

N° d'ordre:

juin 2000 1996

50376
1996
336

THÈSE



présentée à

L'UNIVERSITÉ DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES DE LILLE

pour obtenir le titre de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ

Spécialité: **ÉLECTRONIQUE**

par

Ammar SLEIMAN

SIMULATION MONTE-CARLO DU TRANSPORT ELECTRONIQUE ET DES PHENOMENES DE DIFFUSION DANS LES HETEROSTRUCTURES III-V. APPLICATION AUX STRUCTURES MODFET ET DMT.

Soutenue le 17 Décembre 1996 devant la commission d'examen:

Membres du jury:

G. SALMER	Président
R. FAUQUEMBERGUE	Directeur de Thèse
J. L. THOBEL	Codirecteur de Thèse
J. ZIMMERMANN	Rapporteur
J. C. VAISSIERE	Rapporteur
P. LUGLI	Examineur
L. VARANI	Examineur
A. CAPPY	Examineur

A mes Parents

A mes Ami(e)s

Ce travail a été effectué à l'Institut d'Electronique et du 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, me fait l'honneur de présider ce jury d'examen et je l'en remercie vivement.

Cette thèse a été réalisée sous la direction de Monsieur le Professeur R. Fauquembergue. Je tiens à lui exprimer toute ma reconnaissance pour l'attention et la sympathie qu'il m'a toujours témoignées.

Je tiens particulièrement à remercier Monsieur J. L. Thobel, Chargé de recherche au CNRS de la constante attention qu'il a apportée au déroulement de ce travail, pour sa disponibilité et pour ses précieux conseils. Je tiens à lui témoigner ici ma sympathie et ma plus profonde gratitude.

Je remercie Monsieur J. Zimmermann, Directeur de recherche au CNRS, au LPCS de Grenoble, qui a accepté de rapporter ce travail et dont les conseils éclairés pendant le DEA m'ont aidé tout au long de ce travail.

Mes remerciements vont aussi à Monsieur, J. C Vaissière, Professeur à l'université de Montpellier, qui a accepté de participer au jury et de rapporter ce travail.

Je remercie profondément Monsieur P. Lugli, Professeur de l'université de Rome, et Monsieur L. Varani, Chargé de recherche au CNRS, au CEM de Montpellier, qui me font l'honneur de participer à ce jury.

Monsieur le Professeur A. Cappy a accepté d'examiner ce travail et je l'en remercie sincèrement.

Je remercie vivement Monsieur L. Baudry, P. Bourel qui ont contribué directement au développement de ce travail.

Je tiens à remercier également F. Banse et F. Dessenne doctorants, de l'équipe qui se sont montrés toujours aimablement disponibles à de nombreuses questions sur l'utilisation de logiciels.

Je n'oublierai pas d'associer à mes remerciements, les autres membres et anciens membres de l'équipe pour leur aide amicale et sympathique : O. Mouton, M. Badirou, M. Charef, P. Chevalier, O. Schuler, D. Courtecuisse, et N. Ménard.

Je remercie également Monsieur J. P. Dehorter, qui a réalisé la reproduction et la reliure de ce mémoire.

Introduction
Générale

INTRODUCTION GENERALE

De nos jours les systèmes de communications occupent une place importante et leur développement connaît un élan considérable. Le débit, le stockage et la vitesse de transmission de données qui représentent les principales caractéristiques de ces systèmes doivent sans cesse être améliorés pour répondre à des exigences toujours croissantes. De ce fait, ils sont réalisés à partir de composants microélectroniques de plus en plus complexes et fonctionnant à des fréquences très élevées. Une proportion croissante de ces composants utilisent les matériaux semiconducteurs III-V. Ces derniers possèdent des propriétés particulièrement intéressantes comme la forte mobilité des électrons, le gap important et direct, qui offrent de nombreuses applications hyperfréquences et optoélectroniques.

Outre le développement de la technologie de réalisation de ces composants qui est sophistiquée et coûteuse, leur amélioration nécessite une large connaissance de la physique du transport dans les matériaux qui les constituent. Pour cela, la modélisation de ces composants par simulation numérique est devenue une étape nécessaire. C'est dans ce cadre théorique que notre étude s'inscrit.

Dans ce travail nous étudions le transport électronique dans les gaz bidimensionnels (**2D**) dans les hétérostructures III-V. Nous nous sommes particulièrement intéressés à l'étude de la diffusion, un sujet qui n'a pas été suffisamment abordé jusqu'à présent et reste mal connu. Pour cela, nous avons considéré deux hétérostructures MODFETs (**M**odulation **D**oped **F**ield **E**ffect **T**ransistors) typiques puisqu'ils sont à la base des composants utilisés actuellement. Nous avons étudié aussi une variante de DMT (**D**oped **C**hannel **MIS**-like-**FET**) qui est adaptée à l'électronique de puissance.

Pour parvenir à cette fin, nous détaillons dans le premier chapitre le modèle de simulation Monte-Carlo que nous avons développé. Nous présentons le mouvement quasi-bidimensionnel, l'un des aspects fondamentaux dû à la quantification des états électroniques. Dans ce modèle, que nous avons voulu le plus complet possible nous avons introduit les aspects physiques fondamentaux : la non-parabolicité, la quantification des vallées L, X et le principe de Pauli.

Nous avons utilisé ce modèle dans le chapitre II pour étudier les caractéristiques de premier ordre et de second ordre des structures MODFETs en AlGaAs/InGaAs et en

AlInAs/InGaAs, à 300 K et 77 K. Nous rappelons les deux définitions des coefficients de diffusion. Nous montrons que ces deux méthodes sont toutes deux efficaces numériquement et qualitativement. Nous comparons ces deux méthodes et nous justifions notre choix de la méthode 'Étalement' et nous l'appliquons dans le reste de ce travail. Nous présentons successivement les résultats obtenus pour les deux hétérostructures, que nous comparons entre elles. Nous interprétons les résultats obtenus à la lumière des différentes interactions. Nous étudions enfin l'effet de la densité électronique sur le coefficient de diffusion longitudinal.

Dans le chapitre III, nous appliquons ce modèle à l'étude du transport électronique dans les hétérostructures à puits dopé du type DMT, plus spécialement destinées au fort courant. Nous considérons deux hétérostructures, une à puits infini en AsGa et une autre plus réaliste en AlGaAs/GaAs. Nous étudions l'influence de la répartition des impuretés sur le transport dans le puits. Nous présentons les caractéristiques de premier ordre, et nous examinons la réponse à un échelon de champ. Nous abordons dans la dernière partie de ce chapitre la détermination des coefficients de diffusion. Malheureusement, les théories existantes ne permettent d'étudier que les faibles densités électroniques. C'est pourquoi dans le chapitre IV, nous proposons une étude des coefficients de diffusion dans les gaz dégénérés. Nous expliquons par des exemples que les méthodes habituelles se limitent seulement au domaine non dégénéré. Nous proposons ensuite une méthode valable pour les systèmes dégénérés. Nous présentons les premiers résultats obtenus avec cette méthode dans le cas d'un DMT typique.

CHAPITRE I

MODELE DE SIMULATION MONTE CARLO

DU TRANSPORT ELECTRONIQUE

DANS LES HETEROSTRUCTURES III-V.

CHAPITRE I
MODELE DE SIMULATION MONTE-CARLO
DU TRANSPORT ELECTRONIQUE
DANS LES HETEROSTRUCTURES III-V.

I.1. Transistors à effet de champ - Hétérojonction	2
I.1.1. Généralités	2
I.1.2. Transistor à effet de champ	3
I.1.3. Structure d'un T.E.G.F.E.T et de ses dérivés, le M.I.S-like-F.E.T et le D.M.T4	5
I.1.4. Etats électroniques dans les hétérojonctions	5
I.1.5. Gaz bidimensionnels d'électrons	5
I.1.6. Détermination des états électroniques	5
I.1.7. Description de l'algorithme numérique	7
I.2. Transport électronique et méthode de Monte-Carlo	8
I.2.1. Equations de transport et choix de la méthode	8
I.2.2. Effet d'écrantage	9
I.2.3. Les différents mécanismes d'interactions	10
I.2.4. Calcul des probabilités de collision	10
I.2.5. Principe de la méthode de Monte-Carlo	11
I.3. Le Modèle	12
I.3.1. Etats électroniques - Prise en compte de la non-parabolicité	13
I.3.2. Formalisme des interactions	15
I.3.2.1. Interaction optique polaire	16
I.3.2.2. Interaction acoustique	18
I.3.2.3. Interaction d'alliage	19
I.3.2.4. Interaction sur impuretés ionisées	19
I.3.3. Prise en compte du principe d'exclusion de Pauli	21
I.4. Organigramme - Les éléments essentiels	23
Références	

Chapitre I

Dans ce chapitre nous présentons les outils qui permettent de mener une large étude des phénomènes de transport et du coefficient de diffusion dans les gaz bidimensionnels d'électrons.

Pour ce faire, ce chapitre est organisé de la manière suivante :

Dans la première partie nous présentons les différents types de transistors à hétérojonctions qui ont motivé notre étude tels que le T.E.G.F.E.T, le M.I.S-like-F.E.T et le D.M.T. La quantification des états électroniques qui est un aspect fondamental des hétérostructures sera bien développée. Nous présentons en particulier les outils numériques permettant de déterminer les énergies propres et les fonctions d'onde électroniques.

Dans la deuxième partie nous évoquons : l'équation du transport de Boltzmann, ainsi que les différents mécanismes qui régissent le transport électronique: les différentes interactions, l'écrantage linéaire. Nous terminons cette partie en présentant rapidement la méthode de Monte-Carlo.

La troisième partie est consacrée au modèle que nous avons développé pour étudier le transport électronique dans les hétérostructures. Nous avons introduit les effets physiques fondamentaux: la non-parabolicité, la quantification de toutes les vallées (Γ , L, X), le principe de Pauli. Toutes les interactions importantes sont prises en compte. Ce modèle sera utilisé dans les chapitres qui vont suivre.

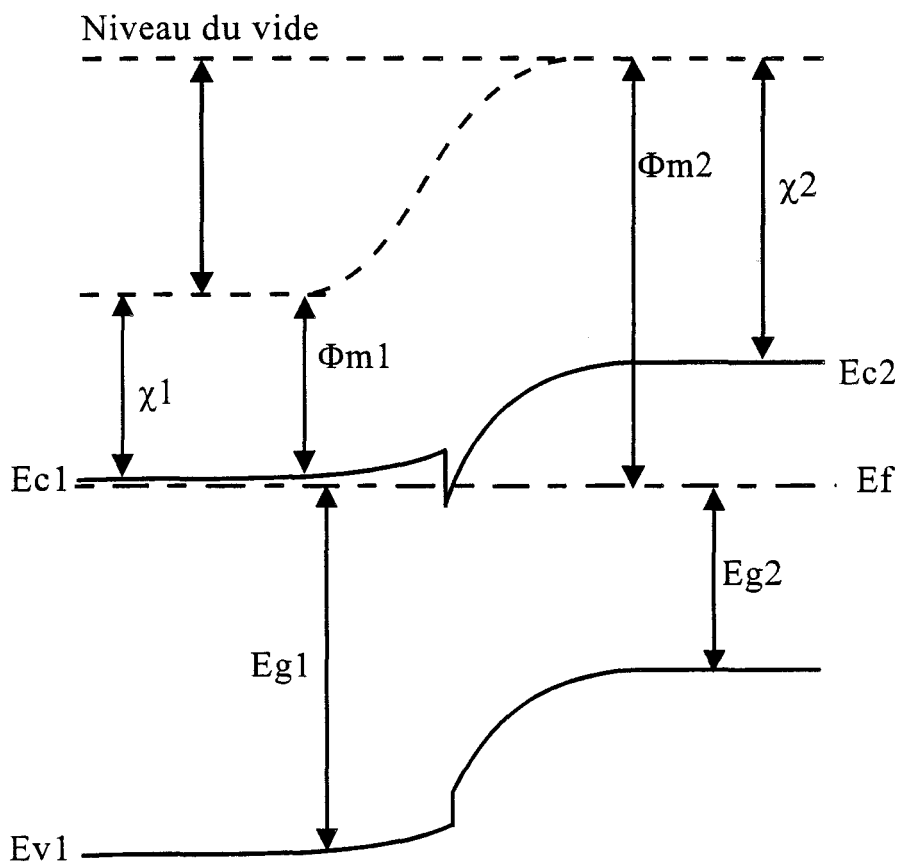
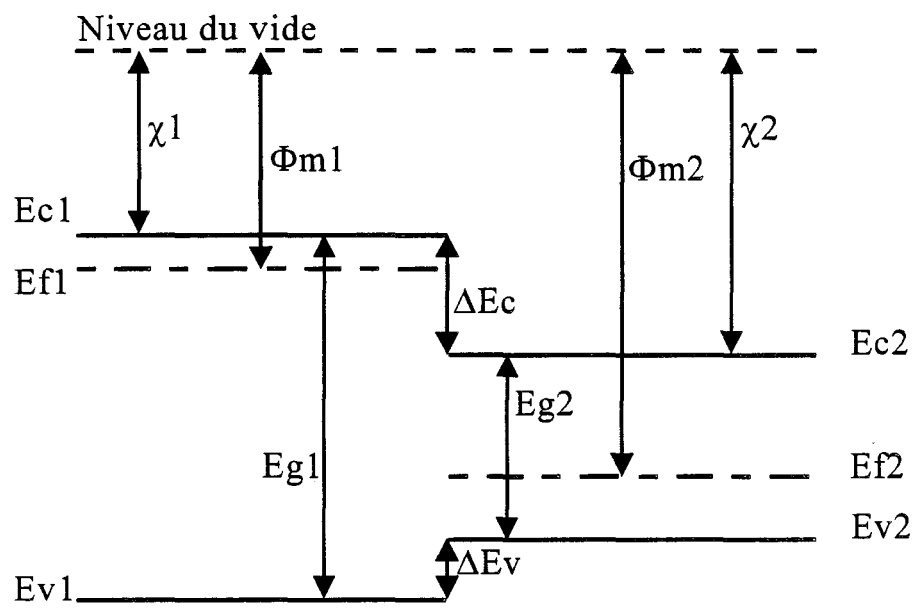


Figure (I-1)
Modèle d'Anderson d'une hétérojonction

I.1. Transistors à effet de champ - Hétérojonction

I.1.1. Généralités

Dans un semiconducteur, la densité des porteurs libres est liée à la présence d'impuretés donneuses ou acceptrices. Mais cette présence est un facteur limitant en ce qui concerne les propriétés de transport à cause de l'interaction entre électrons et impuretés ionisées. C'est pourquoi les concepteurs ont cherché à séparer spatialement les porteurs libres des impuretés pour pouvoir bénéficier à la fois d'une forte densité de charge et des performances de transport d'un matériau intrinsèque. Cette séparation a été possible grâce à l'utilisation d'hétérojonctions.

C'est en 1962 que R.L ANDERSON [1] a proposé le modèle de l'hétérojonction qui sera le plus utilisé et deviendra une référence dans son domaine. Dans ce modèle, lors de la jonction de deux semiconducteurs à bandes interdites différentes, les niveaux de Fermi s'alignent. La conservation des paramètres physiques de part et d'autre de l'interface entraîne des courbures des bandes de conduction et de valence, ainsi que des discontinuités à l'interface pour ces deux bandes (figure (I-1)).

En 1969 L. Esaki et R. Tsu [2] ont suggéré qu'une telle structure présenterait une faible interaction entre électrons et impuretés ionisées, grâce à la technique dite de modulation de dopage. Celle-ci consiste à doper uniquement la couche à bande interdite plus élevée, réalisant ainsi la séparation spatiale entre impuretés et les électrons accumulés dans la couche à bande interdite plus faible.

En 1978 R. Dingle et Coll [3] confirment les prévisions d'Anderson en appliquant cette technique pour un superréseau de GaAs non dopé / AlGaAs dopé de type n^+ . Ils ont observé un transfert d'électrons de l'AlGaAs vers l'AsGa qui viennent s'accumuler à l'interface et forment un gaz bidimensionnel d'électrons de très haute mobilité électronique.

L'évolution des techniques de croissance cristalline a permis d'utiliser plusieurs matériaux qui ont facilité le développement de diverses hétérostructures. Celles-ci ont permis d'améliorer un des composants les plus utilisés en électronique: le transistor à effet de champ.

I.1.2. Transistor à effet de champ

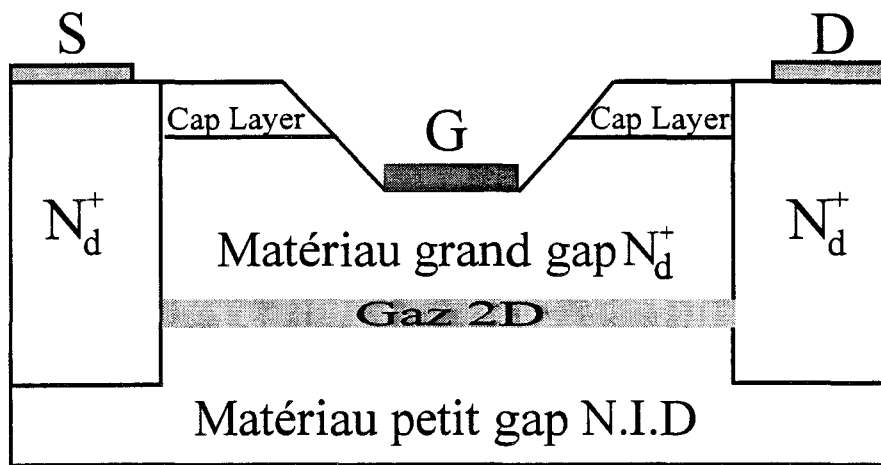
Le principe de fonctionnement d'un transistor à effet de champ, est basé sur l'existence d'un canal conducteur dont les deux extrémités portent des électrodes appelées Source et Drain. Une différence de potentiel entre celles-ci, provoque la naissance d'un courant appelé courant de drain, qui circule dans le canal. L'intensité de ce courant dépend de la section du canal conducteur et de la densité électronique des porteurs libres dans ce canal. Pour le moduler, une troisième électrode appelée Grille, est placée latéralement entre la source et le drain.

Parmi les transistors à effet de champ, on trouve, entre autres les M.E.S.F.E.Ts, les T.E.G.F.E.Ts, les M.I.S-like-F.E.Ts et les D.M.Ts.

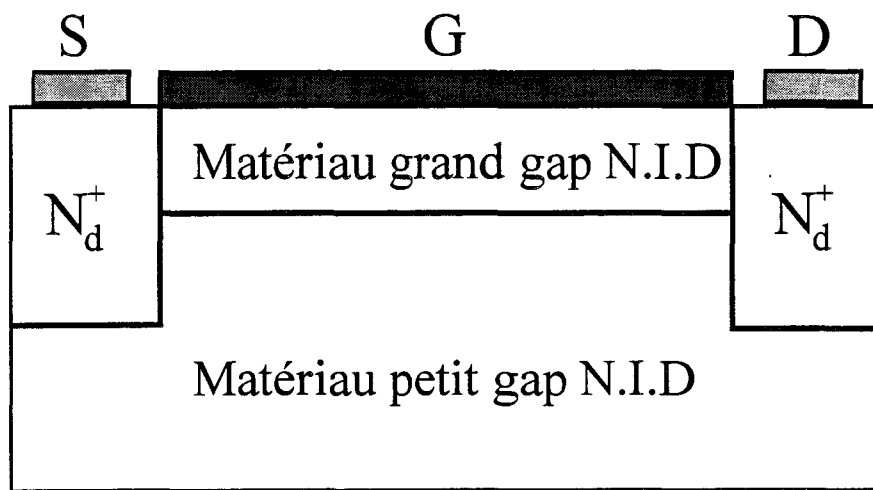
Tout d'abord on a les transistors à effet de champ du type M.E.S.F.E.T (Metal Semiconductor Field Effect Transistor) à contact Schottky basés sur la modulation de la section du canal conducteur.

On trouve ensuite les transistors à effet de champ, basés sur la modulation de la densité électronique de porteurs libres dans le canal conducteur. C'est vers 1980 que cette nouvelle famille de transistors est apparue. Ceux-ci sont connus sous différentes dénominations: T.E.G.F.E.T (Two Dimensional Electron Gas Field Effect Transistors) pour THOMSON [4] et H.E.M.T (High Electron Mobility Transistor) pour FUJITSU [5].

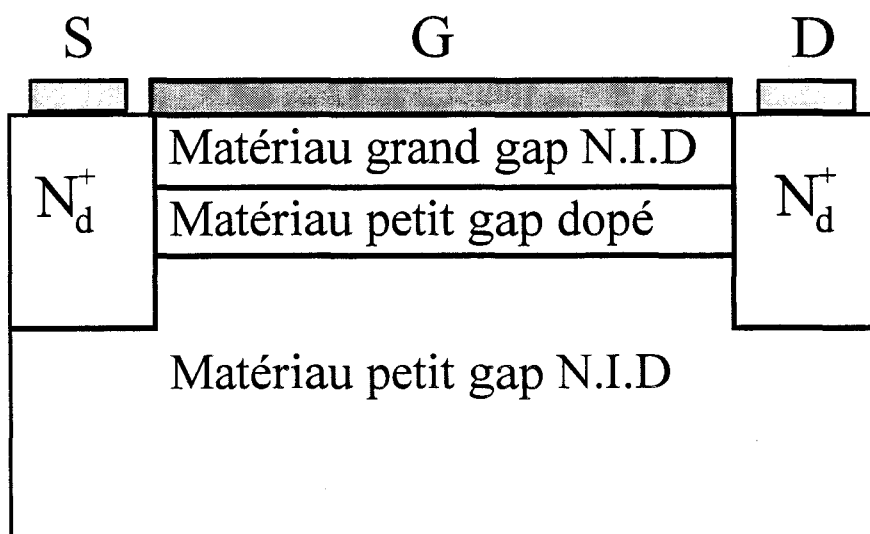
Les premiers T.E.G.F.E.Ts ont bénéficié des conditions de transport dans le GaAs non dopé, en utilisant l'hétérojonction AlGaAs/GaAs, puisque le ternaire AlGaAs possède un gap supérieur à celui du GaAs et a sensiblement le même paramètre de maille. Ensuite dans le but d'améliorer ce transistor, les concepteurs ont cherché à remplacer le GaAs par le GaInAs qui possède de meilleures propriétés de transport. Alors est apparu le T.E.G.F.E.T utilisant l'hétérojonction AlInAs/GaInAs qui croît en accord de maille sur InP et bénéficie des qualités de transport du GaInAs. Ensuite, ce sont les T.E.G.F.E.T pseudomorphiques qui ont vu le jour. Ils utilisent des hétérojonctions comme AlGaAs/InGaAs, AlInAs/InGaAs où le transport des porteurs se fait dans l'InGaAs non adapté en maille avec le substrat. Cependant, sur une faible épaisseur la croissance s'effectue sans apparition de dislocation, le GaInAs étant mécaniquement contraint.



a) Structure générale du T.E.G.F.E.T



b) Structure générale du M.I.S-like-F.E.T



c) Structure générale du D.M.T

Figure (I-2)

Il existe divers autres composants à hétérojonctions utilisés pour des applications spécifiques. Ainsi on trouve le M.I.S-like-F.E.T (**Metal Insulator Semiconductor-like-Field-Effect-Transistor**) est particulièrement adapté aux applications logiques et à l'électronique intégrée. De même le D.M.T (**Doped-Channel-MIS-like-FET**) est plus spécialement adapté à l'électronique de puissance. Le fonctionnement et la structure de ces transistors sont similaires à celle du T.E.G.F.E.T .

I.1.3. Structure d'un T.E.G.F.E.T et de ses dérivés, le M.I.S-like-F.E.T et le D.M.T

La structure de base d'un T.E.G.F.E.T est présentée sur la figure (I-2a). Elle est constituée, essentiellement de deux matériaux de nature différente et de trois contacts qui permettent de contrôler le courant circulant dans la structure.

La couche superficielle très fortement dopée (appelée « Cap layer ») reçoit les deux contacts de source et de drain. Cette couche permet de réduire les résistances d'accès et d'améliorer les résistances de contacts.

La couche de matériau à grand gap fortement dopée a pour rôle de fournir les électrons libres à la structure. De plus, elle reçoit le contact Schottky de grille.

Vient ensuite une couche de matériau à grand gap non intentionnellement dopé (nid) appelée « spacer ». Cette couche permet d'accroître la séparation spatiale entre électrons et impuretés, et donc de réduire les interactions à distance électrons-impuretés.

La couche suivante, constituée de matériau à petit gap non intentionnellement dopé, est la plus importante dans la mesure où elle reçoit le gaz bidimensionnel d'électrons, et assure en grande partie la conduction du courant.

La structure du M.I.S-like-F.E.T ressemble à celle du T.E.G.F.E.T avec comme seule différence que la couche supérieure est non intentionnellement dopée (figure (I-2b)). L'avantage de cette structure est que la tension de pincement est beaucoup plus homogène sur une plaquette, ce qui est favorable à l'intégration.

La structure du DMT est similaire à celle du MIS-like-FET avec en plus un canal fortement dopé (figure (I-2c)). Cette structure présente le même avantage que celle du M.I.S-like-F.E.T mais le canal dopé permet d'obtenir un meilleur courant.

I.1.4. Etats électroniques dans les hétérojonctions

L'apparition des hétérojonctions a contribué d'une façon directe à la progression de l'électronique. Elles ont aidé à améliorer les composants à effet de champ et à favoriser l'apparition de composants dont le fonctionnement est basé sur des effets quantiques. Mais cette progression dans ce domaine s'accompagne d'un accroissement de la complexité de la physique qui régit le fonctionnement de ces hétérojonctions.

Ce paragraphe est consacré à la mise en évidence du principal effet physique introduit par l'utilisation des hétérojonctions, qui est la quantification du mouvement électronique.

I.1.5. Gaz bidimensionnels d'électrons

Lorsqu'un matériau à grande bande interdite, très dopé, est juxtaposé sur le matériau à petite bande interdite intrinsèque, les électrons transfèrent dans le semiconducteur à faible bande interdite. Ils viennent s'accumuler à l'interface, où existe la barrière de potentiel due à l'hétérojonction. La bande de conduction va donc se courber vers les énergies les plus faibles pour permettre à une forte densité d'électrons de demeurer au voisinage de l'interface. Il y a formation d'un puits de potentiel dont la faible largeur (100 à 200 Å) engendre des effets quantiques qui vont caractériser le mouvement des électrons.

En effet, des études de la couche d'accumulation d'une hétérojonction ont montré que les électrons qui la constituent, ont un mouvement quasi-bidimensionnel [3]. Ce qui signifie que ces électrons peuvent uniquement se déplacer dans un plan parallèle à celui de l'hétérojonction. Cela est dû à la quantification de l'énergie dans la direction perpendiculaire à l'interface. Ce caractère bidimensionnel peut être mis en évidence expérimentalement par la méthode de Shubnikov de Haas [6]. Cependant les électrons ne sont bidimensionnels que du point de vue dynamique, et non spatialement, dans la mesure où leur fonction d'onde possède une étendue spatiale, certes réduite, dans la troisième dimension. C'est pourquoi, en toute rigueur il faut parler d'un gaz électronique quasi-bidimensionnel.

I.1.6. Détermination des états électroniques

Dans le puits de potentiel, les états électroniques sont solutions de l'équation de Schrödinger, qui est résolue dans l'approximation de la masse effective et dans le formalisme de la fonction enveloppe.

La fonction d'onde électronique est divisée en deux parties distinctes :

Chapitre I

- une partie variant rapidement dans l'espace (*onde de Bloch*) qui intervient par l'intermédiaire de paramètres effectifs (*masse, structure de bande*) [7] ;

- une autre partie variant lentement à l'échelle d'une maille atomique qui est la fonction enveloppe.

La particule est décrite par la fonction enveloppe de la forme:

$$\Psi_i(x, y, z) = \varphi_i(x, y) * \xi_i(z) \quad (\text{éq I-1})$$

$\varphi_i(x, y)$: l'onde plane de la forme $e^{ik_x x + ik_y y}$

$\xi_i(z)$: partie dépendant du z de la fonction enveloppe. Elle traduit la quantification selon z .

Pour un électron en sous-bande i on a:

$$(H_0 + V(z))|\psi_i\rangle = \varepsilon_i|\psi_i\rangle \quad (\text{éq I-2})$$

H_0 : Hamiltonien de l'énergie cinétique

$V(z)$: énergie potentielle dans la structure

ε_i : énergie propre

$|\psi_i\rangle$: fonction enveloppe totale.

L'énergie de l'électron suivant z étant quantifiée, la bande de conduction prend la forme:

$$\varepsilon = \varepsilon_{//}(k_{//}) + \varepsilon_i \quad (\text{éq I-3})$$

à chaque état lié i d'énergie ε_i correspond une "sous-bande"

$\varepsilon_{//}(k_{//})$: est l'énergie correspondant au vecteur d'onde $k_{//}$ dans le plan de l'interface

Si la relation $\varepsilon_{//}(k_{//})$ est supposée parabolique, on obtient la relation classique:

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k_{//}^2}{2m_{//}^*} + \varepsilon_i \quad (\text{éq I-4})$$

\hbar : constante de Planck

$m_{//}^*$: masse effective en sous-bande i

Perpendiculairement à l'interface, les états électroniques et les fonctions d'onde $\xi_i(z)$ vérifient l'équation de Shrödinger Ben Daniel Duke [8] donnée ci-dessous, qui tient compte de la dépendance spatiale de la masse effective:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m_z^*(z)} \frac{\partial \xi_i}{\partial z} \right) + V(z) \xi_i(z) = \varepsilon_i \xi_i(z) \quad (\text{éq I-5})$$

Sa résolution exige la détermination du potentiel $V(z)$ qui dépend de la densité volumique de charge $\rho(z)$ d'après l'équation de Poisson:

$$\frac{\partial^2 V(z)}{\partial z^2} = - \frac{\rho(z)}{\epsilon_0 \epsilon_r} \quad (\text{éq I-6})$$

Trouver une solution analytique, est difficile, voir impossible, à obtenir vu que les deux équations sont couplées. C'est pour cela qu'on utilise une procédure numérique qui consiste à résoudre de façon autocohérente les équations de Schrödinger et Poisson chaque fois que nous étudions une structure réelle.

I.1.7. Description de l'algorithme numérique

Le but est de résoudre, dans la direction perpendiculaire à l'interface, les équations de Shrödinger et Poisson. La méthode utilise la technique des différences finies, elle est déduite de celle proposée par Stern [9] [10]. La procédure que nous avons exploitée dérive de celle mise au point par Cappy [11] et Alamkan [12]. L'algorithme est le suivant:

- le potentiel de départ $V_0(z)$ est déterminé à partir de la statistique de Fermi-Dirac, la position du niveau de Fermi étant prise comme valeur de référence ;

- les énergies des sous-bandes et les fonctions d'onde correspondantes sont obtenues par la résolution de l'équation de Schrödinger ;

Chapitre I

- le niveau de Fermi et la répartition électronique dans la structure $n(z)$ sont à nouveau calculés ;

- à la nouvelle distribution de charge $n(z)$ correspond un nouveau potentiel $V_1(z)$ calculé par la résolution de l'équation de Poisson. $V_1(z)$ sera utilisé lors de l'iteration suivante après utilisation d'un facteur de convergence ;

- tant que la valeur du niveau de Fermi est non nulle (supérieur à une précision η) alors une nouvelle iteration est effectuée.

I.2. Transport électronique et méthode de Monte-Carlo

I.2.1. Equations de transport et choix de la méthode

Dans un semiconducteur, le comportement au cours du temps des électrons de la bande de conduction résulte à la fois de l'action extérieure du champ électrique appliqué et de l'effet des collisions relatives à la présence du réseau cristallin et de ses défauts (impuretés ionisées). Le comportement du gaz d'électrons est décrit par la fonction de distribution $\bar{f}_i(\bar{r}, \bar{k}, t)$ pour la sous-bande i . Celle-ci est, dans l'approximation quasi classique, solution de l'équation de Boltzmann. Elle permet de calculer toutes les grandeurs moyennes caractéristiques des phénomènes étudiés: vitesse, énergie, coefficients de diffusion, mobilité....etc.

Sous une forme très générale, l'équation de Boltzmann s'écrit:

$$\frac{d\bar{f}_i(\bar{r}, \bar{k}, t)}{dt} = -\bar{\nabla}_{\bar{r}} \bar{f}_i \cdot \bar{v} - \frac{1}{\hbar} \bar{\nabla}_{\bar{k}} \bar{f}_i \cdot q \bar{E} + \left(\frac{\partial \bar{f}_i(\bar{r}, \bar{k}, t)}{\partial t} \right)_{\text{collisions}} \quad (\text{éq I-7})$$

$\bar{f}_i(\bar{r}, \bar{k}, t)$ peut dépendre de \bar{r} quand le champ électrique \bar{E} dans le semiconducteur est non uniforme spatialement; elle peut aussi dépendre explicitement du temps quand on observe des phénomènes non stationnaires dues à la présence de champs dépendant du temps.

\bar{v} : est la vitesse d'un porteur que l'on peut calculer si l'on connaît la structure de bande $\varepsilon(\bar{k})$.

$$\bar{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \bar{k}} \quad (\text{éq I-8})$$

$\left(\frac{\partial \bar{f}_i(\bar{r}, \bar{k}, t)}{\partial t} \right)$ collisions représente la variation temporelle de la distribution due aux

interactions.

A cause de la forme intégrodifférentielle de l'équation de Boltzmann, il est très difficile de trouver une forme analytique exacte de la solution. C'est la raison pour laquelle on a recours généralement à des hypothèses simplificatrices qui peuvent limiter considérablement le domaine de validité des solutions.

Pour éviter cela, on fait appel en général à des méthodes numériques, mises en oeuvre sur ordinateur. Parmi celles-ci, il y a par exemple les méthodes itératives [13], ou la méthode de Monte-Carlo [14].

La raison du succès de la méthode de Monte-Carlo tient en grande partie à sa simplicité et à sa souplesse d'utilisation, car elle peut être mise en oeuvre quelles que soient les conditions imposées, et peut en particulier rendre aussi bien compte des phénomènes stationnaires que non stationnaires. Cette souplesse vient du fait qu'on peut introduire d'une manière indépendante les différentes interactions subies par les électrons ou le principe de Pauli. C'est la méthode que nous avons adoptée, compte tenu de l'expérience acquise dans l'équipe.

I.2.2. Effet d'écrantage

Le phénomène d'écrantage d'un gaz électronique a été initialement introduit dès les années 50 dans la physique du solide [15] [16]. Au cours de ces années des travaux théoriques ont été réalisés, et sont devenus la base des études du phénomène d'écrantage dans les semiconducteurs.

Ainsi sous l'effet d'un potentiel de collision, le gaz électronique est déformé. Pour retrouver son équilibre, il est nécessaire que le gaz d'électrons se réarrange spatialement, entraînant une augmentation du nombre des électrons là où l'énergie potentielle est la plus faible. Cette modification de la distribution électronique est d'autant plus importante que la concentration en électrons est élevée. Elle a pour effet de modifier l'expression du potentiel intervenant dans le calcul des probabilités de transitions. On dit que le potentiel de collision est écranté par le gaz d'électrons.

Le comportement d'écrantage d'un gaz d'électrons peut être décrit par la fonction diélectrique dans la mesure où la réponse du gaz électronique à l'application d'un potentiel extérieur est linéaire, ce qui est le cas quand le potentiel appliqué est assez faible. Cette condition est la même que celle qui assure la validité de la règle d'or de Fermi. L'expression de la fonction diélectrique est donnée par Lindhard [17] pour les gaz 3D. Le calcul du potentiel écranté que nous avons utilisé est bien détaillé par Baudry [18].

I.2.3. Les différents mécanismes d'interactions

Nous avons vu précédemment à propos de l'équation de Boltzmann que parmi les quantités fondamentales qui conditionnent l'évolution des porteurs figure la fonction

$\left(\frac{\partial \bar{f}(\bar{r}, \bar{k}, t)}{\partial t} \right)_{\text{collisions}}$. Elle représente la variation temporelle de la distribution compte tenu

des interactions des porteurs avec le milieu. Il est inutile de passer en revue les différentes interactions que peut subir l'électron au cours de son déplacement dans un semiconducteur. Nous nous contentons seulement de les nommer puisque les définitions ont été fournies en détail par Baudry [18]. Dans la catégorie interaction avec les imperfections du cristal on trouve principalement l'interaction sur impuretés ionisées qui fera l'objet d'une étude détaillée dans la troisième partie de ce chapitre. On peut également ranger dans cette catégorie l'interaction d'alliage. Dans la catégorie interaction avec le réseau on trouve l'interaction sur phonon acoustique, traitée par la méthode du potentiel de déformation, l'interaction optique polaire et non polaire, l'interaction intervallée.

I.2.4. Calcul des probabilités de collision

Les collisions qu'un électron est susceptible de subir au cours de son évolution dans un système physique sont caractérisées par $S_{ij}(\bar{k}, \bar{k}')$. C'est la densité de probabilité par unité de temps qu'un électron subisse une collision l'amenant de l'état $\left| \xi_{i, \bar{k}}(\bar{r}) \right\rangle$ dans un autre état

$\left| \xi_{j, \bar{k}'}(\bar{r}) \right\rangle$ dont l'expression est donnée par la règle d'or de Fermi:

$$S_{ij}(\bar{k}, \bar{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \left| M_{ij}(\bar{k}, \bar{k}') \right|^2 \delta(\varepsilon_{\bar{k}} - \varepsilon_{\bar{k}'} \pm \Delta\varepsilon) \quad (\text{éq I-9})$$

Chapitre I

la fonction δ de Dirac traduit la conservation de l'énergie et tient compte du caractère élastique ou non du mécanisme de collision mis en jeu.

i et j sont les indices des sous-bandes

$M_{ij}(\bar{k}, \bar{k}')$ est l'élément de matrice défini par

$$\left| M_{ij}(\bar{k}, \bar{k}') \right|^2 = \left\langle \xi_{j, \bar{k}'}^*(\bar{r}) \left| V(\bar{r}) \right| \xi_{i, \bar{k}}(\bar{r}) \right\rangle = \int \xi_{j, \bar{k}'}^*(\bar{r}) V(\bar{r}) \xi_{i, \bar{k}}(\bar{r}) d\bar{r} \quad (\text{éq I-10})$$

$V(\bar{r})$ est le potentiel perturbateur responsable de la collision. $\xi_{i, \bar{k}}$ et $\xi_{i, \bar{k}'}$ sont les fonctions d'onde électronique.

Pour aboutir à cette forme de $S_{ij}(\bar{k}, \bar{k}')$ nous avons considéré les hypothèses suivantes:

a- on suppose que $V(\bar{r})$ est suffisamment faible pour que la fonction d'onde après interaction ait la même forme mathématique que celle avant interaction. Ceci constitue l'approximation de Born [19] ;

b- on utilise la théorie des perturbations dépendantes du temps qui permet de déterminer $S_{ij}(\bar{k}, \bar{k}')$. Si l'on ne retient que le premier terme du développement asymptotique et que l'on suppose que le temps entre deux collisions est grand devant la durée d'une collision, on aboutit à la règle d'or de Fermi.

Pour qu'il y ait transition de l'état \bar{k} vers l'état \bar{k}' il faut que ce dernier soit libre (Principe d'exclusion de Pauli). La probabilité de collision est donnée par:

$$\lambda(\bar{k}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int S_{ij} (1 - \bar{f}(\bar{k}')) d\bar{k}' \quad (\text{éq I-11})$$

A faible densité $f(\bar{k}') \approx 0$ et on peut négliger le principe de Pauli.

La prise en compte du principe de Pauli sera bien détaillée au chapitre IV. Des résultats seront montrés et détaillés dans la section (IV.2).

I.2.5. Principe de la méthode de Monte-Carlo

Le principe de cette méthode [14] consiste à suivre au cours du temps, dans l'espace géométrique et dans l'espace réciproque, l'évolution d'un ensemble de porteurs représentant la

population électronique réelle. En effet, le mouvement des porteurs est décrit de façon classique comme une succession de vols libres (accélérations due au champ électrique) et d'interactions instantanées (collisions avec le réseau). Dans notre cas, le temps est discrétisé en pas réguliers dt . L'action du champ extérieur E entre t et $t+dt$ se traduit par une variation du vecteur d'onde \vec{k} qui s'exprime sous la forme:

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{q}{\hbar} E \quad (\text{éq I-12})$$

Une procédure de tirage aléatoire permet de déterminer s'il y a lieu de faire intervenir ou non une interaction parmi celles introduites dans le modèle. Alors une procédure de tirage aléatoire permet de déterminer l'état final de l'électron. La connaissance de la structure de bande $\varepsilon(\vec{k})$ permet de connaître à chaque instant la vitesse et la position du porteur dans l'espace direct. Ainsi, l'expression de la vitesse des particules est la suivante:

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \quad (\text{éq I-13})$$

Sa position est donnée à chaque instant par l'intégrale de la vitesse:

$$\vec{r} = \vec{r}_0 + \int_0^t \vec{v}(t') \cdot dt \quad (\text{éq I-14})$$

où \vec{r}_0 représente la position initiale du porteur.

Ainsi, deux ensembles de données seront nécessaires pour étudier la dynamique électronique avec la méthode Monte-Carlo. D'une part il faut connaître la forme des bandes d'énergie où vont évoluer les électrons, d'autre part, il faut connaître les expressions de toutes les probabilités de collisions que ces électrons sont susceptibles de subir durant leur mouvement. Dans les paragraphes suivants, nous allons aborder en détails ces deux points.

I.3. Le Modèle

Nous avons construit un modèle Monte-Carlo du transport dans les hétérostructures, que nous avons voulu le plus complet possible. Nous avons introduit successivement les effets physiques fondamentaux afin d'avoir un modèle bien adapté à l'étude du transport électronique dans une large gamme de champs appliqués dans la direction parallèle à

l'hétérojonction. Nous avons tenu compte de la non-parabolicité, de la quantification de toutes les vallées (Γ, L, X), du transfert d'électrons dans les vallées satellites et dans les couches barrières, phénomènes importants à champ fort. Nous avons pris en compte le principe de Pauli qui lui trouve son importance à champ faible lorsqu'on étudie les gaz dégénérés (pour les fortes densités de porteurs). Dans notre modèle toutes les interactions importantes sont prises en compte (impuretés ionisées, acoustique, optique polaire et non polaire, intervallées, inter-sous-bandes et intra-sous-bande). Lorsque nous considérons des matériaux pseudomorphiques, nous tenons compte de l'effet de la contrainte sur les propriétés du matériau. En particulier la déformation de la maille abaisse la symétrie cristalline, ce qui entraîne une légère anisotropie de la vallée centrale et une levée de dégénérescence des vallées X. Dans ce dernier cas, qui est celui de l'InGaAs sur GaAs, on doit considérer quatre jeux de vallées: Γ , L, X^- et X^+ . (Les vallées X^- sont 4 fois dégénérées, les vallées X^+ 2 fois).

I.3.1. Etats électroniques - Prise en compte de la non-parabolicité

Le phénomène de non-parabolicité est introduit dans l'équation de Schrödinger en supposant qu'il n'affecte pas les fonctions d'onde mais uniquement les énergies propres. La relation de dispersion $\varepsilon(k)$ est également modifiée par la prise en compte de la non-parabolicité.

Pour les matériaux III-V en volume on utilise la relation :

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

α est le coefficient de non-parabolicité en vallée v.

m^* est la masse effective en volume au fond de la vallée v.

Si on néglige la non-parabolicité ($\alpha=0$), l'équation de Schrödinger pour les électrons s'écrit:

$$H_0 \xi_i^0 = \varepsilon_i^0(\vec{k}) \xi_i^0 \quad (\text{éq I-16})$$

avec

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} \right] + V(z) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*(z)} \quad (\text{éq I-17})$$

une très bonne approximation est:

$$\varepsilon_i^0(k) = \varepsilon_i^0(k=0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_i^*} \quad (\text{éq I-18})$$

où m_i^* est définie de la façon suivante : $\frac{1}{m_i^*} = \int \frac{|\xi_i^0|^2}{m^*(z)} dz$ (éq I-19)

Quand on prend en compte la non-parabolicité ($\alpha \neq 0$), on introduit une masse dépendante de l'énergie:

$$M^*(\varepsilon_i^\alpha(\bar{k}), z) = m^*(z) \left[1 + \alpha(z) \left[\varepsilon_i^\alpha(\bar{k}) - V(z) \right] \right] \quad (\text{éq I-20})$$

où $\alpha(z)$ désigne le coefficient de non-parabolicité à la coordonnée z de la structure.

Dans ce cas l'équation de Schrödinger pour les électrons s'écrit

$$H_\alpha \xi_i^\alpha = \varepsilon_i^\alpha(\bar{k}) \xi_i^\alpha \quad (\text{éq I-21})$$

avec

$$H_\alpha = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{1}{M^*(\varepsilon_i^\alpha(\bar{k}), z)} \frac{\partial}{\partial z} \right] + V(z) + \frac{\hbar^2 k^2}{2M^*(\varepsilon_i^\alpha(\bar{k}), z)} \quad (\text{éq I-22})$$

Pour retrouver les énergies propres ε_i qui sont solutions de l'équation I-21. Nous supposons que la non-parabolicité n'est pas trop forte. On peut alors utiliser la méthode des perturbations au premier ordre et nous supposons que les fonctions d'onde restent inchangés

$\xi_i^\alpha = \xi_i^0$. Nous notons ε_i^α l'énergie propre, et nous obtenons:

$$\varepsilon_i^0 = \varepsilon_i^\alpha \left(1 + \overline{\alpha(z)} \Big|_i \varepsilon_i^\alpha - 2\overline{\alpha(z)V(z)} \Big|_i - A_i \right) + \overline{\alpha(z)V(z)^2} \Big|_i - B_i \quad (\text{éq I-23})$$

le symbole $\Big|_i$ indique la prise de moyenne pour l'état i $A_i = \langle i|A|i \rangle$

avec:

$$A_i = \frac{\hbar^2}{2} \int \frac{\partial \alpha(z)}{\partial z} \xi_i^0(z) \frac{1}{m^*} \frac{\partial \xi_i^0}{\partial z} dz \quad (\text{éq I-24})$$

$$B_i = \frac{-\hbar^2}{2} \int \frac{\partial (\alpha(z)V(z))}{\partial z} \xi_i^0(z) \frac{1}{m^*} \frac{\partial \xi_i^0}{\partial z} dz \quad (\text{éq I-25})$$

La principale contribution à ces intégrales vient des discontinuités de α et V aux interfaces.

La relation de dispersion est obtenue en écrivant que l'énergie est la somme de l'énergie cinétique ε et de l'énergie potentielle $\varepsilon_i^0 = \varepsilon_p$ en se souvenant que ε_i^0 dépend de k par l'intermédiaire d'une relation parabolique Thobel [20].

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_i^*} = \varepsilon \left(1 + \overline{\alpha(z)} \Big|_i (\varepsilon + 2\varepsilon_i^0) - 2\overline{\alpha(z)V(z)} \Big|_i - A_i \right) \quad (\text{éq I-26})$$

I.3.2. Formalisme des interactions

Dans cette partie nous présentons les interactions prises en compte et les expressions mathématiques associées. Pour chaque interaction nous précisons aussi la manière dont est déterminé l'angle de déviation du vecteur d'onde lors de l'interaction.

Un certain nombre d'interactions sont absentes de ce modèle comme les interactions de dislocation, de cluster, d'interface, puisque leurs probabilités respectives dépendent de paramètres physiques difficilement accessibles. L'interaction d'interface est apparue avec l'avènement des hétérostructures [21] [22] [23]. Elle s'accompagne d'une perturbation locale du potentiel cristallin qui peut contribuer à dégrader les propriétés de transport. Son amplitude est faible pour des hétérojonctions de bonne qualité et les largeurs de puits habituellement considérées ($>50 \text{ \AA}$). Nous avons écarté aussi l'interaction piézoélectrique puisque son amplitude est négligeable aux températures considérées. Nous ne tenons pas compte de l'interaction électron-électron puisque nous considérons qu'elle n'est pas importante aux valeurs de la densité électronique considérées.

Nous n'oublions pas les dislocations mais elles sont faiblement présentes donc d'effet négligeable, du moins si le matériau est de bonne qualité.

Nous présentons ci-dessous les expressions des probabilités d'interactions prises en compte dans le modèle:

I.3.2.1. Interaction optique polaire

Pour déterminer la probabilité d'interaction, nous avons considéré le potentiel d'interaction du phonon optique polaire 3D et utilisé une méthode proposée par Price [24] et utilisée par Yen [25] et Price [26]. En tenant compte de la relation de dispersion I-26 on obtient l'expression suivante:

$$\lambda(\varepsilon) = C_{op} \left(N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \gamma_i(\varepsilon') \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{H_{ij}(q)}{q} d\beta \quad (\text{éq I-27})$$

avec $q = |\bar{k} - \bar{k}'|$, $\beta = (\bar{k}, \bar{k}')$, $\varepsilon' = \varepsilon \mp \hbar\omega_{op}$

C_{op} représente la constante d'interaction optique polaire:

$$C_{op} = \frac{m^* e^2 \hbar \omega_{op}}{8\pi \hbar^3 \varepsilon_0} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_r} \right) \quad (\text{éq I-28})$$

N_0 le nombre de phonons à l'équilibre.

$$N_0 = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{op}}{kT}\right) - 1} \quad (\text{éq I-29})$$

ω_{op} désigne la pulsation du phonon optique polaire.

$$\gamma_i(\varepsilon) = 1 + 2\overline{\alpha(z)} \Big|_i (\varepsilon - \varepsilon_i) - 2\overline{\alpha(z)V(z)} \Big|_i - A_i \quad (\text{éq I-30})$$

$\gamma_i(\varepsilon)$: terme décrivant l'évolution de la densité d'état avec l'énergie.

H_{ij} représente le facteur de forme:

$$H_{ij} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \xi_i^*(z) \xi_j(z) \xi_i(z') \xi_j^*(z') \exp(-q|z - z'|) dz dz' \quad (\text{éq I-31})$$

La forme compliquée de H_{ij} alourdit la mise en œuvre de la simulation est ceci bien que les fonctions d'onde soient déterminées de façon numérique. A ce stade, il est intéressant

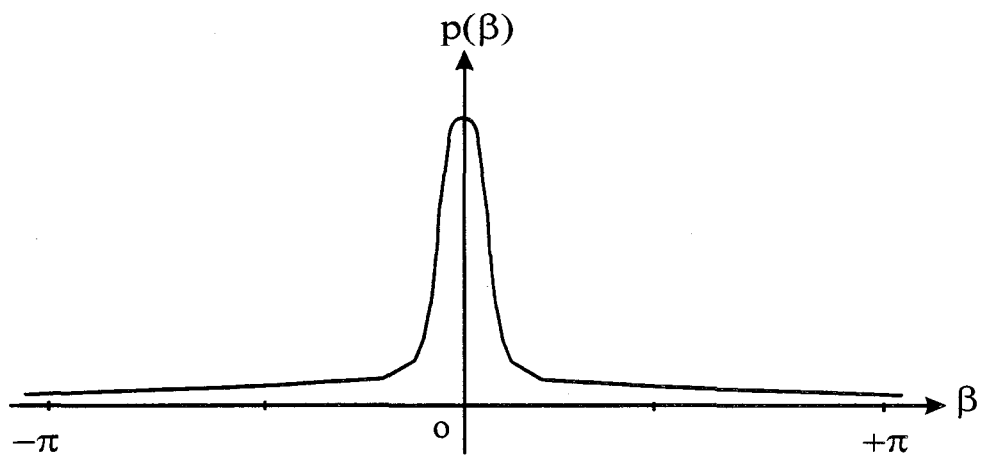


Figure (I-3)

*Allure de la fonction de distribution de l'angle de déviation lors d'une collision.
Les angles de déviation faibles sont favorisés.*

d'introduire la notion de largeur effective due à Price car cela permet de mener une partie des calculs de façon analytique, donc de gagner du temps calcul.

$$b_{ij} = \frac{1}{2 \int_{-\infty}^{+\infty} |\xi_i(z)|^2 |\xi_j(z)|^2 dz} \quad (\text{éq I-32})$$

En utilisant b_{ij} , le facteur de forme H_{ij} peut s'exprimer sous forme approchée:

dans le cas de la collision intra-sous-bande ($i=j$)

$$H_{ii}(q) = \frac{1}{1 + b_{ii}q} \quad (\text{éq I-33})$$

et dans le cas de la collision inter-sous-bande ($i \neq j$)

$$H_{ij}(q) = \frac{q}{b_{ij}q^2 + F_{ij}} \quad (\text{éq I-34})$$

avec

$$F_{ij} = \frac{\pi^2}{4b_{ij}} \frac{[i^2 - j^2]^2}{i^2 + j^2} \quad (\text{éq I-35})$$

De façon générale l'angle de déviation β est solution de

$$r = \frac{\int_0^\beta f_E(\beta') d\beta'}{\int_0^\pi f_E(\beta') d\beta'} \quad (\text{éq I-36})$$

où $f_E(\beta')$ est la fonction de distribution d'angle β' et r est un réel aléatoirement tiré entre 0 et 1.

Dans le cas de l'interaction optique polaire intra-sous-bande, il n'a pas été possible de trouver une solution analytique. C'est pourquoi nous avons fait appel à la méthode de Von Neumann décrite par Nougier [27] et appliqué par plusieurs auteurs [28] [25]. Cette interaction est dominante à température ambiante lorsque $\varepsilon > \hbar\omega_0$. Elle est très anisotrope, comme le montre la figure (I-3) qui présente l'allure de la fonction de distribution pour l'angle

de déviation après une collision intra-sous-bande. Du fait de la présence d'un pic assez marqué, la technique de réjection peut devenir couteuse en temps calcul.

Dans le cas de l'interaction inter-sous-bande l'angle de déviation est donné par la relation suivante:

$$\beta = 2r_2 \text{Arc tan} \left[\sqrt{\frac{Y+X}{Y-X}} \tan \left(r_1 \frac{\pi}{2} \right) \right] \quad (\text{éq I-37})$$

où r_1 est un nombre réel aléatoire entre 0 et 1 et r_2 nombre entier aléatoire valant -1 ou 1 et

$$X = \frac{b_{ij}^2}{F_{ij}^2} |\bar{k}|^2 |\bar{k}'|^2 \quad (\text{éq I-38})$$

$$Y = \left(1 + \frac{b_{ij}}{F_{ij}} (|\bar{k}| + |\bar{k}'|) \right)^2 \quad (\text{éq I-39})$$

1.3.2.2. Interaction acoustique

La probabilité d'interaction acoustique dans un gaz 2D a été calculée par [29] en supposant que cette interaction était élastique. Nous avons utilisé la même expression dans laquelle nous avons pris en compte la non-parabolicité et nous avons obtenu:

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{m_i^* k T \gamma_i(\varepsilon)}{2\hbar^3} \sum_{c \text{ couches}} \frac{(\Phi_{ac}^c)^2}{\rho_c s_c^2 b_{ij}^c} \quad (\text{éq I-40})$$

La sommation sur les différentes couches permet de tenir compte de la présence de plusieurs matériaux.

Φ_{ac}^c : potentiel de déformation acoustique du matériau de la couche c.

ρ_c : densité volumique du matériau de la couche c.

s_c : vitesse du son dans le matériau de la couche c.

b_{ij}^c : largeur effective caractéristique de chaque couche

$$b_{ij}^c = \frac{1}{2 \int_{\text{couche } c} |\xi_i(z)|^2 |\xi_j(z)|^2 dz} \quad (\text{éq I-41})$$

L'angle de déviation β est tiré au sort uniformément entre 0 et 2π

1.3.2.3 Interaction d'alliage

Nous avons utilisé l'expression de la probabilité d'interaction d'alliage donnée par [30] en tenant compte de la non-parabolicité.

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{3\pi^2 m_i^* \gamma_i(\varepsilon)}{128 \hbar^3} \sum_{c \text{ couches}} \frac{x_c(1-x_c) a_c^3 (\Phi_{\text{all}}^c)^2}{b_{ij}^c} \quad (\text{éq I-42})$$

Φ_{all}^c : potentiel d'alliage du matériau $A_{1-x_c} B_{x_c} C$ de la couche c .

a_c : paramètre de maille du matériau de la couche c .

b_{ij}^c : largeur effective caractéristique de chaque couche

L'angle de déviation β est tiré au sort uniformément entre 0 et 2π

1.3.2.4 Interaction sur impuretés ionisées

Le potentiel Coulombien des impuretés est écranté par le gaz d'électrons. Pour le calculer nous avons utilisé la méthode de Stern Howard [31] utilisée par Thobel [32] dont nous rappelons seulement l'idée principale. Cette méthode permet de prendre en compte le caractère quasi bidimensionnel et nécessite la connaissance de la fonction enveloppe.

Il s'agit de calculer ce potentiel à partir de l'équation de Poisson. Soient ε_i et ξ_i l'énergie propre et la fonction d'onde enveloppe pour un électron en sous-bande i , dans la suite nous utilisons la notation suivante $g_i(z) = |\xi_i|^2$ qui représente la probabilité de présence d'un électron de la sous-bande i . Une charge positive $+Ze$ se trouvant en z_0 induit un potentiel écranté $V(Q,z)$ calculé par la méthode de Stern-Howard et dont l'expression est la suivante:

$$V(Q,z) = \frac{Ze^2}{2 \epsilon_0 \epsilon_s} \exp(-Q|z - z_0|) - \frac{1}{Q} \sum_i S_i F_i(Q,z) \bar{V}_i(Q) \quad (\text{éq I-43})$$

où S_i est le paramètre qui détermine l'effet d'écran induit par les électrons de la sousbande i .

$$S_i = \frac{m_i^*}{\epsilon_0 \epsilon_r} \frac{1}{\pi \hbar^2} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\epsilon_i - \epsilon_F}{kT}\right)} \quad (\text{éq I-44})$$

$$F_i(Q, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} g_i(z') \exp(-Q|z'-z|) \cdot dz' \quad (\text{éq I-45})$$

Le potentiel moyen par sousbande $\bar{V}_i(Q)$ est calculé à partir de $V(Q, z)$:

$$\bar{V}_i(Q) = \int_{-\infty}^{+\infty} g_i(z) V(Q, z) \cdot dz \quad (\text{éq I-46})$$

et on obtient le système d'équations

$$\bar{V}_i(Q) = \frac{Ze^2}{2 \epsilon_0 \epsilon_r} F_i(Q, z_0) - \frac{1}{Q} \sum_j S_j H_{ij}(Q) \bar{V}_j(Q) \quad (\text{éq I-47})$$

où

$$H_{ij}(Q) = \int g_i(z) F_j(Q, z) dz \quad (\text{éq I-48})$$

dans ses formules ϵ_r représente la constante diélectrique statique supposée uniforme dans toute la structure, ϵ_f est le niveau de Fermi.

Ce système a été résolu dans le cas de deux sous-bandes (la sous-bande fondamentale et celle de l'électron), ceci permet de prendre en compte l'écrantage secondaire multi-sous-bandes défini par Price [33].

Finalement on obtient par intégration la probabilité d'interaction sur impuretés ionisées

$$\lambda(\epsilon) = \frac{2}{\pi} \frac{m^*}{\hbar^3} \gamma_i(\epsilon) \int_0^{\pi/2} [\bar{V}_i(2K \sin \theta)]^2 \cdot d\theta \quad (\text{éq I-49})$$

et $\gamma_i(\epsilon)$ est donné par l'équation (I-30)

L'existence de plusieurs sous-bandes dans un puits quantique fournit la possibilité à un électron de changer de sous-bande par interaction sur impuretés ionisées. Ce qui pose le

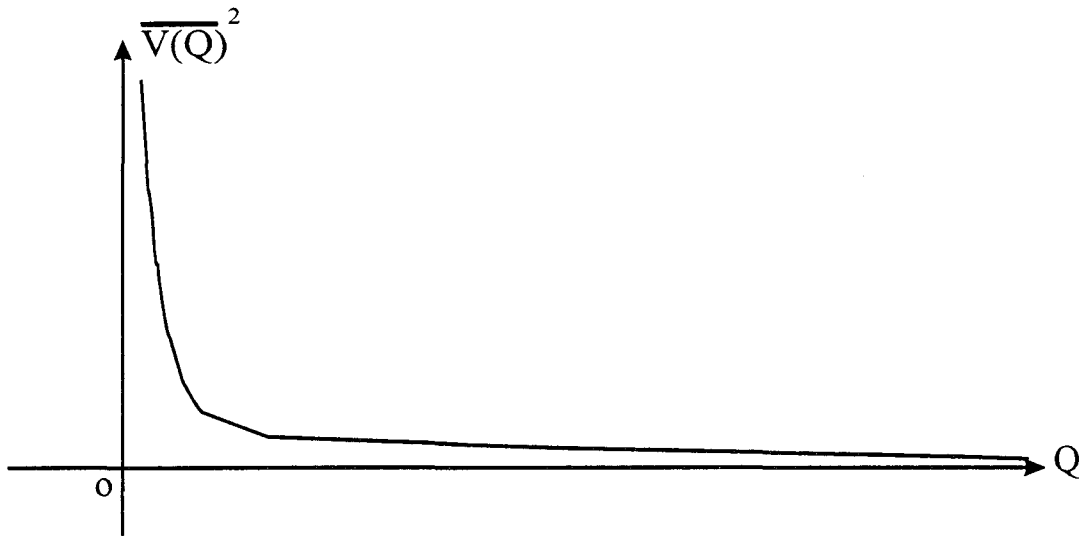


Figure (I-4)

Représentation schématique de l'évolution de l'élément de matrice de l'interaction sur impuretés ionisées.

problème de la prise en compte de l'interaction inter-sous-bandes. D'après l'équation (éq I-43) le potentiel d'interaction décroît rapidement en fonction de Q , il en va de même pour l'élément de transition $\overline{V(Q)}^2$ comme le montre la figure (I-4) qui présente d'une façon schématique l'évolution de l'élément de matrice de l'interaction sur impuretés ionisées. Dans le cas de l'interaction intra-sous-bande le vecteur d'onde de déviation minimum vaut $Q_{\min} = 0$, la principale contribution vient donc des valeurs de Q proches de 0. Pour l'interaction inter-sous-bandes l'énergie minimale échangée au cours de l'interaction d'une sous-bande i vers une sous-bande j vaut $\varepsilon_{\min} = \varepsilon_j - \varepsilon_i$. Le vecteur d'onde minimal d'interaction vaut dans ces conditions $Q_{\min} = \sqrt{2 m^* \varepsilon_{\min} / \hbar^2}$, il est donc supérieur à 0 et la contribution au temps de relaxation sera inférieure à celle de l'interaction intra-sous-bande. Ceci explique que l'interaction inter-sous-bandes soit généralement négligeable devant l'interaction intra-sous-bande, et c'est pourquoi nous ne l'avons pas introduite dans notre modèle.

Comme le montre la figure (I-5) cette interaction est très fréquente à des énergies faibles avec des angles de déviation faibles. En général l'angle de déviation β est solution de l'équation (I-36), mais comme il est difficile de résoudre cette équation d'une façon analytique on remplace la probabilité d'interaction par le temps de relaxation, tandis que l'on considère l'interaction comme randomisante.

I.3.3. Prise en compte du principe d'exclusion de Pauli

Le principe de Pauli joue un rôle dans la détermination de la probabilité de transition vers l'état final, par l'intermédiaire du terme $1 - f(\vec{k}')$ (éq I-11) qui traduit la probabilité que l'état final soit libre.

Pour un matériau non dégénéré, le niveau de Fermi se trouve en dessous de la bande de conduction $\varepsilon_F < \varepsilon_c$. Dans ce cas la fonction de distribution $f(\vec{k}') \ll 1$, ceci se traduit par $1 - f(\vec{k}') \approx 1$ dans l'équation I-11, et le principe de Pauli est sans influence.

Si le matériau est fortement dopé, typiquement supérieur à 4.10^{24} m^{-3} dans l'AsGa ou en régime de forte accumulation. Le niveau de Fermi se situe dans la bande de conduction. Dans ce cas les probabilités de transition devraient être calculées par l'équation I-11 et tiendraient compte implicitement du principe de Pauli. Mais ceci suppose que l'on connaisse la fonction

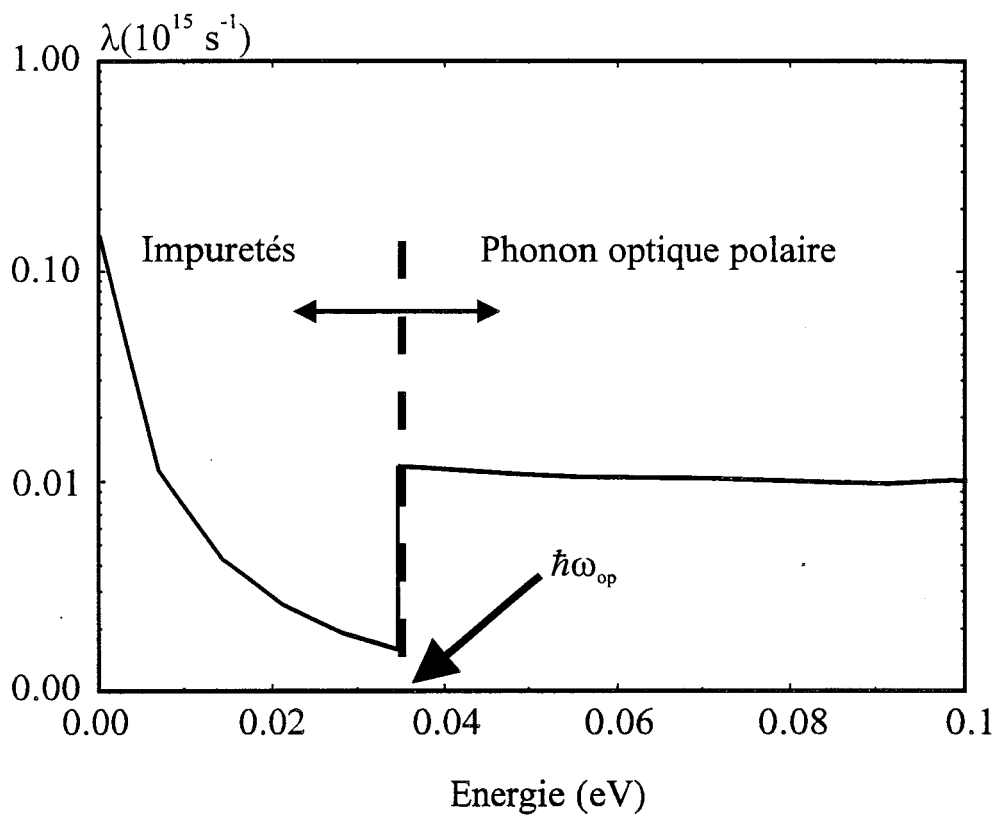


Figure (I-5a)

Evolution de la probabilité totale d'interaction pour la première sousbande avec l'énergie.

Structure de la figure (I-3b).

($T=77\text{ K}$, $N_s=2 \times 10^{15}\text{ m}^{-2}$)

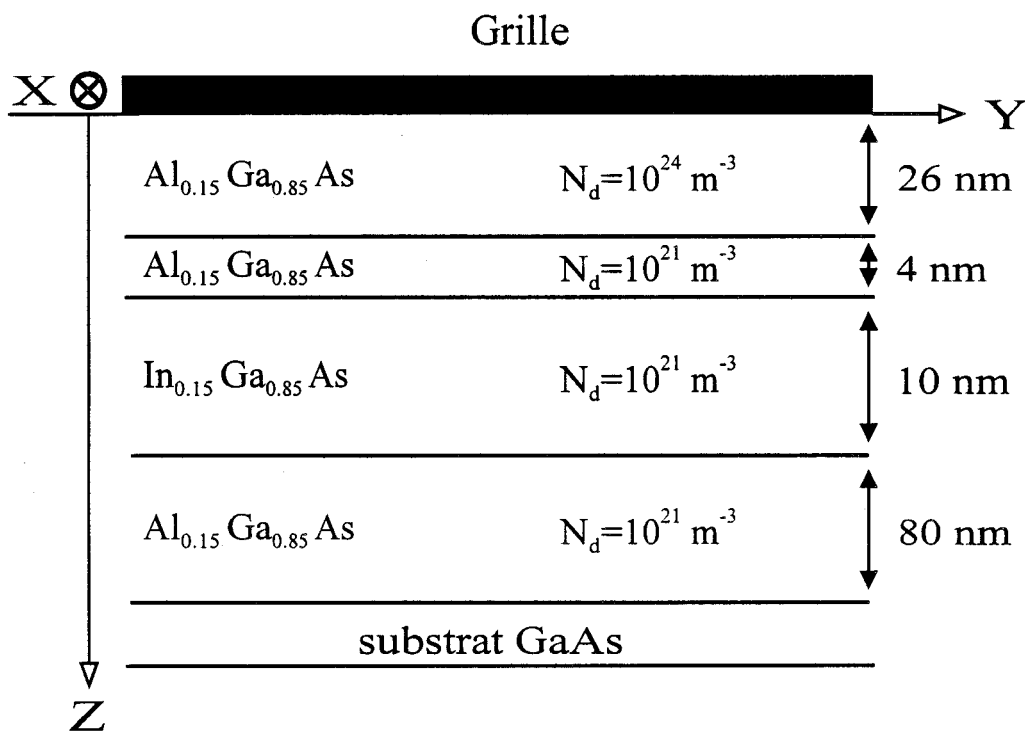


Figure (I-5b)

Structure AlGaAs/InGaAs/AlGaAs étudiée

de distribution instantanée des électrons, puisque la fonction de distribution varie dans le temps, il faudrait donc recalculer à chaque pas de temps les probabilités de transition, ce qui est prohibitif en temps calculs et en occupation mémoire. Pour surmonter ce problème nous avons utilisé la méthode de réjection de Lugli [34] : lorsqu'un état final est sélectionné, l'interaction n'est acceptée que si cet état est libre, ce qui se produit avec la probabilité $1 - f(\bar{k}')$. Dans le cas contraire l'interaction est rejetée. Ainsi toutes les interactions sont traitées de cette manière; la probabilité qu'une interaction soit réalisée apparaît naturellement comme le produit de deux probabilités: celle que l'interaction soit choisie et celle que l'état final soit disponible.

Le problème délicat de cette méthode est la détermination de la fonction de distribution des électrons. Alors pour déterminer la fonction de distribution nous avons adopté une méthode qui dérive de celle de Lugli. Elle consiste à discrétiser l'espace réciproque en cellules élémentaires et à compter le nombre d'électrons par cellule.

Dans un premier temps , on détermine la densité d'états quantiques disponibles par unité de surface de l'espace réel, en tenant compte de la dégénérescence de spin.

$$N_q = 2 \frac{1}{4\pi^2} \tag{éq I-50}$$

Quand on simule N électrons représentant un gaz bidimensionnel de densité N_S , la densité d'états disponibles est:

$$N_d = 2 \frac{1}{4\pi^2} \frac{N}{N_S} \tag{éq IV-51}$$

Le nombre d'états disponibles dans une cellule élémentaire $\Delta k_x \Delta k_y$ est défini par :

$$N_{\max} = 2 \frac{1}{4\pi^2} \frac{N}{N_S} \Delta k_x \Delta k_y \tag{éq I-52}$$

Pour connaître la fonction de distribution des électrons, on adopte la méthode suivante : on discrétise l'espace réciproque en cellules C_k ; pour chaque électron de l'ensemble, on connaît à chaque instant sa position (k_x, k_y) ; on peut ainsi accéder au nombre entier d'électrons par cellules N_C et par là même déterminer la fonction de distribution instantanée des électrons.

Si l'on choisit de fixer N et N_{\max} , et de déterminer ensuite Δk_x et Δk_y , le taux d'occupation par cellule T est:

$$T = \frac{N_C}{N_{\max}} \quad (\text{éq IV-53})$$

Cette quantité représente la probabilité pour qu'un état quantique soit occupé par une particule réelle. Pour appliquer le principe de Pauli, on tire au hasard un nombre r entre 0 et 1, si $r < T$, on décide que l'état final est occupé et l'interaction est rejetée.

Cette partie est bien développée dans le chapitre IV, section (IV.2), où nous avons étudié les gaz électroniques dégénérés.

I.4. Organigramme - Les éléments essentiels

Avec notre modèle nous pouvons calculer non seulement les caractéristiques statiques telles que la dépendance champ-vitesse, mais aussi les propriétés de bruit et les coefficients de diffusion qui sont présentés au chapitre II. Il est également possible d'étudier les régimes transitoires et les réponses à des signaux sinusoïdaux.

Nous résumons ici les différentes étapes du calcul :

1) Résolution auto-cohérente des équations de Schrödinger et Poisson en admettant que tous les électrons sont à l'équilibre, dans le canal, en vallée Γ :

* Détermination des fonctions d'onde associées à chaque sous-bande ;

2) Détermination du profil de potentiel en vallées L et X :

* Résolution de l'équation de Schrödinger pour chaque vallée ;

* Détermination des fonctions d'onde associées à chaque sous-bande ;

3) A l'aide des fonctions d'onde, calcul de la masse effective, du coefficient de non-parabolicité et des paramètres associés pour chaque sous-bande de chaque vallée ;

4) Détermination des niveaux liés et des relations de dispersion en tenant compte de la non-parabolicité pour chaque sous-bande de chaque vallée ;

5) Calcul et tabulation des différentes probabilités d'interactions à partir des fonctions d'onde et des relations de dispersion ;

Chapitre I

6) Simulation Monte-Carlo du transport. L'énergie et la vitesse moyenne des électrons sont évaluées ainsi que la population de chaque sous-bande de chaque vallée dans chacune des couches constituant l'hétérostructure.

Les fonctions d'onde et les niveaux liés devraient être réévalués régulièrement au cours de la simulation pour tenir compte de la modification de la distribution électronique due au champ électrique appliqué. Ainsi, les étapes 1 à 5 devraient être réalisées périodiquement jusqu'à ce que le calcul soit autocohérent.

Du fait du volume de calculs nécessaire à l'évaluation des probabilités, en particulier sur impuretés, cette méthode autocohérente conduit à des temps calculs prohibitifs. Nous ne l'avons donc utilisé qu'exceptionnellement pour valider certains résultats.

REFERENCES

- [1] **R.L. Anderson.**
IBM. J. Res. and Dev. 4. p. 283. (1980).
- [2] **L. Esaki and R. Tsu.**
IBM. Res. Interr. Report. Rc 2418. 26 mars 1969.
- [3] **R. Dingle, H. L. Stromer, A. C. Gossard and W. Wiegmann.**
Appl. Phys. Lett. 33. p. 665 (1978).
- [4] **Delagebeaudeuf, P. Delescluse, P. Etienne, J. Chaplart and N. P. Linh.**
Electron. Lett. 16, 667 (1980).
- [5] **T. Mimura S. Hiamizu, T. Fuji, K. Nanbu.**
Jpn. J. Appl. Phys. 19, 1 (1980).
- [6] **H. L. Stromer et Al.**
Solid State Communication 29 705 (1979).
- [7] **G. Bastard and J. Brum IEEE.**
J. Quantum Electron. QE-22, 1625 (1986).
- [8] **D. J. Ben Daniel and C. B. Duke.**
Phys. Rev. 152, 683 (1966).
- [9] **F. Stern.**
Phys. Rev. B. 5 12 4891 (1972).
- [10] **F. Stern.**
Jour. Comp. Phys. 6, 56 (1970).
- [11] **A. Cappy.**
Thèse de doctorat d'état, lille (1986).
- [12] **J. Alamkan, H. Happy, Y. Cordier and A. Cappy.**
European Trans, on Telecom. and rel. tech. 1,429 (1980).
- [13] **J. P. Nougier et al.**
Phys rev, vol 8, p. 5728 (1973).
- [14] **C. Jacoboni and L. Reggiani.**
Reviews of Modern Physics, 55, 3, (1983).
- [15] **D. Pines and D. Bohm.**

Phys. Rev. 85, 338 (1952).

[16] D. Pines and D. Bohm.

Phys. Rev. 92, 609 (1953).

[17] J. Lindhard.

Kgl, Danske Videnskab. Selskab, Mat. Fys. Medd. 28, N^o. 8 (1954).

[18] L. Baudry.

Thèse de Doctorat, (1993).

[19] A. Messiah.

Mécanique quantique tome II Dunod Paris (1964).

[20] J. L. Thobel et Al.

J. Appl. Phys 74 (10) (1993).

[21] A. Krol.

J. Appl. Phys 62 (2) (1991).

[22] P. K. Bhattacharya.

J. Appl. Phys 58 (7) (1985).

[23] K. Hess.

Phys. Lett. 45. 21 (1980).

[24] P. J. Price.

Surface Science, 113, 199 (1982).

[25] W. Yen.

Thèse de l'Université, Lille (1988).

[26] P. J. Price.

Phys. Rev. B, 30, 2234 (1984).

[27] J. P. Nougier.

Méthodes de calcul numérique, Masson (1987).

[28] A. Kaszynski.

Thèse de Docteur Ingénieur, LilleI (1979).

[29] B. K Ridely.

J. Phys. C. : Solid State Phys. 15, 5899 (1982).

[30] F. Dessenne.

Mémoire de D.E.A, Université de Lille (1990).

[31] F. Stern, W. E. Howard.

Chapitre I

Phys. Rev. 163, 816 (1967).

[32] J. L. Thobel et Al.

J. Appl. Phys 73 (1) (1993).

[33] P. J. Price.

Annals of Physics, 133, 217 (1981).

[34] P. Lugli.

IEEE, Transactions on Electronics Devices, Vol 32, N°11 (1985).

CHAPITRE II

**ETUDE DES COEFFICIENTS DE DIFFUSION
DANS LES GAZ NON DEGENERES.**

APPLICATION AUX MODFETs

AlGaAs/InGaAs/AlGaAs ET AlInAs/InGaAs/AlInAs

CHAPITRE II
ETUDE DES COEFFICIENTS DE DIFFUSION DANS LES GAZ
NON DEGENERES.
APPLICATION AUX MODFETs
AlGaAs/InGaAs/AlGaAs ET AlInAs/InGaAs/AlInAs

II.1. Coefficient de diffusion.	3
II.1.1. Rappels des définitions.	3
II.1.1.1. Coefficient de diffusion par étalement d'un paquet.	3
II.1.1.2. Coefficient de diffusion bruit.	4
II.1.2. Procédure de calcul.	6
II.1.2.1. Présentations des structures des MODFETs.	6
II.1.2.2. Procédure de calcul du coefficient de diffusion par étalement d'un paquet	6
II.1.2.3. Procédure de calcul du coefficient de diffusion par fluctuation de vitesse	8
II.1.2.4. Aspects qualitatifs. Périodicité de l'émission optique polaire.	11
II.2. Résultats et interprétations.	14
II.2.1. Caractéristiques du premier ordre	14
II.2.1.1. Influence de la température	14
II.2.1.2. Influence de la densité surfacique N_s .	14
II.2.1.3. Comparaison entre les deux hétérostructures.	14
II.2.2. Caractéristiques du second ordre.	15
II.2.2.1. Etude à la température ambiante.	15
II.2.2.2. Etude à la température de l'azote liquide - Résultats et interprétations.	17
II.3. CONCLUSION.	20
Références	

Chapitre II

Dans ce chapitre nous présentons des résultats sur le transport électronique dans les hétérostructures III-V utilisées dans les transistors à haute mobilité : TEGFET (Two Electron Gas Field Effect Transistors). Nous nous sommes intéressés spécialement à l'étude du coefficient de diffusion dans les MODFETs (Modulation Doped Field Effect Transistors)

Ce coefficient trouve son importance dans le fait qu'il caractérise le bruit qui domine à haute fréquence [1] qui est le bruit de diffusion. Ce bruit peut limiter les performances d'un système, telle que la sensibilité [2]. A l'équilibre thermique, le coefficient de diffusion D est relié à la mobilité μ par la relation d'Einstein. Malheureusement, lorsqu'un champ électrique est appliqué, cette relation ne tient plus, et il devient nécessaire de calculer D par un autre moyen. Cela peut se réaliser par la résolution de l'équation de Boltzmann [3] [4] [5] [6] [7]. Cependant la méthode la plus utilisée est la méthode de Monte-Carlo [8] [9] [10].

Pour cela nous avons utilisé les 2 méthodes déjà appliquées aux gaz 3D [11][12][13]: par étalement d'un paquet d'électrons que nous appelons « Etalement » et par étude des fluctuations de vitesse des électrons que nous appelons « Bruit ». Nous présentons les résultats à $T=300$ K et 77 K pour deux structures MODFETs typiques: l'une pseudomorphique en AlGaAs/InGaAs/AlGaAs et l'autre en AlInAs/InGaAs/AlInAs en accord de maille sur InP.

Ce chapitre est divisé en deux parties.

Dans la première partie nous rappelons les deux méthodes de calcul du coefficient de diffusion. Nous ne discutons pas l'équivalence théorique puisque ceci a été largement fait dans la littérature [11][12][13]. Pour chacune de ces méthodes nous présentons la procédure de calcul que nous avons suivie. Nous donnons des ordres de grandeurs de quelques paramètres comme: le pas de simulation dt et le temps de simulation total. Nous discutons également de la stationnarité du système. Nous terminons cette partie en évoquant l'aspect oscillatoire de la fonction de corrélation de vitesse qui traduit la quasi-périodicité de l'émission optique polaire. Cet aspect a été étudié et discuté par plusieurs auteurs [14][15]. Nous montrons aussi que ce comportement peut être observé avec la variance de la position obtenue par la méthode d'étalement d'un paquet d'électron.

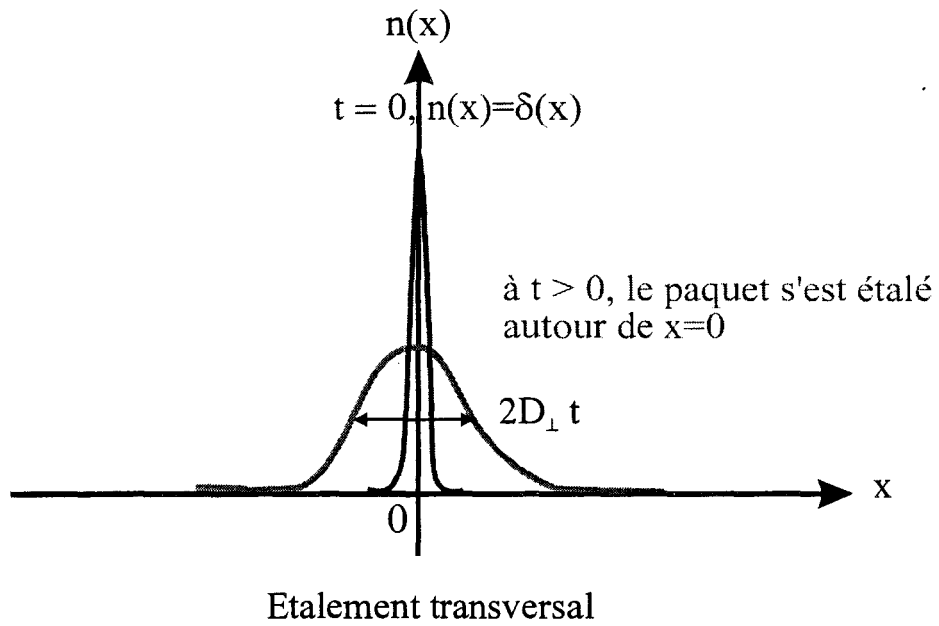
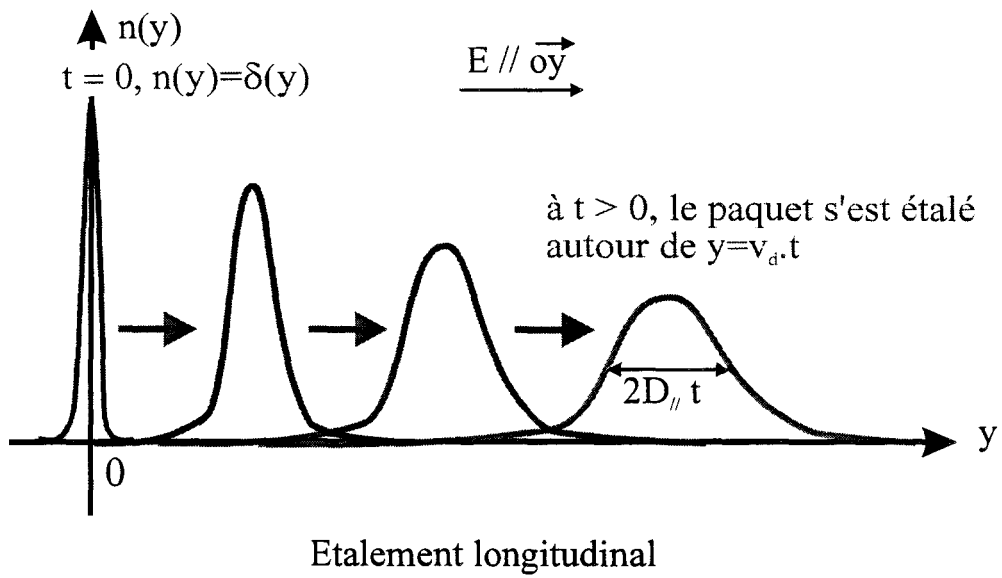


Figure (II-1)

Effet de la diffusion longitudinale et de la diffusion transversale sur un 'Dirac de porteurs'

Chapitre II

Dans la deuxième partie nous présentons les caractéristiques de transport obtenues pour les 2 structures MODFETs que nous avons examinées. Nous commençons par présenter brièvement les caractéristiques de 1^{er} ordre. Nous présentons ensuite les résultats des coefficients de diffusion parallèle et transverse obtenus respectivement à 300 K et 77 K. Dans la première section après avoir établie l'équivalence numérique entre les deux méthodes, nous en comparons les avantages et les inconvénients, et nous justifions ainsi notre choix de la méthode par étalement de paquet. Nous comparons les résultats obtenus pour les deux hétérostructures.

Dans la deuxième section, nous présentons une étude détaillée à 77 K. Nous discutons et comparons ensuite l'évolution des coefficients de diffusion pour les deux hétérostructures. A champ faible le coefficient de diffusion parallèle dévie largement de la relation d'Einstein. Nous montrons que ce coefficient est fortement dépendant du champ électrique et qu'il peut atteindre des valeurs importantes autour de 1 kV/cm. Cette évolution peut être expliquée par celle des probabilités, tels que la probabilité d'interaction sur impuretés ou sur phonon optique polaire.

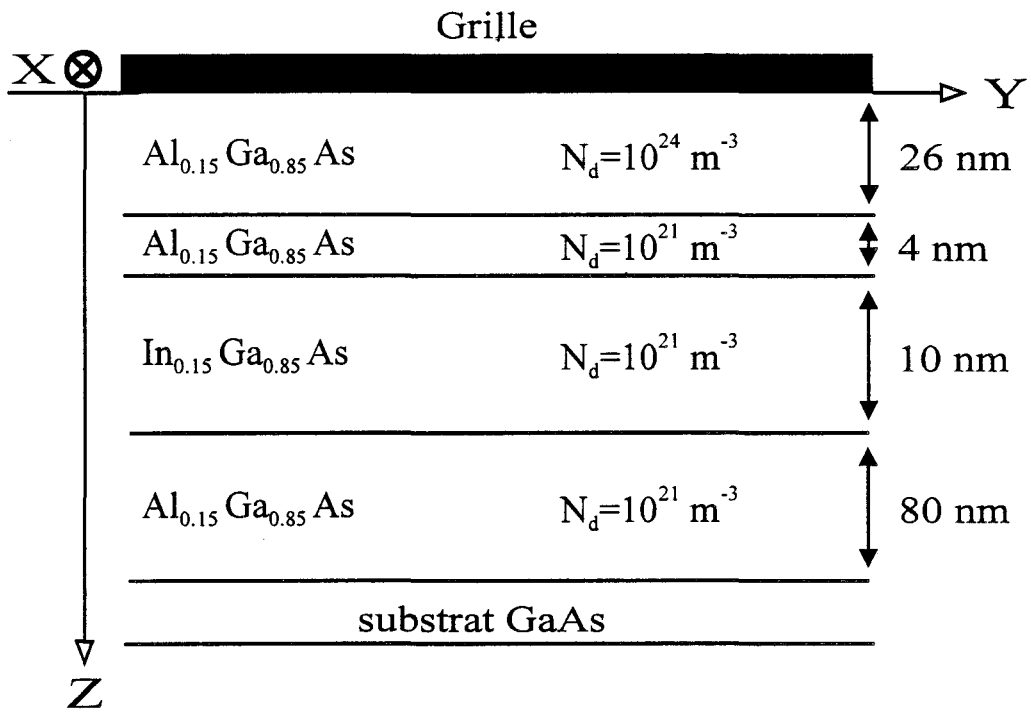


Figure (II-2a)
Structure AlGaAs/InGaAs/AlGaAs étudiée

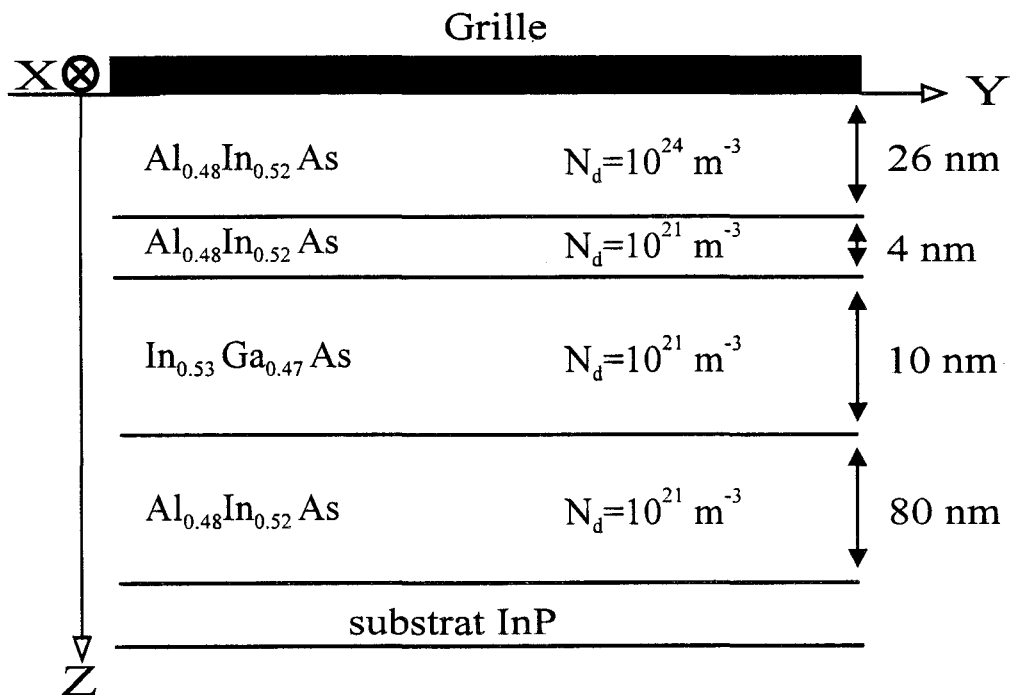


Figure (II-2b)
Structure AlInAs/InGaAs/AlInAs étudiée

II.1. Coefficient de diffusion.

L'ensemble des travaux qui ont traité ce coefficient ont montré que ce paramètre du second ordre est difficile à estimer aussi bien théoriquement qu'expérimentalement. Malgré cela, sa connaissance s'avère très utile car il permet d'avoir des informations sur les mécanismes de transport et de modéliser les propriétés de bruit des dispositifs [16], par exemple, en utilisant la méthode du champ d'impédance [17][18]. Ceci pourrait trouver des applications pour des logiciels de type HELENA [19].

II.1.1. Rappels des définitions.

La diffusion est liée aux fluctuations de l'état des porteurs par rapport à un comportement moyen. Ceci donne lieu à deux définitions distinctes du coefficient de diffusion, qui ne sont valables que pour les gaz non dégénérés. On distingue, soit le coefficient de diffusion « Etalement » qui traduit l'étalement d'un paquet de porteurs en excès à l'intérieur d'un matériau, soit le coefficient de diffusion « Bruit » qui traduit le désordre lié aux fluctuations de vitesse des porteurs.

II.1.1.1. Coefficient de diffusion par étalement d'un paquet.

Un paquet d'électrons photocréé dans un semiconducteur s'étalement au cours du temps, du fait des fluctuations aléatoires de la vitesse des porteurs provoquées par les collisions. Si le semi-conducteur est soumis à un champ électrique, le paquet subit, en outre, un déplacement dans la direction du champ. La dispersion spatiale des porteurs peut s'évaluer à chaque instant par la variance des positions des électrons à partir d'un instant t_0 . Pour cela nous considérons un paquet de porteurs de variance nulle dit « Dirac de porteurs » à $t=0$ et nous étudions l'étalement de ce paquet au cours du temps (figure (II-1)). Les coefficients de diffusion longitudinal et transversal $D_{//}(E)$ et $D_{\perp}(E)$ qui mesurent la rapidité moyenne d'étalement du paquet au cours du temps sont alors définis par:

$$D_{//}(E) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\text{Var } y(t)}{2t} \quad (\text{éq II-1})$$

\bar{y} est la direction du champ électrique E . L'indice // indique la direction parallèle au champ.

$$D_{\perp}(E) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\text{Var } x(t)}{2t} \quad (\text{éq II-2})$$

Chapitre II

L'indice \perp indique la direction \bar{x} transverse au champ électrique et à la direction de croissance cristalline.

Var $y(t)$ et Var $x(t)$ sont les variances des coordonnées de la position dans les directions parallèles et transversales au champ électrique appliqué. La position des porteurs $x(t)$ et $y(t)$ est calculée en cours de simulation, les variances correspondantes sont déterminées par:

$$\text{Var } y(t) = \overline{[y(t) - \overline{y(t)}]^2} \quad (\text{éq II-3})$$

$$\text{Var } x(t) = \overline{[x(t) - \overline{x(t)}]^2} \quad (\text{éq II-4})$$

Les moyennes représentées par une barre sont effectuées à chaque instant sur l'ensemble des électrons simulés.

La méthode de Monte-Carlo ne pouvant faire intervenir qu'un nombre restreint de processus élémentaires, le temps d'observation t ne pourra pas tendre vers l'infini, et les coefficients de diffusion seront alors donnés par les expressions :

$$D_{//}(E) = \frac{1}{2} \frac{\text{Var } y(t) - \text{Var } y(t_0)}{t - t_0} \quad (\text{éq. II-5})$$

$$D_{\perp}(E) = \frac{1}{2} \frac{\text{Var } x(t) - \text{Var } x(t_0)}{t - t_0} \quad (\text{éq. II-6})$$

où t_0 est un instant arbitraire, suffisamment loin de l'instant initial $t=0$ pour que les phénomènes transitoires soient éliminés, et t représente un temps d'observation suffisamment long pour permettre une évaluation précise.

II.1.1.2. Coefficient de diffusion bruit.

L'autre aspect de la diffusion se traduit par le bruit lié aux fluctuations des vitesses des porteurs. Ce bruit de diffusion est caractérisé par sa densité spectrale de puissance $S(\omega)$ qui est, d'après le théorème de Wiener-Kinchine, la transformée de Fourier de la fonction d'auto-corrélation des fluctuations de vitesse $\phi(\tau)$:

$$S(\omega) = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\tau) e^{-i\omega\tau} d\tau \quad (\text{éq. II-7})$$

avec

Tableau II-1. Paramètres des différents matériaux utilisés dans le modèle.

	$\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}$	$\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$	$\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$	$\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$
Bottom energy of the valley (eV)				
Γ valley	1.472	0.733	1.611	1.288
L valley	2.472	1.344	1.873	1.653
X valley	2.268	1.839	1.979	1.830
Effective mass				
Γ valley	0.083	0.042	0.060	0.060
L valley	0.303	0.258	0.222	0.220
X valley	0.495	0.537	0.554	0.567
Nonparabolicity coefficient (eV^{-1})				
Γ valley	0.544	1.250	0.496	0.685
L valley	0.416	0.440	0.430	0.443
X valley	0.204	0.200	0.200	0.200
Deformation potential				
acoustic (eV)				
Γ valley	5.90	5.88	7.00	6.68
L valley	7.23	10.8	9.19	9.66
X valley	9.02	9.60	9.26	9.37
intervalleys (10^{11} eV/m)				
Γ -L	0.525	0.782	1.00	0.938
Γ -X	0.383	1.132	1.00	1.037
L-L	0.655	0.639	1.00	0.897
L-X	0.854	0.680	0.50	0.550
X-X	0.854	0.853	0.80	
non polar optic (10^{10} eV/m)	2.279	3.790	3.00	3.220
Phonon energy (eV)				
polar	0.0404	0.0327	0.0372	0.0350
non polar	0.0311	0.0368	0.0343	0.0350
Intervalleys				
Γ -L	0.0293	0.0254	0.0292	0.0274
Γ -X	0.0293	0.0257	0.0315	0.0287
L-L	0.0302	0.0243	0.0305	0.0277
L-X	0.0322	0.0302	0.0312	0.0295
X-X	0.0297	0.0283	0.0315	0.0294
Other material parameters				
lattice constant (\AA)	6.867	5.862	5.650	5.710
crystal density (Kg/m^3)	4306	5545	5096	5412
sound velocity (m/s)	4970	4754	5240	5106
static permittivity ϵ_s	12.41	13.88	12.46	13.20
high frequency permittivity ϵ_∞	10.23	11.35	10.57	11.04
piezoelectric constant (Cb/m^2)	0.075	0.015	0.052	0.046
alloy potential (eV)	0.420	0.420	1.245	0.420

Chapitre II

$$\phi(\tau) = \langle (V(t) - V_d)(V(t+\tau) - V_d) \rangle_t \quad (\text{éq. II-8})$$

Dans ces expressions, V_d est la vitesse de dérive stationnaire et le symbole $\langle \rangle_t$ indique la prise d'une moyenne sur le temps t . L'indice représentant la direction est ici omis pour alléger l'écriture.

Le coefficient de diffusion « dynamique » défini par $D(\omega) = S(\omega)/4$ peut s'écrire compte tenu de la parité de la fonction de corrélation:

$$D(\omega) = \int_0^{\infty} \phi(\tau) \cos(\omega\tau) d\tau \quad (\text{éq. II-9})$$

Le coefficient de diffusion statique est alors défini par:

$$D(0) = \lim_{\omega \rightarrow 0} D(\omega) = \int_0^{\infty} \phi(\tau) d\tau \quad (\text{éq. II-10})$$

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

$$\tau_c = \int_0^{\infty} \frac{\phi(\tau)}{\phi(0)} d\tau \quad (\text{éq. II-11})$$

par $D(0) = \phi(0) \cdot \tau_c = \text{Var}(V) \cdot \tau_c$ où $\text{Var}(V)$ est la variance des vitesses; suivant la direction considérée, cette définition s'écrit:

$$D_{//}(E) = \text{Var} V_Y(E) \tau_{c//}(E) \quad (\text{éq. II-12})$$

$$D_{\perp}(E) = \text{Var} V_X(E) \tau_{c\perp}(E) \quad (\text{éq. II-13})$$

Nous venons de présenter le phénomène de diffusion suivant deux approches de natures différentes, se traduisant par deux définitions possibles du coefficient de diffusion, l'une reposant sur l'observation de l'étalement d'un paquet d'électrons au cours du temps, l'autre sur les propriétés de la densité spectrale du bruit de diffusion. Notons que l'équivalence théorique des deux définitions du coefficient de diffusion a été démontrée par plusieurs auteurs [11][12][13]. Cependant il ne s'agit que de l'équivalence mathématique qui n'est valable que si l'on fait tendre les temps d'observation vers l'infini dans les deux méthodes, ce qui est impossible à réaliser. Dans la pratique l'équivalence numérique sera seulement

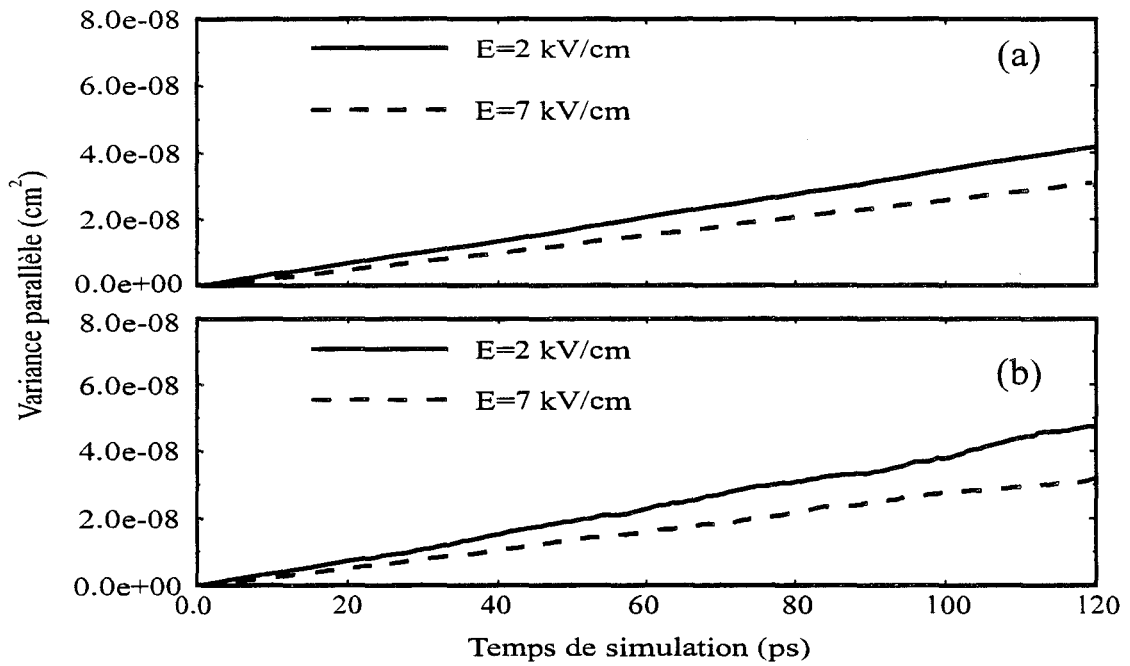


Figure (II-3)
 Evolution des variances parallèles pour la structure en
 $Al_{0.15}Ga_{0.85}As/In_{0.15}Ga_{0.85}As/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$.
 ($T=300\text{ K}$, $N_s=8 \times 10^{15}\text{ m}^{-2}$)
 a) 10000 électrons.
 b) 1000 électrons.

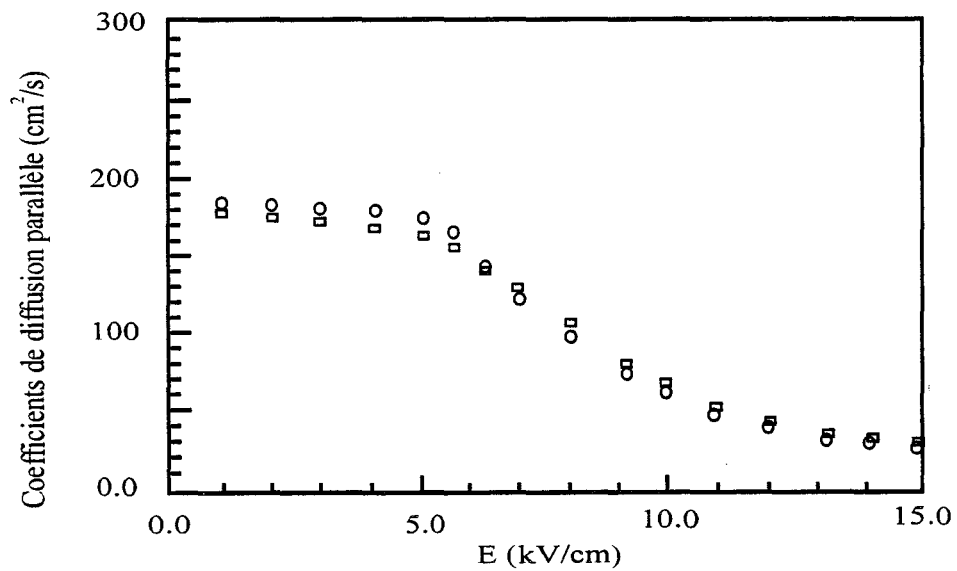


Figure (II-4)
 Comparaison des coefficients de diffusion par étalement par paquet pour la structure
 en $Al_{0.15}Ga_{0.85}As/In_{0.15}Ga_{0.85}As/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$.
 ($T=300\text{ K}$, $N_s=8 \times 10^{15}\text{ m}^{-2}$)
 □ 10000 électrons.
 ○ 1000 électrons.

Chapitre II

approximative puisque nous limitons nos études à des intervalles finis mais suffisamment long pour que les phénomènes transitoires soient éliminés.

En outre, ces formules ne sont applicables que si toutes les hypothèses utilisées explicitement ou implicitement, sont vérifiées. Parmi ces hypothèses, il y a le principe d'ergodisme, indispensable pour donner un sens à l'équivalence entre moyennes d'ensemble et moyennes temporelles. D'autre part il est nécessaire que les particules soient indépendantes les unes des autres [20]. Cela est implicitement supposé dans la méthode de fluctuation de vitesse, ou l'on considère une particule unique. Dans la méthode d'étalement de paquet, cette hypothèse est rendue nécessaire par le fait que l'on considère que D est une constante. Si on admet que les particules interagissent entre elles, la dynamique du transport dépendra de leur nombre et en particulier D sera fonction de la densité électronique. Les équations (II-5) et (II-6) ne seront plus valables.

II.1.2. Procédure de calcul.

II.1.2.1. Présentations des structures des MODFETs.

Tout d'abord nous présentons les structures des deux MODFETs que nous avons utilisées pour calculer les coefficients de diffusion dans ce chapitre. Nous nous sommes intéressés à une hétérostructure pseudomorphique en $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}/\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}/\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ sur substrat GaAs, ainsi qu'à une autre en $\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}/\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}$ en accord de maille sur InP. Les différentes caractéristiques correspondant à chaque structure sont décrites respectivement sur les figures (II-2a) et (II-2b). Les valeurs des paramètres pour les matériaux que nous avons utilisées sont résumées dans le tableau II-1. Nous avons gardé le maximum de paramètres identiques (épaisseur et dopage des couches) pour que la comparaison soit faite dans les meilleures conditions. Dans ces hétérostructures la couche supérieure est dopée pour assurer une importante densité de charges transférées dans le puits. Un spacer de 4nm permet une meilleure séparation spatiale entre les électrons et les impuretés ionisées. La couche InGaAs non intentionnellement dopée de 10 nm d'épaisseur reçoit le gaz bidimensionnel d'électrons.

II.1.2.2. Procédure de calcul du coefficient de diffusion par étalement d'un paquet

Le coefficient de diffusion est obtenu en prenant la pente moyenne de la variance et en la divisant par deux. Ceci peut se faire par divers moyens, par exemple grâce à une méthode numérique de régression linéaire. A ce stade se pose le choix du nombre d'électrons à

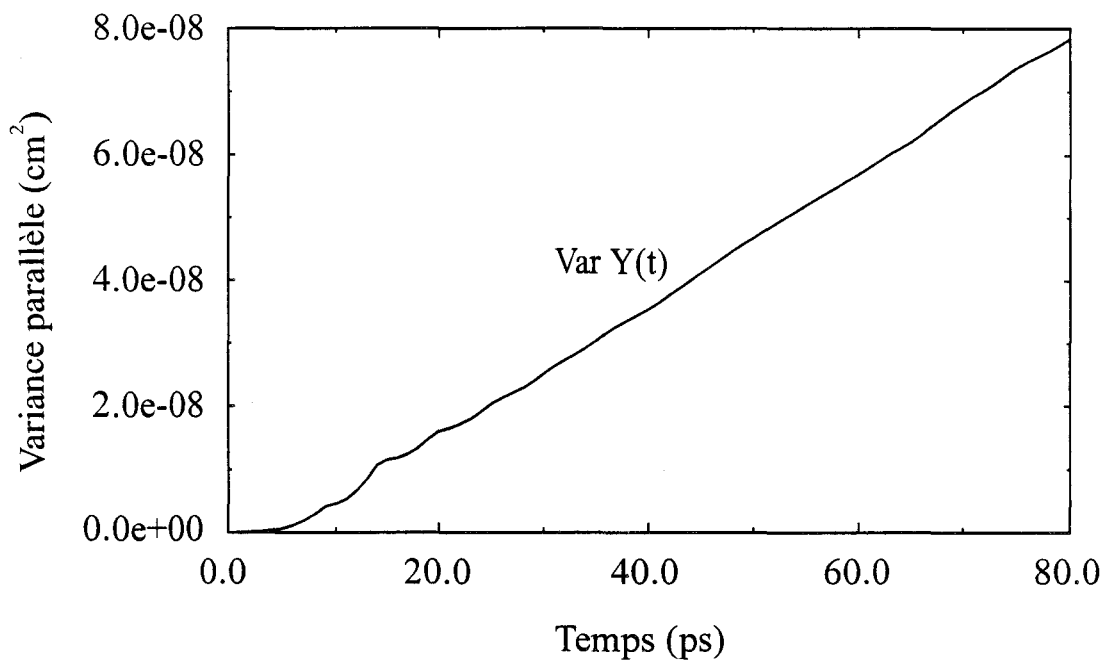


Figure (II-5a)

*Evolution de la variance parallèle pour la structure en
 $Al_{0.15}Ga_{0.85}As/In_{0.15}Ga_{0.85}As/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$.
 ($T=77\text{ K}$, $E=0.2\text{ kV/cm}$, $N_S=8 \times 10^{15}\text{ m}^{-2}$, 1000 électrons)*

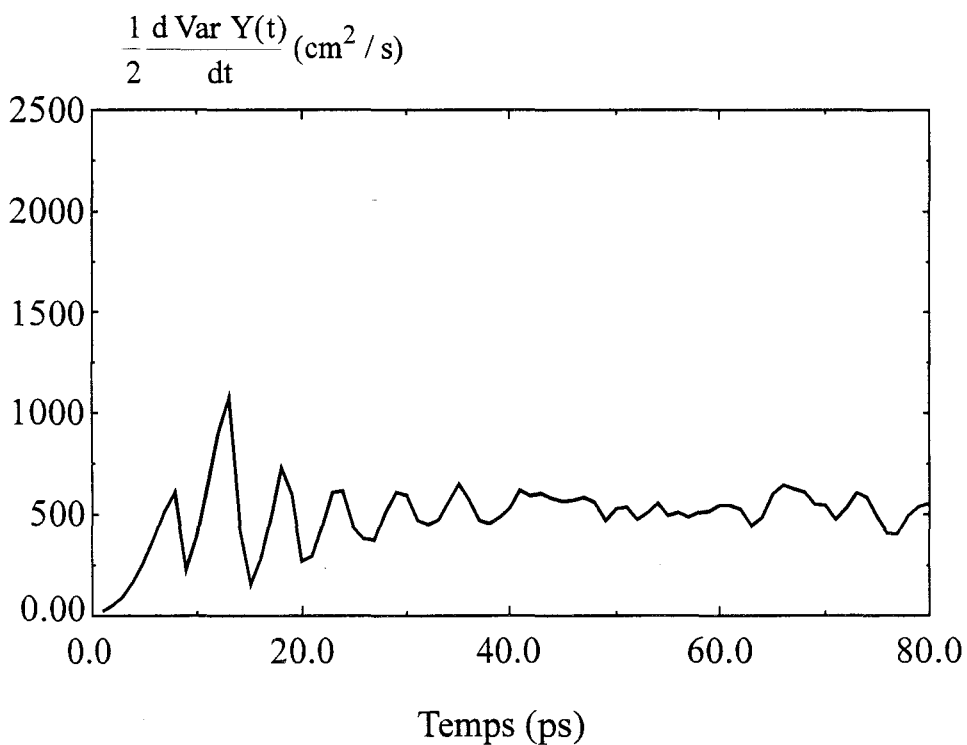


Figure (II-5b)

*Evolution de la pente instantanée.
 Cas de la figure (II-5a)*

Chapitre II

observer et celui du temps d'observation. En réalité la détermination précise des coefficients de diffusion nécessite des calculs systématiques utilisant un nombre important d'électrons (10^4 ou 10^5 électrons par exemple). Cependant un nombre d'électrons aussi grand va allonger le temps CPU d'exécution des simulateurs.

Pour fixer le nombre d'électrons à observer nous avons effectué deux études de diffusion par paquet l'une avec 10^4 électrons et l'autre avec 10^3 électrons. Les figures (II-3a) et (II-3b)) montrent respectivement l'évolution des variances en fonction du temps pour 10^4 électrons et 10^3 électrons obtenues à 2kV/cm et 7 kV/cm pour la structure de la figure (II-2a). La température a été fixée à 300 K et la densité électronique $N_S=8 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$. On peut constater que l'allure est linéaire dans les deux cas. Le coefficient de diffusion sera calculé sans aucune difficulté dans le cas de la figure (II-3a). Pour le cas de 1000 électrons, figure (II-3b), nous observons des fluctuations qui traduisent l'erreur introduite due au faible nombre d'électrons simulés. Alors pour estimer cette erreur nous avons présenté sur la figure (II-4) l'évolution du coefficient de diffusion parallèle en fonction du nombre d'électrons à 300 K pour une durée globale de simulation $T_S=250$ ps aux champs faibles et 100 ps aux champs forts. Nous pouvons observer que cette erreur introduite par la diminution du nombre d'électrons ne dépasse pas les 10% sur tout le domaine du champ électrique. Par conséquent nous avons choisi pour la suite de nos études par étalement de paquet d'observer 10^3 électrons puisque le calcul du coefficient de diffusion avec 10^4 électrons nécessite, bien entendu, 10 fois plus de temps CPU.

Maintenant que le nombre des électrons à étudier est fixé, il reste à s'assurer de la stationnarité du système. Pour cela nous avons observé l'évolution de la pente de la variance $\frac{d}{dt} \text{var } y(t)$ en fonction du temps. L'examen de cette pente nous permet d'estimer la durée de la période transitoire. La phase stationnaire se caractérise par une pente qui fluctue autour d'une valeur moyenne indiquant la linéarité de la variance ainsi que la stabilité du système étudiée. Nous calculons le coefficient de diffusion à partir d'un instant t_0 loin de la période transitoire pour s'assurer que la stationnarité est bien établie.

La figure (II-5) montre un exemple à 77 K pour la structure AlGaAs/InGaAs de la figure (II-2a) à $E=0.2$ kV/cm $N_S=8 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$. Nous avons simulé un cas extrême dans lequel nous avons tenu compte seulement de l'interaction sur phonon optique polaire. Sur la figure (II-5a)

Figure (II-6)

Etude de la stationnarité par l'observation des fonctions de corrélations de vitesse pour la structure en $Al_{0.15}Ga_{0.85}As/In_{0.15}Ga_{0.85}As/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$.

($T=77$ K, $E=0.3$ kV/cm, $N_S=8 \times 10^{15}$ cm⁻²)

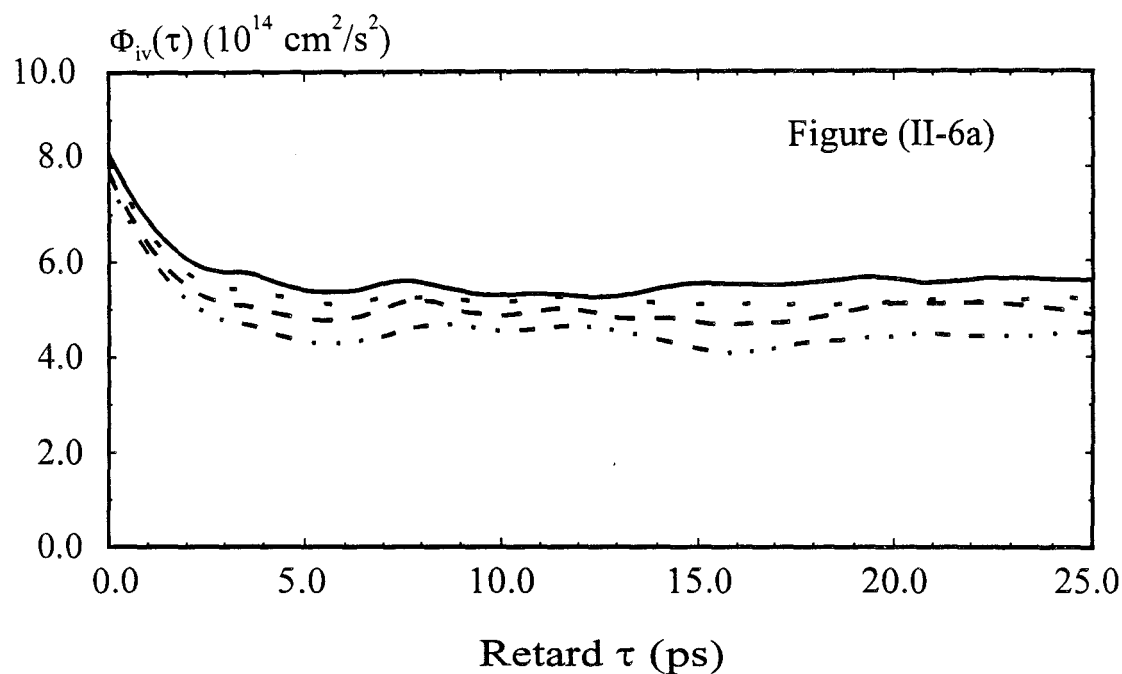


Figure (II-6a): présente les fonctions de corrélations $\Phi_{iv}(t)$ ($i=1,2,3,4$) calculées à partir des sous histoires

- $\Phi_{1v}(t)$ Fonction de corrélation de vitesse pour la première sous histoire
- · · $\Phi_{2v}(t)$ Fonction de corrélation de vitesse pour la deuxième sous histoire
- - - $\Phi_{3v}(t)$ Fonction de corrélation de vitesse troisième sous histoire
- · · - - $\Phi_{4v}(t)$ Fonction de corrélation de vitesse pour la quatrième sous histoire

Chapitre II

nous avons représenté un agrandissement de la variance de position longitudinale pour montrer la phase transitoire. Sur la figure (II-5b) nous avons montré la pente instantanée correspondante qui croît jusqu'à 8 ps, ce qui représente la phase transitoire, puis oscille autour d'une valeur moyenne dans le domaine de temps inférieur à 40 ps et enfin se stabilise sur le reste du domaine du temps d'observation. Dans ce cas nous avons estimé que la période à ignorer est de 60 ps. Et nous avons calculé le coefficient de diffusion à partir de $t_0=60$ ps. Bien entendu lorsque nous prenons en compte toutes les autres formes d'interaction cette période diminue. Par commodité, nous avons fixé cette période à $T_s/4$ où T_s représente la durée globale de simulation. Dans la pratique cette période peut être égale à 60 ps aux champs faibles et atteint 25 ps pour les champs forts quelque soit la température. Avant de terminer ce paragraphe nous présentons dans le tableau II-2, à titre d'illustration, le temps T_s associé au champ électrique E_Y . Le pas dt a été choisi de façon à ce que la somme des probabilités reste nettement inférieure à l'unité (~ 0.3).

La valeur du champ électrique E_Y en kV/cm	Le pas temporel dt (fs)	La durée globale de simulation T_s en picosecondes
$E_Y < 1$	1	250
$1 < E_Y < 10$	2 à 3	150
$10 < E_Y < 30$	3 à 5	100

Tableau II-2

II.1.2.3. Procédure de calcul du coefficient de diffusion par fluctuation de vitesse

Pour obtenir le coefficient de diffusion par fluctuation de vitesse, plusieurs étapes de calcul sont nécessaires. La première étape consiste à obtenir la vitesse des porteurs. La deuxième étape, très importante et délicate, permet de calculer la fonction de corrélation de fluctuation de vitesse et de s'assurer que le régime stationnaire est bien établi. La dernière étape sert au calcul du coefficient de diffusion.

C'est la méthode de calcul Monte-Carlo, mise en oeuvre pour étudier le transport de charges dans les hétérojonctions, qui nous permet d'accéder à toutes les grandeurs microscopiques et macroscopiques, parmi lesquelles la vitesse électronique instantanée.

En ce qui concerne le calcul de la fonction d'autocorrélation de vitesse, deux approches sont possibles et donnent des résultats très voisins [21]. La première approche consiste à

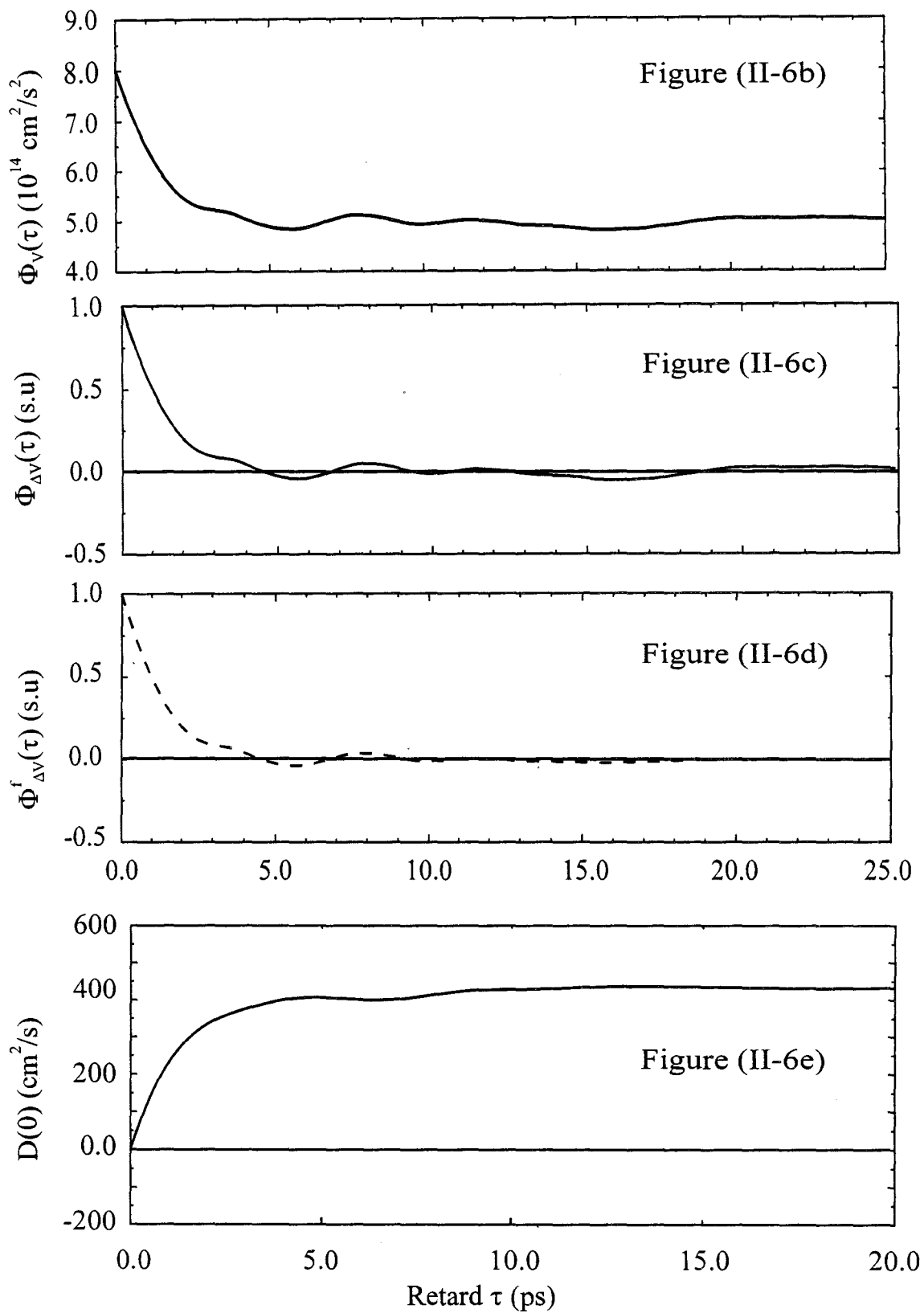


Figure (6-b) : présente la fonction de corrélation moyenne $\Phi_V(\tau)$
Figure (6-c) : présente la fonction de corrélation moyenne centrée et normalisée $\Phi_{\Delta V}(\tau)$
Figure (6-d) : présente la fonction de corrélation traitée par la fenêtre de Hamming $\Phi_{\Delta V}^f(\tau)$
Figure (6-e) : présente le coefficient de diffusion statique $D(0)$ en fonction du temps d'intégration.

Chapitre II

centrer la fonction de corrélation «a priori». Si la vitesse moyenne des électrons V_d est correctement calculée, on peut centrer la vitesse $V(t)$ pour obtenir $\Delta V = V(t) - V_d$ et par la suite obtenir la fonction de corrélation centrée $\Phi_{\Delta V}(\tau)$.

Nous avons choisi l'autre approche qui consiste à traiter la vitesse instantanée et non les fluctuations. A partir de la vitesse non centrée on calcule la fonction de corrélation $\Phi_V(\tau)$. On déduit une valeur moyenne $\overline{\Phi_V}(\tau)$ dans un intervalle de temps $\tau_i - \tau_f$. On centre la fonction de corrélation $\Phi_V(\tau)$ dans cet intervalle pour obtenir la fonction de corrélation centrée $\Phi_{\Delta V}(\tau) = \Phi_V(\tau) - \overline{\Phi_V}(\tau)$. Dans la suite de ce paragraphe nous détaillons cette approche pour un exemple à 77 K, et nous montrons les étapes permettant d'aboutir à $\Phi_{\Delta V}(\tau)$.

Dans cette méthode, le point clé c'est le calcul de la fonction de corrélation de vitesse avec une bonne précision. Comme il est impossible d'observer les fluctuations de vitesse pendant un temps infini, nous nous limitons à un temps d'observation dont la durée varie en fonction de la température. Nous avons appliqué la méthode mise en oeuvre et testée par El Idrissi [21] qui consiste à étudier les fonctions de corrélation relatives à quelques «sous histoires» du mouvement de l'électron. Ces sous-histoires seront prises en compte à partir d'un instant t_0 qui est choisi loin de $t=0$, après qu'un régime stationnaire soit bien établi. La cohérence entre ces fonctions atteste de la stabilité du système.

Dans la pratique, à $T=300$ K nous avons observé 1 électron pendant 10 nanosecondes avec $dt=0.003$ ps. Nous commençons à stocker les valeurs de la vitesse instantanée à partir de $t_0=9$ ns. Nous conservons dans un fichier les 3.10^5 valeurs obtenues en double précision qui vont servir pour le calcul de la fonction de corrélation. La durée du traitement d'un tel fichier dépend directement de la valeur maximale du retard. Si $\tau=20$ ps on a 6.10^3 valeurs de la vitesse. Donc il faut exécuter $3.10^5 \times 6.10^3$ multiplications en double précision pour obtenir la fonction de corrélation. Un tel nombre d'opérations exige de la place mémoire (5 Mo) et dure 2 heures en temps CPU (Station *Hp 735*). C'est cette procédure de calcul que nous avons adopté pour calculer la fonction de corrélation à 300 K.

A $T=77$ K et à champ faible, le régime transitoire va durer plus longtemps. Un temps long est nécessaire pour que le système subisse suffisamment d'interactions pour se stabiliser. Nous avons donc choisi d'observer 1 électron pendant 30 ns avec $dt=0.001$ ps. Nous stockons les dernières 5.10^5 valeurs de la vitesse instantanée qui vont servir pour calculer la fonction de

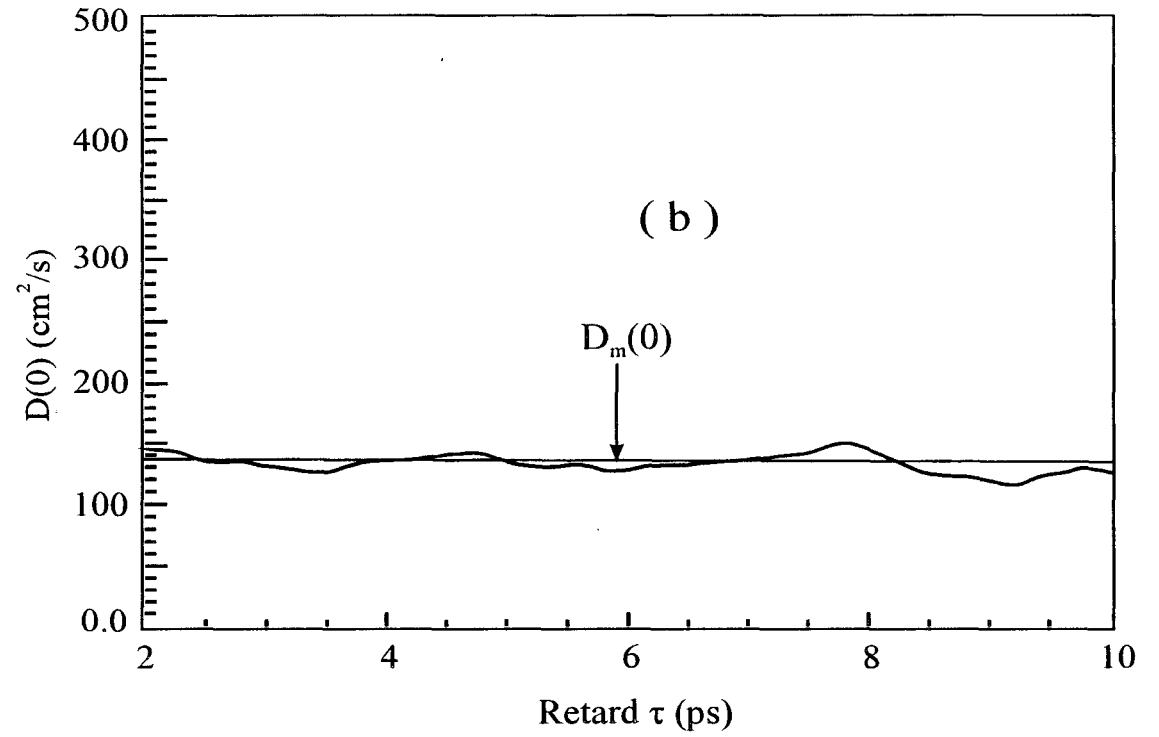
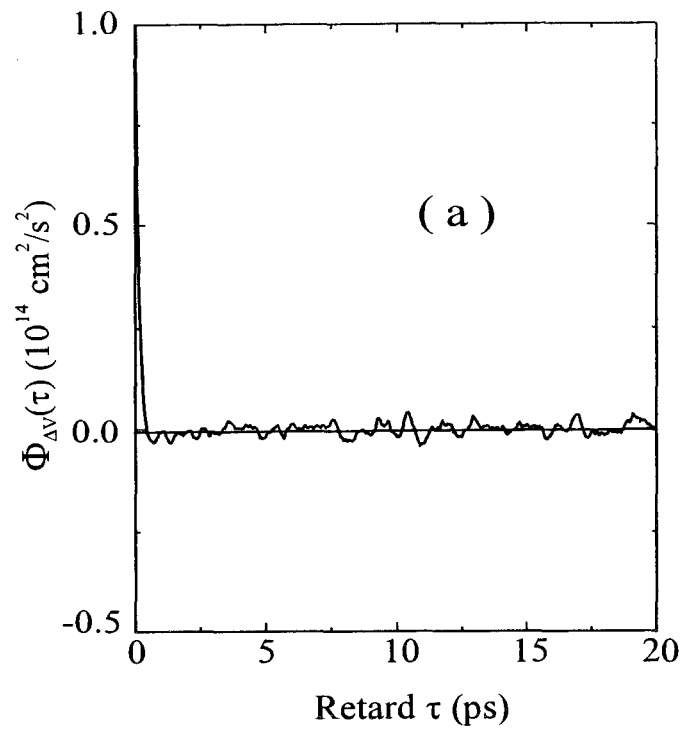


Figure (II-7)

- a) la fonction de corrélation de vitesse longitudinale $\Phi_{\Delta V}(\tau)$
 b) le coefficient de diffusion associé $D(0)$ pour la structure en
 $Al_{0.15}Ga_{0.85}As/In_{0.15}Ga_{0.85}As/Al_{0.15}Ga_{0.15}As$
 ($T=300\text{ K}$, $E=7\text{ kV/cm}$, $N_S=8 \times 10^{15}\text{ m}^{-2}$)

Chapitre II

corrélation. Le temps nécessaire pour traiter ce fichier est trois fois plus long qu'à 300 K. La figure (II-6) montre un exemple de fonction de corrélation et les étapes nécessaires entre l'état initial et l'état final adopté pour calculer le coefficient de diffusion. Sur la figure (II-6a) nous avons montré 4 fonctions $\Phi_{iv}(\tau)$ qui correspondent à quatre sous-histoires. Ces fonctions ne sont ni centrées ni normalisées. Nous observons qu'elles sont pratiquement identiques. A partir de ces fonctions nous déduisons la fonction de corrélation moyenne $\bar{\Phi}_v(\tau)$ qui est présentée à la figure (II-6b). Nous centrons cette fonction dans un intervalle de temps $\tau_i - \tau_f$. La figure (II-6c) montre la fonction de corrélation moyenne centrée et normalisée $\phi_{\Delta v}(\tau)$. C'est la démarche que nous avons adoptée pour nous assurer de la stabilité du système et calculer la fonction de corrélation à 77 K.

La fonction $\phi_{\Delta v}(\tau)$ ne tend pas vers une valeur nulle mais fluctue autour de zéro, même au temps longs. Une fenêtre temporelle s'avère donc indispensable pour éliminer les fluctuations et pour bien visualiser la forme du spectre. Nous avons fixé notre choix de fenêtre temporelle sur celle de Hamming [22], donnée par la relation suivante:

$$f(\tau) = 0.5 \left(1 + \cos \frac{\pi \tau}{T} \right) \quad (\text{éq. II-14})$$

il lui correspond une fenêtre spectrale:

$$Q(f) = 0.5 Q_0(f) + 0.25 Q_0 \left(f + \frac{1}{2T} \right) + 0.25 Q_0 \left(f - \frac{1}{2T} \right) \quad (\text{éq. II-15})$$

avec

$$Q_0(f) = 2 T \frac{\sin 2 \pi f T}{2 \pi f T} \quad (\text{éq. II-16})$$

qui représente la fenêtre spectrale correspondante à la fenêtre temporelle rectangulaire.

La figure (II-6d) montre $\Phi_{\Delta v}^f(\tau)$ la fonction de corrélation dans l'état final après avoir utilisé la fenêtre de Hamming.

Concernant la dernière étape de calcul, le coefficient de diffusion statique est donné par une simple relation:

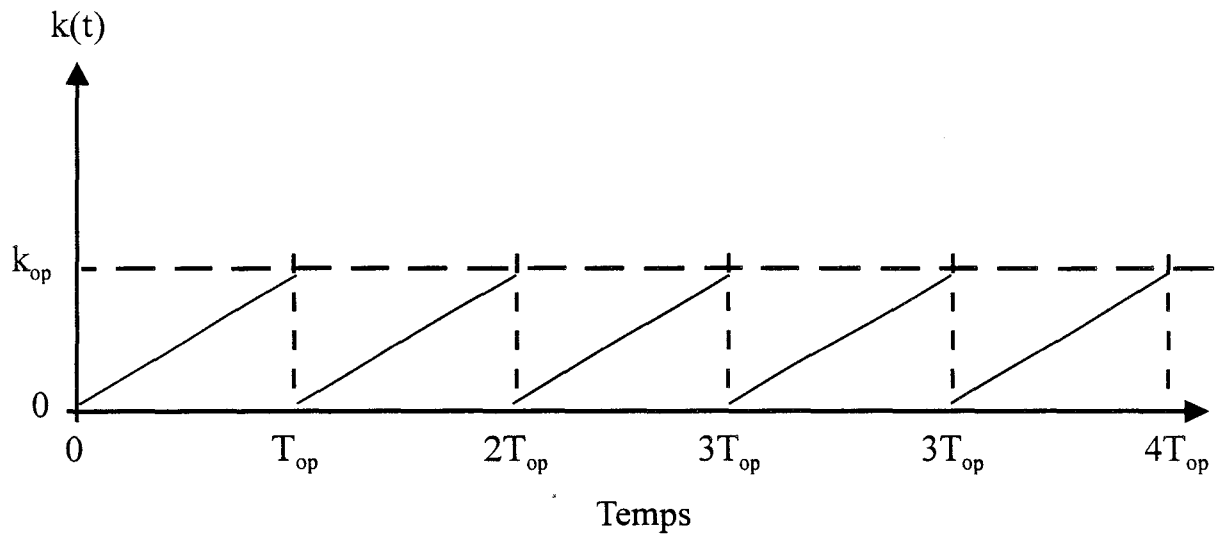


Figure (II-8a)

Représentation schématique de l'évolution du vecteur d'onde $k(t)$ d'un électron sous l'effet combiné du champ électrique accélérateur et de la collision par émission de phonons optiques polaires.

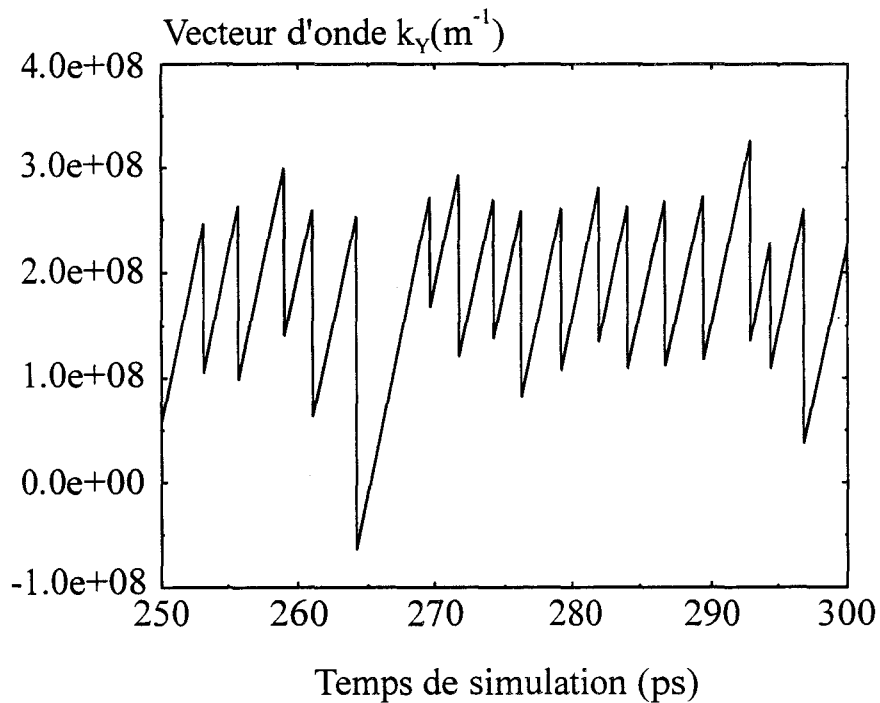


Figure (II-8b)

Evolution du vecteur d'onde k_y avec le temps pour la structure en

$Al_{0.15}Ga_{0.85}As/In_{0.15}Ga_{0.85}As/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$

($T=77\text{ K}$, $E=0.4\text{ kV/cm}$, $N_s=8 \times 10^{15}\text{ m}^{-2}$)

$$D(0) = \int_0^{\infty} \Phi(\tau) d\tau \quad (\text{éq. II-17})$$

Nous avons observé l'évolution de $D(0)$ en fonction du temps d'intégration T de la fonction $\Phi(\tau)$. Nous avons observé que généralement, $D(0)$ fluctue autour d'une valeur moyenne qu'on déterminera et qui va être la valeur finale du coefficient de diffusion par fluctuation de vitesse $D(0)$. Sur la figure (II-6e) est représenté le coefficient de diffusion statique associé en fonction du temps d'intégration. Nous constatons que $D(0)$ tend vers une valeur moyenne $D_m(0)=400 \text{ cm}^2/\text{s}$.

A titre d'exemple les figures (II-7a) et (II-7b) montrent respectivement la fonction de corrélation de vitesse longitudinale $\Phi_{\Delta v}^f(\tau)$ et le coefficient $D(0)$ associé obtenus avec l'hétérostructure de la figure (II-2a) à $T=300 \text{ K}$ pour $N_s=8 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$ et $E=7 \text{ kV/cm}$. Nous constatons que $D(0)$ fluctue autour d'une valeur moyenne $D_m(0)=140 \text{ cm}^2/\text{s}$ qui sera la valeur définitive de $D(0)$.

Comme on le voit la méthode « Bruit » est plus délicate à mettre en oeuvre que la méthode « Etalement ». Cependant elle fournit, outre le coefficient de diffusion statique, le comportement en fréquence, qui semble inaccessible par la méthode « Etalement ». En fait, il est possible d'obtenir des renseignements au moins qualitatifs sur le comportement transitoire même à l'aide de la simulation d'étalement de paquet. Pour cela il faut considérer l'évolution temporelle des variances de positions, aux temps « courts ». Pour illustrer ce point nous considérerons le phénomène d'émission quasi-périodique de phonons [23]. C'est le but de la section (II.1.2.4)

II.1.2.4. Aspects qualitatifs. Périodicité de l'émission optique polaire.

La fonction de corrélation peut présenter des oscillations quasi-périodiques qui traduisent la quasi-périodicité de l'interaction sur phonon optique polaire que subissent les porteurs dans leur évolution. Ce phénomène a été prédit par Ferry [23]. Yen [14] et Zimmermann [15] l'ont observé à l'aide d'un modèle Monte-Carlo pour un gaz d'électrons 2D. En fait, du point de vue théorique, l'évolution d'un électron au cours du temps est une succession d'accélération sous l'effet du champ électrique entrecoupées par les interactions. Si l'interaction optique polaire agissait seule, un électron serait accéléré par le champ électrique jusqu'à ce que son énergie atteigne $\hbar\omega_0$ pour émettre probablement un phonon, et

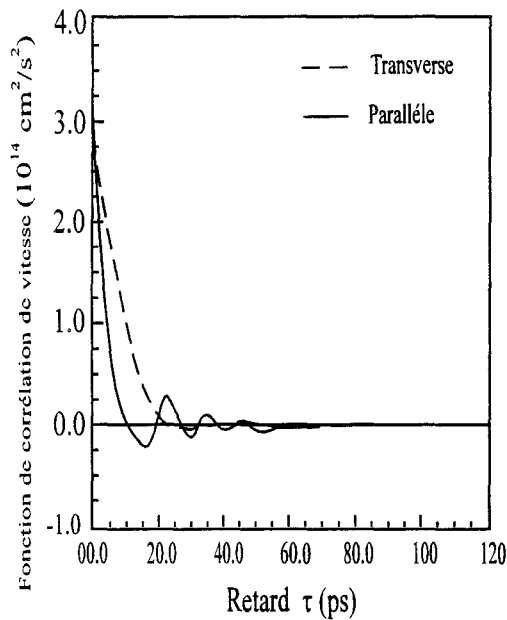


Figure (II-9a)

Fonctions de corrélations des vitesses
pour la structure en
 $Al_{0.15}Ga_{0.85}As/In_{0.15}Ga_{0.85}As/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$
($T=77\text{ K}$, $E=0.1\text{ kV/cm}$, $N_S=8\times 10^{15}\text{ m}^{-2}$)

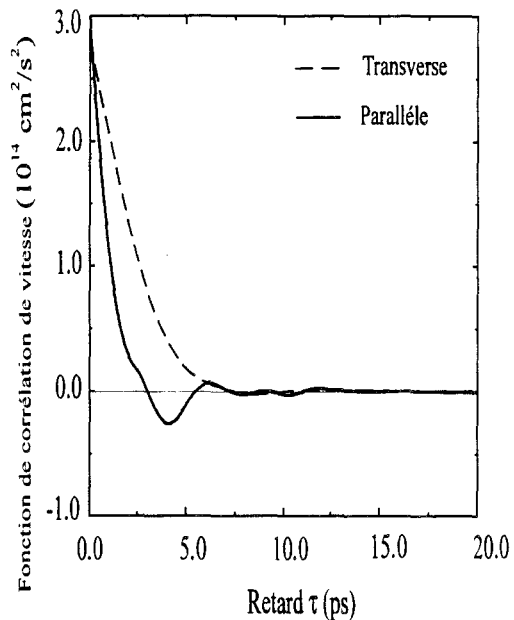
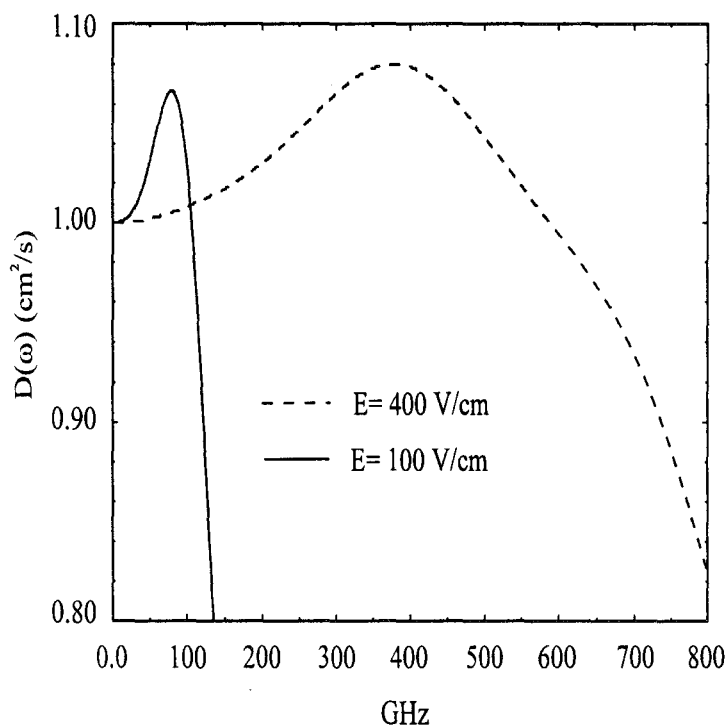


Figure (II-9b)

Fonctions de corrélation des vitesses
pour la structure en
 $Al_{0.15}Ga_{0.85}As/In_{0.15}Ga_{0.85}As/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$
($T=77\text{ K}$, $E=0.4\text{ kV/cm}$, $N_S=8\times 10^{15}\text{ m}^{-2}$)



Figure(II-10)

Densité spectrale de bruit longitudinale traitée avec la fenêtre de Hamming
pour la structure en
 $Al_{0.15}Ga_{0.85}As/In_{0.15}Ga_{0.85}As/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$
($T=77\text{ K}$, $N_S=8\times 10^{15}\text{ m}^{-2}$)

Chapitre II

retomberait après la collision au fond de la sous-bande qu'il occupe pour être accéléré de nouveau. Cette évolution est schématisée sur la figure (II-8). La période de ce processus est donnée par:

$$T_{op} = \frac{\hbar}{qE} k_0 \quad (\text{éq. II-18})$$

où k_0 est le vecteur d'onde de seuil pour l'émission optique polaire

Sur la fonction de corrélation de vitesse cela se traduit par des oscillations dont la pseudo-période est égale à T_{op} et dont l'amplitude diminue lentement.

Nous avons utilisé le modèle Monte-Carlo pour observer ce phénomène. Nous avons choisi d'étudier l'hétérostructure pseudomorphique en AlGaAs/InGaAs/InGaAs avec les mêmes caractéristiques que sur la figure (II-2a). Pour faciliter l'observation de ce phénomène nous avons étudié un électron sous l'effet de l'interaction optique polaire seulement puisque les autres interactions perturbent le mouvement de l'électron et par conséquent amortissent les oscillations.

Les figures (II-9a) et (II-9b) présentent les fonctions de corrélation longitudinale et transverse obtenu à $T=77$ K et $N_s=8 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$ pour $E=0.1, 0.4$ kV/cm. Nous pouvons constater que les fonctions de corrélation ont la même allure que celle obtenu par Zimmermann et Yen [14][15]. Alors que les transverses décroissent exponentiellement avec le temps, les longitudinales présentent des oscillations dont l'amplitude diminue dans le temps et dont la pseudo-période est inversement proportionnelle au champ électrique appliqué. Concernant la pseudo-période, les valeurs de T_{op} obtenues par la simulation sont voisines de celles obtenues par la formule comme le montre le tableau II-3. Nous avons exprimé T_{op} en fonction du vecteur d'onde k_0 , en tenant compte de la non-parabolicité.

Champ électrique (kV/cm)	Modèle (ps)	$T_{op} = \frac{\hbar}{qE} k_0$ (ps)
E=0.1	13.5	15.3
E=0.4	3.0	3.8

Tableau II-3

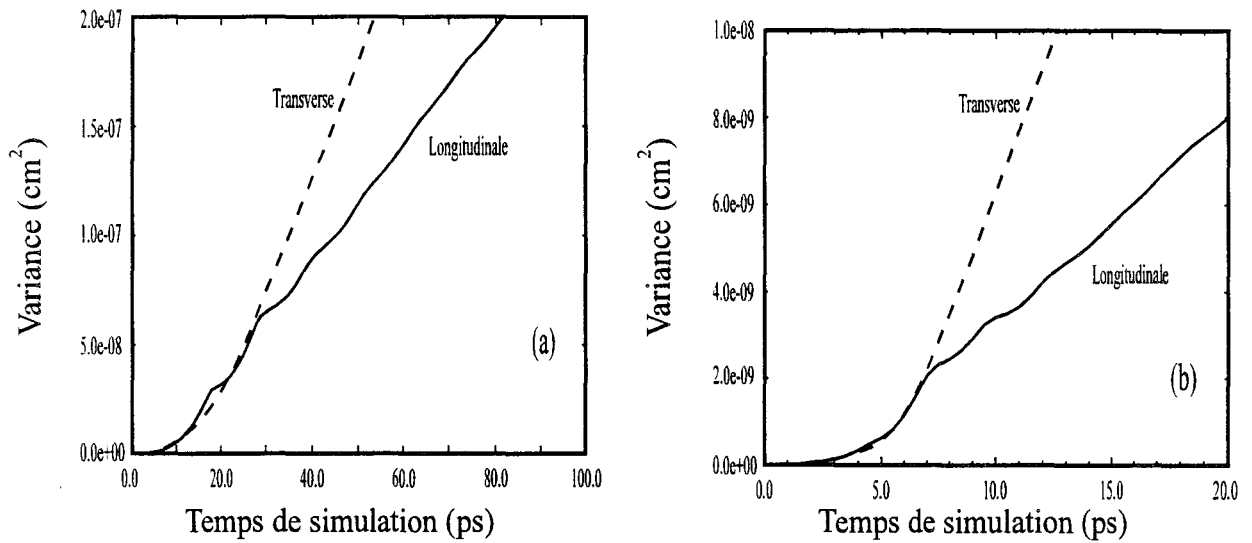


Figure (II-11)

Evolution des variances de déplacements longitudinale et transverse

pour la structure en

$Al_{0.15} Ga_{0.85} As / In_{0.15} Ga_{0.15} As / Al_{0.15} Ga_{0.85} As$

($T=77\text{ K}$, $N_S=8 \times 10^{15}\text{ m}^{-2}$)

a) $E=0.1\text{ kV/cm}$

b) $E=0.4\text{ kV/cm}$

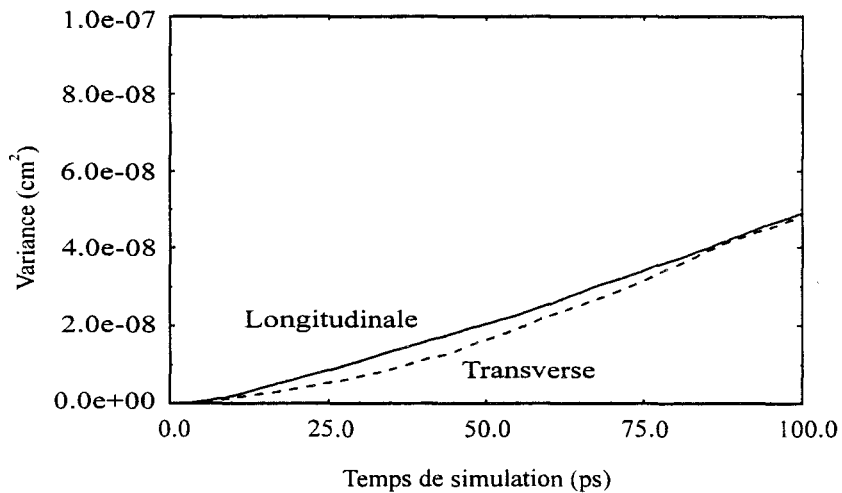


Figure (II-12)

Evolution des variances de déplacements longitudinale et transverse pour la structure en

$Al_{0.15} Ga_{0.85} As / In_{0.15} Ga_{0.85} As / Al_{0.15} Ga_{0.85} As$

*en tenant en compte de l'interaction sur impuretés
et de l'interaction optique polaire.*

($T=77\text{ K}$, $E=0.1\text{ kV/cm}$, $N_S=8 \times 10^{15}\text{ m}^{-2}$)

Chapitre II

Ce comportement oscillatoire caractérisé par T_{op} se traduit au niveau de la densité spectrale par une fréquence de résonance $1/T_{op}$ proportionnelle au champ électrique. Ceci apparaît sur la figure (II-10) qui montre la densité spectrale de bruit longitudinale à $E=0.1$ et 0.4 kV/cm avec les fréquences de résonance respectives 75 GHz et 350 GHz.

Nous allons maintenant tenter d'observer ce phénomène à l'aide de la méthode « Etalement », en examinant l'évolution temporelle des variances de position.

Pour cela, nous avons utilisé la même structure dans les mêmes conditions de température et de densité surfacique d'électrons. En pratique nous avons observé l'étalement de 4000 électrons pendant 250 ps. Afin de mieux observer le phénomène périodique nous avons reporté sur les figures (II-11a) et (II-11b) un agrandissement de l'évolution de la variance en fonction du temps pour les champs $E=0.1$ et 0.4 kV/cm. Ainsi pendant que la variance transverse évolue linéairement, dans la direction parallèle au champ nous observons des « ondulations » qui sont caractérisées par une pseudo-période et qui disparaissent aux temps longs. Nous avons calculé la pseudo-période et nous avons trouvé respectivement 15 ps et 3.4 ps pour $E=0.1$ et 0.4 kV/cm. Des valeurs qui sont voisines de celles obtenues par la fonction de corrélation.

Cette étude nous a permis de montrer que la périodicité de l'émission optique polaire apparaît également avec la méthode d'étalement de paquet. A titre d'illustration la figure (II-12) montre l'évolution de la variance parallèle en fonction de temps à $E=0.1$ kV/cm en tenant compte des deux interactions: l'optique polaire et l'interaction sur impureté. Nous pouvons constater que la prise en compte de l'interaction sur impuretés voile complètement les oscillations. Une étude quantitative qui montre que l'interaction sur impuretés est de loin prédominante en champ faible, est détaillée dans la section qui suit immédiatement.

Un fait important à signaler est que le phénomène périodique est accessible plus facilement avec la méthode par « Etalement » de paquet qu'avec la fonction de corrélation si on prend en compte le facteur temps calculs. En effet il faut en moyenne 1 heure de simulation pour observer les ondulations par étalement par paquet. D'autre part, nous passons beaucoup de temps à calculer la fonction de corrélation comme nous l'avons expliqué dans le paragraphe consacré à la procédure de calcul de cette fonction. Pour fixer définitivement ce choix, il faut bien sûr s'assurer que cette méthode fournit les coefficients de diffusion avec une précision au moins égale à celle de la méthode « Bruit ». Dans la section (II.2.2.1) nous

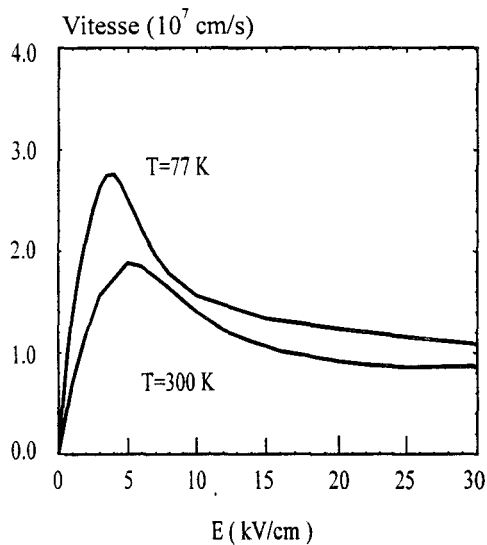


Figure (II-13)
Evolution de la vitesse avec le champ électrique à $T=77$ K et 300 K pour la structure en $Al_{0.15}Ga_{0.85}As/In_{0.15}Ga_{0.85}As/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$ avec $N_S=8 \times 10^{15} m^{-2}$

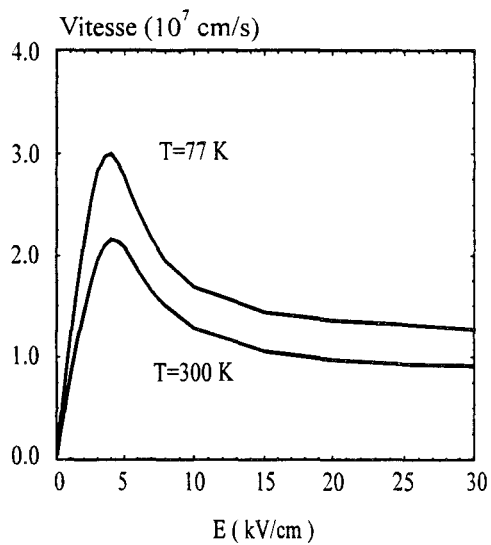


Figure (II-14)
Evolution de la vitesse avec le champ électrique à $T=77$ K et 300 K pour la structure en $Al_{0.48}In_{0.52}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As/Al_{0.48}In_{0.52}As$ avec $N_S=8 \times 10^{15} m^{-2}$

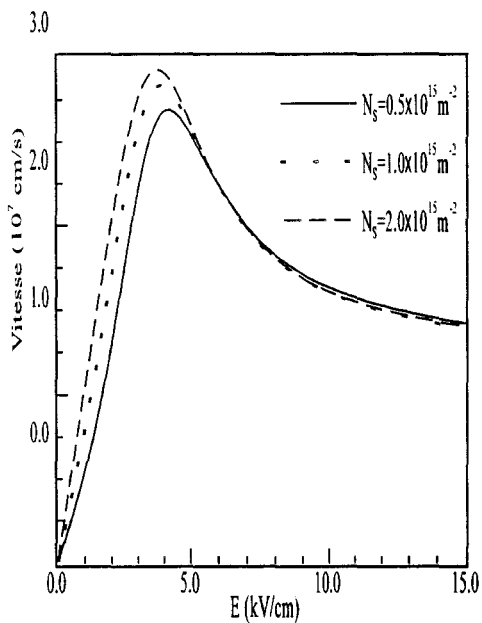


Figure (II-15)
Evolution de la vitesse avec le champ électrique pour la structure en $Al_{0.48}In_{0.52}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As/Al_{0.48}In_{0.52}As$ pour différentes valeurs de N_S à $T=77$ K.

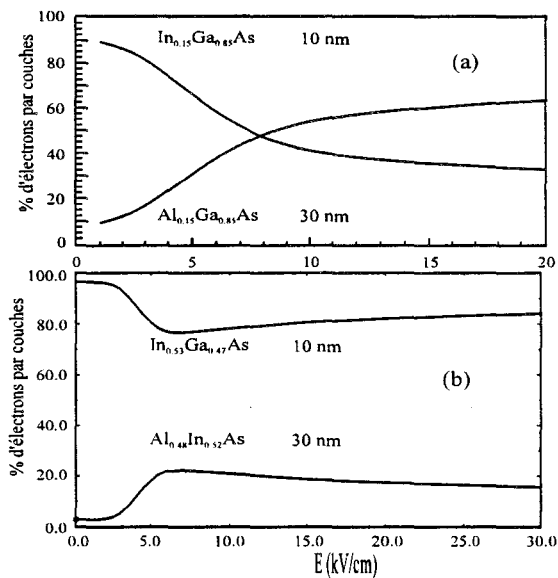


Figure (II-16)
Evolution du pourcentage d'électrons par couche avec le champ électrique pour les deux MODFETs. ($T=300$ K, $N_S=8 \times 10^{15} m^{-2}$)

vérifions ce point avant d'entreprendre une étude systématique de la diffusion dans les MODFETs.

II.2. Résultats et interprétations.

Dans cette section nous présentons de façon systématique les caractéristiques de transport obtenues pour nos deux structures MODFETs typiques représentées sur la figure (II-2). Nous commençons par présenter brièvement les caractéristiques de premier ordre: vitesse moyenne, transfert des électrons dans l'espace réel, structure de bande d'énergie. Nous étudierons ensuite de façon détaillée leur caractéristique de diffusion. Nous discuterons de l'influence de la température et de la densité surfacique de charge N_S .

II.2.1. Caractéristiques du premier ordre

II.2.1.1. Influence de la température

Sur les figures (II-13) et (II-14) sont représentées les caractéristiques vitesse-champ électrique pour les hétérostructures décrites respectivement sur les figures (II-2a) et (II-2b) à $N_S=8 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$. Nous y observons des vitesses plus élevées à la température de l'azote liquide qu'à la température ambiante. Cet effet, étant particulièrement marqué à faible champ, la mobilité augmente de façon très sensible dans les hétérostructures. Notons également l'accroissement de la vitesse pic.

II.2.1.2. Influence de la densité surfacique N_S

L'effet de la densité N_S sur la vitesse est illustré sur la figure (II-15) pour 3 valeurs de la densité N_S : 0.5×10^{15} , 10^{15} et $2 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$ pour la structure présentée par la figure (II-2b) à 77 K. Les caractéristiques vitesse-champ électrique montrent que, lorsque N_S croît, nous observons que la vitesse pic croît aussi et le champ de seuil se décale vers une valeur plus faible. Cela est dû à l'effet d'écrantage qui augmente en fonction de N_S et qui contribue à augmenter la mobilité électronique à champ faible.

II.2.1.3. Comparaison entre les deux hétérostructures.

A titre d'illustration, nous présentons sur les figures (II-16a) et (II-16b) la répartition électronique dans les différentes couches pour les deux hétérostructures présentées par les figures (II-2a) et (II-2b) à $T=300 \text{ K}$ et $N_S=8 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$. Nous remarquons que l'hétérostructure en AlInAs/InGaAs permet un bon confinement des électrons chauds, et réduit considérablement le transfert dans l'espace réel. L'autre favorise le transfert vers la

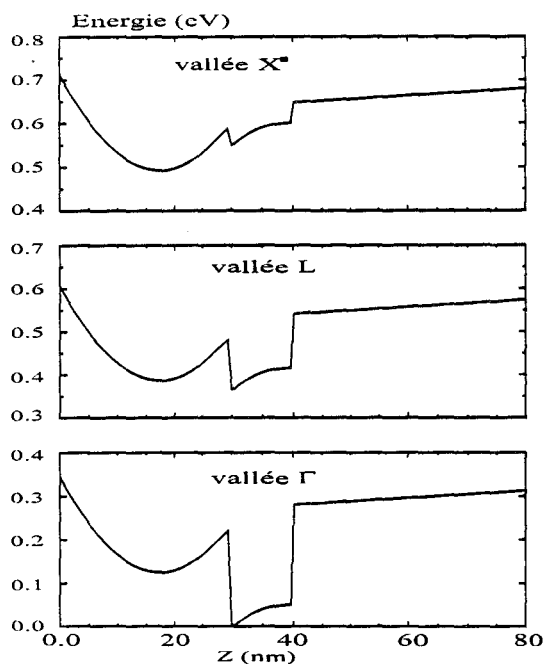


Figure (II-17a)

Potentiel électronique dans les différentes vallées pour la structure en $Al_{0.15}Ga_{0.85}As/In_{0.15}Ga_{0.85}As/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$ ($T=300\text{ K}$, $N_S=8 \times 10^{15}\text{ m}^{-2}$)

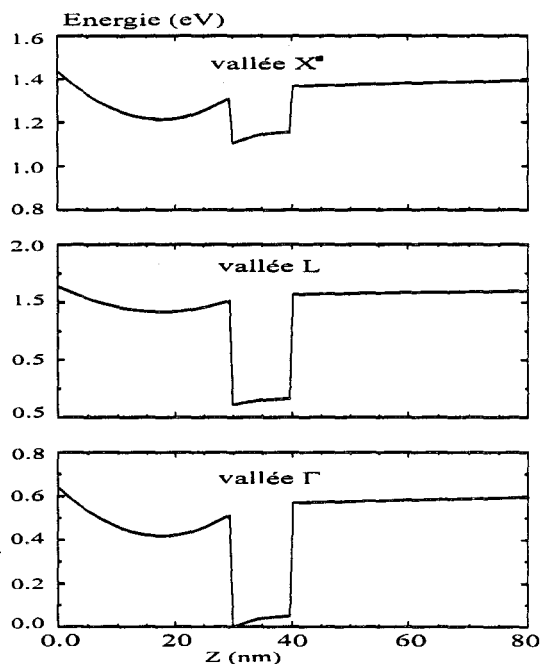


Figure (II-17b)

Potentiel électronique dans les différentes vallées pour la structure en $Al_{0.48}In_{0.52}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As/Al_{0.48}In_{0.52}As$ ($T=300\text{ K}$, $N_S=8 \times 10^{15}\text{ m}^{-2}$)

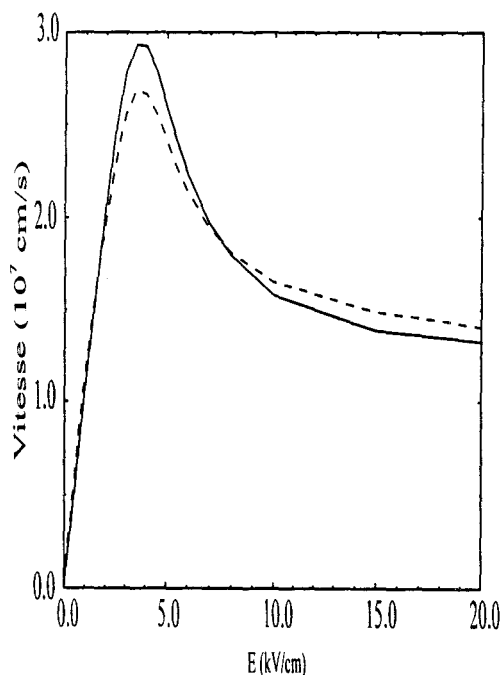


Figure (II-18)

Evolution de la vitesse moyenne avec le champ électrique. En trait plein: structure en $Al_{0.15}Ga_{0.85}As/In_{0.15}Ga_{0.85}As$ En trait pointillé: structure $Al_{0.48}In_{0.52}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As$ ($T=77\text{ K}$, $N_S=2 \times 10^{15}\text{ m}^{-2}$)

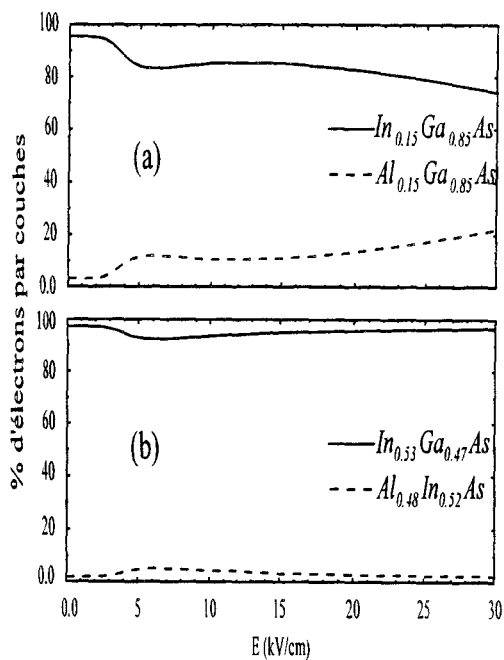


Figure (II-19)

Evolution du pourcentage d'électrons par couches avec le champ électrique pour les deux MODFETs. ($T=77\text{ K}$, $N_S=2 \times 10^{15}\text{ m}^{-2}$)

couche supérieure en AlGaAs à cause de l'existence d'un deuxième puits dans cette couche comme le montrent les figures (II-17a) et (II-17b) où nous avons comparé les potentiels pour les deux hétérostructures [24].

Sur les figures (II-18) et (II-19) nous avons comparé respectivement les caractéristiques vitesse-champ et la répartition spatiale des électrons pour les deux hétérostructures à $T=77$ K et $N_S=2 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$. Nous observons qu'au voisinage du champ de seuil et dans la zone de mobilité différentielle négative, la vitesse est supérieure pour la structure en AlInAs/InGaAs. Cependant la vitesse de saturation est légèrement supérieure dans le cas de AlGaAs/InGaAs. Les potentiels pour les deux hétérostructures sont représentés sur les figures (II-20a) et (II-20b).

II.2.2. Caractéristiques du second ordre.

II.2.2.1. Etude à la température ambiante.

a) Résultats relatifs à l'AlGaAs/InGaAs/AlGaAs. Comparaison des deux méthodes.

Sur la figure (II-21) les courbes représentent les coefficients de diffusion obtenus par les deux méthodes en suivant les démarches de calcul développées dans la section précédente. Ils résultent de la simulation de l'hétérostructure AlGaAs/InGaAs dont les caractéristiques géométriques et les dopages des couches sont détaillés sur la figure (II-2a). La densité électronique N_S a été maintenue égale à $8 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$ pour toutes les études faites à la température ambiante.

Nous constatons que les résultats obtenus par les deux méthodes sont en bon accord sur tout le domaine d'observation avec une erreur relative qui ne dépasse pas 10%. Il apparaît d'après cette étude que la valeur des coefficients D_Y et D_X est indépendante de la méthode choisie. Cette étude permet d'estimer la précision des résultats obtenus par notre simulateur Monte-Carlo (qui est de l'ordre de 10 %). Ceci représente un point important pour choisir entre la méthode « Bruit » et la méthode « Etalement ». Les deux méthodes fournissent des résultats comparables en tout point. Au niveau numérique elles sont en bon accord. Aux niveaux qualitatif et fondamental nous avons montré que les deux méthodes permettent d'observer la quasi-périodicité de l'émission optique polaire. Il est plus facile du point de vue temps calcul de l'observer avec la méthode « Etalement » qu'avec la méthode « Bruit » comme nous l'avons expliqué au paragraphe II-2.2.1. Il est vrai aussi que la méthode « Bruit »

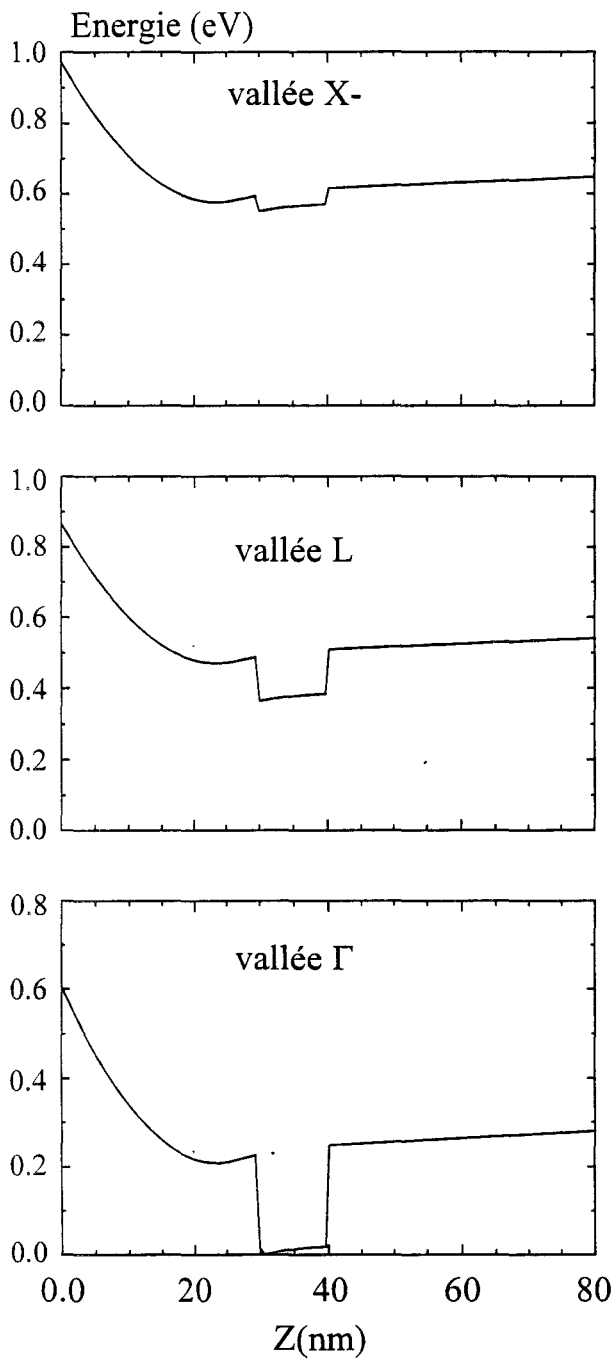


Figure (II-20a)
 Potentiel électronique dans les différentes vallées pour la structure en $Al_{0.15}Ga_{0.85}As/In_{0.15}Ga_{0.85}As/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$
 ($T=77\text{ K}$, $N_S=2 \times 10^{15}\text{ m}^{-2}$)

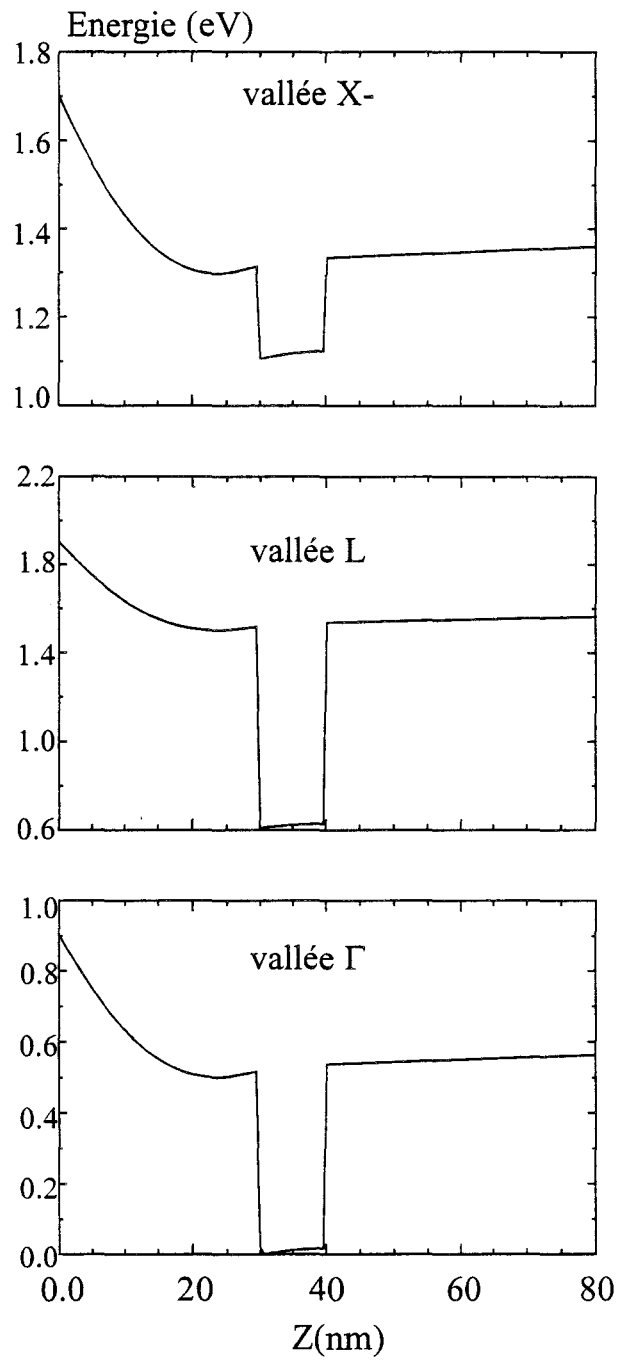


Figure (II-20b)
 Potentiel électronique dans les différentes vallées pour la structure en $Al_{0.48}In_{0.52}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As/Al_{0.48}In_{0.52}As$
 ($T=77\text{ K}$, $N_S=2 \times 10^{15}\text{ m}^{-2}$)

Chapitre II

fournit plus d'informations, comme la densité spectrale de bruit. Cependant dans la suite nous nous concentrons sur le coefficient de diffusion statique. Pour toutes ces raisons nous avons choisi la méthode « Etalement » et tous les coefficients D_Z et D_X présentés dans la suite sont obtenus par cette méthode.

b) Résultats relatifs à l'AlInAs/InGaAs/AlInAs - Comparaison avec l'AlGaAs/InGaAs/AlGaAs.

La figure (II-22) présente les coefficients de diffusion D_Y et D_X relatifs à l'hétérostructure en AlInAs/InGaAs/AlInAs de la figure (II-2b). La densité électronique N_S et la température sont inchangées.

En regardant les deux figures (II-21) et (II-22), nous remarquons que lorsque le champ électrique est nul, la relation d'Einstein liant la diffusion à la température de bruit est vérifiée à la précision de calcul près ($D_Y = D_X = \frac{kT}{q} \mu$). Nous obtenons $\mu=7200 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ associée à $D=180 \text{ cm}^2/\text{s}$ dans le cas de la structure sur GaAs et $10000 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ associée à $D=250 \text{ cm}^2/\text{s}$ pour la structure sur InP. L'allure des caractéristiques de diffusion est la même pour les deux hétérostructures. Le coefficient D_X présente un maximum autour du champ de seuil $E=5 \text{ kV/cm}$ qui est de $250 \text{ cm}^2/\text{s}$ pour la structure sur GaAs, et $450 \text{ cm}^2/\text{s}$ pour la structure sur InP. Ce coefficient croît rapidement pour $1 < E < 6 \text{ kV/cm}$ au champ faible puis décroît lentement au champ fort. Le coefficient D_Y se comporte d'une façon différente; il décrit un plateau aux champs faibles. Ce plateau est plus large pour la structure sur GaAs que pour celle sur InP. Au-dessus du champ de seuil, D_Y décroît rapidement. Cette décroissance à champ élevé, est due au fait que les électrons sont majoritairement en vallées satellites où la masse effective est importante, et tendent alors à orienter leur mouvement dans la direction du champ. Il faut signaler que les valeurs numériques des coefficients sont supérieures dans le cas de l'hétérostructure sur InP que dans l'autre.

Nous constatons que le coefficient de diffusion transverse D_X est toujours supérieur au coefficient de diffusion parallèle D_Y . D'après cette étude sur les gaz 2D pour deux hétérostructures utilisant des matériaux différents et d'après les études diversifiées sur les gaz 3D [13] [25] à la même température $T=300 \text{ K}$, il apparaît que cette position relative de D_Y et D_X est fréquemment rencontrée à température ambiante [26].

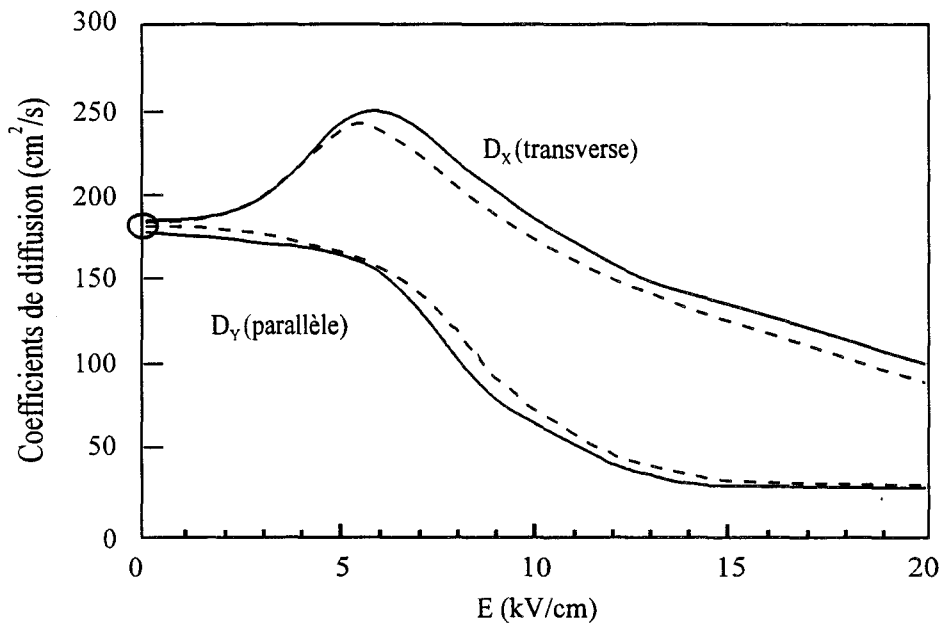


Figure (II-21)

Evolution des coefficients de diffusion avec le champ électrique pour la structure en $Al_{0.15}Ga_{0.85}As/In_{0.15}Ga_{0.85}As/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$.

En trait plein: méthode par étalement d'un paquet d'électrons

En trait pointillé: méthode de fluctuation des vitesses

($T=300\text{ K}$, $N_s=8 \times 10^{15}\text{ m}^{-2}$)

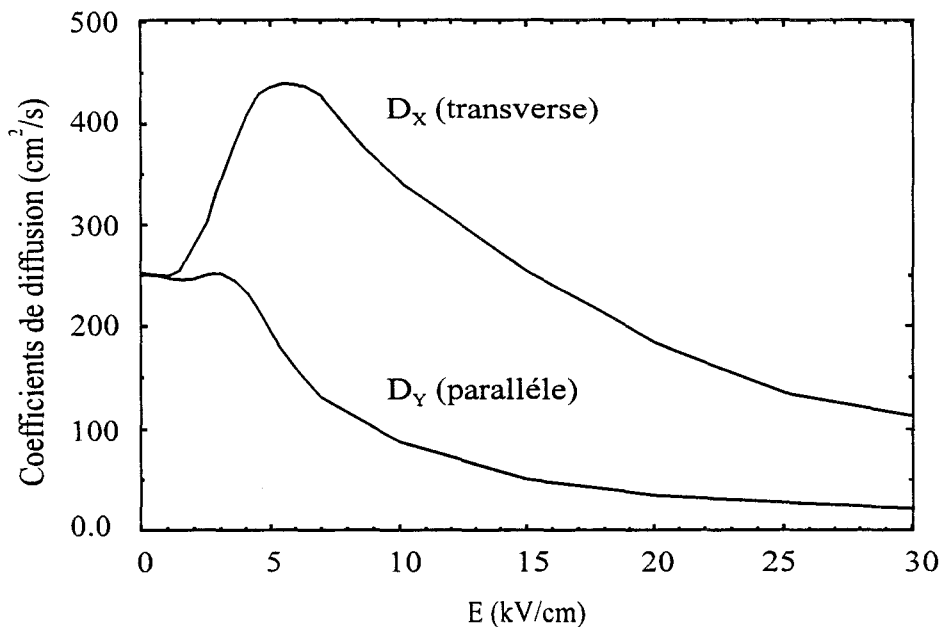


Figure (II-22)

Evolution des coefficients de diffusion avec le champ électrique pour la structure en $Al_{0.48}In_{0.52}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As/Al_{0.48}In_{0.52}As$ calculés par étalement d'un paquet d'électrons.

($T=300\text{ K}$, $N_s=8 \times 10^{15}\text{ m}^{-2}$)

II.2.2.2. Etude à la température de l'azote liquide - Résultats et interprétations.

a) Structure sur GaAs

Tout d'abord, nous avons repris notre structure de référence en AlGaAs/InGaAs/AlGaAs décrite à la figure (II-2a). Nous avons effectué le calcul des coefficients de diffusion, tout en maintenant constante la densité de porteurs $N_S=2 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$. Cette valeur a été choisie car elle est suffisamment faible pour éviter la dégénérescence du gaz électronique.

Les coefficients de diffusion obtenus à 77 K en fonction du champ électrique sont montrés sur la figure (II-23). Tout d'abord en comparant ces résultats par rapport à ceux obtenus à la température ambiante nous constatons un changement dans la position de D_Y par rapport à D_X . Nous remarquons que D_X a la même allure que celle obtenue à 300 K, D_X présentant un maximum autour du champ de seuil 5 kV/cm et une décroissance monotone et lente vers les champs élevés. Le comportement de D_Y est assez différent de celui observé à 300 K. A 77 K le coefficient D_Y est supérieur au coefficient de diffusion transverse D_X pour les champs inférieurs à 3 kV/cm. Dans cette partie nous avons toujours $D_Y=D_X=150 \text{ cm}^2/\text{s}$ à $E=0 \text{ kV/cm}$, soit une mobilité de $\mu=24000 \text{ cm}^2/\text{V.s}$. Le coefficient D_Y s'écarte de la relation d'Einstein dès qu'un champ électrique même faible est appliqué. On peut voir que D_Y croît très rapidement à champ faible pour atteindre autour de 1kV/cm, la valeur de $325 \text{ cm}^2/\text{s}$, puis il décroît rapidement jusqu'à 3 kV/cm. Dans l'intervalle 3-5 kV/cm, D_Y continue sa décroissance mais évolue lentement en fonction du champ. Enfin, au-dessus de 5kV/cm, D_Y décroît. D'après cette description nous pouvons dire que le coefficient D_Y est fortement dépendant du champ électrique. Dans ce qui suit nous allons essayer de donner une explication à ce comportement.

Pour expliquer les évolutions de D_Y , nous avons examiné les mécanismes d'interaction qui agissent directement sur le mouvement électronique. Sur la figure (II-24) nous avons présenté en fonction du champ électrique le nombre moyen d'interactions subies par un électron par unité de temps. Nous avons distingué trois types d'interactions: interaction sur impuretés, interaction sur phonon optique polaire et interaction intervalles. Nous remarquons que lorsque le champ électrique est inférieur à 1kV/cm, le nombre d'interactions sur impuretés subies par un électron domine de loin les autres formes. Le point important est que le taux d'interaction sur impuretés décroît fortement en fonction de l'énergie comme nous le

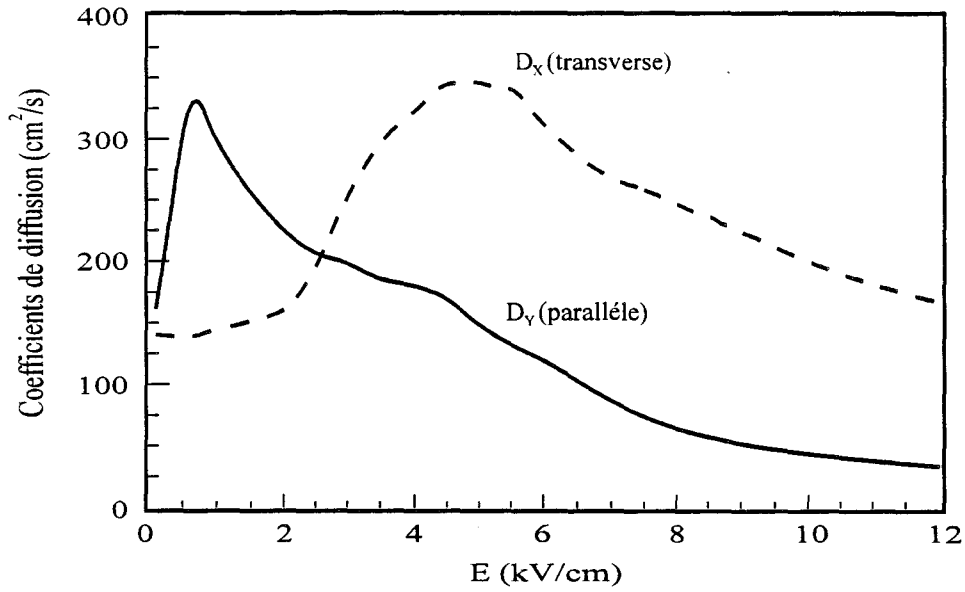


Figure (II-23)

Evolution des coefficients de diffusion avec le champ électrique pour la structure en $Al_{0.15}Ga_{0.85}As/In_{0.15}Ga_{0.85}As/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$
 ($T=77\text{ K}$, $N_S=2 \times 10^{15}\text{ m}^{-2}$)

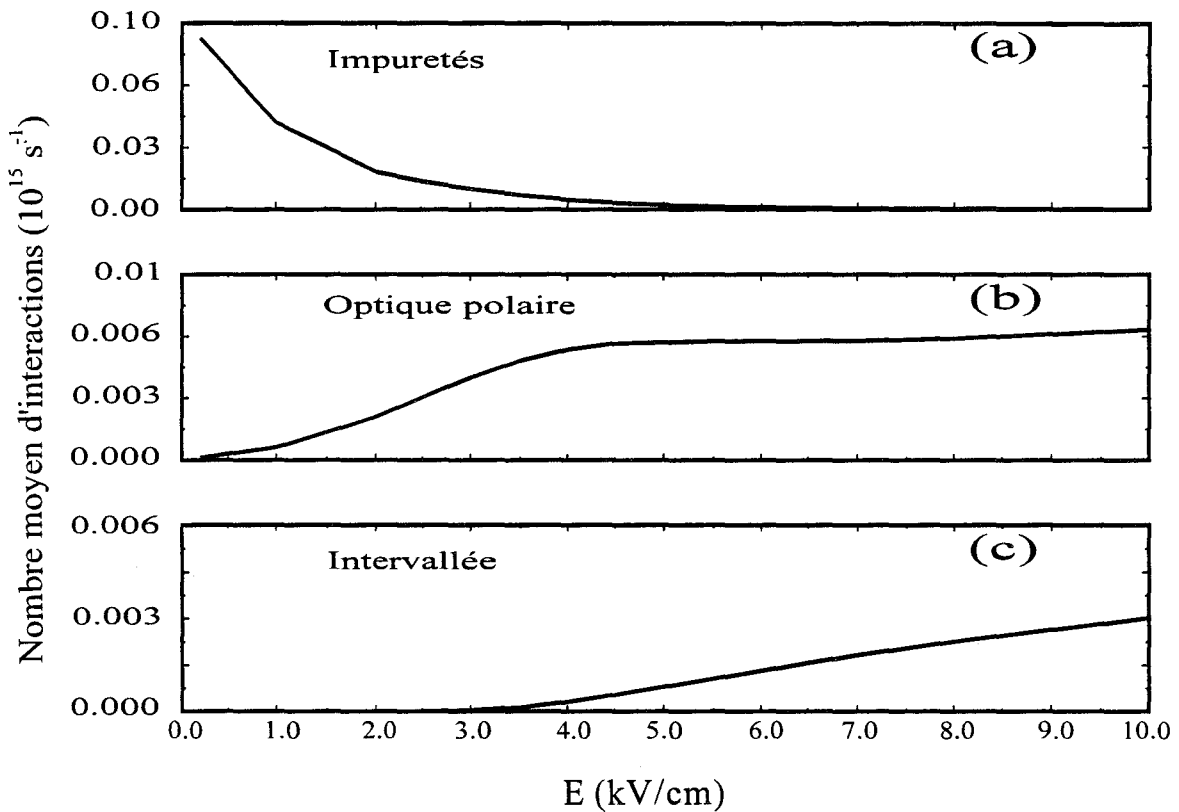


Figure (II-24)

Evolution avec le champ électrique du nombre moyen d'interactions subies par un électron par unité de temps pour la structure en $Al_{0.15}Ga_{0.85}As/In_{0.15}Ga_{0.85}As/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$.
 ($T=77\text{ K}$, $N_S=2 \times 10^{15}\text{ m}^{-2}$).

- a) interaction sur impuretés
- b) interaction optique polaire
- c) interaction intervallée

Chapitre II

montrons sur la figure (II-25). Ceci a une influence directe sur le coefficient de diffusion parallèle qui mesure la vitesse d'étalement du paquet d'électrons dans le semiconducteur. En effet il y a une corrélation entre la position des électrons et leur énergie. Dans la direction du champ électrique, les électrons qui se trouvent en tête du paquet, ont acquis de l'énergie sous l'effet du champ, et sont en moyenne, plus énergétiques que les électrons qui se trouvent en arrière. Puisque le taux d'interaction sur impuretés décroît avec l'énergie, les électrons à l'avant du paquet subissent peu d'interactions, et leur vitesse moyenne est supérieure à celle des électrons « à l'arrière ». Ceci tend à étaler le paquet, et donc, à augmenter le coefficient de diffusion longitudinal. Dans la gamme de champs électrique, 0-1 kV/cm, lorsque le champ augmente, la différence entre la vitesse des électrons en avant et celle des électrons « à l'arrière » augmente aussi. Ce qui explique la croissance du coefficient de diffusion parallèle avec le champ. Dans la direction transverse, il n'y a pas de champ électrique, et l'énergie des électrons est indépendante de la position. Ce qui explique que le coefficient de diffusion parallèle est supérieur au transverse.

Pour les champs électriques entre 1 et 3 kV/cm, les électrons sont suffisamment énergétiques pour émettre des phonons optiques polaires comme le montre la courbe d'énergie de la figure (II-26). Ceci est confirmé par la figure (II-24), qui montre que cette interaction démarre à $E=1$ kV/cm et que sa fréquence augmente en fonction du champ électrique. En conséquence, les électrons les plus énergétiques, qui sont surtout à l'avant du paquet vont subir cette interaction qui va les ralentir. Ceux-ci vont être rattrapés par les autres électrons « de l'arrière » ce qui va tendre à rassembler les électrons et en conséquence va réduire le coefficient D_Y , comme le montre la figure (II-23).

Dans la gamme de champs électriques, 3-5 kV/cm, la plupart des électrons possèdent une énergie supérieure à celle du phonon optique polaire $\hbar\omega_{op}$ et peuvent émettre un phonon, comme nous pouvons le constater sur la courbe d'énergie de la figure (II-26). Nous observons sur la courbe $\lambda(\epsilon)$ de la figure (II-25) que pour les énergies supérieures à $\hbar\omega_{op}$, l'interaction sur phonon varie lentement en fonction de l'énergie. Cette évolution explique pourquoi le coefficient D_Y varie lentement en fonction du champ dans cette gamme.

Pour les champs supérieurs à 5 kV/cm le coefficient D_Y décroît. Dans cette même gamme sur la figure (II-24) nous observons que l'interaction intervallée débute et augmente

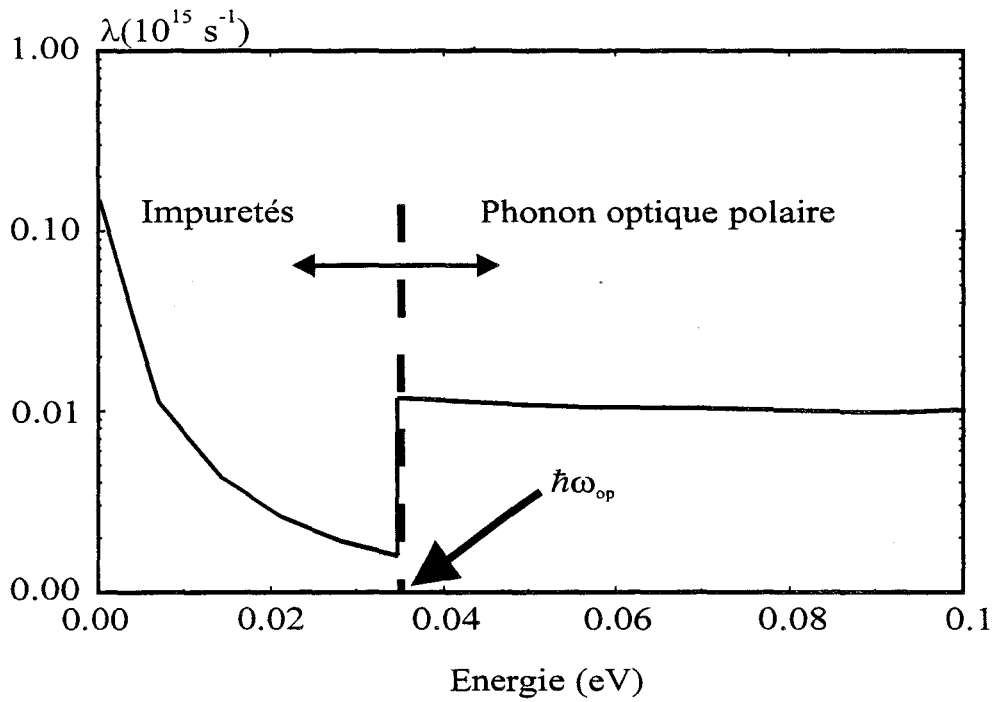


Figure (II-25)

Evolution en fonction de l'énergie du taux d'interaction sur impuretés et sur phonon optique polaire pour la structure en $Al_{0.15}Ga_{0.85}As/In_{0.15}Ga_{0.85}As/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$.
 ($T=77\text{ K}$, $N_S=2 \times 10^{15}\text{ m}^{-2}$)

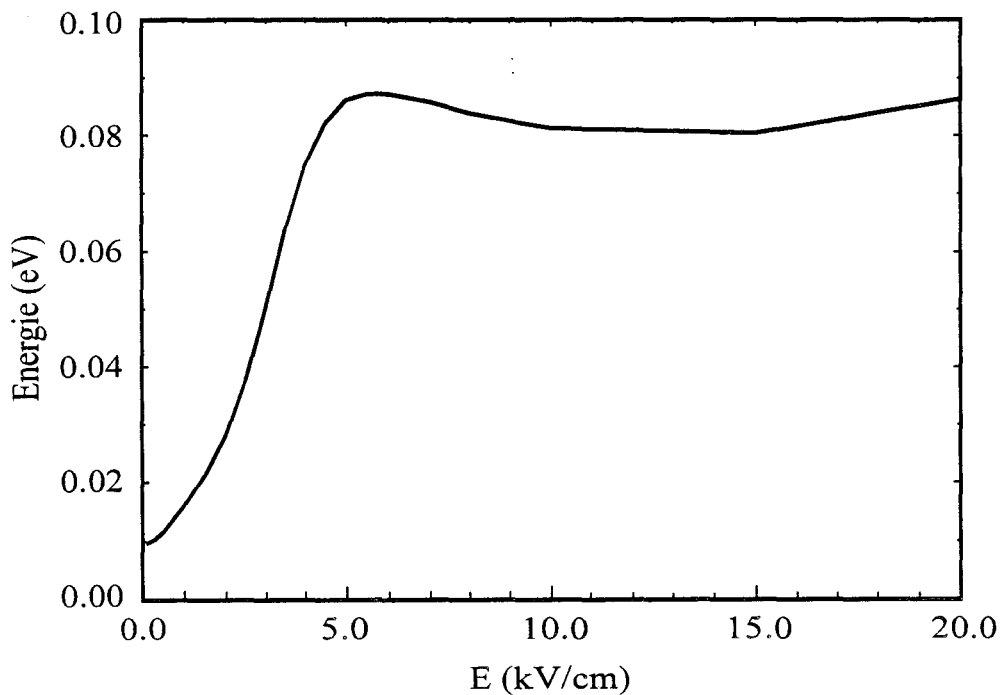


Figure (II-26)

Evolution de l'énergie moyenne avec le champ électrique pour la structure en $Al_{0.15}Ga_{0.85}As/In_{0.15}Ga_{0.85}As/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$.
 ($T=77\text{ K}$, $N_S=2 \times 10^{15}\text{ m}^{-2}$)

Chapitre II

en fonction du champ électrique. L'intervention de cette interaction peut expliquer la décroissance de D_Y qui est due au transfert des électrons vers les vallées supérieures [5].

b) Structure sur InP.

Nous avons également considéré le cas de l'hétérostructure utilisant les matériaux AlInAs et GaInAs adaptés en maille sur InP Fig (II-2b). Nous avons gardé les mêmes caractéristiques que celles de la structure précédemment discutée, avec la même densité électronique $N_S = 2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Les coefficients de diffusion de cette structure sont présentés sur la figure (II-27). A première vue, nous avons $D_X = D_Y$ à $E = 0 \text{ kV/cm}$. Soit une mobilité $\mu = 15600 \text{ cm}^2/\text{V.s}$. Nous remarquons que le coefficient D_Y évolue de la même façon que pour la structure précédente : il croît à champ faible et décroît pour les champs élevés mais entre les champs 1 et 3 kV/cm nous observons un plateau à la place du pic observé dans le cas précédent. Cette différence s'explique en utilisant la figure (II-28) où nous avons représenté l'évolution des taux d'interactions $\lambda(\epsilon)$ pour les deux hétérostructures. Nous observons que le taux d'interaction sur impuretés dans le cas de l'AlInAs/InGaAs est supérieur à celui de l'AlGaAs/InGaAs. Ceci parce que la masse effective de l'électron est plus faible dans la première structure que dans la deuxième, donc, pour une énergie donnée le module du vecteur d'onde est plus faible. Le taux d'interaction décroît lentement avec l'énergie, et reste non négligeable lorsque l'interaction sur phonon optique polaire apparaît. En conséquence, les interactions sur impuretés et sur phonon optique polaire s'opposent et engendrent un plateau au niveau de D_Y .

c) Etude en fonction de N_S .

Nous avons également étudié l'influence de la densité électronique N_S sur l'évolution du coefficient D_Y . Pour cette étude nous avons considéré le cas de la structure en AlInAs/InGaAs présentée à la figure (II-2b). Sur la figure (II-29) nous avons présenté le coefficient de diffusion D_Y en fonction du champ électrique pour trois valeurs de N_S : 0.5×10^{15} , 10^{15} et $2 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$. Nous remarquons que plus N_S est faible plus D_Y possède un maximum important. Ceci peut s'expliquer par le fait qu'à N_S faible, à cause du faible écrantage, le taux d'interactions sur impuretés est élevé. Les électrons vont subir un nombre important d'interactions, qui va réduire leur moment dans la direction du champ, ainsi que l'énergie acquise sous l'effet du champ électrique. Cela se traduit au niveau de l'énergie (Fig (II-30))

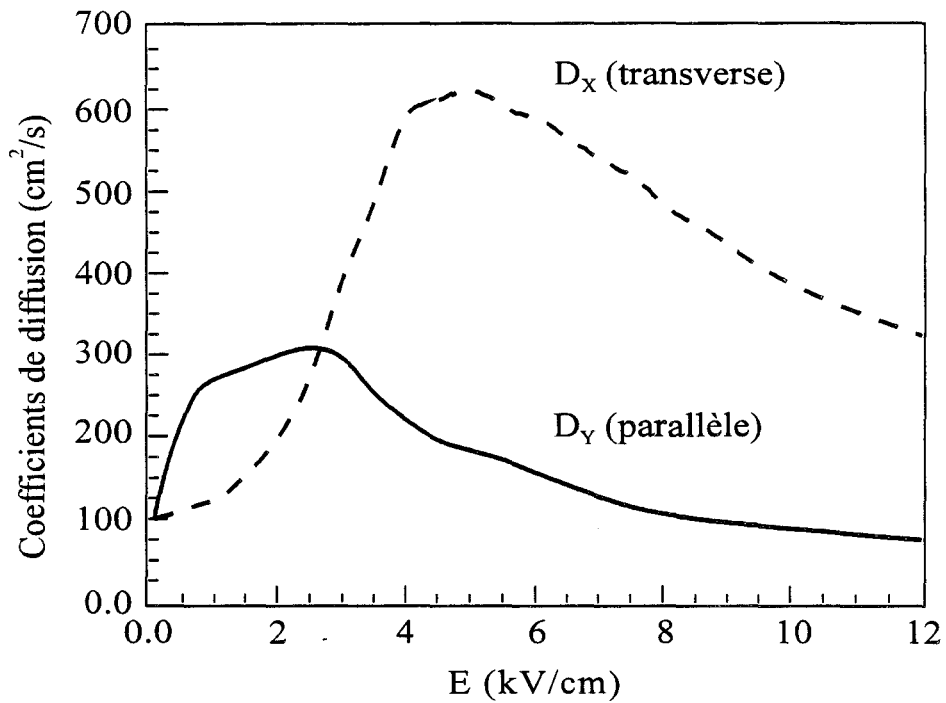


Figure (II-27)

Evolution des coefficients de diffusion avec le champ électrique pour la structure en $Al_{0.48}In_{0.52}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As/Al_{0.48}In_{0.52}As$
 ($T=77\text{ K}$, $N_S=2 \times 10^{15}\text{ m}^{-2}$)

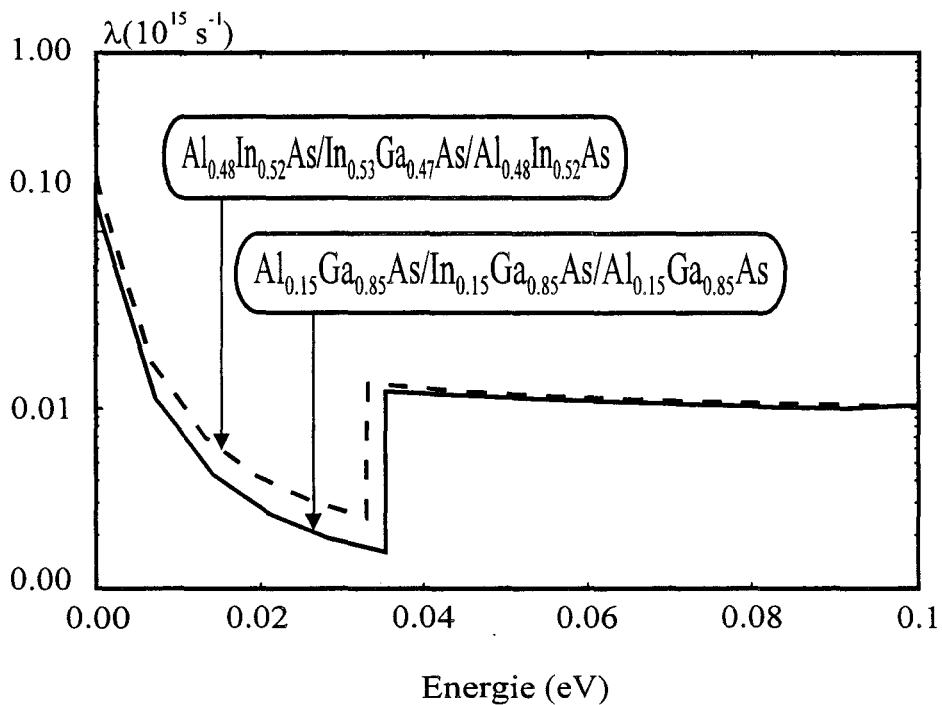


Figure (II-28)

Evolution des taux d'interactions avec l'énergie pour les deux hétérostructures.
 ($T=77\text{ K}$, $N_S=2 \times 10^{15}\text{ m}^{-2}$)

par une croissance très lente lorsque le champ électrique croît. Pour une large gamme de champs le transport électronique est dominé par l'interaction sur impuretés et par conséquent D_Y croît. Il en résulte que ce coefficient atteint des valeurs plus importantes à faible N_S qu'à fort N_S . Cette étude en fonction de N_S confirme que l'interaction sur impuretés a une influence importante sur le coefficient de diffusion. Pour les champs supérieurs à 5 kV/cm le coefficient de diffusion D_Y est pratiquement indépendant de N_S . Ceci était prévisible car l'interaction sur impuretés a peu d'influence.

d) Lien entre le taux d'interaction $\lambda(\varepsilon)$ et $D(E)$

Un fait important qui émerge à travers l'étude à 77 K, c'est la relation qui existe entre les principales interactions (impuretés, phonons et intervalles) et l'évolution du coefficient de diffusion parallèle D_Y . Nous avons montré que D_Y réagit d'une façon différente en fonction de chacune de ces interactions. Par exemple, lorsque le taux d'interaction sur impuretés décroît fortement en fonction de l'énergie ceci se traduit directement au niveau de D_Y par une croissance rapide. A l'interaction sur phonon correspond une évolution lente de D_Y . Ensuite c'est l'interaction intervalles qui marque la décroissance de D_Y à champ élevé.

II.3. CONCLUSION.

Dans ce chapitre nous avons étudié deux hétérostructures: une en AlGaAs/InGaAs pseudomorphique sur GaAs et l'autre en AlInAs/InGaAs adaptée en maille sur InP. Les coefficients de diffusion ont été calculés et commentés.

Tout d'abord nous avons établi que les coefficients de diffusion sont indépendants de la méthode utilisée. Par une étude faite à 77 K sur la périodicité de l'interaction sur phonon optique polaire nous avons observé ce phénomène par les deux méthodes « Etalement » et « Bruit ». Nous avons montré que l'équivalence est totale entre les deux méthodes autant du point de vue numérique que du point de vue qualitatif. Nous avons choisi la méthode « Etalement » pour calculer les coefficients de diffusion à $T=77$ K puisque nous gagnons beaucoup de temps calculs avec cette méthode.

Le résultat marquant que nous avons obtenu à 77 K est que, contrairement au résultat obtenu à la température ambiante, le coefficient de diffusion parallèle D_Y dépend fortement du champ électrique et il est supérieur au coefficient de diffusion transverse D_X . Pour les hétérostructures considérées ici, nous avons établi que D_Y s'écarte largement de la relation

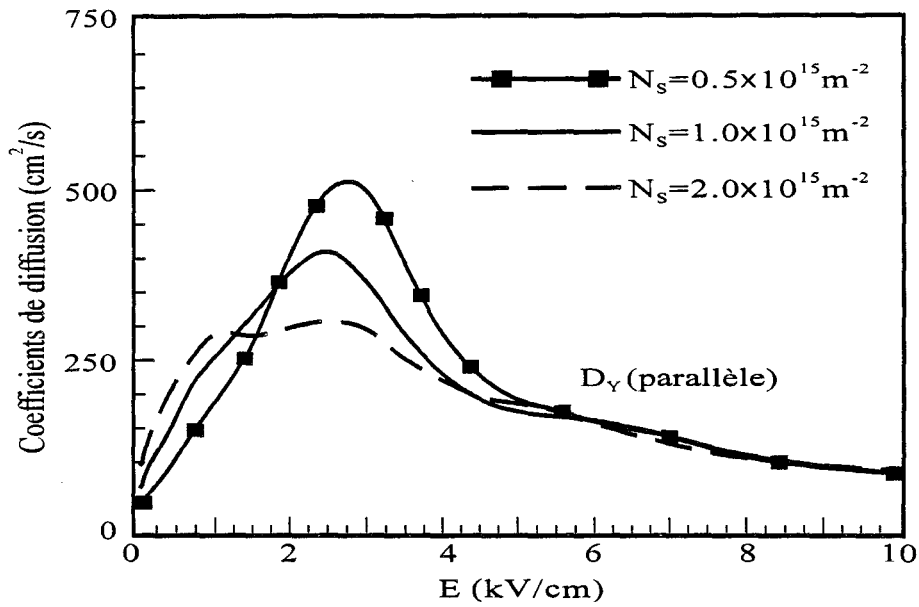


Figure (II-29)

Evolution du coefficient de diffusion parallèle avec le champ électrique pour différentes densités électroniques N_s .
 Cas de la structure en $\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}/\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}$ à $T=77\text{ K}$.

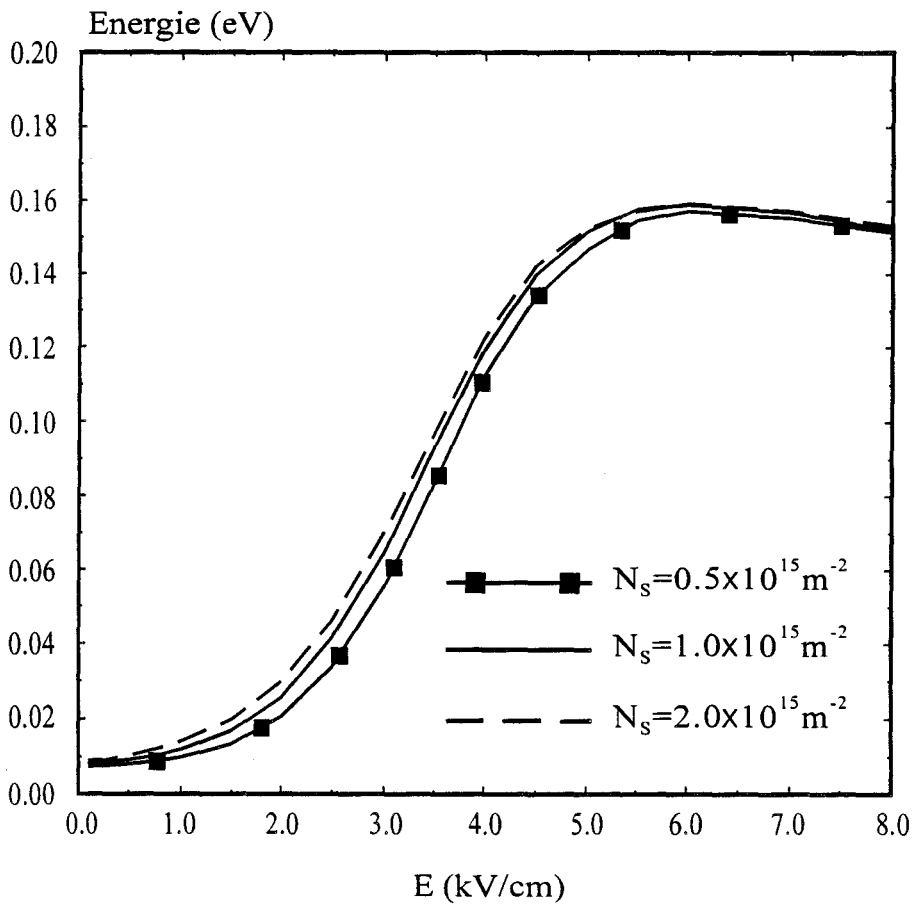


Figure (II-30)

Evolution de l'énergie moyenne avec le champ électrique pour différentes densité électronique N_s .
 ($\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}/\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}$ à $T=77\text{ K}$)

Chapitre II

d'Einstein même pour des champs inférieurs à 1 kV/cm. Cette étude montre que cette relation doit être appliquée avec précaution.

D'après cette étude à 77 K, nous pouvons facilement constater que les coefficients de diffusion sont des grandeurs sensibles à beaucoup de paramètres comme la température, la densité électronique et les matériaux utilisés. Donc il est difficile d'établir une règle générale pour prédire leurs comportements. Néanmoins cette étude met en évidence le rôle primordial que jouent les principales interactions sur l'évolution du coefficient D_{γ} . Un résultat important est que la mesure des coefficients de diffusion peut fournir des informations sur des grandeurs microscopiques, comme les taux d'interactions.

Il serait très intéressant d'avoir des résultats expérimentaux, car ils permettent de confirmer ou d'infirmer le choix des données du modèle. Malheureusement, ils sont très difficiles à obtenir et n'existent pratiquement pas dans la littérature. Seules existent quelques études faites par Murcia [27] dans le cas des matériaux massifs.

REFERENCES

- [1] **A. Cappy, M. Schortgen, and G. Salmer.**
IEEE Electron Dev. Lett. EDL-6..270 (1985).
- [2] **J. P. Nougier.**
Revue de Physique Appliquée, page 803 (1987).
- [3] **B. R. Nag.**
Electron transport in compounds semiconductors.
Springer Verlag, Berlin-Heidelberg-New-York,(1980).
- [4] **D. Chattopadhyay, A. Babasi, and P. C. Rakshit.**
IEEE Transactions on Electron devices, vol ED-35 (10), 1672-1674 (1988).
- [5] **J. C. Vaissière, O. Chapelon, L. Hlou, J-P Nougier, and D. Gasquet.**
'Proc. 11th Int. Conf. on Noise in physical Systems and 1/f Noise'.
P. Handel and A. L. Chung Eds, American Inst. Proc, vol 285, p 77 (1993).
- [6] **J. C. Vaissière et al**
Phys. Rev. B49 (16) (1994).
- [7] **J. C. Vaissière, L. Hlou, J. P. Nougier, and A. Adachi.**
'Proc. 11th Int. Conf. on Noise in physical Systems and 1/f Noise'.
P. Handel and A. L. Chung Eds, American Inst. Proc, vol 285, p 73 (1993).
- [8] **C. Jacoboni and L. Reggiani.**
Reviews of modern Physics, vol 55 (3), 645-705 (1983).
- [9] **C. Jacoboni and P. Lugli.**
'The Monte Carlo method for semiconductor device simulation'.
Edited by S. Selberherr, Springer Verlag Wien New-York (1989).
- [10] **M. V. Fischetti.**
IEEE Transactions on Electron devices, vol TED-38 (3), 634-649 (1991).
- [11] **R. Fauquembergue, J. Zimmermann, A. Kaszynski, and E. Constant**
J. Appl. Phys. 51. (2). 1065 (1980).
- [12] **J. Zimmermann.**
Thèse de doctorat d'état, Lille (1980).
- [13] **A. Kaszynski.**

Chapitre II

Thèse de doctorat, Lille (1979).

[14] W. Yen.

Thèse de doctorat, Lille (1988).

[15] J. Zimmermann, W. Yen.

A Monte Carlo study of diffusion coefficients of two-dimensional electron gas in HEMT AlGaAs/GaAs structures.

ESSDERC (Bologna, Italy, 1987).

[16] M. de Murcia et al.

IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 38, N° 11, pp 2531-2539, November 1991.

[17] J. P. Nougier.

Noise in devices: definition, modeling.

III-V MICROELECTRONICS, Elsevier Science Publishers B, pp183-238, 1991.

[18] A. Cappy and W. Heinrich.

IEEE transactions on Electron Devices, Vol. 36, N° 2, pp403-409, February 1989.

[19] H. Happy et al.

HELENA: A friendly software for calculating the DC, AC and noise performance of HEMTs'.

Int. J. Microwave and Millimeter-Wave Computer-Aided Eng, Vol. 3, N° 1, pp 14-28, 1993.

[20] J. P. Nougier

IEEE Transactions on Electron Devices, Vol 41, N°11, 2035 (1994)

[21] H. El Idrissi.

Thèse de doctorat, Lille (1993).

[22] J. Max.

Méthodes et techniques de traitement du signal et applications aux mesures physiques.

4^e édition. Edition Masson.

[23] D. K. Ferry and R. Barker.

J. Appl. Phys. 52, pp 818-824. 1981.

[24] J. L. Thobel, L. Baudry, P. Bourel, F. Dessenne, and M. Charef.

J. Appl. Phys 74 (10), 6274 (1993).

[25] D. Courtecuisse.

Etude du coefficient de diffusion dans l' $Al_x Ga_{1-x} As$.

Diplome d'Etudes Approfondies en Electronique. 1995.

Chapitre II

[26] R. Brunetti, C. Jacoboni, F. Nava, and L. Reggiani

J. Appl. Phys. 52 (11), 6713 (1981).

[27] M. de Murcia, D. Gasquet, A. Elamri, J. P. Nougier and J. Vanbemeersch

IEEE Transactions on Electron Devices. Vol 38, 11 (1991)

CHAPITRE III

**ETUDE DU TRANSPORT ELECTRONIQUE
DANS LES HETEROSTRUCTURES III-V**

A PUIITS DOPE.

CHAPITRE III
ETUDE DU TRANSPORT ELECTRONIQUE DANS LES
HETEROSTRUCTURES III-V
A PUIITS DOPE.

III.1. Influence des différents paramètres de la structure sur le transport.	2
III.1.1. Etude d'un puits carré infini.	2
III.1.1.1. Influence du profil de dopage	2
III.1.1.2. Influence de la densité électronique N_S .	4
III.1.1.3. Etude en fonction de la largeur du puits.	5
III.1.2. Etude d'une structure réelle à double hétérojonction	5
III.1.2.1. Influence de la distribution des donneurs.	5
III.1.2.2. Influence de la densité électronique.	6
III.1.2.3. Influence du taux de dopage.	7
III.1.2.4. Comparaison avec les données expérimentales.	7
III.1.3. Résultats du second ordre.	8
III.2. Conclusion.	9
Références	

Chapitre III

Dans ce chapitre nous nous sommes intéressés à l'étude du transport électronique dans une autre variante d'hétérojonction: le DMT (**D**oped **C**hannel **MIS**-like-FET) dont la particularité essentielle est que le puits est dopé alors que la couche supérieure ne l'est pas.

D'une part la présence des impuretés dans le canal va dégrader la vitesse des électrons surtout à champ faible, mais beaucoup moins aux champs forts. D'autre part si la densité électronique dépend essentiellement de la densité des donneurs, la vitesse peut être sensible à la répartition des impuretés dans le canal. Ainsi un choix judicieux du profil de dopage permet une optimisation des performances de ses systèmes. Il est donc nécessaire de mener une étude théorique afin de trouver des réponses à ces questions.

Dans ce chapitre nous étudions l'impact des différents paramètres (le profil de dopage, la densité électronique N_s , et la température) sur les propriétés du transport électronique dans une structure à puits dopé. Nous considérons successivement un puits carré infini en AsGa qui nous sert de référence et une structure réaliste constituée d'un puits en AsGa entre deux couches en AlGaAs. Nous étudions le comportement de ses structures en régimes stationnaire et non stationnaire. En régime non stationnaire nous observons un important phénomène de survitesse. Nous montrons qu'un choix judicieux du profil de dopage permet de limiter considérablement la dégradation de vitesse liée à la présence d'impuretés dans le puits. Dans la section (III.1.2.4) nous établissons une comparaison entre ces résultats théoriques d'une part et les données expérimentales obtenues par Masselink [1] d'autre part.

Avant de conclure ce chapitre, nous présentons dans la section (III.1.3) des résultats des coefficients de diffusion obtenus pour la structure réaliste en AlGaAs/GaAs/AlGaAs.

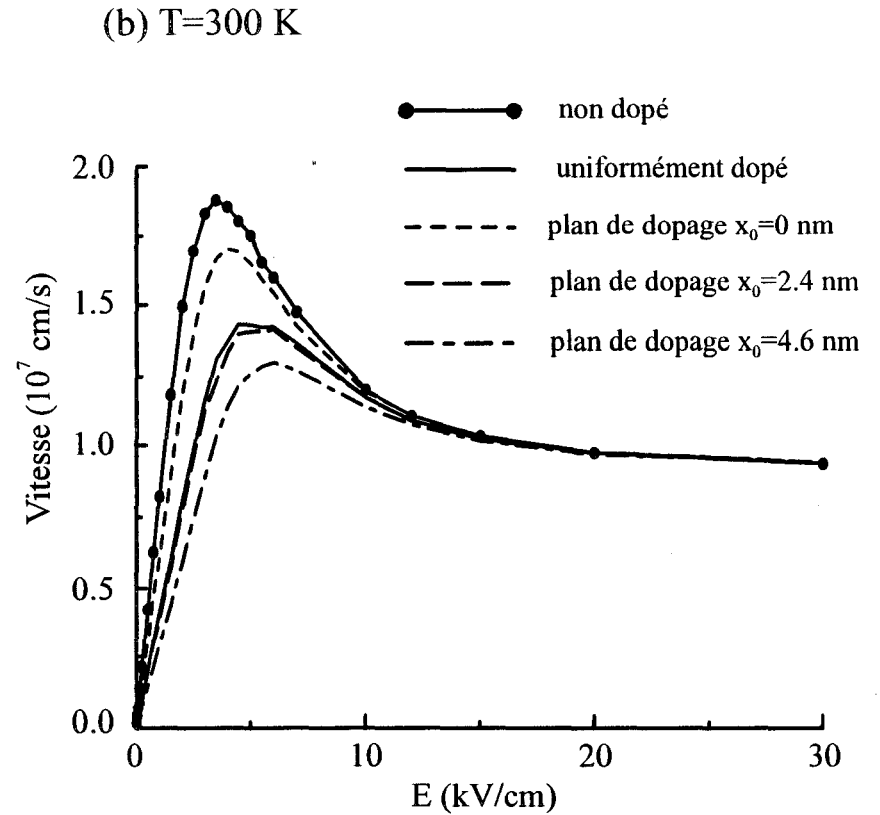
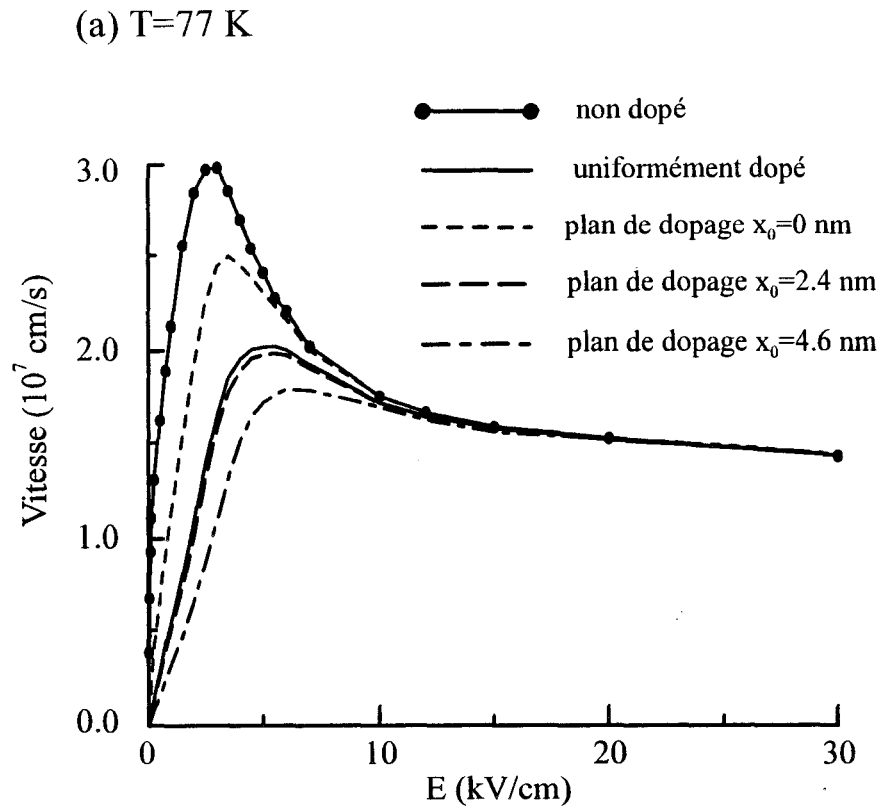


Figure (III-1)

Evolution de la vitesse avec le champ électrique dans un puits carré infini en GaAs de 10 nm de largeur, (a) 77 K (b) 300 K. Différents profils de dopage ont été considérés: puits uniformément dopé et un plan de dopage à une distance x_0 du bord du puits. Le plan de dopage est une couche de 0.8 nm d'épaisseur, ainsi $x_0=4.6$ nm correspond à un plan de dopage au centre du puits. La concentration des électrons et des impuretés est la même 10^{12} cm $^{-2}$. Nous remarquons que les courbes pour le dopage plan à $x_0=2.4$ nm et le dopage uniforme sont identiques. Nous avons également présentés le cas du puits non dopé pour faire la comparaison.

III.1. Influence des différents paramètres de la structure sur le transport.

III.1.1. Etude d'un puits carré infini.

En général, les hétérostructures sont des systèmes compliqués caractérisés par un grand nombre de paramètres, comme la composition des matériaux, la largeur et le profil de dopage de chaque couche. Pour faciliter les discussions qualitatives, il est utile de considérer une structure simple, qui nous sert de référence. Nous avons choisi le puits carré infini, puisqu'il présente l'avantage d'être complètement caractérisé par la largeur L et le profil de dopage. Nous insistons sur le fait que notre choix n'a pas été imposé par des contraintes numériques, mais par souci de simplicité et de clarté. Dans un travail précédent, Thobel et al ont discuté de l'influence de l'utilisation d'un tel modèle simple sur la mobilité d'interaction sur impuretés [2]. Ils ont conclu qu'il produit des résultats raisonnables aussi longtemps que la pénétration des fonctions d'onde dans les barrières est négligeable, autrement des erreurs sont introduites. Dans le cas présent, nous considérons des structures à puits dopé, qui confinent d'une façon efficace les électrons à l'intérieur du puits. Ainsi, le puits carré infini n'est pas très loin de la réalité, comme le confirment les résultats suivants.

Avant de présenter les résultats pour le cas du puits carré infini, nous précisons que la densité totale des donneurs a été fixée à 10^{16} m^{-2} . Les différents paramètres de l'AsGa ont été tirés de la littérature [3] [4].

III.1.1.1. Influence du profil de dopage

Dans ce paragraphe nous allons discuter de l'influence de la distribution des donneurs dans le puits sur le transport électronique. Pour cela nous considérons différents cas: un puits avec un plan dopage, et un puits uniformément dopé. Dans le cas d'un dopage plan, nous considérons une couche uniformément dopée de très faible épaisseur $\delta=0.8 \text{ nm}$ et nous faisons varier la distance entre le plan et le bord du puits. Nous étudions aussi le cas d'un puits non dopé qui va nous servir de référence. Nous considérons un puits de 10 nm de largeur avec une concentration électronique fixée à 10^{16} m^{-2} afin d'assurer la neutralité de la structure. Les caractéristiques vitesse-champ électrique qui sont obtenues à la température de l'azote liquide et à la température ambiante, sont présentées respectivement sur les figures (III-1a) et (III-1b).

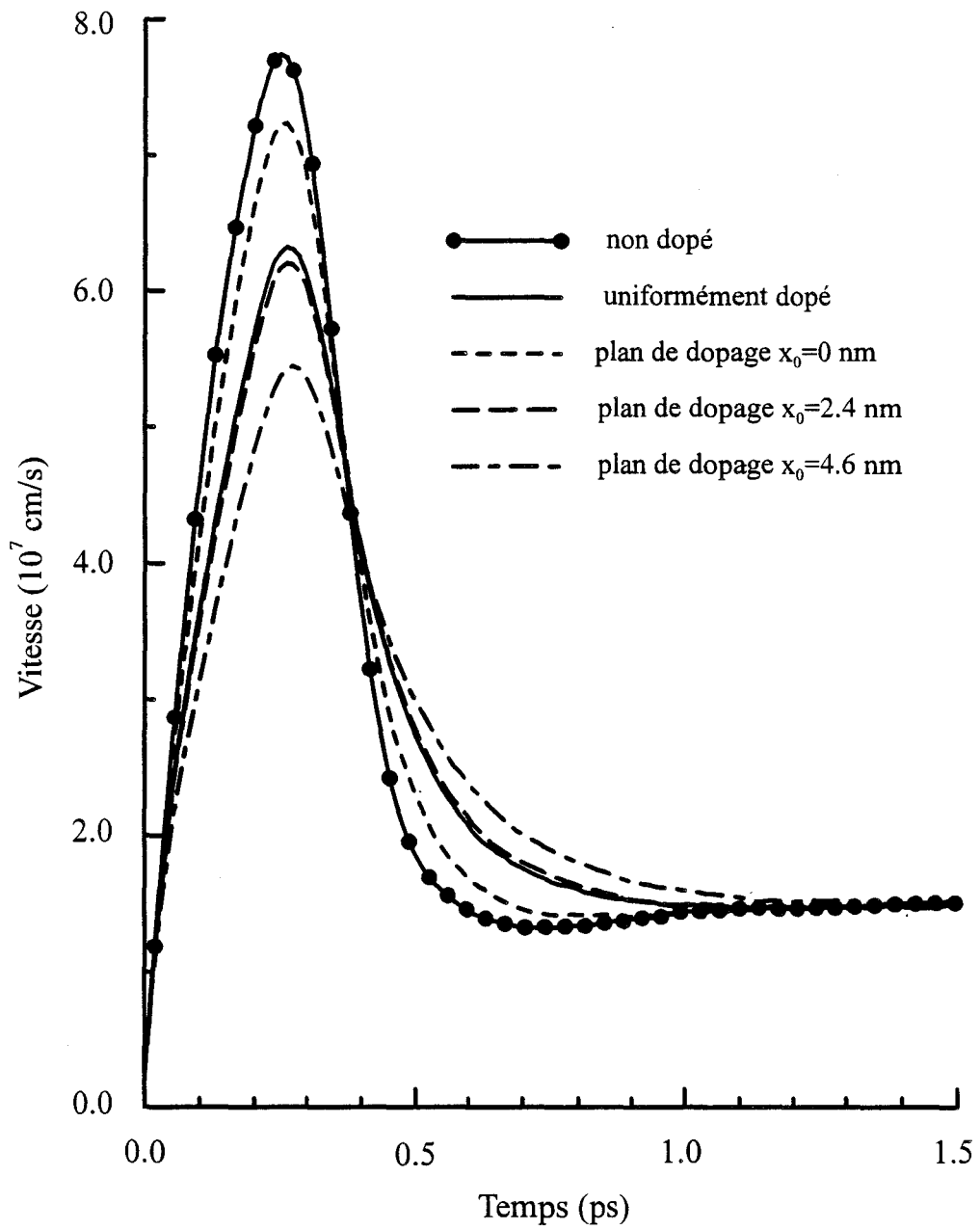


Figure (III-2)

Réponse en vitesse à un échelon de 20 kV/cm dans un puits carré infini en AsGa de 10 nm de largeur à 77 K. Différents profils de dopage ont été considérés et comparés. La concentration des électrons et des impuretés est la même 10^{16} m^{-2} .

Chapitre III

Nous pouvons remarquer que le choix du profil de dopage a une forte influence sur la mobilité et la vitesse maximale, mais joue un rôle peu significatif aux champs élevés, supérieurs à 15 kV/cm. Dans le cas d'un dopage plan, nous remarquons que la valeur de la vitesse maximale varie en fonction de la position du plan de dopage dans le puits. Dans ce cas, la vitesse décroît progressivement lorsque le plan est déplacé du bord vers le centre du puits. Ceci peut être facilement expliqué par le fait que le recouvrement entre la distribution des électrons et des impuretés est maximum lorsque les impuretés sont au centre du puits. Dans le cas d'un puits uniformément dopé nous obtenons approximativement le même résultat que pour un puits avec un plan de dopage à égale distance du bord et du centre du puits. Ces observations sont en accord avec les résultats obtenus par Masselink [1].

Nous remarquons que pour les deux températures 77 et 300 K, les courbes de vitesses ont la même allure. Cependant, l'influence de l'interaction sur impuretés est moins importante à 300 K qu'à 77 K. Par exemple, à la température ambiante, la présence d'un plan de dopage au bord du puits réduit d'environ 15% la vitesse par rapport à celle obtenue dans le cas d'un puits non dopé. Ceci démontre que, pour les systèmes opérant à température ambiante, le fait de doper le canal n'a pas nécessairement un effet important sur le transport électronique. Néanmoins, dans le reste de ce chapitre, nous nous intéressons uniquement au cas à 77 K pour mettre en évidence l'influence de l'interaction sur impuretés et de la dégénérescence.

Les caractéristiques d'un canal sont déterminées non seulement par les grandeurs statiques telles que la dépendance champ-vitesse, champ-énergie, mais aussi par leurs réponses en régime transitoire. C'est pourquoi nous étudions également l'influence des différents profils de dopage sur le transport électronique en régime non stationnaire. La figure (III-2) présente la réponse à un échelon de 20 kV/cm, pour la structure décrite précédemment à 77 K. Pour tous les cas étudiés nous observons toujours un phénomène de survitesse. Il est intéressant de noter que le temps nécessaire pour que la vitesse atteigne sa valeur maximale est de l'ordre de 0.25 ps pour toutes les structures étudiées. Par contre, la valeur maximale de la vitesse dépend directement de la distribution des donneurs dans le canal, de la même façon que la mobilité. En outre, nous pouvons constater que plus la mobilité est élevée, plus l'amplitude de la survitesse est grande et plus courte est la durée de ce phénomène. Dans ce qui suit nous essayons de donner une explication à ces différentes observations.

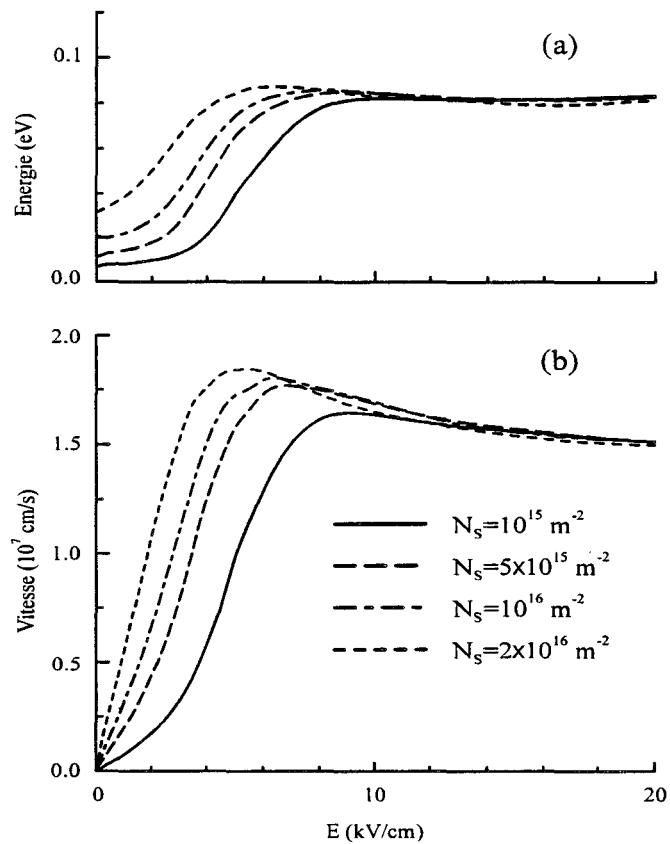


Figure (III-3)

Evolution de l'énergie a) et de la vitesse b) avec le champ électrique pour différents N_s .
 Cas du puits carré infini en AsGa de 10 nm de largeur avec un plan de dopage au centre de concentration 10^{16} m^{-2} . $T = 77 \text{ K}$.

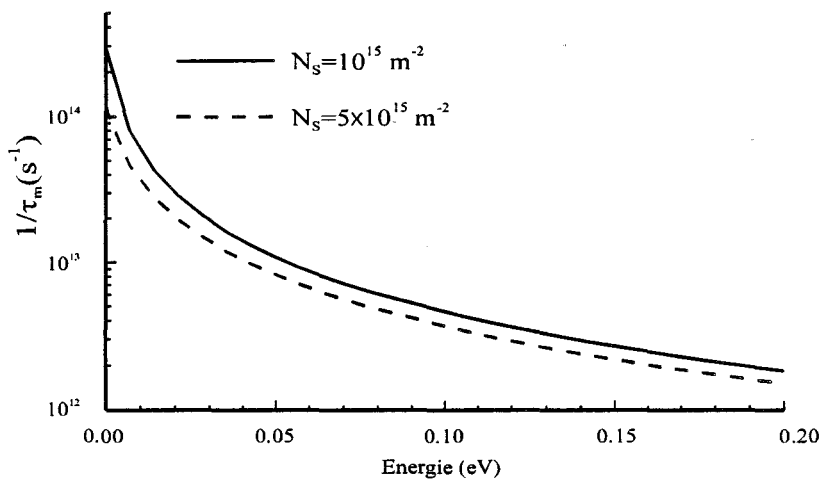


Figure (III-4)

Evolution du taux d'interaction sur impuretés pour la première sousbande avec l'énergie, pour 2 valeurs de N_s . La structure est à puits carré infini en AsGa de 10 nm de largeur avec un plan de dopage au centre de concentration 10^{16} m^{-2} à 77 K.

Chapitre III

En premier lieu, nous vérifions que la vitesse croît aussi longtemps que les électrons restent en vallée Γ . Ainsi la vitesse maximale est atteinte lorsque les électrons les « plus rapides » ont acquis suffisamment d'énergie pour transférer en vallée L. Ces électrons sont les électrons « chanceux », qui ont subi peu d'interactions ou pas du tout. Donc, le temps nécessaire pour atteindre la vitesse maximale est principalement déterminé par le mouvement quasi-ballistique et il est ainsi pratiquement insensible au taux d'interaction. Au contraire la valeur finale de la vitesse est obtenue lorsque le nouvel état d'équilibre est atteint par l'ensemble des électrons. Ce processus est achevé lorsque les électrons 'moins chanceux', qui ont subi beaucoup d'interactions, ont acquis l'énergie nécessaire pour transférer. Ceci explique pourquoi la durée du phénomène de survitesse est plus longue pour les structures à faible mobilité.

Pour terminer, signalons que dans le cas du puits non dopé, après que la vitesse a atteint la valeur maximale, elle décroît pour atteindre des valeurs inférieures à la vitesse stationnaire finale. En d'autres termes, nous observons un phénomène de 'sousvitesse'. Ce phénomène peut être expliqué de la façon suivante : dans ce cas, l'inversion de population entre la vallée Γ et L est très rapide. Après ce processus, la majorité des électrons sont près du centre de la vallée L et par conséquent la vitesse moyenne est très faible. Puis, sous l'influence du champ électrique, ces électrons gagnent de l'énergie et la vitesse moyenne croît pour atteindre la valeur finale.

III.1.1.2. Influence de la densité électronique N_S .

Pour cette étude nous considérons la même structure, un puits carré infini de 10 nm de largeur avec un plan de dopage au centre. Le dopage est de 10^{16} m^{-2} et la température $T=77 \text{ K}$. Nous présentons sur la figure (III-3) l'évolution de l'énergie moyenne et de la vitesse avec le champ électrique pour différentes valeurs de N_S de 10^{15} à $2 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$. Aux faibles et moyens champs électriques, l'énergie croît avec la concentration électronique N_S à cause de la dégénérescence. A partir de la figure (III-4) nous observons que le taux d'interaction décroît fortement avec l'énergie, ce qui explique l'augmentation de la vitesse. L'effet d'écran contribue également à ce phénomène, mais seulement à faible N_S , car dans les conditions de forte dégénérescence le facteur d'écran ne dépend pas de N_S . Lorsque le champ augmente, l'influence de l'interaction sur impuretés et de la dégénérescence est réduite, et l'énergie et la vitesse deviennent indépendantes de la densité électronique. Il en résulte que, pour les N_S

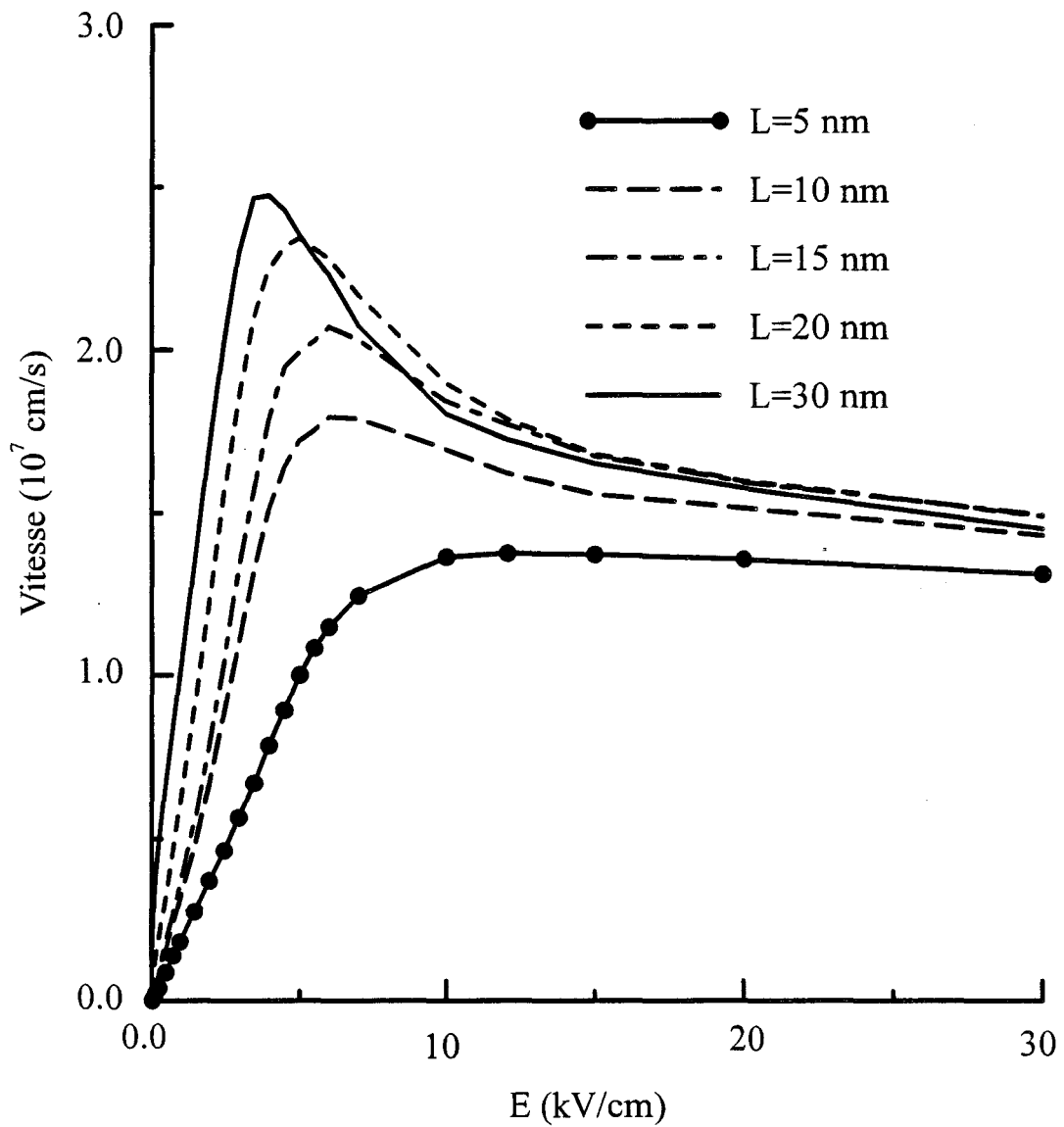


Figure (III-5)

Evolution de la vitesse avec le champ électrique pour le puits carré infini en AsGa, avec un plan de dopage au centre, pour différentes valeurs de la largeur L.

La densité des électrons et des donneurs est la même 10^{16} m^{-2} . $T=77 \text{ K}$.

faibles, la vitesse et la mobilité différentielle augmentent fortement pour les champs entre 2 et 5 kV/cm. L'allure de ces courbes, est typiquement celle des systèmes dominés par l'interaction sur impuretés, qui a été reportée par plusieurs auteurs [4] et les références qui y sont citées.

III.1.1.3. Etude en fonction de la largeur du puits.

Sur la figure (III-5) nous présentons la caractéristique vitesse-champ pour différentes largeurs du puits allant de 5 à 30 nm. Nous avons simulé la même structure à puits carré infini en AsGa, avec un plan de dopage au centre. Les électrons et les impuretés ont la même concentration, soit 10^{16} m^{-2} . Comme la largeur du puits augmente celui-ci va augmenter la distance entre les impuretés et les électrons, et donc la vitesse aux faibles et moyens champs électriques. A champ fort, le transport est dominé par l'interaction sur phonon, spécialement l'interaction intervalles. D'après Thobel [5], l'interaction intra-sous-bande décroît lorsque la largeur du puits augmente, ceci explique l'augmentation de la vitesse lorsqu'on passe de 5 à 10 nm. Cependant, lorsque le puits s'élargit davantage, le processus inter-sous-bande devient significatif et tend à contrebalancer le phénomène intrasousbande. Ceci entraîne que la vitesse tend vers une limite, qui est celle de l'AsGa en volume.

III.1.2. Etude d'une structure réelle à double hétérojonction

Pour cette étude nous considérons une structure plus réaliste constituée d'un puits quantique en AsGa, de 10nm de largeur, situé entre deux couches en $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$. Le puits peut être uniformément dopé ou avec un plan de dopage. Nous avons également effectué la comparaison avec une structure MODFET constituée d'un puits non dopé et d'une couche supérieure dopée en AlGaAs, qui fournit l'hétérostructure en électrons. La densité totale d'impuretés est fixée à $6.3 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$. Les autres paramètres de la structure sont indiqués sur la figure (III-6). Les différents paramètres de l'AlGaAs ont été fournis par [2]. Le potentiel d'interaction d'alliage est donné par [6]. La hauteur de la barrière ΔE_C entre l'AsGa et l'AlGaAs est obtenue avec la formule 62:38 ($\Delta E_C = 0.62 \Delta E_G$).

III.1.2.1. Influence de la distribution des donneurs.

La caractéristique vitesse-champ obtenue à 77 K pour différents profils de dopage est présentée sur la figure (III-7). Nous avons fixé la densité électronique $N_s = 6.3 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$ pour nous assurer de la neutralité électrique de la structure. Nous notons que, jusqu'aux champs de

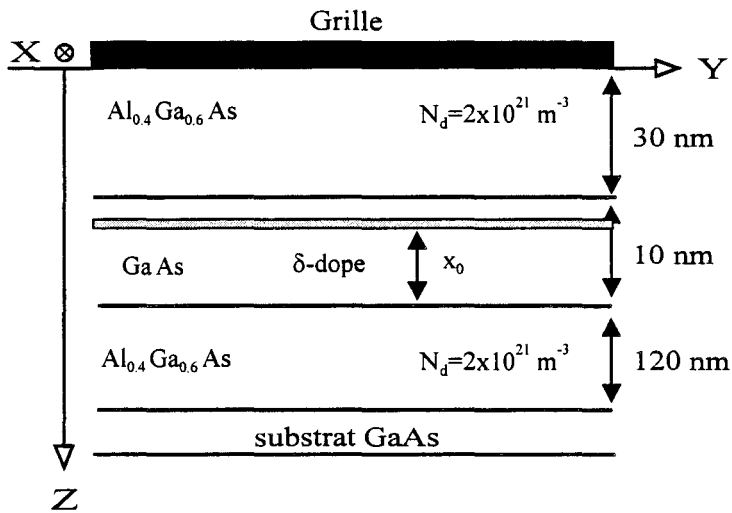


Figure II-6a

Structure AlGaAs/GaAs/AlGaAs étudiée avec un plan de dopage

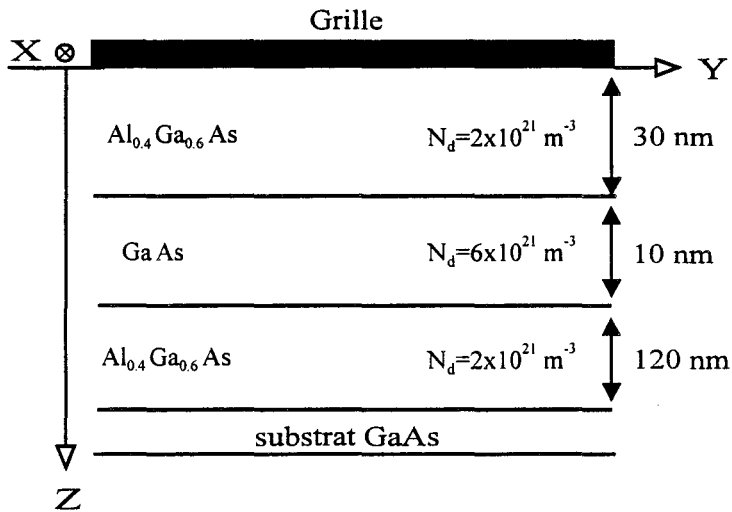


Figure II-6b

Structure AlGaAs/GaAs/AlGaAs étudiée. Le puits est uniformément dopé.

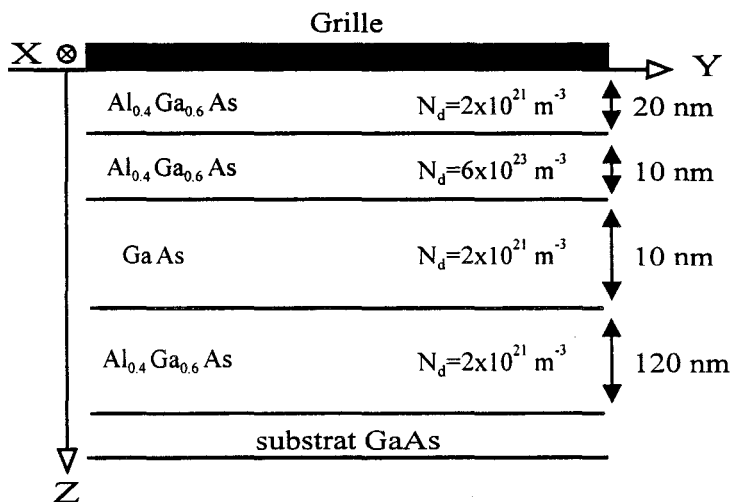


Figure II-6c

Structure MODFET AlGaAs/GaAs/AlGaAs étudiée

Chapitre III

seuil, ces courbes sont très similaires à celles que nous avons obtenues pour le cas du puits carré infini. En particulier, nous remarquons que leurs positions respectives sont identiques, et l'influence de la distribution des donneurs peut être discutée sur les mêmes bases. Ceci n'est pas une surprise puisque, à champ faible ou moyen, la majorité des électrons sont dans la vallée centrale et sont soumis à un potentiel qui n'est pas trop différent de celui qui existe dans le puits carré infini. A champ fort, supérieur à 5 kV/cm, la situation est complètement différente puisque les électrons transfèrent vers les vallées L et X. Ceci a été expliqué par Thobel [7], ce mécanisme de transfert dans l'espace des k est lié au transfert dans l'espace réel vers la couche supérieure en AlGaAs. En comparant par rapport au puits carré infini nous observons une réduction de la vitesse aux champs élevés à cause des propriétés de transport défavorables de l' $\text{Al}_{0,4}\text{Ga}_{0,6}\text{As}$.

Nous avons aussi étudié le comportement de ces structures en régime non stationnaire à 77 K. Nous présentons sur la figure (III-8) la réponse à un échelon de 20 kV/cm. Nous constatons que le phénomène de survitesse est clairement observé pour toutes les structures étudiées. Nous remarquons que le choix du profil de dopage a la même influence que dans le cas d'un puits carré infini, ce qui peut être expliqué de la même façon. Nous notons aussi que plus la mobilité est forte, plus le maximum de la vitesse est important et plus la durée de la survitesse est courte.

III.1.2.2. Influence de la densité électronique.

Nous considérons la même hétérostructure réaliste avec un plan de dopage au centre à $T=77$ K. La caractéristique vitesse-champ obtenue pour les différentes valeurs de N_S est présentée sur la figure (III-9). La quantité des donneurs est maintenue constante, égale à $6.3 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$. L'augmentation de la vitesse avec la concentration électronique jusqu'au champ de seuil est confirmée. Cependant, aux champs forts le comportement est différent. Il faut avoir à l'esprit que la variation de la densité électronique est obtenue par la commande de la grille, qui tend à déformer la bande de conduction. Comme le montre la figure (III-10), à l'augmentation de la densité électronique correspond un abaissement de la bande de conduction du côté de la couche supérieure en AlGaAs, ce qui facilite le transfert spatial vers cette couche. Cet effet tend à réduire la vitesse à champ fort.

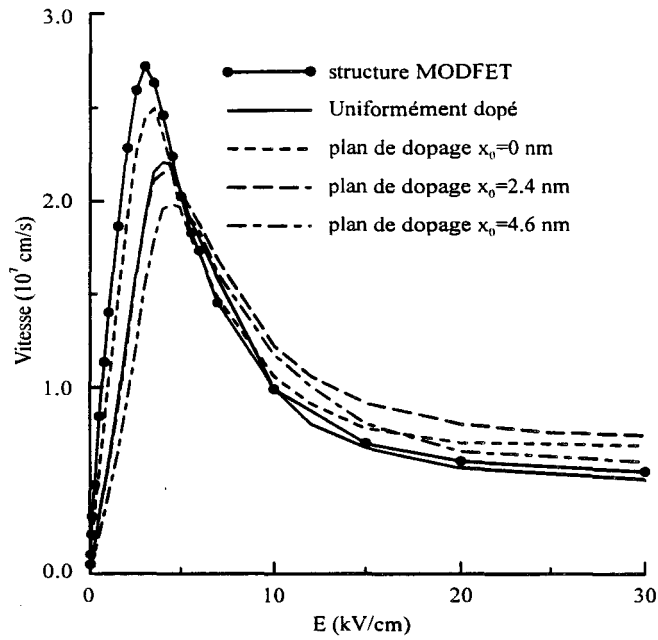


Figure (III-7)

Evolution de la vitesse avec le champ électrique pour les différentes structures décrites sur la figure (III-6).

Dans le cas de la structure avec un plan de dopage, nous avons considéré trois cas :

($x_0=0$) le plan se trouve au bord du puits

($x_0=4.6$ nm) le plan se trouve au centre

($x_0=2.4$ nm) le plan se trouve entre le centre et le bord du puits.

La concentration des électrons et des donneurs est la même $6.3 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$.

Notons que, à champ faible, le plan de dopage à 2.4 nm et le puits uniformément dopé donnent à peu près la même vitesse.

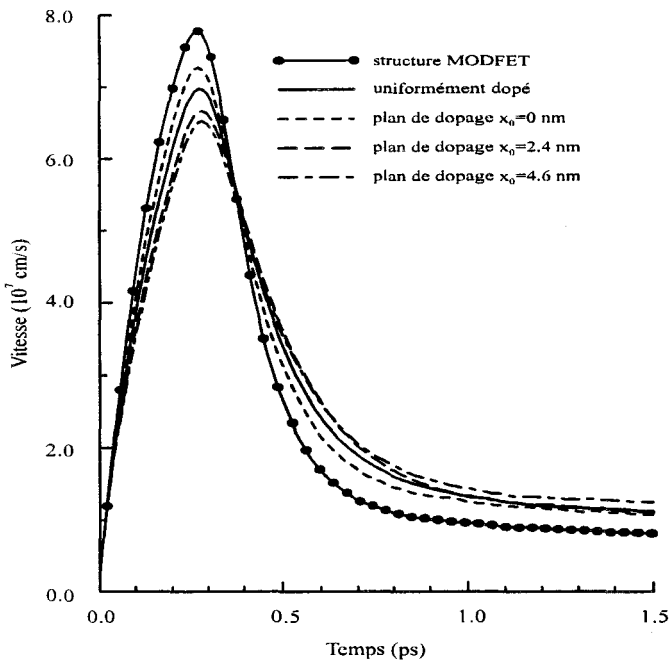


Figure (III-8)

Réponse en vitesse à un échelon de 20 kV/cm pour les différentes structures décrites sur la figure (III-6). La densité des électrons et des donneurs est la même $6.3 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$. $T=77 \text{ K}$.

III.1.2.3. Influence du taux de dopage.

Dans les composants microélectroniques, le nombre des dopants est souvent très important. C'est pourquoi nous avons étudié l'influence de la quantité de ces donneurs sur les propriétés de transport. Pour cette étude, nous considérons la structure présentée sur la figure (III-6a) avec un plan de dopage au centre du puits. Nous avons fait varier simultanément la densité électronique et celle des donneurs de telle façon que la structure reste toujours électriquement neutre. La caractéristique vitesse-champ correspondante, obtenue à 77 K, est présentée sur la figure (III-11) dans laquelle nous avons intégré une autre figure qui montre l'évolution de la mobilité avec la densité électronique N_S . L'augmentation du nombre des donneurs, donc du taux d'interactions sur impuretés, tend à réduire la vitesse, alors que la concentration électronique qui augmente aussi agit dans le sens contraire en provoquant l'augmentation de l'énergie, spécialement à champ faible. Cela se traduit directement au niveau de la mobilité qui évolue lentement avec N_S pour les valeurs entre 0.6 et $4 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$. Lorsque N_S croît nous observons une amélioration significative de la mobilité, puisque les électrons commencent à occuper la deuxième sous-bande. Dans cette sous-bande la fonction d'onde électronique s'annule à la position du plan de dopage et ainsi l'interaction sur impuretés est faible. Pour les champs juste inférieurs au champ de seuil, la distribution électronique s'écarte de celle de Fermi-Dirac et l'énergie moyenne dépend moins de la densité que pour les champs faibles. A champ fort, la situation est complètement différente et nous observons que la vitesse est une fonction croissante de la quantité des donneurs. Cela se justifie par le fait que le potentiel électrostatique créé par les impuretés confine plus efficacement les électrons à l'intérieur du puits, rendant plus difficile le transfert vers l'AlGaAs.

III.1.2.4. Comparaison avec les données expérimentales.

A ce niveau de notre étude théorique, il est intéressant de faire une comparaison avec des études expérimentales. Parmi les rares études relatives à la mesure de la vitesse dans une hétérostructure nous avons trouvé celles de Masselink [1] qui conviennent le mieux à notre comparaison. La structure de Masselink est constituée d'un superréseau de 25 puits en AsGa de 10 nm de largeur séparés par des barrières en $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ de 3.4 nm comme le montre la figure (III-12). Cette structure diffère de nôtre structure simulée principalement par la largeur de la barrière en AlGaAs qui est plus petite que la nôtre. Ceci peut conduire à un couplage

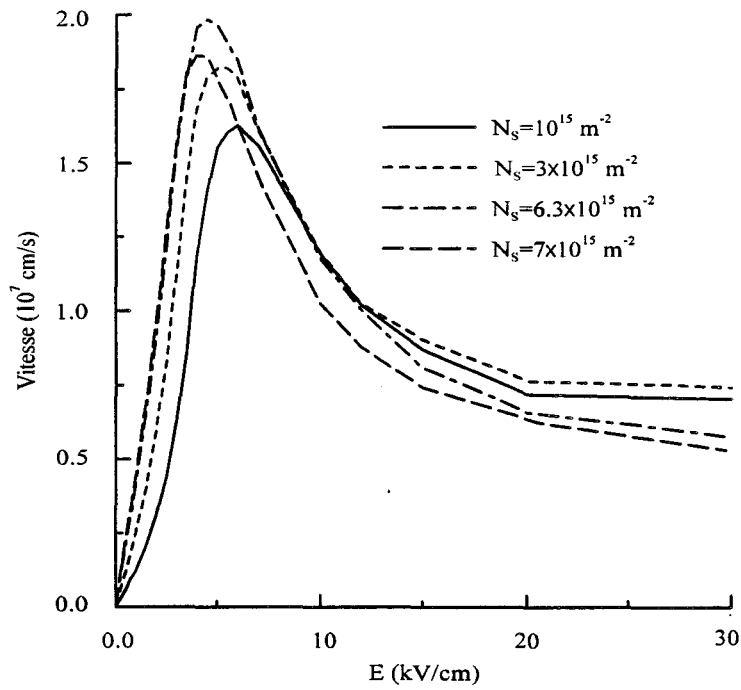


Figure (III-9)

Evolution de la vitesse avec le champ électrique pour la structure avec un plan de dopage au centre du puits en AsGa pour différentes valeurs de la densité électronique N_s .

La densité des donneurs est $6.3 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$ à $T=77 \text{ K}$.

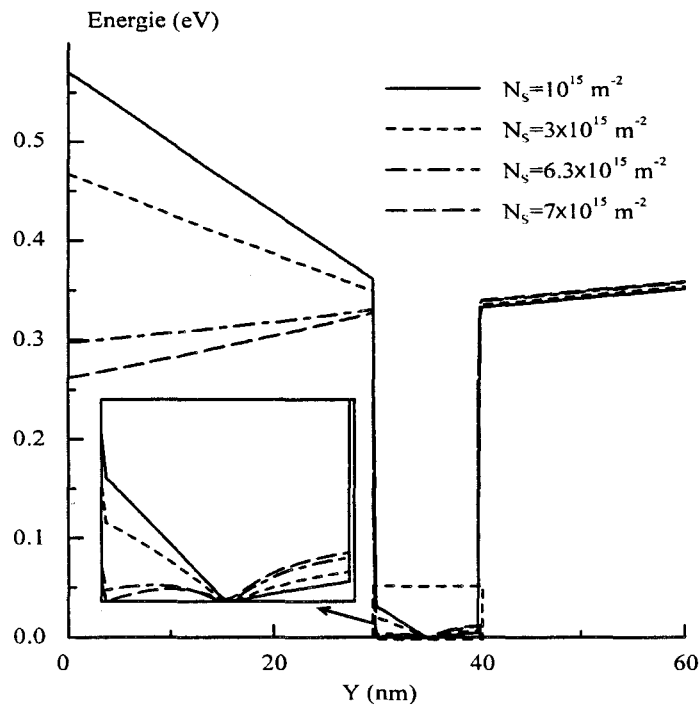


Figure (III-10)

Evolution du minimum de la bande de conduction pour la structure à un plan de dopage au centre pour différentes valeurs de N_s . L'insert montre un agrandissement du puits.

La densité des donneurs est fixée à $6.3 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$ à $T=77 \text{ K}$.

entre les puits quantiques en AsGa. Ce couplage est supposé faible mais il est difficile de savoir s'il est complètement négligeable.

Les résultats que nous avons obtenus par la simulation sont qualitativement en accord avec certaines évolutions décrites par Masselink: tout d'abord la dépendance $\mu=f(x_0)$, ensuite la ressemblance entre un puits uniformément dopé et un puits avec un plan de dopage à 2.5 nm du bord du puits, et finalement la mobilité différentielle qui croît autour de 2 kV/cm. Cependant la comparaison quantitative est moins satisfaisante, comme nous pouvons le constater sur la figure (III-13). Celle-ci présente une comparaison entre la caractéristique de vitesse mesurée par Masselink et celles que nous avons calculées dans le cas d'un puits carré infini et pour la structure à puits réel décrite plus haut. Dans ces structures, le puits a un plan de dopage au centre, la densité électronique $N_S=6 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$ et la température vaut 77 K. Comme nous l'avons mentionné plus haut, les courbes de vitesse obtenues par simulation pour le puits carré infini et le puits réel sont proches l'une de l'autre à champ faible et s'écartent à champ fort à cause de la conduction parasite de la barrière en AlGaAs. Nous notons aussi que la mobilité mesurée est plus faible que celle calculée. Nous remarquons que la valeur maximale de la vitesse mesurée excède celle qui est obtenue par le calcul. Le résultat expérimental montre une forte croissance de la mobilité différentielle. Masselink interprète ce phénomène par le transfert vers la première sous-bande excitée, où l'interaction sur impuretés est faible puisque la fonction d'onde s'annule à la position du plan de dopage. Nos simulations ne confirment pas cette explication puisque nous avons vérifié que la population relative de la première sous-bande excitée n'excède pas 15 %. Un tel désaccord entre théorie et expérience est difficile à expliquer. Une partie de cette explication peut venir du couplage entre les puits dans l'échantillon expérimental, puisque ce phénomène est supposé réduire l'espacement entre les sousbandes et ainsi faciliter le transfert vers les états excités. Pour le moment notre modèle ne peut pas simuler des superréseaux puisqu'un grand nombre de sous-bandes est occupé. Par conséquent, il est difficile de vérifier cette supposition.

III.1.3. Résultats du second ordre.

Sur la figure (III-14) nous montrons l'évolution des coefficients de diffusion avec le champ électrique. Ces coefficients sont obtenus dans le cas de la structure réaliste en AlGaAs/GaAs/AlGaAs avec un plan de dopage au centre, de concentration $N_d=6.3 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$ à $T=77 \text{ K}$ et $N_S=1.0 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$. Lorsque $E=0 \text{ kV/cm}$ nous avons $D_x=D_y$ et nous obtenons des

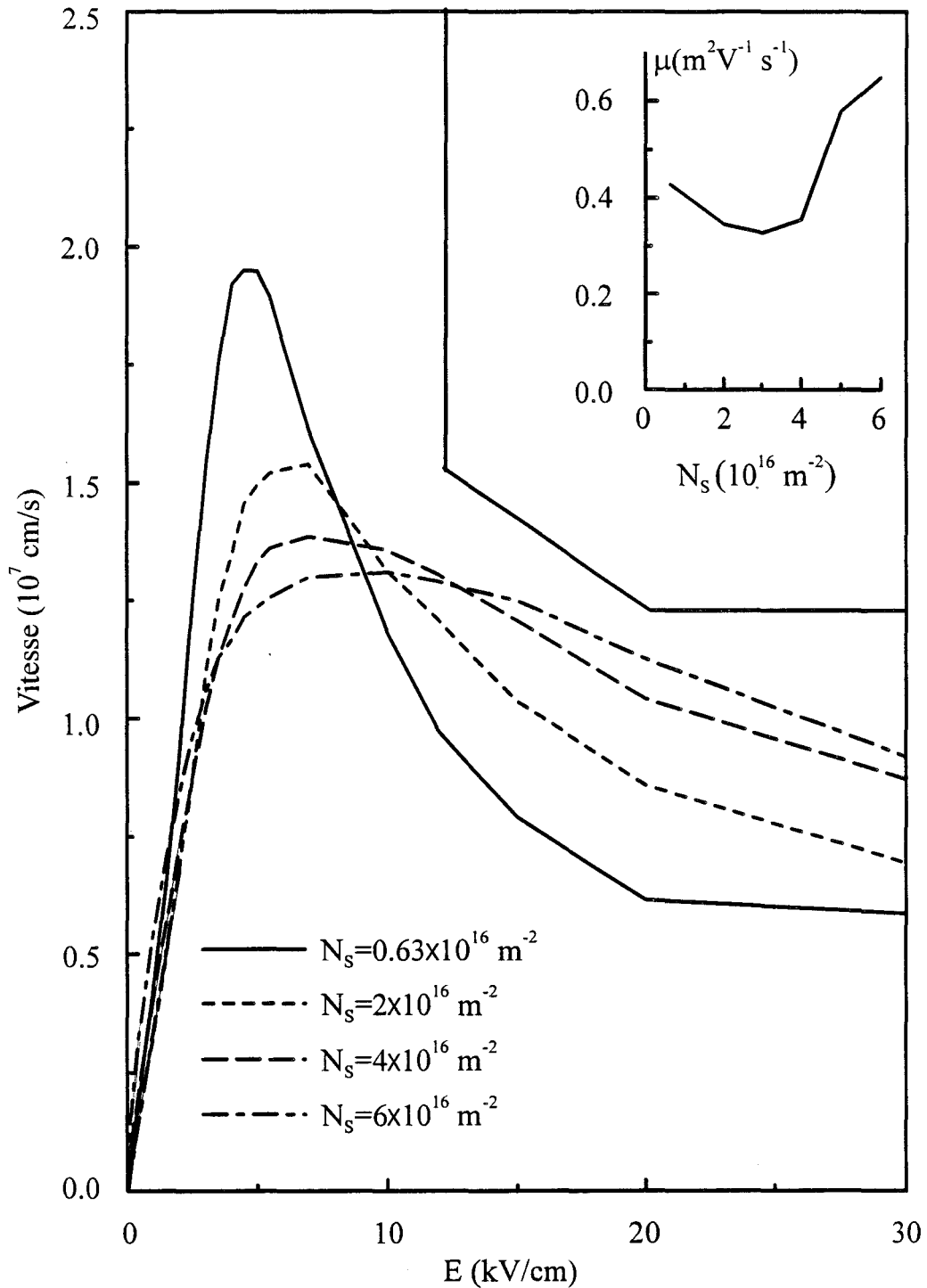


Figure (III-11)

Evolution de la vitesse avec le champ électrique pour la structure avec un plan de dopage au centre.

Les densités des donneurs et des électrons sont égaux et varient simultanément.

Les autres paramètres sont donnés sur la figure (III-6a).

L'insert montre l'évolution de la mobilité avec la densité des électrons et des donneurs.

valeurs, certes faibles, mais prédites par la relation d'Einstein. Ceci s'explique avec la caractéristique vitesse-champ, figure (III-15), où la vitesse croît lentement à champ faible puisque la mobilité électronique est faible à cause de la présence des impuretés dans le canal.

Nous remarquons aussi que le coefficient de diffusion parallèle D_Y est supérieur au coefficient transverse D_X sur tout le domaine du champ étudié. Le coefficient D_Y croît rapidement à champ faible à cause de la forte interaction sur impuretés, puis décroît à champ fort ; cela peut s'expliquer par le transfert des électrons à travers les vallées supérieures et vers la couche supérieure.

III.2. Conclusion.

Avec le modèle de simulation Monte-Carlo nous avons étudié le transport électronique dans une structure à canal dopé en AlGaAs/GaAs/AlGaAs. Des résultats en régime stationnaire et transitoire ont été obtenus.

Il apparaît que l'effet préjudiciable des dopants dans le canal peut être minimisé par un bon choix du profil de dopage. Les meilleurs résultats sont obtenus lorsque le plan de dopage se trouve au bord du puits, une configuration qui permet de minimiser le recouvrement spatial entre les impuretés et les électrons. L'influence de l'interaction sur impuretés est réduite à chaque fois que la largeur du puits, la température, ou la densité électronique augmente. L'augmentation du taux des impuretés tend à réduire la vitesse maximale, mais n'a que peu d'influence sur la mobilité et peut même augmenter la vitesse de saturation, grâce à l'amélioration du confinement dans le puits. Toutes ces observations suggèrent que le dopage du puits n'a pas de conséquence dramatique sur les performances des systèmes. Donc, il peut constituer une voie intéressante pour améliorer le courant dans le canal.

Une autre observation est qu'une part importante de la conduction peut venir des barrières en AlGaAs, spécialement à champ fort et forte densité électronique. Cet effet se traduit par une réduction de la vitesse. Finalement nous avons signalé quelques différences entre nos résultats, obtenus avec une structure monopuits et les résultats expérimentaux de Masselink pour une structure à multipuits. Ceci suggère que le choix de la structure peut sensiblement influencer sur le transport électronique.

Nous avons également calculé les coefficients de diffusion mais la concentration électronique considérée pour cette étude de diffusion est très faible. Pour des composants de

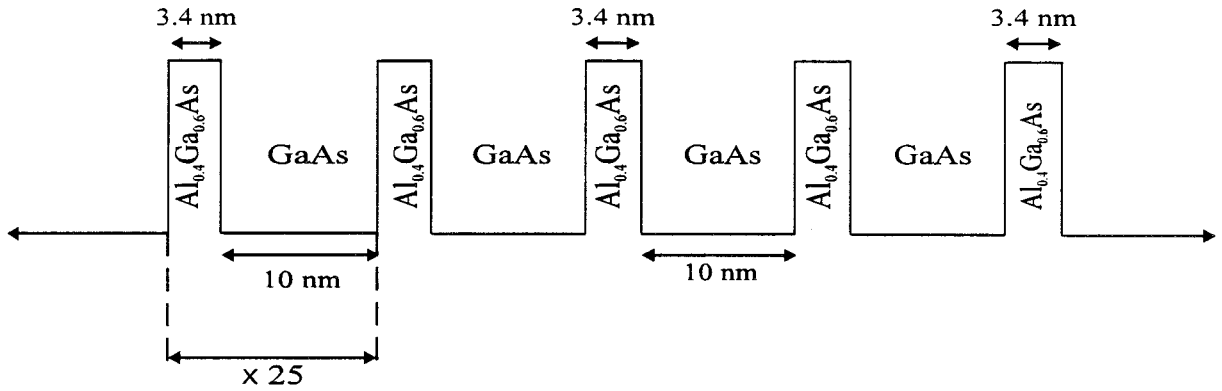


Figure (III-12)

Représentation schématique du modèle de Masselink.
Réseau de 25 puits en AsGa séparés par des barrières en AlGaAs.

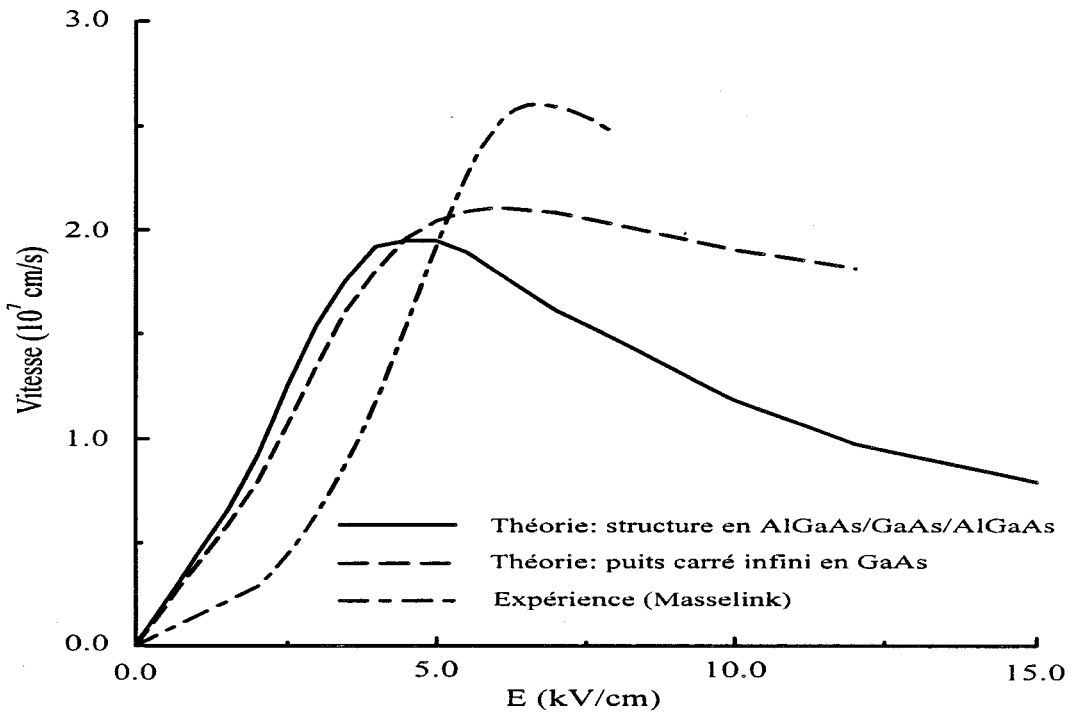


Figure (III-13)

Comparaison des caractéristiques vitesse-champ obtenues par la théorie et l'expérience pour la structure avec un plan de dopage au centre.

En trait continu: simulation Monte carlo de la structure présentée sur la figure (III-6a), plan de dopage au centre, la densité totale des donneurs est $6.0 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$, correspondant à $6.0 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$ dans le puits. La densité totale des électrons est $6.0 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$.

En trait pointillé: simulation Monte Carlo de la structure à puits infini en AsGa, de 10 nm de largeur, avec le plan de dopage au centre. La densité des donneurs et des électrons est $6.0 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$.

En trait mixte: résultats expérimentaux de Masselink, pour le superréseau de 25 puits en AsGa de 10 nm de largeur, séparés par des barrières en $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ de 3.4 nm de largeur.

Le puits a un plan de dopage au centre de concentration $6 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$.

Chapitre III

type DMT, conçus pour transporter de forts courants, cette situation n'est pas très représentative.

Il paraît plus intéressant de considérer des densités élevées de porteurs, comme nous l'avons fait pour les caractéristiques de premier ordre. Malheureusement, la détermination des coefficients de diffusion par la méthode de Monte-Carlo n'est valable que pour des gaz électroniques non dégénérés. C'est une limitation très contraignante, et dont il serait très intéressant de s'affranchir. Dans le dernier chapitre nous étudierons de près ce problème, et nous proposerons une méthode qui permettra de traiter les systèmes dégénérés.

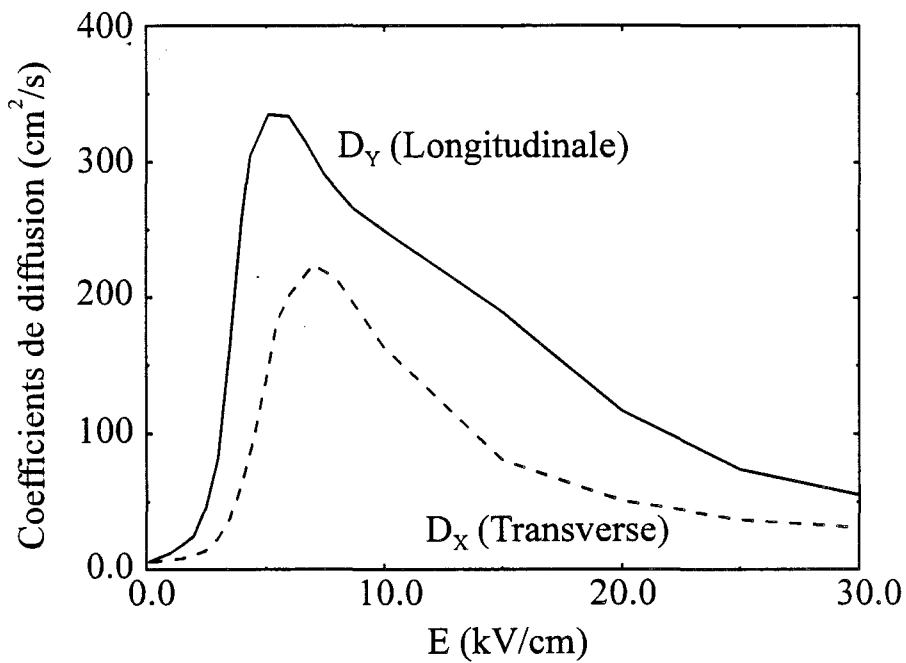


Fig (III-14)

Evolution des coefficients de diffusion pour la structure en $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$.

($T=77$ k, plan de dopage au centre, $N_d=6.3 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$, $N_s=1.0 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$)

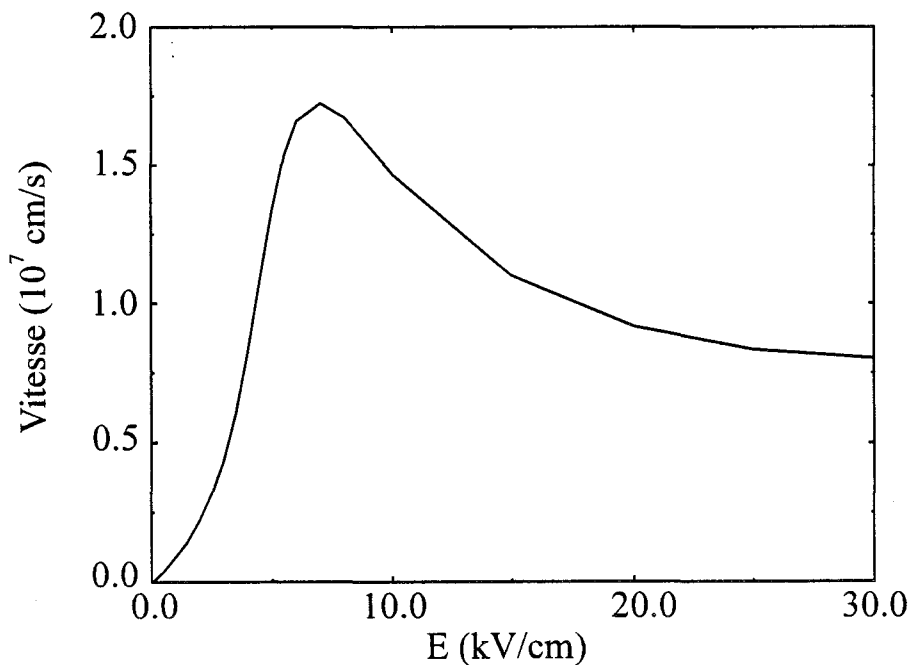


Fig (III-15)

Evolution de la vitesse avec le champ électrique.

Mêmes conditions que la figure (III-14)

REFERENCES

- [1] **W. T. Masselink**
Appl. Phys. Lett. 59, 694 (1991)
- [2] **J. L. Thobel, L. Baudry, F. Dessenne, M. Charef, and R. Fauquembergue**
J. Appl. Phys. 73, 233 (1993).
- [3] **S. Adachi**
Appl. Phys. Lett. 58, R1 (1985)
- [4] **M. A. Littlejohn, J. R. Hauser, and T. H Glisson**
J. Appl. Phys. 48, 4587 (1977)
- [5] **J. L. Thobel, F. Dessenne, R. Fauquembergue, L. Baudry and P. Bourel**
Proc of the Seventeenth International Symposium on Gallium Arsenide and Related Compounds held in Jersey, Channel Islands, 24-27 September 1990. IOP Publisher.
- [6] **A. K. Saxena and A. R. Adams**
J. Appl. Phys. 58, 2640 (1985).
- [7] **J. L. Thobel, L. Baudry, P. Bourel, F. Dessenne, and M. Charef**
J. Appl. Phys. 74, 6274 (1993).

CHAPITRE IV

**ETUDE PROSPECTIVE DES COEFFICIENTS DE
DIFFUSION DANS LES GAZ DEGENERES.**

CHAPITRE IV

ETUDE PROSPECTIVE DES COEFFICIENTS DE DIFFUSION DANS LES GAZ DEGENERES.

IV.1. Echec des méthodes conventionnelles de détermination des coefficients de diffusion pour des systèmes très dégénérés.	2
IV.1.1. Données de base.	2
IV.1.2. Résultats. Discussions et explications.	3
IV.2. Méthode proposée pour la détermination des coefficients de diffusion en gaz dégénéré.	6
IV.2.1. Définitions de Base	6
IV.2.2. Résolution par la méthode de Monte-Carlo	10
IV.2.2.1. Initialisation de la distribution	10
IV.2.2.2. Traitement des électrons du fond	11
IV.2.2.3. Traitement des électrons en excès	12
IV.2.2.4. Calcul des coefficients de diffusion	12
IV.3. Application de la méthode - Résultats	12
IV.3.1. Condition de simulation	13
IV.3.2. Les grandes tendances des résultats	13
IV.3.3. Résultats pour un cas particulier.	15
IV.4. Améliorations suggérées.	16
IV.5. Conclusion.	16
Références	

Chapitre IV

Ce chapitre a pour objet de présenter une étude des coefficients de diffusion dans les gaz dégénérés. Nous présentons dans la section (IV.1) des résultats qui montrent que l'application des formalismes conventionnels à des systèmes dégénérés conduit à des résultats aberrants, même lorsque le principe de Pauli est correctement pris en compte. Nous expliquons l'origine des aberrations constatées, qui sont dues non au modèle du transport mais bien à la méthode d'estimation des coefficients de diffusion. Dans la section (IV.2), nous proposons une définition des coefficients de diffusion, valable même pour des systèmes dégénérés. Celle-ci est basée sur l'observation de l'étalement d'un paquet de porteurs excédentaires dans un milieu présentant un « fond » de concentration uniforme. Nous établissons l'équation d'évolution à partir de l'équation de Boltzmann, et nous montrons qu'elle peut aisément être résolue à l'aide d'une simulation Monte-Carlo. Dans la section (IV.3), nous présentons et discutons les premiers résultats obtenus à l'aide de cette méthode. Enfin, dans la section (IV.5) nous résumons nos principales conclusions.

Dans ce chapitre nous présentons des exemples qui concernent les gaz d'électrons à deux dimensions, tels que ceux rencontrés dans les hétérostructures III-V. Cependant la démarche est tout à fait générale et pourra s'appliquer sans difficulté à des systèmes à une, deux ou trois dimensions.

IV.1. Echec des méthodes conventionnelles de détermination des coefficients de diffusion pour des systèmes très dégénérés.

IV.1.1. Données de base.

Principalement les coefficients de diffusion sont des fonctions du champ électrique appliqué. Lorsque $E=0$, le semiconducteur est à l'équilibre thermique, la relation d'Einstein s'applique. Lorsque la densité électronique est élevée, le système est dégénéré, et l'on doit utiliser la formule suivante:

$$D = \frac{1}{e} n_0 \frac{1}{\frac{dn_0}{dE_F}} \mu \quad (\text{éq IV-1})$$

qui généralise la relation bien connue $D = \frac{k_B T}{e} \mu$, valable pour le gaz non dégénéré.

Dans cette formule, e est la charge électrique, n_0 la densité électronique, E_F le niveau de Fermi, μ la mobilité, k_B la constante de Boltzmann, T la température.

Lorsque le champ appliqué est non nul, la relation d'Einstein ne peut plus être utilisée et les coefficients de diffusion doivent être calculés numériquement. Cela peut être réalisé par différentes méthodes mais nous avons adopté la méthode de Monte-Carlo. Malheureusement, en présence d'interactions porteur-porteur ou, a fortiori, dans un système dégénéré, les procédures utilisées pour l'estimation des coefficients de diffusion cessent d'être valables. C'est une limitation très gênante pour les applications pratiques, car de nombreux composants électroniques utilisent des densités électroniques élevées, correspondant à de fortes dégénérescences surtout dans le DMT et les composants de puissance.

A notre connaissance seuls Reggiani et co-auteurs ont proposé une méthode pour la détermination des coefficients de diffusion en présence d'interactions électron-électron, à l'aide d'une simulation particulière Monte-Carlo [1]. Comme le principe de Pauli pourrait être considéré comme une forme particulière d'interaction porteur-porteur, l'on pourrait envisager de se baser sur cette approche pour l'étude des gaz dégénérés. Malheureusement leur travail fait appel à un formalisme mathématique assez complexe, dont il n'est pas aisé de dégager le sens physique. A notre connaissance, cette méthode n'a jamais été appliquée à des cas concrets. Dans la section suivante nous présentons pour un cas simple, des résultats qui

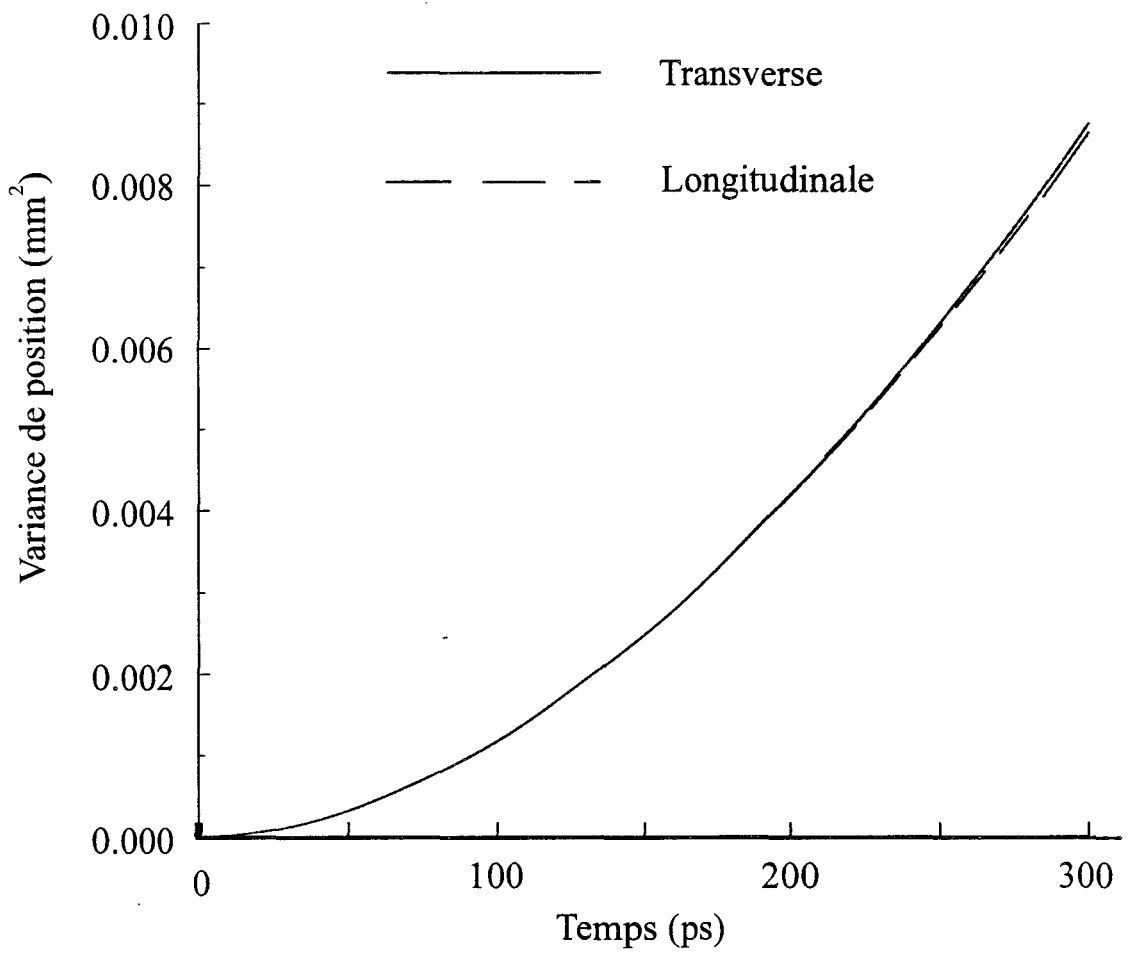


Figure (IV-1)

Evolution de la variance de position avec le temps de simulation.

Puits carré infini en AsGa non dopé de 10 nm de largeur. Le principe de Pauli est appliqué

($E=0$ kV/cm, $T=77$ K, $N_S=4 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$)

illustrent tous les problèmes que l'on peut rencontrer en appliquant les méthodes conventionnelles.

IV.1.2.Résultats. Discussions et explications.

Nous considérons un puits carré infini d'AsGa, de largeur 10 nm. Nous le supposons non dopé et négligeons toute forme d'interaction sur impuretés. Loin d'être une simplification, cela entraîne des contraintes importantes sur la simulation, la précision statistique étant amoindrie par le faible nombre d'interactions. Nous considérons une densité électronique aussi élevée que $4 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$. Nous nous plaçons à température 77 K et nous considérons des champs électriques très faibles, voire nul.

Nous commençons par présenter les résultats obtenus à champ nul.

La figure (IV-1) présente l'évolution des variances de positions en fonction du temps. Nous remarquons que cette évolution n'est pas linéaire mais plutôt parabolique. Ce comportement se maintient bien au-delà des 300 ps représentées ; nous l'avons vérifié jusqu'à 3 ns. Les coefficients de diffusion ne peuvent donc pas être déterminés, ils semblent tendre vers l'infini avec le temps d'observation.

Comme il est bien connu que la condition $E=0$ est très défavorable pour une simulation Monte-Carlo, l'on pourrait espérer de meilleurs résultats en considérant un champ très faible mais fini. La figure (IV-2) présente les évolutions des variances de position pour un champ de 0.05 kV/cm. Le comportement obtenu est très étrange. On remarque d'emblée une anisotropie très forte, le coefficient transverse semble très élevé ; ($D > 10^5 \text{ cm}^2/\text{s}$). La variance parallèle présente de curieuses oscillations, qui ne s'amortissent que progressivement, un comportement linéaire étant observé aux temps longs. La relation d'Einstein est très loin d'être vérifiée, celle-ci donnerait approximativement: 10 à 20000 cm^2/s . Il est assez difficile d'utiliser la relation d'Einstein car la mobilité est difficile à obtenir précisément. De plus dans ce cas particulier le facteur de proportionnalité n'est pas non plus évident à calculer, du fait de l'occupation des sous-bandes supérieures. Cela explique l'imprécision de la valeur donnée ici. Cependant, l'ordre de grandeur ne fait pas de doute.

Pour le coefficient transverse, on trouve une valeur beaucoup trop élevée, et pour le coefficient parallèle, une valeur trop faible (environ 3 à 4000 cm^2/s).

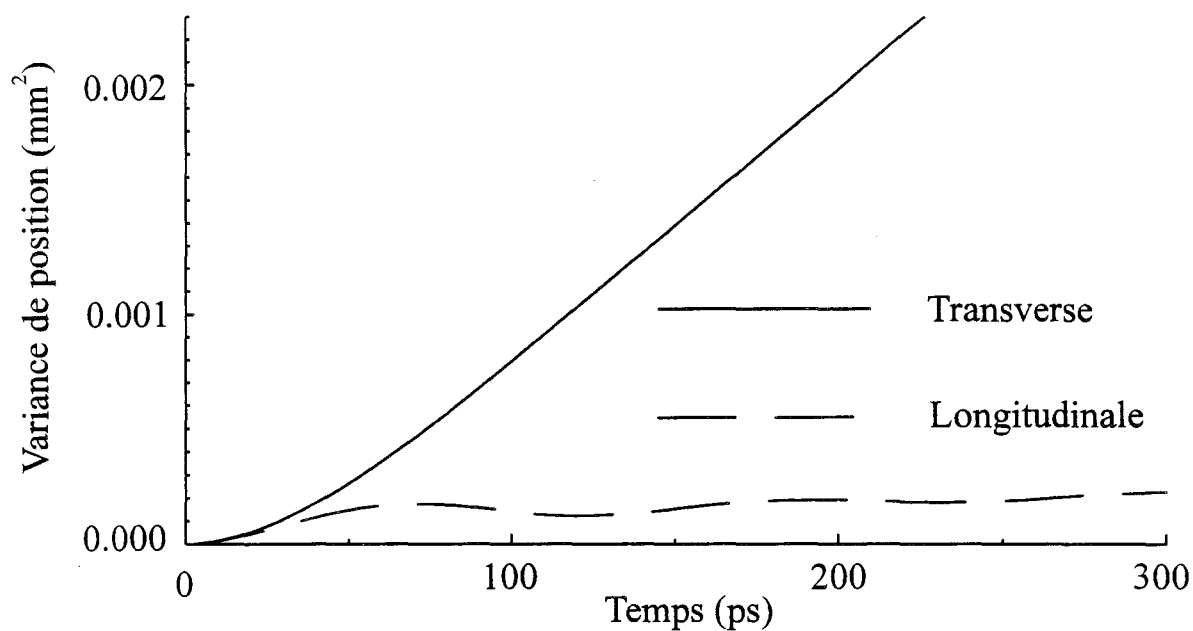


Figure (IV-2)

Evolution de la variance de position avec le temps de simulation.

Puits carré infini en AsGa non dopé de 10 nm de largeur. Le principe de Pauli est appliqué.

($E=0,05 \text{ kV/cm}$, $T=77 \text{ K}$, $N_S=4 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$)

Chapitre IV

L'évolution avec le champ électrique met également en évidence un comportement curieux. La figure (IV-3) présente les variances de position fonction du temps pour différentes valeurs du champ électrique. On observe que les variances parallèle et transverse croissent lorsque le champ diminue. Les coefficients de diffusion semblent donc tendre vers l'infini. On ne peut donc pas non plus retrouver la relation d'Einstein en faisant tendre le champ vers 0. Il est intéressant de constater que la variance parallèle présente aux temps courts des oscillations dont la fréquence est proportionnelle au champ E . Ceci est illustré par l'insert de la figure (IV-3).

Nous avons vérifié que toutes ces observations restaient vraies quand on dopait la structure, même fortement. En revanche, pour des densités de porteurs plus faibles, d'environ 10^{16} m^{-2} , les oscillations de variance ne sont plus observées, mais le coefficient de diffusion tend toujours à devenir très élevé à champ faible. Dès lors que le gaz est nettement dégénéré on observe toujours un écart très important par rapport à ce que prédit la relation d'Einstein.

Toutes ces observations, a priori déconcertantes, peuvent être expliquées. Le point clef est que, dans des conditions de forte dégénérescence, la distribution électronique est essentiellement concentrée à l'intérieur du disque de Fermi, ou d'un domaine du même genre, quand E est légèrement différent de 0. A l'intérieur de ce domaine $f(\bar{k}) \approx 1$, et les interactions sont donc pratiquement interdites.

Lorsque le champ est nul, seules les particules ayant une énergie voisine de l'énergie de Fermi peuvent subir des interactions. Les autres, qui sont de loin les plus nombreuses, conservent leur vitesse très longtemps. Globalement, les particules s'éloignent les unes des autres avec une vitesse pratiquement constante. La variance de position évolue donc grosso-modo comme le carré du temps.

Lorsque qu'un champ électrique faible est appliqué, la distribution est essentiellement répartie sur un domaine, qui est à peu près le disque de Fermi, légèrement décalé vers les k_z positifs, d'une quantité que l'on notera k_d . L'état des particules évolue sous l'effet non seulement des interactions, mais aussi du champ électrique. Les électrons traverseront donc le disque de Fermi, de façon quasi-ballistique, puis auront une probabilité importante de subir une interaction qui ramènera leur vecteur d'onde « à l'arrière » du disque (au voisinage de $k_z = -k_F + k_d$). Ce comportement est confirmé par l'examen de l'évolution au cours du temps de

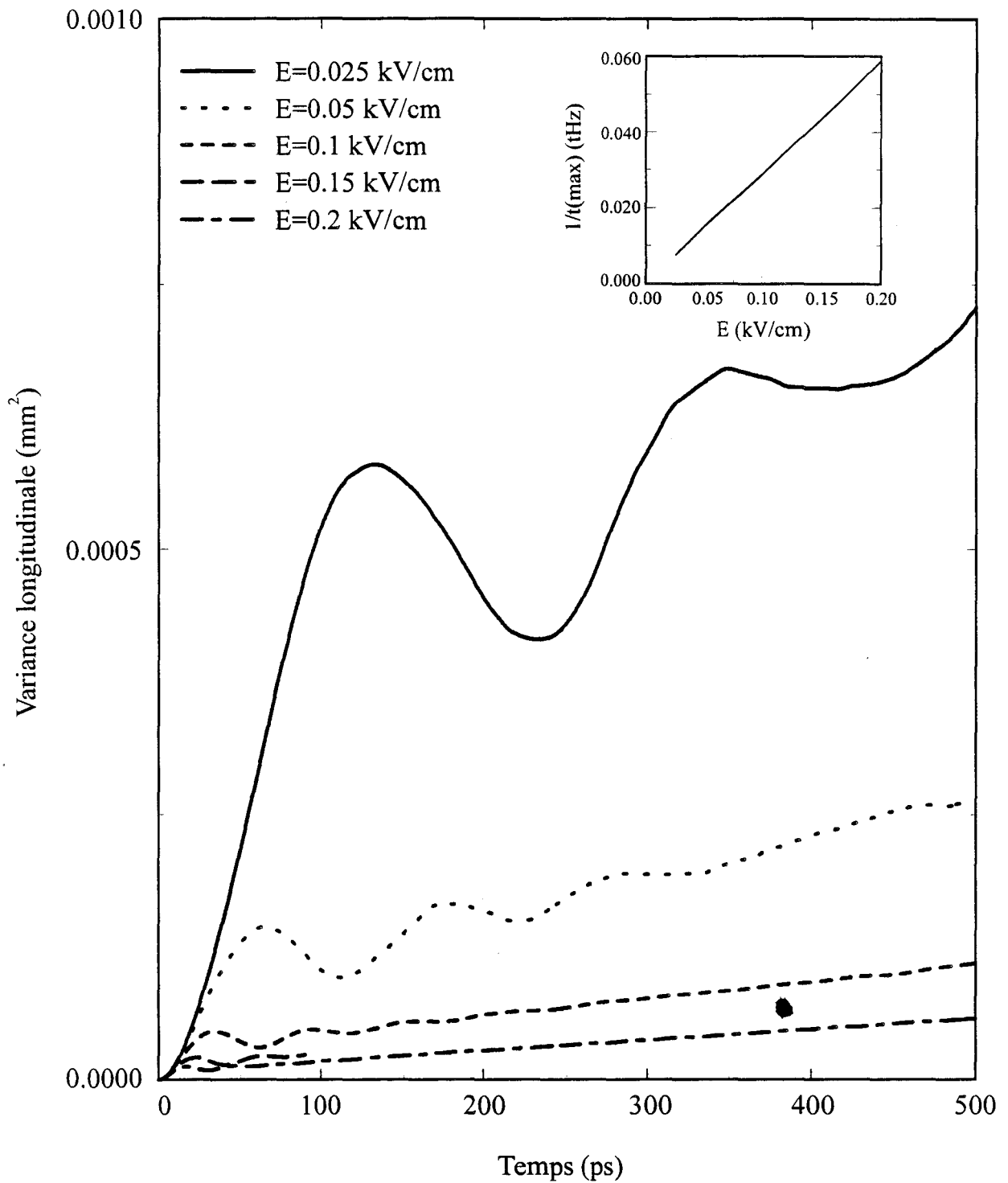


Figure (IV-3)

*Evolution de la variance de position avec le temps de simulation.
 Puits carré infini en AsGa non dopé de 10 nm de largeur. Le principe de Pauli est appliqué.
 L'insert présente l'évolution de la fréquence des oscillations avec le champ électrique.
 (1000 électrons simulés, $T=77$ K, $N_S=4 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$)*

Chapitre IV

la composante parallèle du vecteur d'onde d'un électron, représentée sur la figure (IV-4). On observe de grandes rampes allant sensiblement de $k_z = -k_F + k_d$ à $k_F + k_d$ et dont la pente est proportionnelle au champ appliqué.

Ceci explique pourquoi la variance longitudinale oscille avec une fréquence proportionnelle au champ. On peut de plus remarquer que la période d'oscillation correspond grosso-modo au temps nécessaire pour traverser le disque de Fermi. Initialement le paquet s'étale puis, lorsque tous les électrons ont inversé leur vitesse, il se contracte. La variance de position longitudinale est alors décroissante. Le phénomène se répète, donnant lieu aux oscillations de la variance. Au cours du temps, les écarts par rapport à ce comportement moyens se cumulent ce qui amortit les oscillations et finit par détruire la périodicité. La variance longitudinale évolue alors quasi linéairement, avec une pente relativement faible. En effet, les électrons qui ont une vitesse fortement positive, ont la plus grande probabilité d'inverser leur vitesse dans les instants suivants. Cela s'oppose à l'étalement du paquet de porteurs.

En ce qui concerne la direction transverse, le champ n'influe pas directement sur le mouvement dans cette direction, et la variance de position ne présente pas d'oscillations. L'évolution de la vitesse se fait sous l'effet des interactions. Le temps moyen entre deux interactions est, comme on l'a vu, de l'ordre du temps nécessaire pour traverser la zone de Fermi. Il tend donc vers l'infini lorsque le champ tend vers 0. Ceci explique pourquoi l'on obtient $D \xrightarrow{E \rightarrow 0} \infty$.

Toutes ces observations montrent bien que les méthodes habituelles de détermination des coefficients de diffusion sont inapplicables dans le cas d'un gaz dégénéré. Le point le plus problématique est que l'on considère l'ensemble de la distribution électronique, alors que seuls doivent contribuer les électrons qui sont au voisinage de l'énergie de Fermi. Plus généralement, il s'agit des électrons qui sont voisins de la « frontière » de la zone occupée, en d'autres termes de la « périphérie » de la distribution. Le problème est que lorsque l'on applique un champ électrique, l'état des particules évolue continuellement et il est difficile de désigner ces « électrons périphériques ». Le principe d'indiscernabilité semble même interdire de distinguer les différentes particules. Nous préciserons ce point dans la suite.

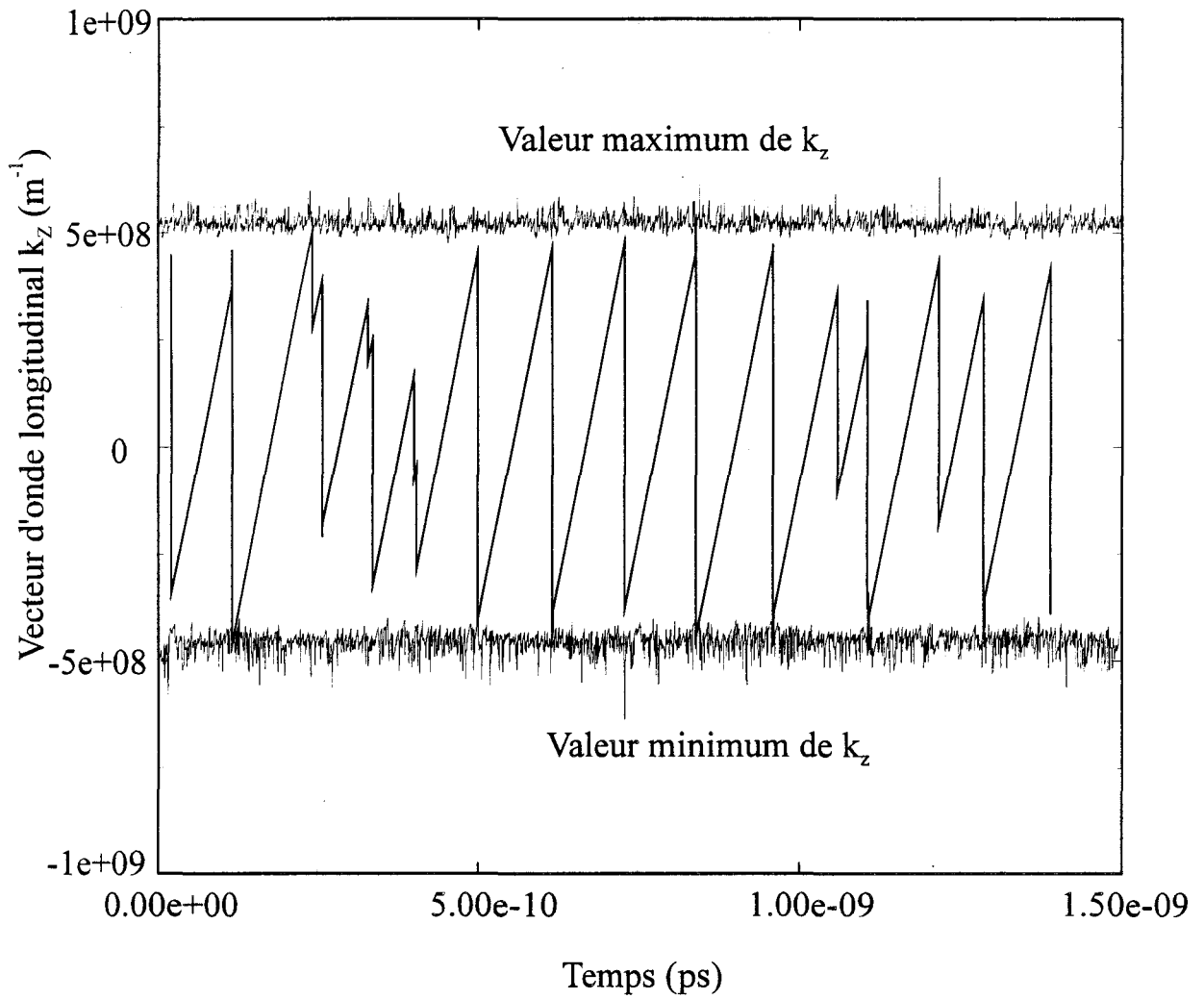


Figure (IV-4)

*Evolution du vecteur d'onde longitudinal avec le temps.
Puits carré infini en AsGa non dopé de 10 nm de largeur.
(1 électron simulé, $T=77 \text{ K}$, $N_S=4 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$)*

Dans la section suivante nous précisons la définition du coefficient de diffusion dans un gaz dégénéré et nous proposons une méthode pratique permettant sa détermination.

IV.2. Méthode proposée pour la détermination des coefficients de diffusion en gaz dégénéré.

IV.2.1. Définitions de Base

Nous choisissons comme définition des coefficients de diffusion celle donnée, au niveau phénoménologique, par la première loi de Fick.

$$\vec{J}_{\text{diff}} = e\vec{\bar{D}} \bullet \vec{\nabla}_{\vec{r}} n \quad (\text{éq IV-2})$$

\vec{J}_{diff} est le courant de diffusion, n la densité de porteurs libres, $\vec{\nabla}_{\vec{r}} n$ le gradient spatial de concentration. $\vec{\bar{D}}$ est un tenseur de rang 2, que l'on peut appeler 'tenseur de diffusion', ses composantes seront les coefficients de diffusion. Le signe \bullet désigne le produit contracté. Les vecteurs et tenseurs peuvent être de dimension 1, 2 ou 3 selon la dimensionnalité du système considéré.

Cependant nous considérons maintenant que le semiconducteur a une densité de porteurs constante et uniforme n_0 , et est soumis à un champ constant et uniforme E . A l'instant initial on perturbe localement la distribution électronique, en ajoutant un certain nombre de porteurs N_1 à la position $\vec{r} = \vec{0}$. On a donc à $t=0$:

$$n(\vec{r}, 0) = n_0 + N_1 \delta(\vec{r}) \quad (\text{éq IV-3})$$

Puis on cherche l'évolution au cours du temps de la répartition électronique, que l'on pourra écrire sous la forme:

$$n(\vec{r}, t) = n_0 + n_1(\vec{r}, t) \quad (\text{éq IV-4})$$

On fera l'hypothèse que N_1 est suffisamment petit pour que l'on ait $n_1(\vec{r}, t) \ll n_0$ au bout du temps t , très petit devant le temps total d'observation. En d'autres termes le nombre d'électrons « excédentaires » N_1 est suffisamment petit pour ne pas perturber sensiblement le fond de la distribution électronique, correspondant à la densité uniforme n_0 . Sous ces hypothèses, on pourra appliquer la seconde loi de Fick

$$\frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} = \bar{\bar{D}} \frac{\partial^2 n(\vec{r}, t)}{\partial x_i \partial x_j} - v_{\text{drift},i} \frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial x_i} \quad (\text{éq IV-5})$$

où i et j sont les indices de directions de l'espace, x_i et x_j sont les coordonnées du vecteur position \vec{r} , v_{drift} la vitesse de dérive déterminée par le champ électrique et $\bar{\bar{D}}$ le tenseur de diffusion constant et uniforme donnée par:

$$\bar{\bar{D}} = \bar{\bar{D}}(n_0 + n_1) \approx \bar{\bar{D}}(n_0) \quad (\text{éq IV-6})$$

En résolvant l'équation qui est ainsi obtenue, avec les conditions initiales (éq IV-3), on trouve que $n_1(\vec{r}, t)$ est une fonction gaussienne de la variable d'espace. Sa matrice de covariance est égale à $2t\bar{\bar{D}}$. Il faut bien noter que cela n'est valable que pour les t « grands ».

Le problème est d'obtenir $n_1(\vec{r}, t)$ à partir de considérations microscopiques. Pour cela nous utiliserons l'équation de transport de Boltzmann. Celle ci détermine l'évolution de la fonction de distribution électronique \bar{f} . Par définition $\bar{f}(\vec{r}, \vec{k}, t)d^d\vec{r}$ est la probabilité de trouver un électron dans l'état \vec{k} , à l'instant t , dans le domaine $d^d\vec{r}$ autour de \vec{r} . Pour plus de simplicité nous faisons comme-ci l'état électronique était entièrement caractérisé par le vecteur \vec{k} , et nous omettons les indices de sous-bande électronique. Ceci permettra d'alléger l'écriture en évitant des sommations, et ne change rien à la démarche. La dégénérescence de spin est prise en compte dans le décompte du nombre d'états électroniques (facteur 2). On peut écrire:

$$n(\vec{r}, \vec{k}, t) = 2 \sum_{\vec{k}} \bar{f}(\vec{r}, \vec{k}, t) \quad (\text{éq IV-7})$$

d étant la dimension du système. De la même façon que l'on a écrit $n=n_0+n_1$ on pourra écrire:

$$\bar{f} = f_0(\vec{k}) + f_1(\vec{r}, \vec{k}, t) \text{ et } n_1(\vec{r}, \vec{k}, t) = 2 \sum_{\vec{k}} \bar{f}_1(\vec{r}, \vec{k}, t) \quad (\text{éq IV-8})$$

\bar{f}_0 décrit la distribution électronique du « fond » uniforme, qui existait dans le semiconducteur avant la perturbation. \bar{f}_1 représente la distribution des électrons excédentaires, générés initialement en $\vec{r} = \vec{0}$. Dans toute la suite nous conserverons cette

terminologie et nous parlerons d'électrons « du fond » et d'électrons « en excès ». Bien entendu, comme les fermions sont indiscernables, cette distinction entre les électrons est commode mais n'a pas de sens physique. Par contre la distinction entre les distributions électroniques est pertinente et significative.

\bar{f}_0 et $\bar{f} = \bar{f}_0 + \bar{f}_1$ vérifient toutes deux l'équation de Boltzmann, et nous allons en déduire l'équation d'évolution vérifiée par \bar{f}_1 .

L'équation de Boltzmann s'écrit pour \bar{f}_0 :

$$\begin{aligned} \frac{-eE}{\hbar} \bar{\nabla}_{\vec{k}} \bar{f}_0(\vec{k}) = \\ \sum_{\vec{k}'} S(\vec{k}, \vec{k}') \bar{f}_0(\vec{k}) (1 - \bar{f}_0(\vec{k}')) - S(\vec{k}', \vec{k}) \bar{f}_0(\vec{k}') (1 - \bar{f}_0(\vec{k})) \end{aligned} \quad (\text{éq IV-9})$$

$S(\vec{k}, \vec{k}')$ désigne la densité de probabilité de transition d'un état \vec{k} vers un état \vec{k}' .

Pour alléger l'écriture des équations suivantes, nous poserons:

$$\bar{f}_0 = \bar{f}_0(\vec{k}), \bar{f}'_0 = \bar{f}_0(\vec{k}'), \bar{f}_1 = \bar{f}_1(\vec{r}, \vec{k}, t), \bar{f}'_1 = \bar{f}_1(\vec{r}, \vec{k}', t), S = S(\vec{k}, \vec{k}'), S' = S(\vec{k}', \vec{k})$$

L'équation de Boltzmann pour $\bar{f} = \bar{f}_0 + \bar{f}_1$ s'écrit alors:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \bar{f}_1 - \frac{eE}{\hbar} \bar{\nabla}_{\vec{k}} (\bar{f}_0 + \bar{f}_1) + \bar{v} \bar{\nabla}_{\vec{r}} \bar{f}_1 = \\ \sum_{\vec{k}'} S(\bar{f}_0 + \bar{f}_1) (1 - \bar{f}'_0 - \bar{f}'_1) - S'(\bar{f}'_0 + \bar{f}'_1) (1 - \bar{f}_0 - \bar{f}_1) \end{aligned} \quad (\text{éq IV-10})$$

d'où l'on déduit l'équation d'évolution de f_1 :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \bar{f}_1 - \frac{eE}{\hbar} \bar{\nabla}_{\vec{k}} \bar{f}_1 + \bar{v} \bar{\nabla}_{\vec{r}} \bar{f}_1 = \\ \sum_{\vec{k}'} S \bar{f}_1 (1 - \bar{f}'_0 - \bar{f}'_1) - S' \bar{f}'_1 (1 - \bar{f}_0 - \bar{f}_1) + \sum_{\vec{k}'} \bar{f}_1 S' \bar{f}'_0 - \bar{f}'_1 S \bar{f}_0 \end{aligned} \quad (\text{éq IV-11})$$

Examinons successivement les différents termes de cette formule. Le premier membre est celui de l'équation de Boltzmann habituelle, avec la fonction inconnue \bar{f}_1 . Le second membre se décompose en deux termes. Le premier d'entre eux ressemble fortement au second membre de l'équation de Boltzmann usuelle, à ceci près que le terme d'exclusion n'est pas $(1 - \bar{f}'_1)$ mais $(1 - \bar{f}'_0 - \bar{f}'_1)$. Ceci traduit que, à l'issue d'une interaction, un électron

Chapitre IV

excédentaire (de la distribution de \bar{f}_1) ne peut accéder ni aux états occupés par d'autres électrons excédentaires, ni à ceux occupés par des électrons « du fond ». Remarquons que, comme au cours du temps la distribution d'électrons excédentaire se « dilue », on aura généralement $\bar{f}_1 \ll \bar{f}_0$, et l'on pourra remplacer $(1 - \bar{f}'_0 - \bar{f}'_1)$ par $(1 - \bar{f}'_0)$.

Le deuxième terme du second membre est moins facile à interpréter. Nous l'examinons de plus près. Il peut s'écrire sous la forme:

$$\sum_{\bar{k}'} P_{\text{ex}}(\bar{k}, \bar{k}') - P_{\text{ex}}(\bar{k}', \bar{k}) \quad (\text{éq IV-12})$$

$P_{\text{ex}}(\bar{k}, \bar{k}')$ doit s'interpréter comme une probabilité, pour un électron excédentaire, de faire une transition de \bar{k} vers un état \bar{k}' , pendant l'unité de temps. Symétriquement $P_{\text{ex}}(\bar{k}', \bar{k})$ est relatif à la transition de \bar{k}' vers un état \bar{k} . On a:

$$P_{\text{ex}}(\bar{k}, \bar{k}') = \bar{f}_0(\bar{k}') S(\bar{k}', \bar{k}) \bar{f}_1(\bar{r}, \bar{k}, t) \quad (\text{éq IV-13})$$

On peut le voir comme la probabilité composée de trois événements, supposés indépendants:

$\bar{f}_0(\bar{k}')$: un électron « du fond » se trouve dans l'état \bar{k}' .

$S(\bar{k}', \bar{k})$: un mécanisme d'interaction tend à provoquer la transition de \bar{k}' vers un état \bar{k} .

$\bar{f}_1(\bar{r}, \bar{k}, t)$: un électron excédentaire se trouve dans l'état \bar{k} .

On peut interpréter cet événement de la manière suivante. Un électron du fond « veut » faire une transition de \bar{k}' vers un état \bar{k} . L'état \bar{k} étant déjà occupé par un électron excédentaire, le principe de Pauli interdit cette transition. Cependant on peut supposer que l'interaction a lieu et que simultanément l'électron du fond est remplacé par l'électron en excès. Autrement dit, les deux particules échangent leur état. Les fermions étant indiscernables, cela ne modifie pas l'état physique du système. En revanche ce phénomène, que l'on appellera « interaction d'échange », permet de décrire l'évolution des fonctions \bar{f}_0 et \bar{f}_1 . \bar{f}_0 décrit le système lorsqu'il n'y a que les électrons du fond, la présence d'un électron

excédentaire ne peut donc empêcher une interaction. $\bar{f} = \bar{f}_0 + \bar{f}_1$ décrit l'évolution du système total, le principe de Pauli doit donc s'appliquer en tenant compte de toutes les particules. Cela est fait en introduisant l'interaction d'échange. L'évolution de $\bar{f}_1 = \bar{f} - \bar{f}_0$ peut donc être déduite.

A ce stade nous disposons d'une équation d'évolution pour la distribution \bar{f}_1 . Nous en avons interprété les différents termes comme des probabilités d'interaction pour des particules. Il est donc possible de définir une simulation particulière permettant de déterminer \bar{f}_1 de façon statistique. Le paragraphe suivant décrit la mise en oeuvre d'une telle simulation.

IV.2.2. Résolution par la méthode de Monte-Carlo

Nous nous proposons de résoudre l'équation de Boltzmann par la méthode de Monte-Carlo, en distinguant les deux distributions \bar{f}_0 et \bar{f}_1 . Pour cela on suit deux populations d'électrons, l'une représentant les électrons du fond et l'autre les électrons en excès. L'interdépendance de ces deux populations est prise en compte en introduisant l'interaction d'échange décrite plus haut. Ce procédé peut être considéré comme un artifice commode permettant de concilier l'indiscernabilité des fermions avec une description particulière du système. Le traitement des deux « types » d'électrons ne diffère que par la façon d'appliquer le principe de Pauli, par la réjection ou l'interaction d'échange. Pour la technique de réjection, le principe de base reste celui exposé au chapitre I, et nous conservons les mêmes notations.

IV.2.2.1. Initialisation de la distribution

On simule $N=N_0+N_1$ superparticules, N_0 et N_1 représentent respectivement le nombre d'électrons du fond et en excès. A l'instant $t=0$, on initialise les électrons du fond selon la distribution de Fermi-Dirac $f_{FD,0}$. Celle ci correspond à la densité électronique « de fond » n_0 .

On note $n_1 = n_0 \frac{N_1}{N_0}$ et $f_{FD,T}$ la distribution de Fermi-Dirac correspondant à la densité, uniforme n_0+n_1 . Les électrons en excès sont initialisés selon $f_{FD,T} - f_{FD,0}$, leur position étant fixée à l'origine. Cette condition initiale correspond au fait qu' à l'instant initial, les électrons en excès étant localisés au même point, ils doivent obéir au principe d'exclusion. Aux temps longs, la distribution des électrons du fond devient, en moyenne, \bar{f} , fonction dépendante du

champ E et de la densité n_0 . La fonction de distribution des électrons en excès relaxe vers \bar{f}_1 , qui en l'intégrant sur l'espace peut être relié à $\frac{\partial \bar{f}_0}{\partial n_0}$ par:

$$F_1 = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_V \bar{f}_1(\bar{r}, \bar{k}, t) dv = N_1 \frac{\partial \bar{f}_0}{\partial n_0} \quad (\text{éq IV-14})$$

IV.2.2.2. Traitement des électrons du fond

Lorsqu'une interaction est sélectionnée, trois cas peuvent se produire. Soit l'interaction est acceptée, soit elle est refusée, soit elle donne lieu à une interaction d'échange. Pour déterminer lequel de ces trois cas a lieu, on tire aléatoirement un nombre r entre 0 et 1. La probabilité de ces trois événements peut être estimée à l'aide des taux d'occupation de la cellule c de l'espace réciproque contenant l'état final \bar{k}' . La cellule c contient $N_{C,0}$ électrons « du fond » et $N_{C,1}$ électrons « en excès ».

Si $r > \frac{N_{C,0} + N_{C,1}}{N_{\max}}$, l'état final est libre et l'interaction est acceptée.

Si $r < \frac{N_{C,0}}{N_{\max}}$, l'état final est occupé par un autre électron du fond et l'interaction est rejetée.

Enfin, si $\frac{N_{C,0}}{N_{\max}} < r < \frac{N_{C,0} + N_{C,1}}{N_{\max}}$, c'est que l'état final est occupé par un électron en excès. Il y a interaction d'échange. Nous cherchons alors parmi tous les électrons en excès ceux qui se trouvent dans la case correspondant à l'état final \bar{k}' . Parmi tous les électrons « candidats à l'échange », nous choisirons celui dont le vecteur \bar{k} est le plus proche de \bar{k}' . Cet électron se voit attribuer le vecteur d'onde et toutes les caractéristiques (sous-bande, vallée...) de l'électron du fond avant interaction.

L'électron du fond se voit attribuer les caractéristiques de l'électron en excès avec lequel il effectue l'échange. Cela est théoriquement équivalent à lui laisser effectuer l'interaction. Cependant, numériquement, il y a une différence, du fait de la discrétisation de l'espace réciproque. La solution choisie peut perturber la dynamique des électrons « du fond »

si la discrétisation est trop grossière. Elle a cependant l'énorme avantage de préserver les lois de conservation du moment et de l'énergie pour le système total.

IV.2.2.3. Traitement des électrons en excès

Leur mouvement est simulé de la façon habituelle. Le seul point particulier est la mise en oeuvre de la réjection. D'après les équations ci-dessus la probabilité de rejet d'une interaction aboutissant à l'état final \bar{k}' est $\bar{f}_0(\bar{k}') + \bar{f}_1(\bar{r}, \bar{k}', t)$. Cependant il faut bien voir que très vite on a $\bar{f}_1(\bar{r}, \bar{k}', t) \ll \bar{f}_0(\bar{k}')$. En effet, si les électrons du fond sont présents uniformément dans tout l'espace, les électrons en excès sont très vite « dilués ». Il est donc très peu probable de trouver deux électrons en excès dans le même état, à la même position, au même moment. Nous appliquons donc la réjection seulement en considérant les électrons du fond.

Dans la pratique, on tire donc un nombre r au hasard entre 0 et 1. L'interaction est acceptée si $r > \frac{N_{C,0}}{N_{\max}}$ et rejetée dans le cas contraire.

IV.2.2.4. Calcul des coefficients de diffusion

A chaque instant nous calculons la position moyenne des porteurs en excès et les variances de leur position, dans les directions parallèles et transverses au champ. On déduit alors les coefficients de diffusion par la formule (éq.II-1). (La nouveauté est qu'ici l'on ne considère que les électrons en excès).

IV.3. Application de la méthode - Résultats

Du fait de la très grande durée d'exécution des exploitations, cette partie ne présente que quelques exemples des premiers résultats que nous avons obtenus dans le cas d'un puits carré infini. Cette étude préliminaire a pour objet de montrer que la méthode proposée fonctionne réellement.

Tout d'abord nous établirons les conditions de simulations. Puis nous discuterons des résultats, comme l'évolution temporelle de la variance d'une part et la caractéristique $D=f(E)$ d'autre part. Nous donnerons les grandes tendances qualitatives qui devront être confirmées dans d'autres travaux à venir. Avant de conclure nous discuterons et nous fixerons les

conditions qui nous semblent nécessaires pour déterminer le coefficient de diffusion par fluctuation de vitesse.

IV.3.1. Condition de simulation

Nous avons choisi d'étudier 10000 électrons pour représenter le 'fond' et 1000 électrons « en excès ». La discrétisation de l'espace réciproque est telle que le nombre de superparticules admissible dans chaque cellule soit compris entre 50 et 80. Ceci permet de maintenir l'erreur de troncature inférieure à 2%. Le pas de temps est choisi pour que l'on n'ait pas plus d'une interaction tous les 5 pas de temps en moyenne. Cela conduit à des valeurs de 0.003 à 0.01 ps. Il serait préférable d'utiliser $dt=0.001$ ps, mais cela est impossible maintenant. Le temps d'observation doit être assez long, surtout à basse température et à faible champ. Typiquement, nous l'avons pris entre 0.3 et 2 ns. Il est clair qu'il nous faut simuler un grand nombre de porteurs pendant un temps long et que les durées de simulation seront assez grandes. Le traitement de l'interaction d'échange est lui même pénalisant, la recherche de la particule à échanger pouvant être assez longue. C'est une des raisons qui conduit à limiter le nombre des électrons en excès.

A 77 K le temps calculs typique est de 42h CPU par nanoseconde simulée pour un système à faible mobilité et 30h CPU/ns simulée pour un système à haute mobilité. Ces temps sont obtenus sur des stations de travail HP 735.

IV.3.2. Les grandes tendances des résultats

Les temps calculs énormes nécessaires à l'exécution de la méthode ne nous ont pas permis de l'exploiter systématiquement. Cependant, nous avons pu la tester pour quelques cas particuliers et nous avons constaté qu'elle fonctionnait correctement. Nous résumons ici les points clefs des résultats obtenus. Les fonctions de distributions \bar{f}_0 et \bar{f}_1 ont dans tous les cas des allures correctes. Nous obtenons, avec une précision satisfaisante, une distribution énergétique des électrons excédentaires proportionnelle à $\frac{\partial \bar{f}_0}{\partial n_0}$.

Cela est très encourageant, car il s'agissait d'un point clef de la méthode. Cela confirme notre interprétation de l'équation d'évolution de \bar{f}_1 et la pertinence de la notion d'interaction d'échange.

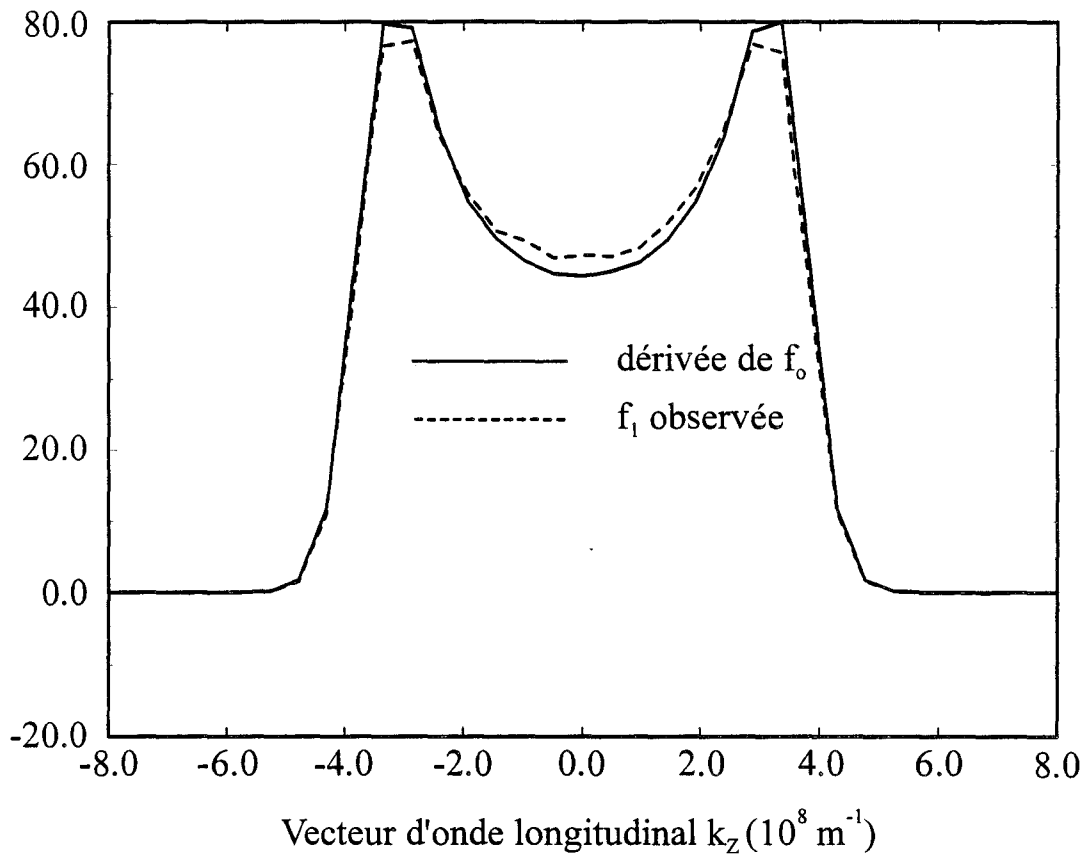


Figure (IV-5)

Comparaison de la distribution d'électrons excédentaire avec la dérivée de f_0 par rapport à la densité.

Puits carré infini en AsGa non dopé de 10 nm de largeur.

($T=77\text{K}$, $N_S=4 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$.)

Chapitre IV

Ce point est illustré de façon partielle par la figure (IV-5), qui présente les distributions du vecteur d'onde parallèle pour les électrons en excès calculés, à partir de \bar{f}_1 et de $\frac{\partial \bar{f}_0}{\partial n_0}$, pour un cas typique. Nous avons vérifié l'accord satisfaisant pour l'ensemble de la distribution.

Les variances de position ont toujours un comportement linéaire. Nous n'observons jamais de divergence, ni d'oscillations intempestives. La figure (IV-6) présente un exemple d'évolution temporelle des variances de positions. On y vérifie bien la linéarité, avec cependant un « bruit statistique » important, lié au faible nombre d'électrons en excès. La détermination des coefficients de diffusion est illustrée également. Pour ce cas particulier, nous aboutissons à une marge d'erreur de 5 %, ce qui est typique des résultats obtenus.

Par des simulations à champ nul on trouve toujours des ordres de grandeurs conformes à la relation d'Einstein.

Dans beaucoup de cas celle-ci semble vérifiée à la précision du calcul près. Il faut cependant bien voir que cette vérification n'est pas aisée car la mobilité elle-même ne peut être obtenue avec une très bonne précision.

Dans les plus mauvais cas nous obtenons une surestimation du coefficient de diffusion d'un facteur 2 à 3. Mais on se trouve alors dans des cas extrêmes, ceux pour lesquelles les coefficients de diffusion étaient infinis avec l'ancienne méthode. ($N_S=4 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$, $T=77 \text{ K}$, $E=0 \text{ kV/cm}$, pas d'impuretés). Nous avons alors très peu d'interactions pour stabiliser le système.

Dans des cas moins extrêmes, $N_S=2 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$, uniformément dopé, on obtient des résultats cohérents pour les caractéristiques $D(E)$. Cependant, l'incertitude statistique est encore importante : supérieure à 10%, parfois plus lorsque le temps de simulation est court. Il faut donc être prudent dans les interprétations. Il semblerait que le cas $E=0 \text{ kV/cm}$, entraîne une erreur systématique, probablement due au manque d'interactions inélastiques. Cette erreur n'est que de 10% à 20%. Dans le cas considéré les variations avec le champ électrique ne sont pas très brutales.

Dans tous les cas nous observons que, à champ fort, lorsque le principe de Pauli, ne joue plus un rôle important, nous retrouvons les valeurs fournies par l'ancienne méthode.

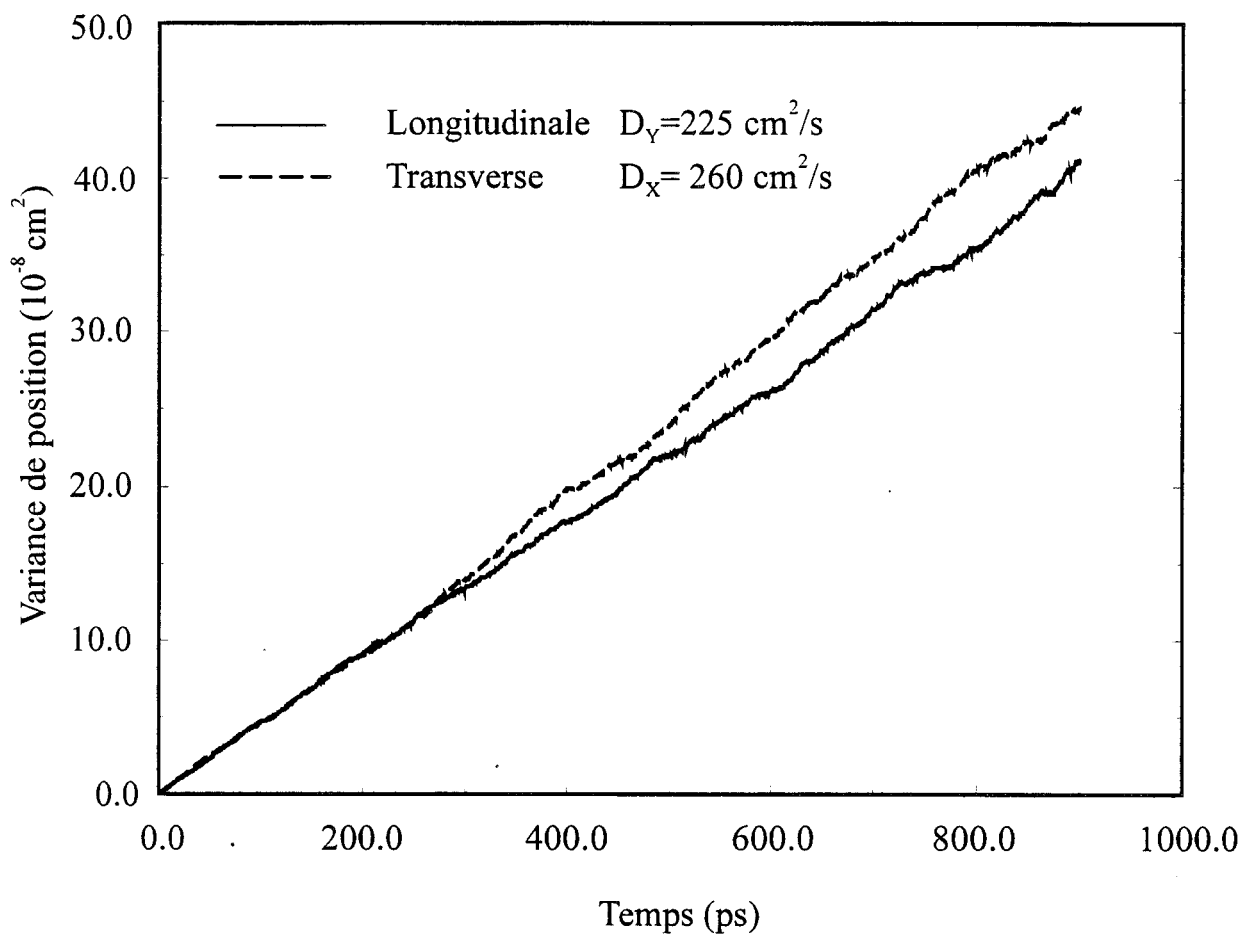


Figure (IV-6)

Evolution de la variance avec le temps.

Puits carré infini en AsGa uniformément dopé de largeur 10 nm.

($E=0.5 \text{ kV/cm}$, $N_S=2 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$, $T=77 \text{ K}$)

Nous avons cherché à vérifier la cohérence du calcul, en calculant les moments d'ordre supérieurs de la position. Si la densité est bien Gaussienne, on doit ainsi obtenir $E\left[(x_i - \bar{x}_i)^4\right] \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 12 D^2 t^2$. Nous avons trouvé que cette relation permet de retrouver les coefficients de diffusion, à la précision du calcul près, qui est typiquement de 5%. Ceci tend à confirmer la validité de la deuxième loi de Fick.

IV.3.3. Résultats pour un cas particulier.

On considère un puits carré infini d'AsGa, de largeur 10 nm, uniformément dopé à $N_d = 2 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$, à température $T = 77 \text{ K}$.

La mobilité peut être estimée avec une bonne précision, elle vaut $3550 \text{ cm}^2/\text{V/s}$ à 2% près.

Le facteur de proportionnalité D/μ peut également être obtenu sans trop de problème en traçant la courbe $N_S(E_F)$ et en dérivant numériquement. On obtient ici $D/\mu = 0.74 - 0.76$. La relation d'Einstein prédit donc un coefficient à champ nul de $260-270 \text{ cm}^2/\text{s}$. Notre programme fournit une valeur de $279 \text{ cm}^2/\text{s}$ à 5% près. On voit que l'accord est bon. A des champs faibles, nous obtenons des valeurs de l'ordre de 250. Nous restons donc dans le bon ordre de grandeur.

Nous considérons maintenant l'évolution en fonction du champ, représentée sur la figure (IV-7). Dans la gamme $0-1.5 \text{ kV/cm}$, les évolutions sont un peu confuses. Nous remarquons une légère décroissance, mais il y a trop d'incertitude pour en discuter. Le coefficient parallèle croît ensuite, il est alors supérieur au coefficient transverse qui 'décolle' plus tard. Les valeurs pics des coefficients longitudinal et transverse sont obtenues respectivement pour des champs de 2.5 et 4 kV/cm . La valeur maximale est sensiblement la même pour les deux coefficients, de l'ordre de $335 \text{ cm}^2/\text{s}$. Aux champs plus fort il y a décroissance des deux coefficients, et nous retrouvons un comportement 'classique'. Nous remarquons que, aux champs faibles, les évolutions sont relativement lentes, par rapport à ce qui se passe dans des systèmes non dégénérés. Cela peut -peut-être- s'expliquer par le fait que l'énergie moyenne des porteurs en excès est voisine de l'énergie de Fermi, et ne croît qu'assez peu avec la température électronique, donc avec le champ.

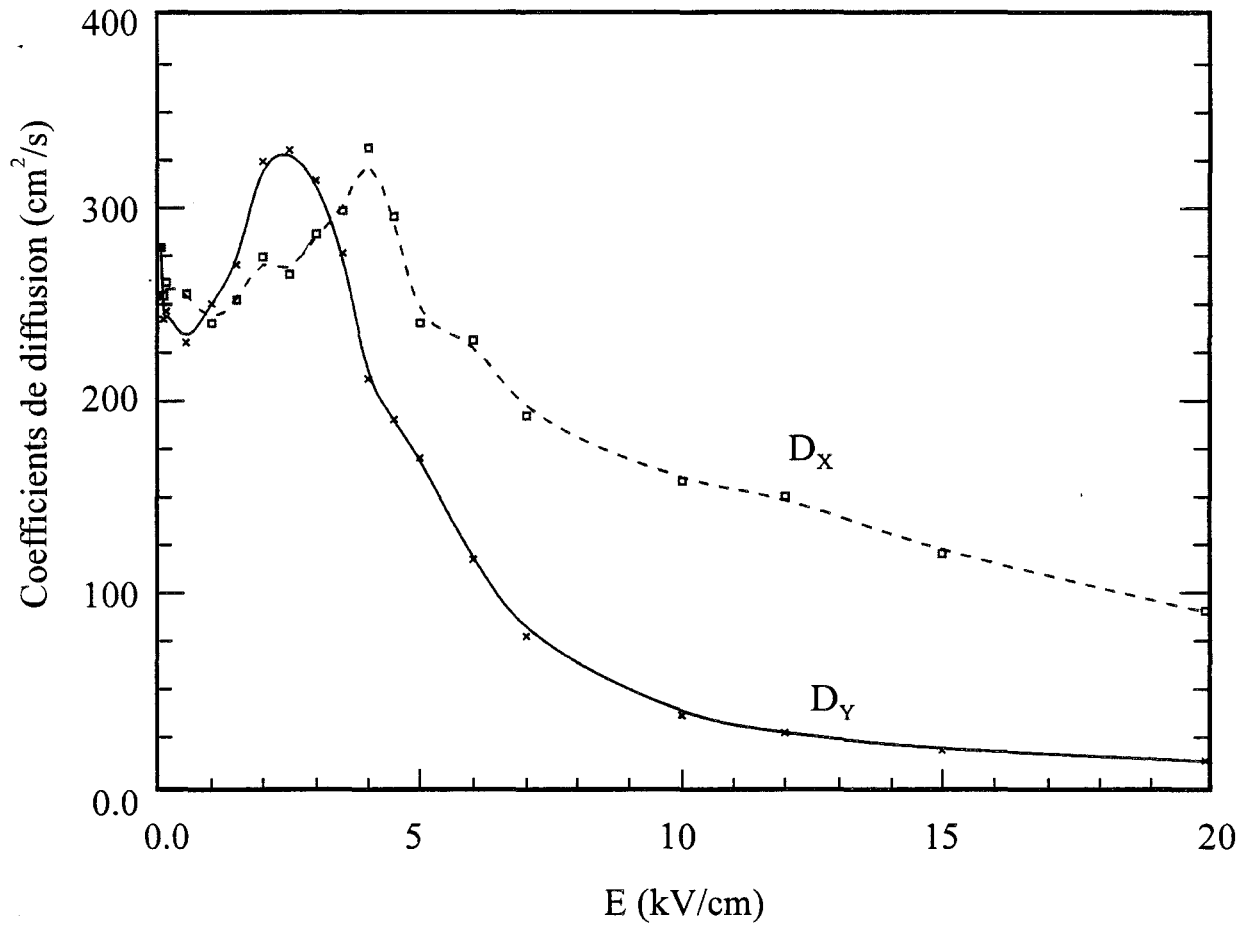


Figure (IV-7)

Evolution des coefficients de diffusion avec le champ électrique calculés pour un gaz dégénéré en tenant compte de l'interaction d'échange. Puits carré infini en AsGa uniformément dopé de 10 nm de largeur.

$$T=77 \text{ K}, N_s=2 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$$

IV.4. Améliorations suggérées.

La méthode que nous venons de décrire ne permet d'obtenir que le coefficient de diffusion statique. Pour obtenir la densité spectrale de bruit de diffusion, il est nécessaire de revenir à une étude des fluctuations de vitesse. Il semble naturel d'étudier la vitesse d'un porteur en excès, dont la dynamique est décrite en tenant compte de l'interaction d'échange. En calculant la fonction d'autocorrélation des fluctuations de vitesse, puis en prenant la transformée de Fourier, on doit obtenir le coefficient de diffusion fonction de la fréquence $D(f)$, comme dans la méthode usuelle. L'équivalence des deux approches de la diffusion doit pouvoir être justifiée en calquant la démonstration sur celle qui s'applique aux gaz non dégénérés. Pour cela, il est nécessaire de faire une hypothèse de type ergodique. A savoir, l'observation du mouvement d'un seul électron en excès doit permettre de déterminer la

fonction de distribution
$$F1 = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{\mathbf{v}} \bar{f}_1(\bar{\mathbf{r}}, \bar{\mathbf{k}}, t) d\mathbf{v} = N1 \frac{\partial f_0}{\partial n_0}$$
.

Une telle assertion demanderait à être sérieusement justifiée. Cependant, l'intuition nous pousse à la tenir pour vraie. Le point clef est que les électrons en excès sont en fait indépendants les uns des autres (au temps long, du fait de leur éloignement). On ne voit pas d'obstacle, a priori, pour qu'un électron en excès représente l'ensemble de cette population. Ceci ne saurait remplacer une justification rigoureuse, qui sort du cadre de ce travail. Cependant le véritable problème sera d'ordre pratique. En effet il faut considérer des temps très longs, et tenir compte des nombreux électrons du fond. On en revient donc au principal inconvénient de la méthode, son coût en temps calculs. On peut envisager de le réduire, par différentes façons. Par exemple, il serait souhaitable de ne pas considérer les électrons du fond, mais de tabuler la probabilité d'échange. Le problème est la place mémoire énorme nécessaire, car cette probabilité dépend des deux variables vectorielles $\bar{\mathbf{k}}$ et $\bar{\mathbf{k}}'$.

IV.5. Conclusion.

Nous avons présenté, pour la première fois, une méthode de détermination des coefficients de diffusion à l'aide d'une simulation Monte-Carlo, appliquée à des gaz électroniques dégénérés. Pour cela nous nous sommes basés sur la définition phénoménologique des coefficients de diffusion, à l'aide des lois de Fick. Le passage au point de vue microscopique se fait grâce à l'équation de Boltzmann. L'équation d'évolution d'un « paquet de porteurs en excès » fait apparaître un terme que l'on peut interpréter comme

Chapitre IV

résultant d'une « interaction d'échange ». Par ce mécanisme les électrons en « excès » échangent leur état avec les électrons du « fond » de concentration uniforme. Cette interaction peut très facilement être incorporée dans un simulateur Monte-Carlo. L'évolution de la variance de position des porteurs en excès permet alors de déterminer les coefficients de diffusion statiques. Le gros inconvénient de cette technique est le volume important des calculs informatiques. Cependant nous avons pu présenter des applications à des cas d'intérêt pratique. Les résultats sont cohérents, même dans des situations de très forte dégénérescence.

REFERENCES

- [1] **L. Reggiani, P. Lugli, S. Gantsevich, V. Gurevich and R. Katilius.**
Phys. Rev. B, 40 (18), 12209-12213 (1989).

*Conclusion
Générale*

CONCLUSION GENERALE

Dans ce mémoire nous avons présenté une étude détaillée du transport électronique dans les gaz 2D dans les systèmes à hétérojonctions III-V. En particulier nous avons considéré des systèmes tels que les MODFETs et les DMT.

Principalement nous nous sommes intéressés au calcul des coefficients de diffusion. Pour cela nous avons développé un simulateur Monte-Carlo dans lequel nous avons tenu compte des effets physiques fondamentaux comme la non-parabolicité, le principe de Pauli et la quantification des vallées L et X.

Tout d'abord nous avons présenté les résultats des coefficients de diffusion obtenus pour deux hétérostructures MODFETs typiques: l'une en AlGaAs/InGaAs/AlGaAs pseudomorphique sur GaAs et l'autre en AlInAs/InGaAs/AlInAs adaptée en maille sur InP. Après avoir vérifié l'équivalence numérique entre les deux méthodes 'Bruit' et 'Etalement', nous avons adopté cette dernière méthode dans le reste de ce travail. Par rapport à la méthode « Bruit » nous avons montré que la méthode « Etalement » est simple à mettre en oeuvre et que les coefficients sont plus facilement accessibles.

Les résultats les plus marquants ont été obtenus pour les deux hétérostructures à 77 K. Nous avons établi que le coefficient de diffusion parallèle s'écarte largement de la relation d'Einstein même pour des champs inférieurs à 1 kV/cm. Donc cette relation doit être appliquée avec précaution. Contrairement à ce qui se passe à la température ambiante, le coefficient parallèle dépend fortement du champ électrique et il est supérieur au coefficient transverse. Les résultats obtenus montrent que les coefficients de diffusion sont des grandeurs sensibles à de nombreux paramètres comme la température, la densité électronique et la nature des matériaux. Il est donc difficile d'établir une règle générale pour prédire leur comportement. Néanmoins, nous avons montré qu'il existe une relation entre les principales interactions (impuretés, phonon et intervalles) et l'évolution du coefficient parallèle. Par exemple, le fait que le taux d'interaction sur impuretés décroît fortement avec l'énergie se traduit directement par une croissance rapide du coefficient de diffusion parallèle avec le champ. Ainsi la mesure des coefficients de diffusion pourrait fournir des informations sur des grandeurs microscopiques, comme les taux d'interactions.

Nous nous sommes ensuite intéressés à des structures à puits dopé du type DMT. Nous avons considéré une structure avec un puits carré infini en AsGa et une autre structure plus réaliste en AlGaAs/GaAs/AlGaAs. Nous avons étudié à la fois les régimes stationnaire et transitoire. Nous avons montré que le dopage du puits n'a pas de conséquence dramatique sur le transport à condition de bien choisir le profil de dopage. Avec un choix judicieux du taux et du profil de dopage, on peut limiter la dégradation de la mobilité et même améliorer la vitesse de saturation. Les meilleurs résultats sont obtenus lorsque un plan de dopage se trouve au bord du puits. Nous avons comparé nos résultats avec ceux des études expérimentales de Masselink pour un superréseau. Nous avons constaté que les résultats obtenus par la simulation sont qualitativement en accord avec certaines évolutions décrites par Masselink.

L'étude des coefficients de diffusion a également été abordée. Malheureusement elle n'a pu être entreprise que pour des densités faibles, qui sont peu usuelles pour ce type de composants. En effet les méthodes habituelles de détermination des coefficients de diffusion par simulation Monte-Carlo cessent d'être valable pour des gaz dégénérés. Cette limitation est particulièrement gênante, les composants fonctionnant fréquemment avec de fortes densités. C'est pourquoi nous avons consacré la dernière partie de travail à la recherche d'une méthode permettant de déterminer les coefficients de diffusion pour les gaz dégénérés. Cette méthode consiste à observé l'étalement d'un paquet de porteurs excédentaires dans un milieu présentant un « fond » de concentration uniforme. Nous avons introduit le concept d'interaction d'échange que nous avons facilement intégré dans le simulateur Monte-Carlo. Le seul inconvénient est le volume important des calculs informatiques. Néanmoins nous avons présenté dans ce dernier chapitre des résultats cohérents et encourageants obtenus dans le cas d'un DMT qui montrent la validité de cette méthode pour les situations de forte dégénérescence.

Ce travail que nous avons mené sur la diffusion dans les gaz 2D en général ouvre la porte à plusieurs projets d'études futures. Maintenant que nous avons la possibilité de calculer les coefficients de diffusion dans les gaz dégénérés, il serait intéressant d'établir une démarche pour :

- réduire le temps CPU pour la méthode « Etalement » en vue de déterminer les coefficients de diffusion dans le DMT ;

- calculer le coefficient de diffusion 'Bruit' en vue de faire une comparaison avec la méthode « Etalement » et déterminer la densité spectrale.

En ce qui concerne notre simulateur, ses qualités d'adaptabilité permettent de l'utiliser pour étudier des structures relativement complexes à multipuits. En effet, si l'on parvient à moduler à l'aide des polarisations extérieures la répartition de charges entre différents puits de caractéristiques différentes, des applications rapides sont envisageables.



Résumé

Dans ce mémoire nous présentons une étude théorique par la méthode de Monte-Carlo du transport électronique et des coefficients de diffusion dans les hétérostructures III-V. Ce mémoire se divise en quatre parties.

Dans le premier chapitre nous présentons le modèle de simulation que nous avons développé pour étudier le transport électronique. Dans ce modèle nous avons introduit les effets physiques fondamentaux tels que la non-parabolicité, la quantification des vallées (Γ , L, X), le principe de Pauli, et toutes les interactions importantes.

Dans le deuxième chapitre, nous utilisons ce modèle pour calculer les coefficients de diffusion dans deux hétérostructures MODFETs (**M**odulation **D**oped **F**ield **E**ffect **T**ransistors) : l'une en AlGaAs/InGaAs et l'autre en AlInAs/InGaAs. Après avoir rappelé les méthodes de calculs dans les gaz non dégénérés. Nous discutons et comparons l'évolution des coefficients de diffusion pour les deux hétérostructures. Nous montrons l'influence des différentes interactions sur leur évolution.

Dans le troisième chapitre nous étudions le transport électronique dans le DMT (**D**oped **C**hannel **M**is-like-**F**ET) en AlGaAs/GaAs. Nous examinons l'impact des différents paramètres (le profil de dopage, la densité électronique et la température) sur les propriétés du transport. Nous étudions le comportement de ces structures en régime stationnaire et transitoire. Nous terminons ce chapitre par une comparaison avec des résultats expérimentaux.

Le quatrième chapitre, est consacré à l'étude de la diffusion dans les gaz dégénérés. Après avoir montré la limite de validité des définitions conventionnelles. Nous proposons une méthode applicable quelque soit le degré de dégénérescence. Nous montrons qu'elle peut aisément être introduite dans un modèle Monte-Carlo. Nous présentons enfin des résultats concernant un DMT typique.

**TRANSPORT ELECTRONIQUE
PUITS QUANTIQUES
MATERIAUX III-V**

**METHODE DE MONTE-CARLO
DIFFUSION
DEGENERESCENCE**

Abstract

In this memoir we present a Monte-Carlo study of electron transport and diffusion phenomena in III-V heterostructures. This memoir is organized in four parts.

In the first chapter, we present the Monte-Carlo model which we have developed to study the electron transport. In this model the important physical phenomena are included : nonparabolicity, the quantization in all valleys (Γ , L, X), Pauli principle and all important interactions.

In the second chapter, we use this model to calculate the diffusion coefficients in two typical MODFET (**M**odulation **D**oped **F**ield **E**ffect **T**ransistor) heterostructures: a pseudomorphic AlGaAs/InGaAs and a AlInAs/InGaAs lattice matched on InP. We recall the calculation methods for the non degenerate gas. We discuss and compare the evolutions of the diffusion coefficients for the two heterostructures. We show the influence of different interactions on these evolutions.

In the third chapter, we study the electron transport in DMT (**D**oped **C**hannel **M**is-like-**F**ET) heterostructures : AlGaAs/GaAs. We examine the influence of doping profile, donors density, and the temperature on transport properties. We study both steady state and transient transport. We end this chapter by a comparison with experimental data.

The fourth chapter is devoted to the study of diffusion in degenerate electron gas. After having shown the limit of validity of the conventional definitions, we propose a new method, applicable in any degeneracy situation. We show that is easy to include it in the Monte-Carlo model. Finally, we present a results of diffusion coefficients for a typical DMT.

**ELECTRON TRANSPORT
QUANTUM WELLS
III-V MATERIALS**

**MONTE-CARLO METHOD
DIFFUSION
DEGENERACY**