes) de libre parcours moyen simulés dans InP, par la méthode de Monte-Carlo avec le modèle bi-bandes des vallées étendues.

CONCLUSION.

A basse énergie, c'est à dire pour des champs non ionisants s'étendant jusqu'à typiquement 100kV/cm, que ce soit dans GaAs ou dans InP, le modèle de structure de bande s'apparentant au modèle classique des vallées, la comparaison des résultats de simulation concernant la vitesse de dérive, avec la vitesse de dérive stationnaire expérimentale, et la comparaison de l'énergie simulée avec l'énergie moyenne d'autres simulations Monte-Carlo, ont permis de valider les valeurs de paramètres matériaux utilisées dans la gamme concernée de champs électriques.

L'étude du transport électronique dans le matériau GaAs massif en champ fort a permis de mettre en évidence un certain nombre de résultats physiques concernant la façon dont se produit l'ionisation par choc dans l'espace réciproque. Ces résultats ont été rendus possible par l'emploi d'une structure de bande (SDB) et d'une densité d'états (DOS) réalistes, couvrant les deux premières bandes de conduction. Les grandeurs matériaux inconnues comme, la constante de couplage entre les deux premières bandes, et le potentiel de déformation intra-seconde-bande, ont été ajustés au coefficient d'ionisation par choc pour deux champs ionisants assez éloignés.

La validation de la simulation Monte-Carlo utilisant le modèle de SDB des vallées étendues a été rendu possible à haute énergie, par la double comparaison dans le matériau GaAs, d'une part du coefficient d'ionisation par choc au coefficient d'ionisation par choc expérimental, et d'autre part des distributions énergétiques pour différents champs forts ionisants, en excellent accord avec celles d'une simulation Monte-Carlo de J.Bude & K.Hess [BUD92] utilisant la SDB réelle.

Nous avons montré que la non prise en compte de la seconde bande de conduction aboutirait à une forte sous-estimation du coefficient d'ionisation par choc, et que la prise en compte de l'anisotropie de haute énergie associée à la localisation des points W est essentielle pour une description correcte de l'ionisation par choc.

La distribution énergétique, en champs ionisants, c'est à dire de plus de 200 kV/cm, dans les deux matériaux GaAs et InP, est caractérisée par une queue de distribution à haute énergie, renfermant peu d'électrons, mais dont sont issus tous les électrons ionisants.

La comparaison du pourcentage d'électrons ionisants dans les deux premières bandes de conduction, a permis de montrer que l'ionisation par choc dans les deux matériaux est essentiellement due aux électrons de la seconde bande de conduction, dont le peuplement est assuré par un réservoir d'électrons situé en vallées latérales L1 et X1 de la première bande. L'observation détaillée de la contribution des bandes à la fonction de distribution, montre que la plupart des

électrons très énergétiques appartiennent à la seconde bande. Ce sont ces électrons qui participent à l'ionisation dans la gamme de champs étudiés qui s'étend jusqu'à 500 kV/cm.

La forme gaussienne de la distribution énergétique des électrons ionisants a permis de vérifier le caractère de seuil doux de l'ionisation par choc.

Le caractère d'évènement rare de l'ionisation par choc a été confirmé, par la faible fréquence d'ionisation par choc.

La caractéristique expérimentale de coefficient d'ionisation par choc en fonction du champ dans GaAs est assez bien reproduite. La variation exponentielle du coefficient d'ionisation par choc est retrouvée dans les matériaux GaAs et InP.

Le coefficient d'ionisation par choc dans GaAs situé entre 50000/cm et 60000/cm pour un champ électrique de 500 kV/cm, est 4 à 5 fois plus élevé que dans InP. Sa nettement plus faible valeur dans InP s'explique, non pas par les probabilités d'ionisation, qui sont assez proches, mais par le plus faible peuplement des états de haute énergie, car les énergies de fond de vallées latérales L1 et X1 y sont plus élevées que dans GaAs. Le plus faible peuplement des vallées latérales à haute énergie dans InP par rapport à GaAs, limite donc le nombre d'électrons capables de transférer dans la seconde bande où se produit l'essentiel de l'ionisation par choc. La limitation de ce transfert est renforcée par la plus haute énergie des points X3 dans InP.

Les vitesses de dérive stationnaire à bas champ sont retrouvées dans les deux matériaux. L'analyse de la vitesse stationnaire aux champs ionisants a montré que la vitesse stationnaire ne subit pas de modification très significative de sa valeur qui reste quasiment constante. Toutefois des évolutions qualitatives ont pu être montrées mettant en évidence deux effets tendant à augmenter la vitesse moyenne:

- le transport en seconde bande où la vitesse des électrons y est en moyenne plus forte qu'en première bande, car les électrons se trouvent en moyenne au voisinage des points X3 où les vallées sont quasiment parabolique
- la forte perte énergétique des électrons ionisants qui relaxent dans des régions où le rayon de courbure, donc la masse effective, des vallées est plus faible, et donc la vitesse plus élevée.

Dans GaAs les deux effets combinés aboutissent à une légère augmentation de la vitesse de dérive, tandis que dans InP, leur plus faible amplitude laisse la vitesse inchangée. La comparaison de la vitesse de dérive stationnaire dans GaAs avec une ancienne simulation Monte-Carlo de H.Shichijo & K.Hess [SHI81] utilisant la SDB réelle limitée à la première bande, a confirmé le rôle de la seconde bande dans ce comportement de la vitesse de dérive.

BIBLIOGRAPHIE.

- [BRE84]: K.F.Brennan & K.Hess, Sol. State Electron. 27 n°4, 347 (1984).
- [BUD92]: J.Bude & K.Hess, J. Appl. Phys. 72 n°8, 3554 (1992).
- [BUL83]: G.Bulman & al., IEEE Elecron Dev. Letters EDL-4 n°6, 181 (1983).
- [COO82]: L.W.Cook & al., Appl. Phys. Lett. 40(7), 589 (1982).
- [FIS91]: M.V.Fischetti, IEEE Trans. Elec. Dev. 38 n°3, 634 (1991).
- [HER56]: C.Herring & E.Vogt, Phys. Rev. 101, 944 (1956).
- [KAS79]: A.Kaszynski, Thèse de doctorat, Lille (1979).
- [KEL65]: L.V.Keldysh, Soviet Phys. JETP 21 n°6, 1135 (1965).
- [KUN94]: H.Kunikiyo & al., J. Appl. Phys. 75 n°1, 297 (1994).
- [RUC68]: J.G.Ruch & G.S.Kino, Phys. Rev. 174, 921 (1968).
- [SHI81]: T.Shichijo & K.Hess, Phys. Rev. B 23 n°8, 4197 (1981).
- [SAN95]: N.Sano & A.Yoshii, J. Appl. Phys. 77 n°5, 2020 (1995).
- [SHI81]: H. Shichijo & K.Hess, Phys. Rev. B 23 n°8, 4197 (1981).
- [STO94]: M.Stobbe & al., Phys. Rev. B 49 n°7, 4494 (1994).
- [WIN83]: T.H.Windhorn & al., Appl. Phys. Lett. 42, n°8, 725 (1983).

CONCLUSION GÉNÉRALE

CONCLUSION GÉNÉRALE.

Dans les composants semiconducteurs modernes, la réduction des dimensions donne naissance à de forts champs électriques dans le matériau, provoquant l'apparition de phénomènes de transport spécifiques aux énergies élevées, comme l'ionisation par choc.

Pour la compréhension de ces phénomènes, il est nécessaire de procéder à l'étude du transport électronique par une simulation utilisant une méthode de résolution de l'équation de transport de Boltzmann, comme la méthode statistique de Monte-Carlo. Une telle étude nécessite au préalable de prendre en compte la structure de bande du matériau, donnant une relation de dispersion réaliste, mêmes aux énergies élevées. Les temps de calculs ne devant pas être rédhibitoires pour une application au niveau du composant, le choix s'est porté sur un modèle analytique original.

Le modèle de structure de bande proposé, dit modèle des "vallées étendues", prend aussi bien en compte la première bande de conduction que la seconde bande, l'importance de cette dernière bande à haute énergie ayant été signalée par de récents travaux sur la probabilité d'ionisation par choc.

Le modèle proposé décrit assez bien la relation de dispersion réelle au voisinage des principaux minima et maxima d'énergie, le long des directions cristallographiques principales. Par rapport au modèle classique des vallées au voisinage des minima, il a été nécessaire d'introduire des coefficients de non parabolicité d'ordre supérieurs pour bien décrire la courbure de bande dans les directions principales.

L'anisotropie de la structure de bande a été assez bien restituée, aussi bien au voisinage des minima que des maxima. En particulier, à haute énergie une description réaliste de l'anisotropie a été rendue possible par la prise en compte réaliste de la localisation des maxima de bande W .

La prise en compte de l'anisotropie de haute énergie et d'une courbure de bande correcte sur toute la gamme d'énergie de bande, a ainsi permis de calculer une densité d'états réaliste. Des probabilités d'interaction également correctes en ont été déduites à partir de leur expression connue dans le cadre du modèle classique des vallées.

La mise en oeuvre du modèle proposé dans la méthode Monte-Carlo a été réalisée, en tenant compte notamment des caractéristiques d'anisotropie de la structure de bande. En particulier, l'effet

de l'anisotropie de haute énergie sur la modification de l'état de l'électron, a été détaillée après action du champ extérieur ou d'une interaction.

La simulation Monte-Carlo a été appliquée à l'étude des matériaux GaAs et InP.

La description correcte des phénomènes de haute énergie étant intimement liée à celle de la distribution énergétique en champ fort, cette fonction a été détaillée. L'examen de la fonction de distribution a montré que la queue de distribution, est essentiellement constituée d'électrons chauds d'énergie supérieure à 3 eV appartenant à la seconde bande de conduction.

L'étude a également porté sur les caractéristiques d'énergie moyenne, de vitesse de dérive stationnaire, de temps et de distance de libre parcours moyen, ainsi que de coefficient d'ionisation par choc.

L'étude de l'ionisation par choc a montré que ce phénomène est essentiellement provoqué par des électrons très énergétiques de la seconde bande de conduction, appartenant à la queue de distribution. La forte influence de l'anisotropie de haute énergie sur ce phénomène a été mise en évidence. Il a été montré qu'aux champs ionisants, l'ionisation par choc et le peuplement de la deuxième bande provoquent une remontée de la caractéristique de vitesse de dérive stationnaire. Enfin, le caractère d'événement rare de l'ionisation par choc a été confirmé par la faible fréquence d'ionisation calculée.

L'étude réalisée permettra d'envisager l'application du modèle des vallées étendues à d'autres matériaux (GaAlAs, GaInAs..) très utilisés dans les composants, ou à d'autres matériaux moins bien connus pouvant présenter des particularités intéressantes de la structure de bande leur conférant de bonnes propriétés de transport à haute énergie (GaN,...).

L'étude dans le composant permettra d'étudier l'influence de l'ionisation par choc sur les performances des composants à grille ultra-courtes. En particulier, il sera possible d'étudier les problèmes de courants de grille parasites par franchissement de barrière de potentiel, ou bien les phénomènes de claquage par avalanche.

ANNEXES

ANNEXES

INDEX DES ANNEXES

ANNEXE I.....A-2

ANNEXE II.....A-4

ANNEXE III.....A-6

ANNEXE IV.....A-8

ANNEXE V.....A-9

ANNEXE VI.....A-11

ANNEXE VII.....A-15

ANNEXE VIII.....A-17

ANNEXE IX.....A-19

BIBLIOGRAPHIE.....A-21

ANNEXE I

PRINCIPAUX POINTS ET AXES DE SYMÉTRIE DE LA PREMIÈRE ZONE DE BRILLOUIN DES MATÉRIAUX DE TYPE ZINC-BLENDE COMME GaAs ET InP

L'Arséniure de Gallium et le Phosphure d'Indium sont des cristaux cubiques à faces centrées (cfc) dans l'espace réel. Dans l'espace réciproque, comme le montre la figure I.1, la maille élémentaire est un cube tronqué à ses sommets.

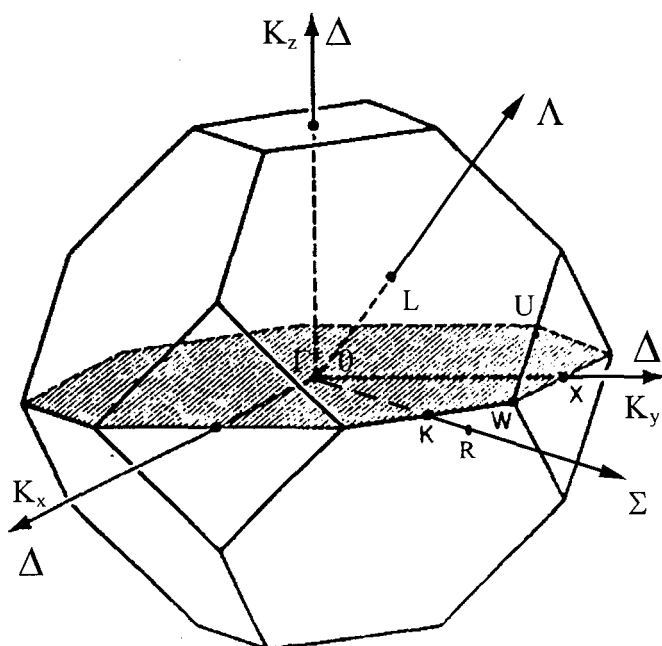


Figure I.1. Zone de Brillouin et plan ΓXW en grisé.

Le point Γ situé en $(0,0,0)$ occupe le centre de la zone de Brillouin. Les points principaux L , X , K et W sont situés en bordure de la zone de Brillouin. Les points Γ , L , X , U , K , et W , sont représentés aux sommets de la zone de Brillouin réduite occupant $1/48$ -ième de la zone de Brillouin complète, tout point de cette dernière pouvant se ramener par symétrie dans la zone réduite.

Les axes cristallographiques principaux joignant le point Γ à un point L , X ou K , sont respectivement les axes Λ (axes $\langle 111 \rangle$), Δ (axes $\langle 100 \rangle$), ou Σ (axes $\langle 110 \rangle$), de multiplicités respectives 8, 6 et 12, et d'ordres de symétrie respectifs 3, 4, et 2.

En exprimant les vecteurs d'onde repérant certains points principaux en unités de $\frac{2\pi}{a}$, où a est le paramètre de maille, on obtient les localisations de ces points.

Le point Γ est situé au centre de la zone de Brillouin en $\mathbf{K}_{o\Gamma} = (0,0,0)$.

Comme les points L sont portés par des axes Λ , le nombre de ces points est de 8. Ces points sont

situés en $\mathbf{K}_{oL} = \frac{1}{2}(1,1,1), \frac{1}{2}(\bar{1},1,1), \frac{1}{2}(\bar{1},\bar{1},1), \frac{1}{2}(\bar{1},\bar{1},\bar{1}),$

et par symétrie centrale en $\frac{1}{2}(\bar{1},\bar{1},\bar{1}), \frac{1}{2}(1,\bar{1},\bar{1}), \frac{1}{2}(\bar{1},1,\bar{1}), \frac{1}{2}(1,1,\bar{1}).$

Les points X sont portés par des axes Δ . Le nombre de points X est donc de 6. Ces points sont

situés en $\mathbf{K}_{oX} = (1,0,0), (0,1,0), (0,0,1),$

et par symétrie centrale en $(\bar{1},0,0), (0,\bar{1},0), (0,0,\bar{1}).$

A chaque vallée X sont associés 4 points U. La multiplicité de l'axe Δ étant de 6, le nombre de points U s'élève donc à 24. Les points U associés, par exemple, au point $\mathbf{K}_{oX} = (1,0,0)$, sont situés

en $\mathbf{K}_{oU} = (1, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}), (1, \frac{\bar{1}}{4}, \frac{1}{4}), (1, \frac{\bar{1}}{4}, \frac{\bar{1}}{4}), (1, \frac{1}{4}, \frac{\bar{1}}{4}),$ et $(1, \frac{\bar{1}}{4}, \frac{\bar{1}}{4}).$

La multiplicité de l'axe Σ valant 6, le nombre de points K vaut 12.

Les points K associés par exemple au point L situé en $\mathbf{K}_{oL} = \frac{1}{2}(1,1,1)$, sont localisés en

$\mathbf{K}_{oK} = \frac{3}{4}(1,1,0), \frac{3}{4}(0,1,1),$ et $\frac{3}{4}(1,0,1).$ Ces points appartiennent à un axe Σ .

Les points K situés en bordure de zone de Brillouin ne sont pas des minima dans les directions Σ .

Ces minima sont situés au-delà de la zone de Brillouin aux points R, d'après J.Blakemore [BLA82], en $(1,1,0)$, etc...

La relation de dispersion dans la direction XU est identique à celle dans la direction KR [BLA82].

Les points W sont situés dans des plans passant par les points X et L et transverses aux axes principaux respectifs Δ et Λ passant par ces points.

Considérons, par exemple les points W appartenant au plan affine transverse à un l'axe Δ associé au point $\mathbf{K}_{oX} = (1,0,0)$. Les points W associés à ce point X sont situés en $\mathbf{K}_{oW} = (1, \frac{1}{2}, 0), (1, 0, \frac{1}{2}),$
 $(1, \frac{\bar{1}}{2}, 0),$ et $(1, 0, \frac{1}{2}).$

ANNEXE II

RACINES ANALYTIQUES DES ÉQUATIONS POLYNOMIALES DU MODÈLE DES VALLÉES ÉTENDUES

Cette annexe présente les racines analytiques des principales équations polynômiales du modèle de structure de bande des vallées étendues. Ces équations concernent aussi bien la recherche de l'énergie en fonction du vecteur d'onde dans les relations de dispersion en vallées, que la détermination de la dépendance angulaire de l'énergie maximale accessible en vallées latérales.

Le § II.1 présente la solution analytique ε de l'équation du second degré $\varepsilon(1 + \alpha\varepsilon) = E_R$.

Le § II.2 présente la solution analytique ε de l'équation du troisième degré $\varepsilon(1 + \alpha\varepsilon + \beta\varepsilon^2) = E_R$.

Le § II.3 présente la solution analytique ε de l'équation du quatrième degré $\varepsilon(1 + \omega\varepsilon^3) = E_R$.

II.1) SOLUTION ANALYTIQUE DE L'ÉQUATION $\varepsilon(1 + \alpha\varepsilon) = E_R$.

Cette équation se ramène immédiatement à une équation du second degré ayant pour solution:

$$\varepsilon = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4\alpha E_R}}{2\alpha}$$

II.2) SOLUTIONS ANALYTIQUES DE L'ÉQUATION $\varepsilon(1 + \alpha\varepsilon + \beta\varepsilon^2) = E_R$.

Cette équation se ramène immédiatement à une équation du troisième degré ayant des solutions analytiques réelles [SMI69][LEL74].

$$\text{Soit le changement de variable } \begin{cases} p(\alpha, \beta) = \frac{1}{\beta} \left(1 - \frac{\alpha^2}{3\beta} \right) \\ q(\alpha, \beta, E_R) = \frac{\alpha}{3\beta} \left(2 \left(\frac{\alpha}{3\beta} \right)^2 + \frac{1}{\beta} \right) - \frac{E_R}{\beta} \end{cases}$$

$$\text{Si } \frac{q^2(\alpha, \beta, E_R)}{4} + \frac{p^3(\alpha, \beta)}{27} \leq 0$$

$$\varepsilon_n = 2 \sqrt{\frac{-p(\alpha, \beta)}{3}} \cos \left(\frac{1}{3} \left(\frac{\text{Arc cos} \left(-\frac{q(\alpha, \beta, E_R)}{2} \right)}{\sqrt{-\frac{p^3(\alpha, \beta)}{27}}} + 2n\pi \right) \right) \text{ avec } n=0, 1, \text{ ou } 2$$

D'après la règle de Descartes, étant donné que la suite des coefficients polynomiaux ne subit qu'une alternance de signe on choisira la solution en prenant la première racine réelle positive.

$$\text{Si } 0 < \frac{q^2(\alpha, \beta, E_R)}{4} + \frac{p^4(\alpha, \beta)}{27}$$

$$\varepsilon_3 = \sqrt[3]{-\frac{q(\alpha, \beta, E_R)}{2} + \sqrt{\frac{q^2(\alpha, \beta, E_R)}{4} + \frac{p^3(\alpha, \beta)}{27}}} + \sqrt[3]{\frac{q(\alpha, \beta, E_R)}{2} + \sqrt{\frac{q^2(\alpha, \beta, E_R)}{4} + \frac{p^3(\alpha, \beta)}{27}}}$$

$$\varepsilon = \varepsilon_{n=0,1,2 \text{ ou } 3}$$

II.3) SOLUTION ANALYTIQUE DE L'ÉQUATION $\varepsilon(1 + \omega\varepsilon^3) = E_R$ APPLIQUÉE A LA RELATION DE DISPERSION DANS LA SECONDE BANDE DE CONDUCTION.

Cette équation se ramène immédiatement à une équation du quatrième degré. Les racines analytiques des équations du quatrième degré peuvent être trouvées dans la littérature [ANG72][LEL74]. Nous nous restreindrons à l'expression correspondant au couple particulier de paramètres $(\omega; E_R)$ du modèle de bande proposé pour la deuxième bande de conduction.

$$\text{Soient les changement de variables } \begin{cases} p = 4 \frac{E_R}{3\omega} \\ q = -\frac{1}{\omega^2} \end{cases}$$

$$\text{et } Z(\omega, E_R) = \sqrt[3]{-\frac{q(\omega)}{2} + \sqrt{\frac{q^2(\omega)}{4} + \frac{p^3(\omega, E_R)}{27}}} + \sqrt[3]{\frac{q(\omega)}{2} + \sqrt{\frac{q^2(\omega)}{4} + \frac{p^3(\omega, E_R)}{27}}}$$

$$\varepsilon = \varepsilon_4 = \frac{-\sqrt{Z(\omega, E_R)} + \sqrt{\frac{Z(\omega, E_R)}{2} - \sqrt{\left(\frac{Z(\omega, E_R)}{2}\right)^2 + \frac{E_R}{\omega}}}}{2}$$

REMARQUE.

La recherche des racines d'une équation polynomiale ne peut être obtenue dans le cas général que lorsque le degré du polynôme ne dépasse pas 4.

ANNEXE III

PARAMÈTRES DE BANDE HAUTES ÉNERGIES À PARTIR DES ÉQUATIONS DE CONTINUITÉ AUX POINTS DE CROISEMENT

Le modèle de structure de bande (SDB) des vallées étendues décompose une relation de dispersion en vallées (RDV), en deux relations de dispersions locales (RDL). La RDV fait apparaître, à haute énergie, 5 paramètres de bande à déterminer:

ε_c : énergie aux points de croisement des deux RDL.

$\varepsilon_{\max}$: énergie maximale relativement au fond de vallée.

$\tilde{m}^*$: masse effective à un sommet de vallée.

$\tilde{\alpha}$: coefficient de non-parabolicité du premier ordre relativement à un sommet de vallée.

$\tilde{\beta}$: coefficient de non-parabolicité du second ordre relativement à un sommet de vallée.

L'application à l'énergie de croisement, ε_c , des deux équations de continuité relatives à la SDB du modèle proposé, permet de limiter le nombre de paramètres à ajuster à la SDB réelle. Les équations de continuité aux points de croisement sont:

- continuité du vecteur d'onde.
- continuité de la dérivée première du vecteur d'onde, donc de la vitesse de groupe.
- continuité de la densité d'états.

L'application de la continuité du vecteur d'onde, de la vitesse de groupe et de la densité d'états à l'énergie de croisement impose:

$$\tilde{k}(\tilde{\varepsilon}) = \rho k(\varepsilon) \quad (\text{III.1})$$

$$\tilde{v}(\tilde{k}) = v(k) \quad (\text{III.2})$$

$$\tilde{D}(\tilde{\varepsilon}) = D(\varepsilon) \quad (\text{III.3})$$

Dans la relation (III.1), ρ est une constante positive.

$$(\text{III.1}) \Leftrightarrow \sqrt{\frac{2\tilde{m} \tilde{\gamma}(\tilde{\varepsilon}_c)}{\hbar^2}} = \rho \sqrt{\frac{2m^* \gamma(\varepsilon_c)}{\hbar^2}} \Leftrightarrow \frac{m^*}{\tilde{m}^*} = \frac{1}{\rho^2} \frac{\tilde{\gamma}(\tilde{\varepsilon}_c)}{\gamma(\varepsilon_c)} \quad (\text{III.4})$$

$$(\text{III.2}) \Leftrightarrow \left. \frac{\hbar k(\varepsilon_c)}{m^* \gamma'(\varepsilon)} = \frac{\hbar \tilde{k}(\tilde{\varepsilon}_c)}{\tilde{m}^* \tilde{\gamma}'(\tilde{\varepsilon})} \right\}_{(\text{III.1})} \Rightarrow \left. \frac{m^*}{\tilde{m}^*} = \frac{1}{\rho} \frac{\tilde{\gamma}'(\tilde{\varepsilon}_c)}{\gamma'(\varepsilon_c)} \right\}_{(\text{III.4})} \Rightarrow \frac{\tilde{\gamma}'(\tilde{\varepsilon}_c)}{\gamma'(\varepsilon_c)} = \frac{1}{\rho} \frac{\tilde{\gamma}(\tilde{\varepsilon}_c)}{\gamma(\varepsilon_c)} \quad (\text{III.5})$$

En considérant que la masse effective est prise dans une direction telle qu'elle est égale à la masse de densité d'états:

$$(III.3) \Leftrightarrow \left. \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_d^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \gamma'(\epsilon_c) \sqrt{\gamma(\epsilon_c)} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2\tilde{m}_d^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \tilde{\gamma}'(\tilde{\epsilon}_c) \sqrt{\tilde{\gamma}(\tilde{\epsilon}_c)} \right\} \Rightarrow \frac{m_d^*}{\tilde{m}_d^*} = \frac{1}{\rho^{2/3}} \frac{\tilde{\gamma}(\tilde{\epsilon}_c)}{\gamma(\epsilon_c)} \quad (III.6)$$

(III.5)

Le système {(III.1), (III.2), (III.3)} équivaut au système {(III.4), (III.5), (III.6)}. Pour toutes les vallées, il sera imposé la valeur $\rho = 1$, ce qui correspond au choix implicite du modèle de R.Brunetti & C.Jacoboni [BRU89]. Les relations (III.5) et (III.6) sont alors équivalentes, on se ramène à deux équations de continuités permettant de déterminer deux grandeurs de SDB de haute énergie.

Les grandeurs choisies sont les coefficients de non-parabolicité de haute énergie $\tilde{\alpha}$ et $\tilde{\beta}$, propres au modèle des vallées étendues. Ils vont être explicités en fonction des autres paramètres ϵ_c , $\epsilon_{\max}$, et $\tilde{m}^*$, qui sont fixés par les caractéristiques de la SDB réelle.

Comme $\tilde{\gamma}(\tilde{\epsilon}) = \tilde{\epsilon} \left(1 + \tilde{\alpha} \tilde{\epsilon} + \tilde{\beta} \tilde{\epsilon}^2 \right)$, soit le changement de variable

$$\begin{cases} \tilde{x}_c = \alpha \tilde{\epsilon}_c \\ \tilde{y}_c = \beta \tilde{\epsilon}_c^2 \end{cases} \quad (III.7)$$

On peut réécrire la relation (III.5) à l'aide de la relation (III.7) sous la forme:

$$\frac{1 + 2\tilde{x}_c + 3\tilde{y}_c}{\gamma'(\epsilon_c)} = \frac{\tilde{\epsilon} (1 + \tilde{x}_c + \tilde{y}_c)}{\gamma(\epsilon_c)} \quad (III.8)$$

A partir de la relation (III.8), posons $\eta_c = \tilde{\epsilon}_c \frac{\gamma'(\epsilon_c)}{\gamma(\epsilon_c)}$ (III.9)

On en déduit: $1 - \eta_c + (2 - \eta_c)\tilde{x}_c + (3 - \eta_c)\tilde{y}_c = 0$ (III.10)

A l'énergie de croisement des RDL, on obtient à l'aide de la relation (III.4), du changement de variable (III.7) et du fait que $\rho = 1$: $1 + \tilde{x}_c + \tilde{y}_c = \frac{m^*}{\tilde{m}^*} \frac{\gamma(\epsilon_c)}{\tilde{\epsilon}_c}$ (III.11)

Les relations (III.10) et (III.11), et les changements de variables (III.7) et (III.9) permettent alors de déterminer les coefficients de non-parabolicité de haute énergie $\tilde{\alpha}$ et $\tilde{\beta}$:

$$\begin{cases} \tilde{\alpha} = \begin{cases} \frac{\eta_c - 1 + (\eta_c - 3)\beta \tilde{\epsilon}_c^2}{(2 - \eta_c)\tilde{\epsilon}_c}, & \text{si } \eta_c \neq 2 \\ \frac{1}{\tilde{\epsilon}_c} \left(\frac{m^*}{\tilde{m}^*} \frac{\gamma(\epsilon_c)}{\tilde{\epsilon}_c} - 2 \right), & \text{si } \eta_c = 2 \end{cases}, & \text{avec } \eta_c = \tilde{\epsilon}_c \frac{\gamma'(\epsilon_c)}{\gamma(\epsilon_c)} \\ \tilde{\beta} = \frac{1}{\tilde{\epsilon}_c^2} \left(1 + \frac{m^*}{\tilde{m}^*} \frac{\gamma(\epsilon_c)}{\tilde{\epsilon}_c} (\eta_c - 2) \right) \end{cases}$$

ANNEXE IV

MASSE EFFECTIVE EN FONCTION DE L'ENERGIE POUR UNE RELATION DE DISPERSION DE LA FORME $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \gamma(\varepsilon)$

Dans un modèle de type vallée, une relation de dispersion locale en vallée a pour expression:

$$\gamma(\varepsilon) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (\text{IV.1})$$

Le terme polynômiale $\gamma(\varepsilon)$, décrivant la forme non-parabolique de la vallée va être dérivé deux fois pour en déduire l'expression de la masse effective m^* en fonction de l'énergie.

$$\gamma'(\varepsilon) = \frac{\hbar^2}{m^*} k \frac{\partial k}{\partial \varepsilon} \quad (\text{IV.2})$$

$$\gamma''(\varepsilon) = \frac{\hbar^2}{m^*} \left(\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \right)^2 + k \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\frac{1}{\frac{\partial \varepsilon}{\partial k}} \right) \right) = \frac{\hbar^2}{m^*} \left(\frac{1}{\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \right)^2} - k \frac{\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \right)}{\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \right)^2} \right)$$

$$\gamma''(\varepsilon) = \frac{\hbar^2}{m^*} \left(\frac{1}{\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \right)^2} - k \frac{\frac{\partial}{\partial k} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \right) \frac{\partial k}{\partial \varepsilon}}{\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \right)^2} \right) = \frac{\hbar^2}{m^*} \left(\frac{1}{\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \right)^2} - k \frac{\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k^2}}{\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \right)^3} \right) \quad (\text{IV.3})$$

$$\left. \begin{aligned} (\text{IV.2}) \Rightarrow \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k^2} &= \frac{\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \left(1 - \frac{m^*}{\hbar^2} \gamma''(\varepsilon) \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \right)^2 \right)}{k} \\ (\text{IV.3}) \Rightarrow \frac{\partial \varepsilon}{\partial k} &= \frac{\hbar^2}{m^*} \frac{k}{\gamma'(\varepsilon)} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k^2}}{\frac{\partial \varepsilon}{\partial k}} = \frac{\hbar^2}{m^*} \frac{k}{\gamma'(\varepsilon)} \left(1 - \frac{m^*}{\hbar^2} \gamma''(\varepsilon) \left(\frac{\hbar^2}{m^*} \right)^2 \frac{k^2}{\gamma'(\varepsilon)} \right)$$

En remplaçant k^2 par son expression tirée de (IV.1) on obtient:

$$\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k^2} = \frac{\hbar^2}{m^* \gamma'(\varepsilon)} \left(1 - \frac{2\gamma(\varepsilon)\gamma''(\varepsilon)}{\gamma'(\varepsilon)^2} \right) \quad (\text{IV.4})$$

La masse effective en fond de vallée est définie par la relation: $m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k^2}}$ (IV.5)

En appliquant l'expression (IV.5) de la masse effective à une énergie quelconque ε , on en déduit, à l'aide de (IV.4), l'expression de la masse effective en fonction de l'énergie:

$$m^*(\varepsilon) = \frac{\gamma'(\varepsilon)^3}{\gamma'(\varepsilon)^2 - 2\gamma(\varepsilon)\gamma''(\varepsilon)} m^*$$

ANNEXE V

CONDITION DE DISCONTINUITÉ DE LA MASSE EFFECTIVE POUR UNE RELATION DE DIPERSION DE LA FORME $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon + \beta\varepsilon^2)$.

Pour une certaine valeur du coefficient de non parabolicité β , la relation de dispersion $\varepsilon(k)$ au voisinage d'un extremum est exprimée par la relation relation de dispersion implicite

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

Nous allons voir que la relation de dispersion $\varepsilon(k)$ peut présenter des points d'inflexion, et donc une discontinuité de la masse effective, quelle que soit la valeur du coefficient de non parabolicité α .

En posant avec $\gamma(\varepsilon) = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon + \beta\varepsilon^2)$, la relation (V.1) peut également s'exprimer par

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \gamma(\varepsilon) \quad (V.2)$$

D'après l'annexe IV, la masse effective s'exprime alors en fonction de l'énergie par la relation:

$$m^*(\varepsilon) = \frac{\gamma'(\varepsilon)^3}{\gamma'(\varepsilon)^2 - 2\gamma(\varepsilon)\gamma''(\varepsilon)} m^* \quad (V.3)$$

D'après la relation (V.3) et la définition de la masse effective, la condition d'annulation de la dérivée seconde $\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k^2}$ s'exprime par

$$\begin{aligned} & \gamma'(\varepsilon)^2 - 2\gamma(\varepsilon)\gamma''(\varepsilon) = 0 \\ \text{Posons} \quad & d = \gamma'(\varepsilon)^2 - 2\gamma(\varepsilon)\gamma''(\varepsilon) \end{aligned} \quad (V.4)$$

Soient les changements de variables $\begin{cases} x = \alpha\varepsilon \\ y = \beta\varepsilon^2 \end{cases}$

Le terme $\gamma(\varepsilon)$ de la relation (V.2) et ses dérivées premières et secondes s'expriment par:

$$\gamma(\varepsilon) = \varepsilon(1 + x + y) \quad (V.5)$$

$$\gamma'(\varepsilon) = 1 + 2x + 3y \quad (V.6)$$

$$\gamma''(\varepsilon) = 2\alpha + 6\beta\varepsilon \quad (V.7)$$

A partir de (V.5), (V.6), (V.7) on en déduit pour la relation (V.4):

$$d = (1 + x + y)^2 - 4(1 + x + y)(x + 3y)$$

$$d = (1 + 2x)^2 + 6(1 + 2x)y + 9y^2 - 4(1 + x)(x + 3y) - 4y(x + 3y)$$

$$d = -3y^2 + y(6 + 12x - 12 - 12x) + (1 + 2x)^2 - 4(1 + x)x$$

$$d = -3y^2 - 6y + 1.$$

En explicitant x , y et d en fonction de l'énergie, on en déduit l'expression de la masse effective en fonction: de l'énergie, de la masse effective à l'extremum de vallée, et des coefficients de non-parabolicités du premier et du second ordre α et β par rapport à l'extremum de vallée:

$$m^*(\varepsilon) = \frac{(1 + 2\alpha\varepsilon + 3\beta\varepsilon^2)^3}{1 - 6\alpha\varepsilon - 3\beta\varepsilon^2} m^* \quad (V.8)$$

Le dénominateur du second membre de la relation (IV.8) s'annule pour:

$$\begin{cases} y_- = -\frac{2\sqrt{3}+3}{3} \approx -2.155 \end{cases} \quad (V.9)$$

$$\begin{cases} y_+ = \frac{2\sqrt{3}-3}{3} \approx 0.155 \end{cases} \quad (V.10)$$

Lorsqu'on connaît le coefficient de non-parabolicité β , on déduit de la relation (V.9) ou (V.10) l'énergie pour laquelle la masse effective devient infinie. Désignons par ε_I cette énergie. Elle vaut

$$\varepsilon_I = \begin{cases} -\frac{2\sqrt{3}+3}{3\sqrt{\beta}}, & \text{si } \beta < 0 \\ \frac{2\sqrt{3}-3}{3\sqrt{\beta}}, & \text{si } 0 < \beta \\ \text{pas de point d'inflexion si } \beta = 0 \end{cases}$$

Réciproquement, lorsqu'on suppose connue l'énergie pour laquelle la structure de bande présente un point d'inflexion au voisinage d'un extremum, on en déduit le coefficient de non parabolicité du second ordre β :

$$\beta = \begin{cases} \left(\frac{2\sqrt{3}-3}{3\varepsilon_I}\right)^2, & \text{pour une courbure de bande telle que } \beta < 0 \\ \left(\frac{2\sqrt{3}+3}{3\varepsilon_I}\right)^2, & \text{pour une courbure de bande telle que } \beta > 0 \\ 0, & \text{en absence de points d'inflexions} \end{cases}$$

ANNEXE VI

ANISOTROPIE DE HAUTE ÉNERGIE DANS LES III-V DUE À LA PRISE EN COMPTE DES MAXIMA DE BANDE W

Le modèle de structure de bande (SDB) des vallées étendues introduit la prise en compte en vallées latérales L ou X, des points W de plus haute énergie de bande. Le calcul de la densité d'états (DOS) à haute énergie est réalisée à partir de l'énergie au maximum de densité d'états de bande.

Le § VI.1 présente l'expression, en coordonnées elliptiques, de la relation de dispersion relativement au fond d'une vallée latérale d'un électron dépassant le pic de DOS à partir des caractéristiques de SDB à haute énergie. Cela permet au § VI.2, grâce au calcul de la DOS qui en découle, et grâce à la connaissance de la localisation réelle des points W, d'établir une condition angulaire assez simple permettant d'établir qu'à une énergie donnée, correspondant typiquement à l'énergie au pic de densité d'états, toutes les orientations du vecteur d'onde ne sont pas accessibles.

VI.1) VECTEUR D'ONDE EN COORDONNÉES ELLIPTIQUES, RELATIVEMENT AU FOND DE VALLÉE, EN FONCTION DE L'ÉNERGIE APRÈS LE PIC DE DENSITÉ D'ÉTATS.

Dans le modèle des vallées étendues, pour des points de l'espace réciproque en vallée latérale L ou X, dont l'énergie ε par rapport au fond de vallée est supérieure à l'énergie au pic de densité d'états, il est possible d'explicitier assez simplement leur vecteur d'onde en coordonnées elliptiques à partir des caractéristiques de SDB de haute énergie, dont l'énergie $\varepsilon_{\max}$ du maximum de bande W par rapport au fond de vallée.

L'expression de la relation de dispersion $\varepsilon(\mathbf{k})$ par rapport au fond de vallée, est non-parabolique et possède une symétrie elliptique. Le vecteur d'onde $\mathbf{k}$ en vallée peut s'exprimer en fonction de l'énergie ε et des coordonnées elliptiques (ψ, φ) , à partir de l'énergie:

$$\mathbf{k} = \begin{pmatrix} \tilde{k}_{\perp 1}(\tilde{\varepsilon}) \sin(\psi) \cos(\varphi) \\ \tilde{k}_{\perp 2}(\tilde{\varepsilon}) \sin(\psi) \sin(\varphi) \\ \tilde{k}_{//}(\tilde{\varepsilon}) \cos(\psi) \end{pmatrix} \quad (\text{VI.1})$$

Rappelons que la notation $\tilde{x}$ désigne une grandeur s'exprimant à partir de caractéristiques de SDB de haute énergie.

En désignant par l'indice $\delta = //, \perp 1$, ou $\perp 2$ la direction correspondant à la composante $\tilde{k}_{\delta}$ du vecteur d'onde en coordonnées elliptiques, le vecteur d'onde s'explicité à partir des relations suivantes:

$$\begin{cases} \tilde{\varepsilon} = \varepsilon_{\max} - \varepsilon \\ \bar{k}_{\delta}(\tilde{\varepsilon}) = \bar{k}_{\delta\max} - \tilde{k}_{\delta}(\tilde{\varepsilon}) \\ \tilde{k}_{\delta}(\tilde{\varepsilon}) = \sqrt{\frac{2\tilde{m}_{\delta}^* \tilde{\gamma}(\tilde{\varepsilon})}{\hbar^2}} \\ \bar{k}_{\delta\max} = 2k_{\delta}(\varepsilon_{\text{dpic}}) \end{cases} \quad (\text{VI.2})$$

Rappelons que dans le modèle des vallées étendues, pour des énergies ne dépassant pas l'énergie au pic de densité d'états, le vecteur d'onde s'exprime simplement. En particulier en vallées latérales:

$$\begin{cases} k_{\delta} = \sqrt{\frac{2m_{\delta}^* \gamma(\varepsilon)}{\hbar^2}} \\ m_{\delta}^* = \tilde{m}_{\delta}^* \frac{\tilde{\gamma}(\tilde{\varepsilon}_{\text{dpic}})}{\gamma(\varepsilon_{\text{dpic}})} \end{cases} \quad (\text{VI.3})$$

A partir des relations (VI.2) et (VI.3), on déduit la composante $\tilde{k}_{\delta}$ du vecteur d'onde en coordonnées elliptiques:

$$\tilde{k}_{\delta}(\tilde{\varepsilon}) = \sqrt{\frac{2\tilde{m}_{\delta}^* \tilde{\gamma}(\tilde{\varepsilon})}{\hbar^2}} \left(2 \sqrt{\frac{\tilde{\gamma}(\tilde{\varepsilon}_{\text{dpic}})}{\tilde{\gamma}(\tilde{\varepsilon})}} - 1 \right) \quad (\text{VI.4})$$

$$\text{Posons } \xi(\tilde{\varepsilon}) = \left(2 \sqrt{\frac{\tilde{\gamma}(\tilde{\varepsilon}_{\text{dpic}})}{\tilde{\gamma}(\tilde{\varepsilon})}} - 1 \right)^2 \quad (\text{VI.5})$$

A l'aide des relations (VI.3), (VI.4), et (VI.5), la composante $\tilde{k}_{\delta}$ s'écrit:

$$\tilde{k}_{\delta}(\tilde{\varepsilon}) = \bar{k}_{\delta}(\tilde{\varepsilon}) \sqrt{\xi(\tilde{\varepsilon})} \quad (\text{VI.6})$$

Des relations (VI.1) et (VI.6), à partir des caractéristiques de SDB de haute énergie, le vecteur d'un électron de haute énergie, s'exprime en coordonnées elliptiques par:

$$\mathbf{k} = \sqrt{\xi(\tilde{\varepsilon})} \begin{pmatrix} \tilde{k}_{\perp 1}(\tilde{\varepsilon}) \sin(\psi) \cos(\varphi) \\ \tilde{k}_{\perp 2}(\tilde{\varepsilon}) \sin(\psi) \sin(\varphi) \\ \tilde{k}_{//}(\tilde{\varepsilon}) \cos(\psi) \end{pmatrix} \quad (\text{VI.7})$$

VI.2) DENSITÉ D'ÉTATS (DOS) À PARTIR DE L'ÉNERGIE AU PIC DE DOS, JUSQU'À L'ÉNERGIE DES MAXIMA DE BANDE W.

Grâce à l'inversion de la relation de dispersion (VI.7) exprimant le vecteur d'onde en fonction de l'énergie et de l'orientation à partir du pic de densité d'états, ainsi que des caractéristiques de SDB de haute énergie, la densité d'états (DOS) peut s'exprimer à partir de son expression générale en coordonnées elliptiques:

$$\tilde{D}(\tilde{\varepsilon}) = \frac{2}{(2\pi)^3} \iiint J_{\tilde{\varepsilon}, \psi, \varphi} d\tilde{\varepsilon}' d\psi d\varphi \delta(\tilde{\varepsilon}'(\tilde{\mathbf{k}}) - \tilde{\varepsilon})$$

où $J_{\tilde{\varepsilon}, \psi, \varphi}$ est le Jacobien de la transformation (VI.1)

$$J_{\tilde{\epsilon}', \psi, \varphi} = \begin{vmatrix} \frac{\partial(\tilde{k}_{\perp 1}(\tilde{\epsilon}') \sin(\psi) \cos(\varphi))}{\partial \tilde{\epsilon}'} & \frac{\partial(\tilde{k}_{\perp 1}(\tilde{\epsilon}') \sin(\psi) \cos(\varphi))}{\partial \psi} & \frac{\partial(\tilde{k}_{\perp 1}(\tilde{\epsilon}') \sin(\psi) \cos(\varphi))}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial(\tilde{k}_{\perp 2}(\tilde{\epsilon}') \sin(\psi) \sin(\varphi))}{\partial \tilde{\epsilon}'} & \frac{\partial(\tilde{k}_{\perp 2}(\tilde{\epsilon}') \sin(\psi) \sin(\varphi))}{\partial \psi} & \frac{\partial(\tilde{k}_{\perp 2}(\tilde{\epsilon}') \sin(\psi) \sin(\varphi))}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial(\tilde{k}_{//}(\tilde{\epsilon}') \sin(\psi))}{\partial \tilde{\epsilon}'} & \frac{\partial(\tilde{k}_{//}(\tilde{\epsilon}') \sin(\psi))}{\partial \psi} & \frac{\partial(\tilde{k}_{//}(\tilde{\epsilon}') \sin(\psi))}{\partial \varphi} \end{vmatrix}$$

$$\text{En posant } D_{\psi, \varphi} = \begin{vmatrix} \sqrt{\tilde{m}_{\perp 1}^*} \sin(\psi) \cos(\varphi) & \sqrt{\tilde{m}_{\perp 1}^*} \cos(\psi) \cos(\varphi) & -\sqrt{\tilde{m}_{\perp 1}^*} \sin(\psi) \sin(\varphi) \\ \sqrt{\tilde{m}_{\perp 2}^*} \sin(\psi) \cos(\varphi) & \sqrt{\tilde{m}_{\perp 2}^*} \cos(\psi) \cos(\varphi) & -\sqrt{\tilde{m}_{\perp 2}^*} \sin(\psi) \sin(\varphi) \\ \sqrt{\tilde{m}_{//}^*} \cos(\psi) & -\sqrt{\tilde{m}_{//}^*} \sin(\psi) & 0 \end{vmatrix}$$

et en utilisant la relation (VI.7), on obtient pour le Jacobien:

$$J_{\tilde{\epsilon}', \psi, \varphi} = \xi(\tilde{\epsilon}') \gamma(\tilde{\epsilon}') \left(\frac{2}{\hbar^2} \right)^3 \frac{\partial \gamma(\tilde{\epsilon}')}{2 \sqrt{\gamma(\tilde{\epsilon}')}} D_{\psi, \varphi} = \xi(\tilde{\epsilon}') \left(\frac{2}{\hbar^2} \right)^3 \frac{\partial \gamma(\tilde{\epsilon}')}{2} \sqrt{\gamma(\tilde{\epsilon}')} D_{\psi, \varphi}$$

$$J_{\tilde{\epsilon}', \psi, \varphi} = \xi(\tilde{\epsilon}') \left(\frac{2}{\hbar^2} \right)^3 \frac{\partial \gamma(\tilde{\epsilon}')}{2} \sqrt{\gamma(\tilde{\epsilon}')} D_{\psi, \varphi}$$

$$D_{\psi, \varphi} = \sqrt{\tilde{m}_{\perp 1}^* \tilde{m}_{\perp 2}^* \tilde{m}_{//}^*} (\sin^2(\psi) \sin(\psi) \cos^2(\varphi) + \sin^2(\psi) \sin(\psi) \sin(\varphi) + \cos^2(\psi) \cos^2(\varphi) \sin(\psi) + \cos^2(\psi) \sin(\psi) \sin^2(\varphi))$$

$$D_{\psi, \varphi} = \sqrt{\tilde{m}_{\perp 1}^* \tilde{m}_{\perp 2}^* \tilde{m}_{//}^*} \sin(\psi) = \tilde{m}_d^{*3/2} \sin(\psi)$$

On en déduit l'expression de la densité d'états à partir du maximum d'énergie:

$$\tilde{D}(\tilde{\epsilon}) = \frac{2}{(2\pi)^3} \iiint \xi(\tilde{\epsilon}') \gamma(\tilde{\epsilon}') \left(\frac{2}{\hbar^2} \right)^3 \frac{\partial \gamma(\tilde{\epsilon}')}{2} \sqrt{\gamma(\tilde{\epsilon}')} \tilde{m}_d^{*3/2} \sin(\psi) d\tilde{\epsilon}' d\psi d\varphi \delta(\tilde{\epsilon}'(\tilde{\mathbf{k}}) - \tilde{\epsilon})$$

Dans la plupart des semi-conducteurs de type III-V, les maxima d'énergie de bande sont situés aux points W, dans un plan transversal aux axes cristallographiques principaux Λ , et Δ .

Il en résulte que pour une énergie, $E = E_{\max} - \tilde{\epsilon}$, relativement au fond de la première bande, supérieure à l'énergie au pic de densité d'états, $E_{\text{dpic}} = E_{\max} - \tilde{\epsilon}_{\text{dpic}}$, il existe un angle elliptique ψ dans l'intervalle $[\psi_{\text{lim}}(\tilde{\epsilon}); \pi - \psi_{\text{lim}}(\tilde{\epsilon})]$ où $\psi_{\text{lim}}(\tilde{\epsilon}) \in [0; \frac{\pi}{2}]$, en dehors duquel il n'existe pas d'états de même énergie ou d'énergie supérieure.

Avec $\tilde{\epsilon}_{\max} = E_{\max} - E_{\text{pic}}$, on a donc:

$$\tilde{D}(\tilde{\epsilon}) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_0^{\tilde{\epsilon}_{\max}} \int_{\psi_{\text{lim}}(\tilde{\epsilon})}^{\pi - \psi_{\text{lim}}(\tilde{\epsilon})} \int_0^{2\pi} \xi(\tilde{\epsilon}') \gamma(\tilde{\epsilon}') \left(\frac{2}{\hbar^2} \right)^3 \frac{\partial \gamma(\tilde{\epsilon}')}{2} \sqrt{\gamma(\tilde{\epsilon}')} \tilde{m}_d^{*3/2} \sin(\psi) d\tilde{\epsilon}' d\psi d\varphi \delta(\tilde{\epsilon}'(\tilde{\mathbf{k}}) - \tilde{\epsilon})$$

$$\tilde{D}(\tilde{\epsilon}) = \frac{2}{(2\pi)^3} \xi(\tilde{\epsilon}) \left(\frac{2}{\hbar^2} \right)^3 \frac{\partial \gamma(\tilde{\epsilon})}{2} \sqrt{\gamma(\tilde{\epsilon})} \tilde{m}_d^{*3/2} \times \int_{\psi_{\text{lim}}(\tilde{\epsilon})}^{\pi - \psi_{\text{lim}}(\tilde{\epsilon})} \int_0^{2\pi} \sin(\psi) d\psi d\varphi \quad (\text{VI.8})$$

$$\text{avec } \int_{\psi_{\text{lim}}(\tilde{\epsilon})}^{\pi - \psi_{\text{lim}}(\tilde{\epsilon})} \int_0^{2\pi} \sin(\psi) d\psi d\phi = 4\pi \cos(\psi_{\text{lim}}(\tilde{\epsilon})) \quad (\text{VI.9})$$

Réécrivons la relation (VI.8) à l'aide de la relation (VI.9). On obtient après simplification:

$$\tilde{D}(\tilde{\epsilon}) = \frac{1}{2\pi^2} \xi(\tilde{\epsilon}) \left(\frac{2\tilde{m}_d^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{d\gamma(\tilde{\epsilon})}{d\tilde{\epsilon}} \sqrt{\gamma(\tilde{\epsilon})} \cos(\psi_{\text{lim}}(\tilde{\epsilon})) \quad (\text{VI.10})$$

Au maximum de bande, on peut utiliser une approximation de la DOS, en la calculant non pas relativement au fond de vallée comme précédemment, mais relativement au maximum de vallée en commençant l'intégration à partir du maximum. L'expression de la DOS résultante a la même formulation qu'au voisinage d'un minimum:

$$\tilde{D}(\tilde{\epsilon}) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2\tilde{m}_d^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{d\tilde{\gamma}(\tilde{\epsilon})}{d\tilde{\epsilon}} \sqrt{\tilde{\gamma}(\tilde{\epsilon})} \quad (\text{VI.11})$$

En explicitant $\xi(\tilde{\epsilon})$ dans la DOS donnée par la relation (VI.10), et en égalant cette DOS à celle calculée par rapport au maximum de bande dans la relation donnée par la relation (VI.11), on obtient l'angle limite $\psi_{\text{lim}}(\tilde{\epsilon})$:

$$\cos(\psi_{\text{lim}}(\tilde{\epsilon})) = \frac{\tilde{\gamma}(\tilde{\epsilon})}{\left(2\sqrt{\tilde{\gamma}(\tilde{\epsilon}_{\text{pic}})} - \sqrt{\tilde{\gamma}(\tilde{\epsilon})} \right)^2} \quad (\text{VI.12})$$

La relation (VI.12) exprime, qu'à une énergie dépassant le pic de DOS, seuls sont accessibles les états pour lesquels $\psi \in [\psi_{\text{lim}}(\tilde{\epsilon}); \pi - \psi_{\text{lim}}(\tilde{\epsilon})]$. A la limite inférieure correspondant au pic de DOS, $\psi_{\text{lim}} = 0$, et tous les états sont accessibles. A la limite supérieure correspondant à l'énergie aux points W, seuls sont accessibles les états W pour lesquels $\psi_{\text{lim}} = \frac{\pi}{2}$.

L'annexe VII montre que l'angle sphérique β par rapport à l'axe principal associé à la vallée peut s'exprimer en fonction de l'angle elliptique ψ . On peut donc à l'aide de (VI.12) exprimer l'angle limite par rapport à l'axe principal:

$$\sin(\beta_{\text{lim}}(\tilde{\epsilon})) = \frac{\sin(\psi_{\text{lim}}(\tilde{\epsilon}))}{\sqrt{1 + \left(\frac{m_{//}^*}{m_{\perp}^*} - 1 \right) \cos^2(\psi_{\text{lim}}(\tilde{\epsilon}))}}$$

Dans cette expression $m_{\perp}^*$ est la masse effective dans le plan transverse à l'axe principale. Elle est supposée isotrope dans ce plan: $m_{\perp}^* = m_{\perp 1}^* = m_{\perp 2}^*$.

A partir de l'énergie au pic de densité d'états, à une énergie donnée, seules sont donc accessibles les orientations sphériques (β, θ) contenues dans le domaine $[\beta_{\text{lim}}; \pi - \beta_{\text{lim}}] \times [0; 2\pi]$, où θ est l'angle de révolution par rapport à l'axe principal.

ANNEXE VII

PASSAGE ENTRE COORDONNÉES ELLIPTIQUES ET SPHÉRIQUES DANS LE MODÈLE

Les relations de dispersion locales en vallées latérales L et X présentant une symétrie elliptique (avec une restriction angulaire à haute énergie), il est pratique de les exprimer dans le système de coordonnées sphériques.

Le § VII.1 présente l'expression en coordonnées sphériques d'une relation de dispersion de type vallée, à symétrie elliptique.

Le § VII.2 présente l'expression du cosinus de l'angle par rapport à l'axe principal associé à la vallée en fonction des coordonnées elliptiques.

VII.1) EXPRESSION EN COORDONNÉES SPHÉRIQUES D'UNE RELATION DE DISPERSION DE TYPE VALLÉE À SYMÉTRIE ELLIPTIQUE.

Considérons la relation de dispersion pour $\varepsilon < \varepsilon_{\text{dpic}}$. Le calcul suivra le même principe pour la relation de dispersion à $\varepsilon \geq \varepsilon_{\text{dpic}}$. En égalant les composantes du vecteur d'onde $\mathbf{k}(\varepsilon)$, exprimé naturellement en coordonnées elliptiques, à ses composantes en coordonnées sphériques, on obtient:

$$\begin{cases} k_{\perp 1}(\varepsilon) \sin(\psi) \cos(\varphi) = k \sin(\beta) \cos(\theta) & \text{(VII.1)} \\ k_{\perp 2}(\varepsilon) \sin(\psi) \sin(\varphi) = k \sin(\beta) \sin(\theta) & \text{(VII.2)} \\ k_{//}(\varepsilon) \cos(\psi) = k \cos(\beta) & \text{(VII.3)} \end{cases}$$

Dans ces expressions, β est l'angle entre le vecteur d'onde et la direction cristallographique principale associée à la vallée satellite, et θ est l'angle de révolution autour de cet axe.

$$(VII.1), (VII.2) \Rightarrow \left(k_{\perp 1}^2(\varepsilon) \cos^2(\varphi) + k_{\perp 2}^2(\varepsilon) \sin^2(\varphi) \right) \sin^2(\psi) = k^2 \sin^2(\beta) \quad (VII.4)$$

$$\text{Posons } k_{\perp}(\varepsilon) = \sqrt{k_{\perp 1}^2(\varepsilon) \cos^2(\varphi) + k_{\perp 2}^2(\varepsilon) \sin^2(\varphi)} \quad (VII.5)$$

$$\left. \begin{aligned} (VII.4), (VII.5) &\Rightarrow k_{\perp}^2(\varepsilon) \sin^2(\psi) = k^2 \sin^2(\beta) \\ (VII.3) &\Rightarrow \cos(\psi) = \frac{k}{k_{//}(\varepsilon)} \cos(\beta), \text{ (2bis)} \end{aligned} \right\} \Rightarrow k_{\perp}^2(\varepsilon) \left(1 - \left(\frac{k}{k_{//}(\varepsilon)} \cos(\beta) \right)^2 \right) = k^2 \sin^2(\beta) \quad (VII.6)$$

$$(VII.6) \Leftrightarrow k^2 \left(\sin^2(\beta) + \left(\frac{k_{\perp}(\varepsilon)}{k_{//}(\varepsilon)} \cos(\beta) \right)^2 \right) = k_{\perp}^2(\varepsilon) \Leftrightarrow k = \frac{k_{\perp}(\varepsilon)}{\sqrt{\sin^2(\beta) + \left(\frac{k_{\perp}(\varepsilon)}{k_{//}(\varepsilon)} \cos(\beta) \right)^2}} \quad (VII.7)$$

On déduit de cette expression de k:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2} = \frac{\gamma(\varepsilon)}{\frac{\sin^2(\beta)}{m_{\perp 1}^* \cos^2(\varphi) + m_{\perp 2}^* \sin^2(\varphi)} + \frac{\cos^2(\beta)}{m_{//}^*}} \quad (\text{VII.8})$$

$$\left. \begin{aligned} (\text{VII.2}), (\text{VII.3}) \Rightarrow \text{tg}(\theta) &= \frac{k_{\perp 2}(\varepsilon)}{k_{\perp 1}(\varepsilon)} \text{tg}(\varphi) \\ (\text{VII.7}), (\text{VII.8}) \end{aligned} \right\} \Rightarrow \text{tg}^2(\varphi) = \frac{m_{\perp 1}^*}{m_{\perp 2}^*} \text{tg}^2(\theta)$$

$$\text{On en déduit: } m_{\perp 1}^* \cos^2(\varphi) + m_{\perp 2}^* \sin^2(\varphi) = \frac{m_{\perp 1}^* (1 + \text{tg}^2(\theta))}{1 + \frac{m_{\perp 1}^*}{m_{\perp 2}^*} \text{tg}^2(\theta)} = \frac{1}{\frac{\cos^2(\theta)}{m_{\perp 1}^*} + \frac{\sin^2(\theta)}{m_{\perp 2}^*}} \quad (\text{VII.9})$$

A l'aide des relations (VII.8), et (VII.9), on en déduit la relation de dispersion en coordonnées sphériques:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*(\beta, \theta)} = \gamma(\varepsilon)$$

avec $m^*(\beta, \theta)$, la masse effective dans la direction (β, θ) :

$$\left\{ \begin{aligned} m^*(\beta, \theta) &= \frac{1}{\frac{\sin^2(\beta)}{m_{\perp}^*(\theta)} + \frac{\cos^2(\beta)}{m_{//}^*}} \\ m_{\perp}^*(\theta) &= \frac{1}{\frac{\cos^2(\theta)}{m_{\perp 1}^*} + \frac{\sin^2(\theta)}{m_{\perp 2}^*}} \end{aligned} \right.$$

Lorsque la vallée est à symétrie elliptique de révolution, les masses transverses $m_{\perp 1}^*$ et $m_{\perp 2}^*$ sont égales, et la masse effective m^* ne dépend que de l'angle β par rapport à l'axe principal:

$$m^*(\beta) = \frac{1}{\frac{\sin^2(\beta)}{m_{\perp}^*} + \frac{\cos^2(\beta)}{m_{//}^*}}$$

VII.2) EXPRESSION DU COSINUS DE L'ANGLE PAR RAPPORT À L'AXE PRINCIPAL ASSOCIÉE À LA VALLÉE, EN FONCTION DES COORDONNÉES ELLIPTIQUES.

A partir des relations (VII.3), et (VII.7), sachant que $\left(\frac{k_{\perp}(\varepsilon)}{k_{//}(\varepsilon)}\right)^2 = \frac{m_{\perp}^*}{m_{//}^*}$, on en déduit

l'expression du cosinus de l'angle elliptique ψ à partir des coordonnées sphériques:

$$\cos(\psi) = \frac{\cos(\beta)}{\sqrt{1 + \left(\frac{m_{//}^*}{m_{\perp}^*} - 1\right) \sin^2(\beta)}}$$

On en déduit l'expression du sinus de l'angle polaire β à partir de l'angle elliptique, et de

$$\text{l'angle sphérique de révolution } \theta : \sin(\beta) = \frac{\sin(\psi)}{\sqrt{1 + \left(\frac{m_{//}^*}{m_{\perp}^*} - 1\right) \cos^2(\psi)}}$$

ANNEXE VIII

EXPRESSION EN VALLÉES DU CHAMP EXTÉRIEUR APPLIQUÉ

Le vecteur d'onde en vallées étant exprimé dans le repère de la vallée, comme le champ extérieur appliqué est exprimé dans le repère du centre de la zone de Brillouin, pour résoudre l'équation du mouvement il faut exprimer les deux vecteurs dans le même repère. Le champ extérieur est exprimé dans le repère de la vallée.

Le § VIII.1 présente l'expression du champ extérieur appliqué en vallée avec la matrice de passage associée pour une vallée quelconque.

Les § VIII.2 et VIII.3 précisent l'expression de la matrice de passage respectivement dans une vallée X et L.

VIII.1) EXPRESSION GÉNÉRALE DU CHAMP EXTÉRIEUR APPLIQUÉ EN VALLÉES.

Désignons par $M_{A \rightarrow \delta}^{(V)}$ la matrice de passage du champ extérieur appliqué dans le repère de la vallée V de symétrie δ .

Le champ extérieur vaut en vallée:

$$\mathbf{F}^{(V)} = M_{A \rightarrow \delta}^{(V)} \cdot \mathbf{F}$$

Un axe cristallographique de symétrie δ est repéré par ses coordonnées sphériques (β, θ) . La matrice donnant l'expression du champ en vallée V de symétrie δ vaut:

$$M_{A \rightarrow \delta}^{(V)} = \begin{pmatrix} \cos(\beta) \cos(\theta) & \sin(\theta) \cos(\beta) & -\sin(\beta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) & 0 \\ \sin(\beta) \cos(\theta) & \sin(\beta) \sin(\theta) & \cos(\beta) \end{pmatrix}$$

VIII.2) MATRICE DE PASSAGE DANS LE REPÈRE PROPRE À UNE VALLÉE X.

On a 6 demi-vallées X qui se ramènent par symétrie à 3 vallées X.

Les couples (β, θ) valent respectivement:

$(0,0)$ pour l'axe [001], $\left(\frac{\pi}{2}, 0\right)$ pour l'axe [100], et $\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$ pour l'axe [010].

On en déduit les matrices de passage:

$$M_{A \rightarrow X}^{(1)} = \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & +1 \end{pmatrix}, M_{A \rightarrow X}^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & +1 & 0 \\ +1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, M_{A \rightarrow X}^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 \end{pmatrix}$$

VIII.3) MATRICE DE PASSAGE DANS LE REPÈRE PROPRE À UNE VALLÉE L.

On a huit demi-vallées L qui se ramènent par symétrie à 4 vallées L.

Les indices V, identifiant les numéros de vallées dans les matrices de passage, varient dans le sens trigonométrique du premier quadrant ($K_x, K_y, K_z > 0$) jusqu'au quatrième.

Les couples (β, θ) valent respectivement:

$$\left(\arccos\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right), \frac{\pi}{4} \right) \text{ pour l'axe } [111], \left(\arccos\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right), 3\frac{\pi}{4} \right) \text{ pour l'axe } [\bar{1}11],$$

$$\left(\arccos\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right), 5\frac{\pi}{4} \right) \text{ pour l'axe } [\bar{1}\bar{1}1], \text{ et } \left(\arccos\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right), 7\frac{\pi}{4} \right) \text{ pour l'axe } [1\bar{1}1].$$

On en déduit les matrices de passage:

$$M_{A \rightarrow L}^{(1)} = \begin{pmatrix} +\frac{1}{\sqrt{6}} & +\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & +\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ +\frac{1}{\sqrt{3}} & +\frac{1}{\sqrt{3}} & +\frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}, M_{A \rightarrow L}^{(2)} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{6}} & +\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} & +\frac{1}{\sqrt{3}} & +\frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

$$M_{A \rightarrow L}^{(3)} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \\ +\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} & +\frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}, M_{A \rightarrow L}^{(4)} = \begin{pmatrix} +\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \\ +\frac{1}{\sqrt{2}} & +\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ +\frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} & +\frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

ANNEXE IX

RESTRICTION À LA DÉVIATION ANGULAIRE DANS LE MODÈLE DES VALLÉES ÉTENDUES À HAUTE ÉNERGIE

Dans le modèle des vallées étendues, à haute énergie toutes les orientations du vecteur d'onde pour un angle de déviation donnée $\Delta\beta$ ne sont pas accessibles en vallées latérales L et X à cause de l'anisotropie des points W. Cela se traduit par l'existence d'un cône à deux nappes symétriques par rapport au plan transverse à l'axe principal et passant par le centre de la vallée, dont chacune a pour demi-angle au sommet β_{lim} dépendant de l'énergie. Pour une énergie donnée, aucune déviation amenant le vecteur d'onde dans ce cône n'est autorisée. L'angle de déviation ne peut donc pas être choisi uniformément dans l'intervalle $[-\pi; +\pi]$, mais doit l'être dans l'intervalle $[-\Delta\chi_{\text{lim}}; +\Delta\chi_{\text{lim}}]$, avec $\Delta\chi_{\text{lim}} \in [0; \pi]$, comme l'indique la figure IX.1.

La matrice de passage d'un vecteur exprimé dans le repère propre associé au vecteur d'onde initial dans le repère de la vallée, est la matrice suivante:

$$P = \begin{pmatrix} \cos(\theta)\cos(\beta) & -\sin(\theta) & -\sin(\beta)\cos(\theta) \\ \sin(\theta)\sin(\beta) & \cos(\theta) & \sin(\beta)\sin(\theta) \\ -\sin(\beta) & 0 & \cos(\beta) \end{pmatrix}$$

L'égalité d'un vecteur du repère propre associé au vecteur d'onde initial, à son expression à l'angle limite β_{lim} donne pour la matrice de passage:

$$P \times \begin{bmatrix} \sin(\Delta\beta)\cos(\Delta\chi) \\ \sin(\Delta\beta)\sin(\Delta\chi) \\ \cos(\Delta\beta) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sin(\beta_{\text{lim}})\cos(\Delta\theta) \\ \sin(\beta_{\text{lim}})\sin(\Delta\theta) \\ \cos(\beta_{\text{lim}}) \end{bmatrix}$$

L'angle limite $\Delta\chi_{\text{lim}}$ de réorientation du vecteur d'onde, est déterminé à partir de l'égalité de la troisième composante, correspondant à la composante longitudinale:

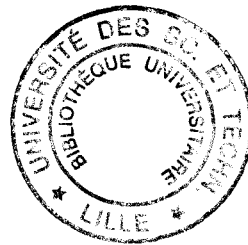
$$\Delta\chi_{\text{lim}} = \text{Arc cos} \left(\frac{\cos(\beta)\cos(\Delta\beta) - \cos(\beta_{\text{lim}})}{\sin(\beta)\sin(\Delta\beta)} \right)$$



Le vecteur d'onde initial $\mathbf{k}_i$, est repéré par les angles sphériques (β, θ) . A haute énergie, les orientations dans le secteur grisé sont inaccessibles. La restriction au domaine $[-\Delta\chi_{\text{lim}}; +\Delta\chi_{\text{lim}}]$ de l'angle azimutal $\Delta\chi$ de réorientation du vecteur d'onde après interaction $\mathbf{k}_f$, est due à la prise en compte des points W.

BIBLIOGRAPHIE.

- [ANG72]: A.Angot, «Complément de mathématiques à l'usage des ingénieurs de l'électrotechnique et des télécommunications», éd. Masson & Cie Paris, (1972).
- [BLA82]: J.Blakemore, J. Appl. Phys. 53 n°10, 123 (1982).
- [BRU89]: R.Brunetti & C.Jacoboni, Solid State Electron.32 n°12, 1663 (1989).
- [LEL74]: J.Lelong-Ferrand & J.M.Arnaudès, «Cours de mathématiques tome 1: algèbre», éd. Dunod Université Paris, (1974).
- [SMI69]: V.Smironov, «Cours de mathématiques supérieures, tome I», éd. Mir Moscou, (1969).



RÉSUMÉ

Ce travail présente une étude théorique du transport électronique en champ fort dans les matériaux III-V, à l'aide d'un modèle original de la structure de bande. Le modèle des "vallées étendues" rend compte de la structure de bande réelle avec suffisamment de précision, tout en ne nécessitant pas un important volume de calcul.

Dans le premier chapitre après avoir rappelé les aspects théoriques fondamentaux du transport électronique, nous présentons les principaux modèles de structure de bande. Puis nous rappelons sommairement les principaux mécanismes d'interactions dans le matériau massif. L'ionisation par choc, phénomène important en champ fort, est particulièrement décrite.

Le deuxième chapitre est consacré au développement du modèle des vallées étendues. Le modèle prend aussi bien en compte la première bande de conduction que la seconde bande. Il décrit correctement la structure de bande dans les directions principales et au voisinage des principaux minima et maxima d'énergie. La densité d'états qui en découle permet d'en déduire des probabilités d'interaction réalistes sur toute la gamme d'énergie. Le modèle des vallées étendues est ensuite mis en oeuvre dans la méthode Monte-Carlo afin de procéder à la simulation du transport électronique.

Le troisième chapitre étudie le transport dans les matériaux GaAs et InP, ce qui permet de présenter des grandeurs importantes comme l'énergie moyenne, la vitesse de dérive stationnaire, le libre parcours moyen, et le coefficient d'ionisation par choc. L'ionisation par choc est détaillée, et le rôle de la deuxième bande conduction dans ce phénomène est vérifié.

MOTS CLEFS: MATÉRIAUX III-V
TRANSPORT ÉLECTRONIQUE
MÉTHODE MONTE-CARLO
MODÉLISATION
STRUCTURE DE BANDE
DENSITÉ D'ÉTATS
IONISATION PAR CHOC