REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE « Dr. TAHAR MOULAY » DE SAIDA

FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



Présenté en vue de l'obtention du diplôme de

MASTER Spécialité : PHYSIQUE

Option : physique des rayonnements

Par

BELHADI Benali

Sur le thème

Etude De L'InGaAs Massif

Soutenu le : 04/07/2019 devant le jury composé de :

| Mr. ZEMOULI Mostefa | MCA | Université Dr. Tahar Moulay de Saida | Président |
|-----------------------|-----|--------------------------------------|---------------------|
| Mr. MAHI Abdelhamid | MCA | Université | Encadreur |
| Mr. ELKEURTI Mohammed | Pr. | Université Dr. Tahar Moulay de Saida | Co-encadreur |
| Mr. BOUTALEB Habib | MCA | Université Dr. Tahar Moulay de Saida | Examinateur |

Année Universitaire 2020 - 2021

Remerciement

A l'occasion de la fin des études du une part, et des travaux destinés à la réalisation de ce mémoire d'autre part.

Je tiens à remercier avant tout, mon dieu qui m'a donnes le pouvoir et le courage pour les

complètes puis a :

* Mes parents de m'avoir guidé, soutenus et orientes tous au long de ma formation.

Mon encadreur et Co-encadreur : Mr. MAHI Abdelhamid, Mr. ELKEURTI

Mohamed pour ses aide, ses précieux conseils et ses soutien moral.

 Mr le directeur et la chef département de physique et ensemble des personnels qui travaillés dans le département de physique.

Tous les enseignants.

Sans oublier toutes les personnes qui mont aides durant mon travail.

Dédicaces

Je dédie se modeste travail avec mes meilleurs pense et mon amour infini à:



Tous les étudiants des facultés.

Liste des abréviations

Liste d'abréviation :

Al : Aluminium.

As: Arséniure.

Éq: Équation.

Ga: Gallium.

HD: hydrodynamique.

HEMT: transistor à électron à haute mobilité.

In: Indium.

M: Metal.

MC: Monte Carlo.

Mg: Magnesium.

N: Azote.

O: Oxygen.

P: phosphor.

S b: Antimonies.

SC: Semi-conducteur.

T Hz : Téra hertz.

ZCE: Zone de charge d'espace.

Zn: Zinc.

Liste des figures

Liste des figures

| Figure I.1.a. Cubique simple. b. Cubique centré. c. Cubique face centrée 14 |
|--|
| Figure I.2. Plans cristallographiques14 |
| Figure I.3. Représentations de l'atome de Silicium faisant apparaître. a. Les niveaux d'énergie et électrons les occupant. b. Le dernier niveau d'énergie. c. Les |
| quatre liaisons covalentes possibles |
| Figure I.4. Représentation de l'association d'un atome de Silicium avec ses quatre voisins. a |
| Figure I.5. Semi-conducteur composé : GaAs |
| Figure I.6. Apparition de bandes de valence, de conduction et interdite avec la diminution de la distance interatomique pour un matériau de la colonne IV, quand on "rapproche" N atomes identiques |
| Figure I.7.a. SC à gap direct. b. SC à gap indirecte |
| Figure I.8. Transition d'un électron de la BV vers la BC |
| Figure I.9. Apparition d'un électron et d'un trou libre lors d'une rupture de liaison covalente |
| Figure .I.10: – Gap et paramètre cristallin des alliages de composés III-V. Les points du graphe figurent la position des composés binaires stœchiométriques, et les lignes représentent l'évolution du gap g et du paramètre cristallin a en fonction |
| de la composition des alliages ternaires |
| Figure .I.11: Structure d'un HEMT |
| Figure .I.12: Interaction rayonnement - semi-conducteur [6] [7]25 |
| Figure .I.13: Libération d'un électron par l'atome de phosphore et schéma des bandes 1-3-2 |

Liste des figures

| Figure II.1 : Organigramme d'une simulation Monte Carlo appliquée à l'étude du transport électronique dans les semi-conducteurs | Figure .I.14: Libération d'un trou par l'atome de bore et schéma des bandes28 |
|---|---|
| Figure III.1 : Représentation schématique de la bande de conduction et le haut de la bande de valence du matériau dans les directions cristallographiques < 100 > et < 111 > | Figure II.1 : Organigramme d'une simulation Monte Carlo appliquée à l'étude du transport électronique dans les semi-conducteurs |
| la bande de valence du matériau dans les directions cristallographiques < 100 > et < 111 > | Figure III.1 : Représentation schématique de la bande de conduction et le haut de |
| < 111 > | la bande de valence du matériau dans les directions cristallographiques < 100 > et |
| Figure III.2 : Masse effective moyenne en fonction de l'énergie moyenne des électrons, calculée par la simulation Monte Carlo de l'In Ga As massif à 300 K. | < 111 > |
| | Figure III.2 : Masse effective moyenne en fonction de l'énergie moyenne des électrons, calculée par la simulation Monte Carlo de l'In Ga As massif à 300 K. |
| | |

Figure III.3: Taux de relaxation de la vitesse et de l'énergie de l' $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ en fonction de l'énergie moyenne à 300 K.

Figure III.4 : Réponse temporelle (a) de la vitesse et (b) de l'énergie moyennes à différents échelons de champ électrique.

Figure III.5 : Vitesse (a) et énergie (b) moyennes stationnaires à différents champs.

Figure III.6 : Variation par rapport à la vitesse stationnaire de la vitesse moyenne en réponse à un échelon de champ électrique de 104 kV/cm appliqué à t = 0 pour différents champs électriques stationnaires.

Figure III.7 : La valeur moyenne de la mobilité différentielle en fonction de la fréquence pour différents champs électriques.

Liste des tableaux

Liste des tableaux

| Tableau I.1 : Exemple de semi-conducteurs [2] 13 |
|--|
| Tableau I.2. Exemple de valeurs du gap et de la distance interatomique ("constante du réseau"= |
| arête du cube du réseau = $(4/3) \times$ distance au plus proche voisin) |
| Tableau III.1 : Valeurs des énergies de fond de vallées, des paramètres de non-parabolicité et |
| des masses effective en fond de vallée pour l' $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ à 300 K |

Sommaire

| Sommaire | |
|--|----|
| Remercîment | |
| Dédicace | |
| Liste des abréviations | |
| Liste des figures | |
| Liste des tableaux | |
| Introduction général | |
| I.1. Introduction | |
| I.2. Conducteurs - Isolants - Semi-conducteurs | 13 |
| I.3. Structure de l'état solide | 13 |
| I.4. Système cristallin et réseau cristallin | 13 |
| I.5. Cristal cubique | 13 |
| I.5.1. Semi-conducteurs de la colonne IV (Ge, Si) - Réseau "diamant" | 14 |
| I.5.2. Semi-conducteurs composés (III-V ou II-VI) - Réseau "Zinc-blende" | |
| I.6. Bandes d'énergie | 16 |
| I.7. "Gap" direct ou indirect | |
| I.8. Conduction par électron ou par trou. Masse effective. Densité d'états | 19 |
| I .9. Les matériaux III-V | 21 |
| I .10. Le transistor HEMT | 22 |
| I.11. Interaction rayonnement - semi-conducteur | 24 |
| I.11.1.Absorption fondamentale | |
| I.11.2.Emission spontanée | |
| I.11.3.Emission stimulée | |
| I .12. Semi-conducteur dopé ou non dopé | 25 |
| I .12.1. Les semi-conducteurs intrinsèques | |
| I .12.2. Les semi-conducteurs extrinsèques :(dopage) | |

Sommaire

| I .12.2.1. Semi-conducteur dopé n | |
|--|--------------|
| I.12.2.2. Semi-conducteur dopé p | |
| I.13.Conclusion | |
| II.1.Introduction | |
| II.2.Phénomène de transport électronique | |
| II.2.1.Equation de Boltzmann | |
| II.2.2 Equations des moments | |
| II.2.3.Équations de bilan local | |
| II.2.4.Équation de Poisson | |
| II.3.Modélisation du transport électronique | 41 |
| II.3.1.Modèle dérive-diffusion | 41 |
| II.3.2.Méthode Monte Carlo | |
| II.4.Conclusion | 45 |
| III.1.Introduction | |
| III.2.Paramètres cinétiques du matériau | |
| III.2.1.Diagramme de bandes | |
| III.2.2.Masse effective moyenne | |
| III 2.2 Trans de malassation | |
| III.2.3. Laux de relaxation | |
| III.2.3. Laux de relaxation III.3.Réponse à un champ électrique | |
| III.2.3. Laux de relaxation III.3.Réponse à un champ électrique III.3.1.Étude transitoire | 54 |
| III.2.3. Laux de relaxation III.3.Réponse à un champ électrique III.3.1.Étude transitoire III.3.2.Étude fréquentielle | 54 54 |
| III.2.3. Faux de refaxation III.3.Réponse à un champ électrique III.3.1.Étude transitoire III.3.2.Étude fréquentielle III.4.Conclusion. | |
| III.2.3. Faux de refaxation III.3.Réponse à un champ électrique III.3.1.Étude transitoire III.3.2.Étude fréquentielle III.4.Conclusion Conclusion général | |
| III.2.3. Faux de refaxation III.3.Réponse à un champ électrique III.3.1.Étude transitoire III.3.2.Étude fréquentielle III.4.Conclusion Conclusion général Bibliographie | |
| III.2.3. Faux de relaxation III.3.Réponse à un champ électrique III.3.1.Étude transitoire III.3.2.Étude fréquentielle III.4.Conclusion Conclusion général Bibliographie Glossaire | |

Sommaire

résumé

Introduction général

Introduction général

Introduction général

Un **semi-conducteur** est un matériau qui a les caractéristiques électriques d'un isolant, mais pour lequel la probabilité qu'un électron puisse contribuer à un courant électrique, quoique faible, est suffisamment importante. En d'autres termes, la électrique d'un semi-conducteur est intermédiaire entre celle des métaux et celle des isolants.

Les matériaux semi-conducteurs sont des isolants au zéro absolu qui conduisent l'électricité de façon limitée à température ambiante. Parmi leurs caractéristiques principales, ils peuvent être dopés grâce à des impuretés pour altérer leurs propriétés électriques.

Les semi-conducteurs sont classés selon leur composition chimique. Il existe des semiconducteurs élémentaires tels que le silicium(Si), le germanium (Ge) et l'étain gris (α -Sn), qui appartiennent tous au groupe 14 du tableau périodique (autrefois appelé groupe IVB et désigné ici comme groupe IV). Il existe également des semi-conducteurs composites, binaires, ternaires, quaternaires, voire quinaires, respectivement constitués de deux, trois, quatre ou cinq espèces chimiques différentes. Ces éléments peuvent être du groupe IV, comme dans le cas carbure de silicium, mais il est plus courant qu'il s'agisse d'éléments d'autres groupes, les plus courants étant les semi-conducteurs III-V, constitués d'éléments du groupe III (groupe13) (aluminium, gallium, indium, V etc.) et d'éléments du groupe (groupe15) (azote, phosphore, arsenic, antimoine, etc.).

Dans ce contexte, notre travail de mémoire propose, du point de vue de la simulation, de développer une approche théorique basée sur le modèle hydrodynamique permettant l'étude des oscillations collectives dans un canal semi-conducteur d'un transistor HEMT et de décrire le comportement aux fréquences T Hz d'un gaz électronique et d'étudier l'influence de différents paramètres physiques et technologiques sur les résonances de plasma (structure générale du dispositif, choix du matériau actif et polarisation). Les champs électriques longitudinal (axe drain-source) et transversal (axe grille-source) seront pris en compte. Le modèle hydrodynamique se présente comme un bon compromis entre le modèle dérive diffusion qui présente beaucoup d'approximations et la méthode Monte Carlo qui nécessite d'importants temps de calcul. Il présente à la fois l'avantage de requérir des temps de calcul très acceptables, tout en permettant l'analyse des phénomènes transitoires rapides dans des structures submicroniques complexes, c'est pourquoi c'est vers ce modèle que se porte notre choix.7

Introduction général

Dans ce même contexte et avant d'aborder la simulation de transistors HEMT, d'un point de vue technologique, la mise en place du modèle analytique nous mène tout droit au choix du matériau semi-conducteur utilisé comme un canal de transistor HEMT. Dans ce but, nous représenterons les propriétés physiques d'In Ga As et son utilité dans le domaine T Hz comme matériau semi-conducteur de haute mobilité électronique, dans lequel une onde de plasma peut être excitée par un signal T Hz détecté par une antenne soudée sur la grille ou le drain du HEMT.

Le travail de cette mémoire sera présenté de la manière suivante :

- Dans Le premier chapitre nous avons donné les notions fondamentales des semiconducteurs et la jonction PN ainsi que les différents types des semi-conducteurs.
- Dans le deuxième chapitre, nous présenterons le modèle hydrodynamique couplé avec l'équation de Poisson ainsi que la modélisation de la détection T Hz par les différentes électrodes du transistor HEMT.
- Le troisième chapitre sera consacré à la présentation des propriétés physiques de l'In Ga As.

I.1. Introduction

I.2. Conducteurs - Isolants - Semi-conducteurs

 Tableau I.1 : Exemple de semi-conducteurs [2]

I.3. Structure de l'état solide

Les matériaux solides se classent en deux grandes catégories qui sont :

- Les matériaux cristallins où les atomes sont rangés régulièrement aux nœuds d'un réseau périodique; la maille (ou motif) élémentaire se répète régulièrement
- Les matériaux amorphes où l'ordre n'est que local et non répété à "longue distance".

On distingue essentiellement quatre familles de solides cristallins :

- Les cristaux ioniques, par exemple le Na+ Cl- où les ions sont liés par attraction coulombienne. Aucun électron n'est libre ce qui rend ces cristaux isolants et très dur (la liaison est très solide).
- Les cristaux covalents (colonne IV : C, Si, Ge, Sn). Les quatre électrons périphériques sont mis en commun avec quatre voisins et établissent des liaisons de valence. Ces liaisons sont moins fortes que les liaisons ioniques et les propriétés des cristaux vont dépendre de la "force" de ces liaisons (C diamant est isolant, Sn est conducteur).
- Les métaux (Li, Na, K, Cu, Ag, Au) conducteurs électriques qui ont un électron libre par atome. Leur température de fusion est moins élevée que celle des cristaux covalents.
- Les cristaux moléculaires.

I.4. Système cristallin et réseau cristallin

Un cristal peut être représenté à partir d'une cellule de base qui est répétée périodiquement, formant ainsi le réseau cristallin. Selon la nature des opérations de symétrie qui laissent la structure cristalline invariante, on est amené à définir sept systèmes cristallins, parmi lesquels le système cubique.

I.5. Cristal cubique

La plupart des semi-conducteurs cristallisent selon un système cubique. Le système cubique comprend trois réseaux différents possibles, selon la disposition des atomes comme l'indique la figure (I.1)

- Cubique simple : les atomes sont aux sommets du cube (figure (I.1.a)).
- Cubique centré : identique au cubique simple mais avec un atome au centre du cube (figure (I.1.b)).
- Cubique face centrée : identique au cubique simple mais avec un atome au centre de chaque face (figure (I.1.c)).



Figure I.1.a. Cubique simple. b. Cubique centré. c. Cubique face centrée.



Figure I.2. Plans cristallographiques.

La figure (I.2) représente certains plans cristallographiques repérés par leur "indices de

Miller". La direction perpendiculaire au plan (h,k,l) se note [h,k,l].

I.5.1. Semi-conducteurs de la colonne IV (Ge, Si) - Réseau "diamant"

Les électrons d'un atome isolé prennent des valeurs d'énergie discrètes et chaque niveau d'énergie peut accueillir un nombre limité d'électrons. Ce nombre est égal à 2n2 où n correspond au numéro du niveau (couche) en partant du noyau. Les électrons se répartissent en occupant d'abord les niveaux les plus proches du noyau (ce qui correspond à l'énergie minimale).

Dans le cas du Silicium, qui a un numéro atomique Z égal à 14, il y aura 2 électrons sur la première couche (complète), 8 sur la seconde (complète aussi) et 4 sur la dernière qui n'est donc pas pleine puisqu'elle peut contenir jusqu'à 18 électrons. La figure (I.3.a) donne une représentation des niveaux d'énergie et des électrons qui les occupent. Cette représentation est simplifiée à la figure (I.3.b) en considérant seulement les quatre électrons "périphériques" de la couche externe (qui participeront aux liaisons entre atomes).



Figure I.3. Représentations de l'atome de Silicium faisant apparaître. a. Les niveaux d'énergie et électrons les occupant. b. Le dernier niveau d'énergie. c. Les quatre liaisons covalentes possibles.

On constate qu'un élément présente une grande stabilité quand il a huit électrons sur sa couche externe (structure des gaz rares), ce qui n'est pas le cas de l'atome de Silicium isolé.

Lors de la formation du cristal cet atome va "gagner" quatre électrons en formant des liaisons covalentes qui correspondent à la "mise en commun" de ses électrons périphériques avec les atomes voisins. Ainsi un atome de Silicium qui s'associe avec quatre autres atomes de Silicium "verra" huit électrons sur sa dernière couche. Une telle association est illustrée aux figures (I.4). On constate que si aucune liaison n'est brisée (par exemple à 0 K), il n'y a pas d'électrons libres, et donc le cristal est isolant.

Le système cubique dans lequel va ainsi cristalliser le Silicium, le Germanium (ainsi que C, Sn) est le réseau diamant constitué de deux réseaux cubiques faces centrées imbriqués (décalés du quart de la diagonale principale du cube).



Figure I.4. Représentation de l'association d'un atome de Silicium avec ses quatre voisins. a En projection plane. b. En trois dimensions.

I.5.2. Semi-conducteurs composés (III-V ou II-VI) - Réseau "Zinc-blende"

Un type de liaisons très proche de celui qui vient d'être décrit peut aussi se faire entre atomes de nature différente par exemple entre le Gallium (Z = 31) et l'Arsenic (Z = 33). La figure (I.5) donne la représentation en deux dimensions du semi-conducteur GaAs dans lequel un atome de Ga prend quatre atomes d'As comme voisins et l'As quatre atomes de Ga. En réalité, le cristal se construit à partir des ions Ga- et As+ qui ont tous quatre électrons périphériques.



Figure I.5. Semi-conducteur composé : GaAs.

Le réseau correspondant est celui de la blende (minerai de sulfure de zinc : ZnS) qui peut être considéré comme une variante du réseau diamant : pour GaAs, il est constitué de deux réseaux cubiques faces centrées (l'un de Ga et l'autre de As) imbriqués et décalés du quart de la diagonale principale. [2]

I.6. Bandes d'énergie

Les électrons d'un atome isolé prennent des niveaux discrets d'énergie (figure (I.3)), qui sont en fait constitués de sous-niveaux (ou sous-couches) ; mais lorsqu'on rapproche deux atomes ces niveaux (ou sous-niveaux) vont se dédoubler. En étendant ce raisonnement à N atomes, cette "dégénérescence" fait apparaître des bandes d'énergie permises, qui peuvent "s'interpénétrer" et se séparer à nouveau lorsque la distance interatomique diminue (cf. Fig. (I.6)), donnant des bandes d'énergie interdite, de largeur EG ("Gap").

Le tableau (I.2) donne quelques exemples de largeur de bande interdite ainsi que de distances interatomique.

| atome | EG (eV) | type de matériau | d (Å) |
|----------------|---------|------------------|-------|
| C (Carbone) | 5.5 | isolent | 3.567 |
| Si (Silicium) | 1.1 | semi-conducteur | 5.431 |
| Ge (Germanium) | 0.7 | semi-conducteur | 5.646 |
| Sn(Etain) | 0 | conducteur | 6.489 |

Tableau I.2. Exemple de valeurs du gap et de la distance interatomique ("constante du réseau"= arête du cube du réseau = $(4/3) \times$ distance au plus proche voisin).

La figure (I.6) illustre le cas des semi-conducteurs du groupe IV (cas du Silicium) : la bande supérieure est appelée "Bande de Conduction" et, à 0 K, ne contient pas d'électrons contrairement à la bande inférieure, appelée "Bande de Valence", qui contient 4N électrons (donc qui est la dernière bande pleine). Entre ces deux bandes se trouve une zone de largeur EG (en J ou en eV) interdite aux électrons et appelée "Bande Interdite" ou "Gap". Le fait que ces deux bandes (BC ou BV) soient entièrement pleines ou vides implique que la conduction électrique ne peut exister.



Figure I.6. Apparition de bandes de valence, de conduction et interdite avec la diminution de la distance interatomique pour un matériau de la colonne IV, quand on "rapproche" N atomes identiques.

Pour une température différente de 0 K un électron de la BV peut recevoir suffisamment d'énergie pour passer dans la BC (un "trou" apparaît alors dans la BV) et rendre possible la conduction électrique. Le matériau n'est plus isolant ; mais plus EG sera grand plus le nombre de "porteurs libres" (électrons dans la BC ou trous dans la BV) sera faible, et plus le matériau sera isolant. [2]

I.7. "Gap" direct ou indirect

Les courbes EC, V (rk) dites aussi "relations de dispersion" où EC est le bas de la bande de conduction, EV le haut de la bande de valence et rk le vecteur d'onde associé à un électron (quantité de mouvement $\vec{\mathbf{p}} = \mathbf{m}\vec{\mathbf{v}} = \hbar\vec{\mathbf{k}}$) font apparaître deux types de semi-conducteur : ceux pour lesquels minimum de EC et maximum de EV se produisent pour la même valeur de rk, que l'on appellera SC à gap direct, et les autres appelés SC à gap indirecte.



Figure I.7.a. SC à gap direct. b. SC à gap indirecte.

La nature du gap joue un rôle fondamental dans l'interaction du semi-conducteur avec un rayonnement électromagnétique (en particulier lumineux), et donc dans le fonctionnement des composants utilisés en optoélectronique. On peut remarquer, pour l'instant, que dans un SC à gap direct un électron du haut de la BV qui acquière une énergie EG passe dans la BC sans changer de quantité de mouvement ($\Delta p \ k = h\Delta = 0$) ce qui n'est pas le cas dans un SC à gap indirect.

On rappelle aussi que lors de toute transition entre niveaux d'énergie, les lois de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement doivent s'appliquer et que la quantité de mouvement associée à un photon :

$$p_{ph} = mc = \frac{mc^2}{c} = \frac{E_{ph}}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \hbar k_{ph}$$
(I.1)

Est typiquement 103 fois plus petite que celle correspondant aux variations Δk nécessaires dans un SC à gap indirect. Ainsi les photons ne peuvent pas y assurer seul le transfert de quantité de mouvement lors des transitions BC \leftrightarrow BV. [2]

I.8. Conduction par électron ou par trou. Masse effective. Densité d'états



Figure I.8. Transition d'un électron de la BV vers la BC.

On peut briser une liaison de valence si on apporte une énergie (thermique ou lumineuse) suffisante: on arrache ainsi un ou plusieurs électrons (précédemment engagés dans ces liaisons). Ceci revient, dans le modèle de bandes d'énergie utilisé, à faire passer ce ou ces électrons de la bande de valence à un état situé dans la bande de conduction (à un niveau dépendant de l'apport d'énergie) : l'électron est "libre" (il ne participe plus à une liaison cristalline) et peut, par contre, participer à la conduction électrique, voir figure (I.8). Il se comporte comme une particule "quasi-libre" dans le semi-conducteur car il y subit l'influence du réseau. On représente cette particule (électron) "quasi-libre" par une "quasi-particule" libre en lui affectant une masse "effective" mn différente de la masse m0 (0,91 10-30 kg) de l'électron libre dans le vide.



Figure I.9. Apparition d'un électron et d'un trou libre lors d'une rupture de liaison covalente.

Dans le même temps qu'apparaît un électron libre dans la bande de conduction (devenu libre en brisant une liaison), apparaît une case (place) vide dans la bande de valence (correspondant à une liaison non assurée) qui peut être occupée par un autre électron de la BV (participant auparavant à une autre liaison covalente). Ce phénomène est illustré à la figure (I.9). A cette place vide (qu'on appelle trou) est affectée une charge positive +q (son déplacement sera opposé à celui des électrons lors de l'application d'un champ électrique). La bande de valence étant toujours quasi-pleine (de N-1 électrons de valence), l'étude du mouvement des particules dans cette bande sera simplifiée en ne considérant que le mouvement du trou auquel on affectera une masse effective mp.

Au voisinage d'un extremum des bandes (BV ou BC), on peut approcher les relations de dispersion E(k) par un développement limité : par exemple au voisinage d'un minimum de la BC (appelé "vallée") on pourra écrire :

$$E(k) \approx E_{C} + 0 + \frac{1}{2} \frac{d^{2}E}{dk^{2}} k^{2} + ...$$
 (I.2)

Ou, ce qui est équivalent avec la quantité de mouvement :

 $\vec{p} = \hbar \vec{k}$

$$E(p) - E_C \approx \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial p^2} p^2 = \frac{p^2}{2m_n}$$
(I.3)

(Approximation "parabolique" de la bande de conduction) ; or p mn22 est l'énergie cinétique d'un électron "libre". Ainsi l'énergie supplémentaire (par rapport à EC) des électrons est une énergie cinétique et on déduit par identification que la masse effective des électrons dans la vallée considérée est donnée par :

$$\mathbf{m}_{\mathbf{n}} = \left[\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial \mathbf{p}^2}\right]^{-1}$$
 (I.4)

Qui est l'inverse de la courbure de E(p). [2]

I .9. Les matériaux III-V

Les matériaux III-V sont constitués des éléments des colonnes III et V de la classification périodique des éléments. Ainsi, de nombreux composés binaires peuvent être réalisés. Des semi-conducteurs binaires comme l'arséniure de gallium (Ga As), l'antimoniure de gallium (Ga Sb), le phosphure d'indium (In P), l'arséniure d'indium (In As), l'arséniure d'aluminium (Al As), mais également les alliages ternaires et quaternaires qui en découlent, présentent des propriétés très intéressantes pour les applications hyperfréquences. Ces alliages ternaires et quaternaires sont réalisés par substitution partielle de l'un des éléments par un élément de la même colonne. On sait, par exemple, obtenir des alliages du type $Ga_xAl_{1-x}As$ ou du type $In_{1-x}Ga_xAs$. Ces alliages peuvent, comme dans le cas de l' $In_{0.53}Ga_{0.47}As$, donner des matériaux à très haute mobilité qui pourraient constituer, par exemple, la zone active de dispositifs capables de fonctionner à très hautes fréquences.

Le diagramme de la **Figure (I.10)** représente les variations de la largeur de bande interdite en fonction du paramètre cristallin à qui varie lui-même avec la composition. Les points du graphe figurent la position des composés binaires stœchiométriques, et les lignes représentent l'évolution du gap $\mathbf{\varepsilon}$ g et du paramètre cristallin a en fonction de la composition des alliages ternaires. Certaines lignes présentent un point anguleux qui dénote une transition entre un gap direct et un gap indirect.

diagramme est très important parce qu'il permet de connaître la composition de tout alliage ternaire susceptible d'être déposé en couche mince, par épitaxie, sur un substrat binaire comme Ga As ou In P. On peut ainsi remarquer que les matériaux III-V offrent une grande variété de compositions permettant de modifie leurs propriétés électroniques. Sur le diagramme, nous avons mis en évidence un matériau sur lequel se porte notre étude : l' $In_{0.53}Ga_{0.47}As$. Nous remarquons que ce matériau à très haute mobilité appartient à la filière de l'In P. Aujourd'hui, il existe déjà des transistors HEMT à canal $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ [3].



Figure .I.10: – Gap et paramètre cristallin des alliages de composés III-V. Les points du graphe figurent la position des composés binaires stœchiométriques, et les lignes représentent l'évolution du gap g et du paramètre cristallin a en fonction de la composition des alliages ternaires

I .10. Le transistor HEMT

Depuis de nombreuses années, le silicium est à la base de la plupart des composants à semiconducteurs, mais dans les dernières décennies les composants à base de matériaux III-V ont attiré l'intérêt des chercheurs. Certains systèmes électroniques parmi les plus courants, comme les téléphones portables, les récepteurs satellites, les radars pour véhicules, etc. utilisent déjà ces matériaux qui garantissent d'excellentes propriétés en termes de puissance à haute fréquence et faible bruit.

La possibilité de combiner deux, trois ou plusieurs éléments de la table périodique pour former déférents alliages III-V fait de ces matériaux des protagonistes dans le domaine de l'électronique. Le Ga As, l'In P, le Ga N, le Zn O, le Mg O, le Ga As Sb, l'In Ga As, l'In As, l'Al Ga N ou bien l'In Ga N en sont des exemples. Le semi-conducteur Si Ge, bien que très prometteur, n'a pas la même étendue d'applications que les semi-conducteurs III-V. Les matériaux III-V couvrent une grande partie du spectre et ouvrent la voie à une multitude d'applications qui s'étendent des télécommunications à la technologie biomédicale [4]. Les progrès récents utilisant les semi-conducteurs III-V et de nouveaux concepts, comme par exemple les puits quantiques avec une mobilité très élevée et les ondes de plasma, pourraient mener à de nouveaux émetteurs et détecteurs T Hz.

Une nouvelle source potentielle de radiations T Hz est constituée par les nano-transistors ayant Une longueur de grille inférieure à 100 nm, condition nécessaire pour satisfaire la condition de transport balistique. Le composant le plus prometteur est le transistor HEMT, dont la structure typique est schématisée sur la **Figure (I.11)** [5].

| Cap Layer | Petit gap dope |
|----------------------|-------------------------------------|
| Couche Schottky | Grand gap non dopé |
| Couche Donneuse | Grand gap dopé ou plan de dopage |
| Espaceur | Grand gap non dopé |
| Canal | Petit gap non dopê |
| Couche Tampon | Grand gap non dopé |
| Substrat semi-isolan | t |
| | |

Figure .I.11: Structure d'un HEMT

Généralité sur les semi-conducteurs

Les premiers transistors HEMT sont apparus dans les années 1980. Ces derniers étaient alors connus sous diverses appellations : TEGFET (Two-dimensionel Electron Gas Field Effect Transistor), MODFET (Modulation Doped Field Effect Transistor), HFET (Heterojunction Field Effect Transistor). Pour mieux comprendre ce qu'est un HEMT, observons sa structure. Un HEMT est essentiellement constitué de trois matériaux différents : le substrat, un matériau à grand gap et un matériau à petit gap. On retrouve les électrodes de source, de grille et de drain communes aux transistors à effet de champ. Cette structure permet la montée en fréquence grâce à la création d'un gaz très mobile dans un canal non intentionnellement dopé. Les parties principales d'un HEMT sont, comme le montre la **Figure (I.11)**:

- Le cap layer ou couche superficiel. Cette couche permet de réaliser les contacts ohmiques de source et de drain. Elle est constituée d'un matériau de faible bande interdite et est fortement dopée, et cet afin de diminuer la valeur des résistances de contact.
- La couche Schottky. C'est une couche à grand gap non dopée destinée à réaliser le contact Schottky de grille.
- L'espacer. Cette couche permet de réaliser la séparation entre les électrons libres de la couche donneuse et les électrons du canal.
- Le canal. Le canal, constitué d'un matériau à petit gap non dopé, est la couche qui reçoit le gaz bidimensionnel d'électrons.
- La couche tampon. Elle permet d'améliorer le confinement des électrons dans le canal en réduisant la fuite des porteurs vers le substrat.
- Le substrat. Matériau binaire identifiant la filière (Ga As, In P, Ga Sb).

Dans le cas du HEMT, la juxtaposition d'un matériau à grand gap et d'un matériau à petit gap implique la création d'une discontinuité de la bande de conduction à l'interface entrelesdeuxmatériaux.Cettehétérojonctionentraînelaformationd'unpuitsdepotentiel dans le matériau à petit gap où sont transférés et s'accumulent les électrons provenant de la couche donneuse. On appelle gaz d'électrons bidimensionnel (2DEG : 2 Dimentional Electron Gas), l'accumulation des électrons dans ce puits.

I.11. Interaction rayonnement - semi-conducteur

L'interaction du rayonnement avec les électrons d'un semi-conducteur se manifeste selon trois processus (**Figure I.12**) :

I.11.1.Absorption fondamentale

Lorsque le photon absorbé provoque un saut d'électron d'un état occupé de la bande de valence vers un état vide de la bande conduction, on dit qu'il y a absorption.

I.11.2. Emission spontanée

Lorsqu'un électron de la bande de conduction retombe spontanément sur un état vide de la bande de valence, il y'a émission spontanée.

I.11.3. Emission stimulée

Le photon absorbé induit la transition d'un électron de la bande de conduction vers un, état vide de bande de valence avec émission d'un photon, cela induit à la recombinaison radiative d'une paire électron-trou. Le photon émis a même phase et même direction que le photon incident ; l'émission est dite stimulée.



Figure .I.12: Interaction rayonnement - semi-conducteur [6] [7]

I .12. Semi-conducteur dopé ou non dopé

En générale, les semi-conducteurs sont classés en deux groupes [8] :

-Les semi-conducteurs intrinsèques

- Les semi-conducteurs extrinsèques

I.12.1. Les semi-conducteurs intrinsèques

Les semi-conducteurs intrinsèques sont des matériaux, en principe chimiquement purs et structurellement parfaits. Leur caractéristique principale est qu'a toute température, les concentrations d'électrons dans la bande de conduction et des trous dans la bande de valence sont égales 5 une égalité entre les concentrations n et p. Pour ce cas particulier, on définit une concentration intrinsèque ni (égale aux concentrations n et p) pour laquelle on montrera plus loin qu'elle est donnée par la relation [9] :

$$n = p = ni (T) = At^{3/2} exp (-EG/2Kt)$$
 (I.5)

Où A est une constante spécifique du matériau [9].

I .12.2. Les semi-conducteurs extrinsèques :(dopage)

Les Semi-conducteur extrinsèque, au contraire sont des matériaux dopés par des impuretés, dont la nature et la concentration de ces impuretés provoquent un déplacement du niveau de fermi .selon le porteur de charge majoritaire nous aurons un semi-conducteur de type [8] :

-N, si ce sont des électrons(e) dans la bande de conduction.

-P si, ce sont des trous (p) dans la bande de valence 1-3-2-1-

I .12.2.1. Semi-conducteur dopé n

Pour un tel matériau, des atomes (ou impuretés) de type donneur (d'électrons) ont été introduits (en général en faible quantité) afin de privilégier la conduction par électrons plutôt que par trous. Les atomes peuvent être de la colonne V si le cristal initial est constitué d'atomes de la colonne IV. Prenons par exemple le cas du silicium dans lequel on introduit de phosphore [9]. On associe au phosphore un niveau donneur E_d dans la bande interdite trie proche de la bande de conduction. L'intérêt est que pour T= 0k, les atomes de phosphore sont ionisés ce que revient à faire passer l'électron du niveau donneur a la bande de conduction.la concentration de

donneurs sera donc supérieure à la concentration d'accepteur (N d-Na) ce qui correspond à la définition d'un semi-conducteur dopé N. A la température ambiante pratiquement tous les donneur sont ionisés ; la densité de porteurs libres du semi-conducteur

Sera [10] :

$$n \approx N_{d}, p = \frac{n_i^2}{N_d}$$
 (I.6)

La densité des donneurs ionisés N_d^+ s'écrit :



Figure .I.13: Libération d'un électron par l'atome de phosphore et schéma des bandes 1-3-2-

I.12.2.2. Semi-conducteur dopé p

Cette fois les impuretés sont de type accepteur d'électrons ce qui correspond aux atomes de la colonne III pour un cristal constitué d'atomes de la colonne IV. La figure (I.14) donne un aperçu de ce qui se passe pour un cristal de silicium dans lequel on a introduit des atomes de bore. L'association avec ses quatre voisins confère à l'atome de bore sept électrons sur la couche externe ce qui est insuffisant pour le rendre stable et il est alors tenté d'en subtiliser un

Généralité sur les semi-conducteurs

à un proche voisin qui lui-même peut en prendre un à un de ses voisins et ainsi de suite .La densité de porteurs libres du semi-conducteur sera [10] :

$$n \otimes Na, p = \frac{n_i^2}{N_a}$$
(**I.8**)

La densité d'accepteurs Na - S'écrit :

$$N_{a}^{-} = N_{a} \frac{N_{a}}{1 + \frac{1}{4} \exp\left(\frac{E_{a} - E_{f}}{KT}\right)}$$
(I.9)



Figure .I.14: Libération d'un trou par l'atome de bore et schéma des bandes

I.13.Conclusion

Dans ce chapitre nous avons donné les notions fondamentales des semi-conducteurs et les différents types des semi-conducteurs.

II.1.Introduction

L'objectif général de la micro- et de la nanoélectronique est de concevoir et de réaliser des composants de plus en plus petits afin de pouvoir fabriquer des circuits logiques ou analogiques de plus en plus denses en terme d'intégration, de plus en plus rapides en terme de vitesse de fonctionnement et de plus en plus complexes pour permettre des applications de plus en plus poussées. Cette évolution exponentielle de l'électronique est accompagnée par une thématique de recherche indispensable au développement technologique, constituée par les activités de modélisation et de simulation du transport électronique dans les dispositifs.

La modélisation nous permet de prédire le fonctionnement d'un dispositif et valider des résultats d'une expérience, et de comprendre les phénomènes physiques mis en jeu. Elle donne l'accès à une quantité de données et de grandeurs inaccessibles par l'expérience : par exemple, la valeur potentielle électrique en un point quelconque du dispositif. La modélisation permet aussi d'optimiser le fonctionnement des dispositifs microélectroniques. On peut alors jouer sur les paramètres physiques intrinsèques et extrinsèques afin d'imaginer et de proposer des structures potentiellement plus efficaces.

La modélisation des transistors HEMT avec un canal de l'ordre d'une dizaine de nanomètres fonctionnant à hautes fréquences est inévitable. Dans cette optique, ce chapitre a pour but de justifier et de décrire notre modèle hydrodynamique pseudo-2D qui sera couplé avec les équations du transport électronique 1D dans le but de calculer et de considérer l'effet du champ électrique. Il s'agit d'une équation de Poisson 1D tenant compte de l'effet de la tension transversale (tension de polarisation sur la grille du HEMT).

II.2.Phénomène de transport électronique

Dans cette section, nous rappelons quelques généralités sur les équations microscopiques de type cinétique. Les travaux présentés dans cette thèse ont pour point de départ des équations cinétiques classiques (de type Boltzmann).

II.2.1.Equation de Boltzmann

La fonction de distribution f(r, k, t) est une quantité très importante en physique statistique pour la description d'un système de particules quelconque [11]. Elle décrit la probabilité qu'une
Phénomène et modalisation de transport

particule du système étudié se trouve à la position r à l'instant t tout en ayant une vitesse U(k). La fonction f(r, k, t) permet une description complète de l'état macroscopique du système, par suite elle permet de calculer toutes les quantités physiques qui nous intéressent. La fonction de distribution d'une particule donne accès à la densité locale, tout en intégrant f(r, k, t) sur l'espace des vecteurs d'ondes k [12] :

$$n(r,t) = \int_{k} f(r,k,t) dk \qquad (II.1)$$

Nous supposons que la fonction $\chi(r, k, t)$ décrit une propriété physique d'une particule localisée à la position r à l'instant t et ayant une vitesse v(k), la valeur moyenne de $\chi(r,k,t)$ est donnée par [12] :

$$\chi(r,k,t) = \frac{\int_{k}^{k} f(r,k,t)\chi(r,k,t)dk}{\int_{k} f(r,k,t)dk}$$
(II.2)

En remplaçant $\int_{k}^{\cdot} f(r, k, t) dk$ par la densité n(r, t) et à titre d'exemple, en supposant que la fonction χ représente la vitesse v, l'équation de la vitesse moyenne locale peut être exprimée de la façon suivante [15] :

$$D(r,t) = \frac{\int_{k} f(r,k,t) \omega dk}{n(r,t)}$$
(II.3)

Commençons par ignorer la possibilité que des collisions aient pu se produire entre $t \rightarrow dt$ et t, et nous corrigerons cette omission plus tard. Si aucune collision ne s'était produite, la force s'exerçant sur une particule se réduirait à la force extérieure F. Dans le cas d'une particule de charge q en présence de champs extérieurs électrique et magnétique E (r.t) et H(r, t), F est la force de Lorentz.

Les coordonnées r et k de chaque électron évolueraient alors d'après les équations du mouvement semi-classiques [13] :

$$\dot{r} = v(k)$$
 $\hbar \dot{k} = q \frac{E(r,t) + v \times H(r,t)}{c} = F$ (II.4)

Puisque dt est infinitésimal, on peut trouver la solution explicite de ces équations au premier ordre en dt : un électron en (r, k) à l'instant t doit avoir été en $(r-\upsilon(k)dt, k-Fdt/h)$ a l'instant $t \rightarrow dt$. En l'absence de collisions, c'est le seul point d'où les électrons en r, k ont pu provenir, et chaque électron en ce point atteindra le point r, k. Par conséquent [13] :

$$f(r,k,t) = f(r-\iota(k)dt, k-Fdt/\hbar t-dt) \quad (II.5)$$

Pour prendre en compte les collisions, nous devons ajouter deux termes correctifs à l'équation (3.5). Le membre de droite est faux car il suppose que tous les électrons vont de $(r-\upsilon(k)dt,k-Fdt/h)$ en (r, k) pendant dt, en ignorant le fait que certains électrons sont déviés par des collisions. Il est également faux car il ne compte pas les électrons qui se trouvent en (r, k) à l'instant t non pas à cause de leur mouvement sans entrave depuis l'instant $t \rightarrow dt$, mais à cause d'une collision entre $t \rightarrow dt$ et t. En ajoutant ces corrections, nous développons le membre de gauche (3.5) au premier ordre en dt, l'équation (II.5) se réduit alors, à la limite $dt \rightarrow 0$, à [13] :

$$\frac{\partial f(r,k,t)}{\partial t} + \upsilon \frac{\partial f(r,k,t)}{\partial r} + F \frac{1}{\hbar} \frac{\partial f(r,k,t)}{\partial k} = \left(\frac{\partial f(r,k,t)}{\partial t}\right)_{coll}$$
(II.6)

L'approximation du temps de relaxation consiste à supposer que l'effet des collisions est toujours de rétablir un équilibre local décrit par la fonction de distribution $f_0(r,k,t)$. Nous supposons en plus que, si la particule est perturbée à partir de l'équilibre local, la distribution

Phénomène et modalisation de transport

correspondante f(r, k, t) est déférente de $f_0(r,k,t)$. Par conséquent, l'effet des collisions est simplement de rétablir la fonction de distribution f(r, k, t) à sa valeur d'équilibre $f_0(r,k,t)$, exponentiellement avec un temps de relaxation τ , qui est de l'ordre du temps entre deux collisions consécutives des particules. Cette assertion est décrite par l'expression suivante [14] :

$$\left(\frac{\partial f(r,k,t)}{\partial t}\right) \approx -\frac{f(r,k,t) - f_0(r,k,t)}{\tau}$$
(II.7)

Pour que cette approximation soit valable, il faut que τ soit indépendant de la cause de la variation de f et la perturbation qui conduit le système à un état hors d'équilibre est faible. On injecte l'é q. (**II.7**) dans l'é q. (**II.6**), et l'on obtient l'équation de Boltzmann des porteurs soumis à un champ électrique, linéarisée dans l'espace de vitesse et dans l'approximation du temps de relaxation [14] :

$$\frac{\partial f(r,k,t)}{\partial t} + \upsilon \frac{\partial f(r,k,t)}{\partial r} + \frac{qE}{m^*} \frac{\partial f(r,\upsilon,t)}{\partial \upsilon} = -\frac{f(r,k,t) - f_0(r,k,t)}{\tau}$$
(II.8)

C'est la célèbre équation de Boltzmann. Les termes du membre de gauche sont souvent appelés termes de dérive, et le terme du membre de droit terme de collision. Cette équation est au cœur de la théorie du transport dans les solides.

II.2.2 Equations des moments

L'approximation du temps de relaxation permet de simplifier l'équation intégro-différentielle de Boltzmann de façon à la transformer en la forme de l'équation (**II.8**), qui est une équation simple aux dérivées partielles. Mais même avec cette simplification, l'équation de Boltzmann demeure compliquée et sa résolution non triviale. Or, la simulation des dispositifs microélectroniques a pour but principal d'étudier les principales grandeurs physiques qui décrivent leur comportement : la densité de porteurs de charges n, leur vitesse v, leur énergie,

Phénomène et modalisation de transport

la densité de courant J, ainsi que le champ électrique E. En d'autres termes, pratiquement, le calcul de la fonction de distribution ne nous intéresse pas en soi. Par suite, au lieu de chercher des moyens pour calculer la fonction de distribution, on contourne le problème en trouvant à partir de l'équation de Boltzmann des relations auxquelles satisfont les principales grandeurs physiques n, v, J et E. Ces équations s'appellent les équations des moments.

Pour les obtenir, on peut mettre en œuvre une procédure de développement systématique proposée par S. Chapman en 1916 et D. Eriskog en 1917 [14], qui consiste à multiplier l'équation de Boltzmann par la grandeur U^n , où m est un entier. Nous utiliserons successivement deux ordres d'approximation de la solution. L'approximation d'ordre zéro est une distribution d'équilibre local. Les équations des moments sont alors celles d'un fluide parfait, c'est-à-dire d'un fluide dans lequel les processus dissipatifs sont négligés. Dans l'approximation d'ordre un, on obtient les équations des moments d'un fluide visqueux, dans lesquelles interviennent les coefficients de transport.

II.2.3.Équations de bilan local

On peut déduire de l'équation de Boltzmann des équations de bilan local pour chacun des invariants collisionnes. Il s'agit de la masse, de la composante de la quantité de mouvement et de l'énergie cinétique.

Afin que nous arrivions à l'équation de continuité, nous intégrons les deux membres de l'équation de Boltzmann sur la vitesse :

$$\int \frac{\partial f}{\partial t} d\upsilon + \frac{\partial}{\partial r} \int \upsilon f d\upsilon + \frac{q \cdot E}{m^*} \int \frac{\partial}{\partial \upsilon} f d\upsilon = \frac{\int f d\upsilon - \int f_0 d\upsilon}{\tau}$$
(II.9)

La fonction de distribution s'annulant lorsque $\mathcal{D} \rightarrow +\infty$, en d'autre termes,

$$\int \frac{\partial}{\partial \nu} f d\nu = 0 \tag{II.10}$$

D'après les équations (**II.9**) et (**II.10**) nous obtenons ainsi l'équation du moment d'ordre 0 :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial n D}{\partial r} = \frac{n - n_0}{\tau_n}$$
(II.11)

O où n0 est la densité d'électrons à l'équilibre thermodynamique et \mathcal{T}_n le temps de relaxation de la densité électronique. S'il n'y a pas de génération électronique, alors le terme $n-\eta_0=0$, et dans le cas où des processus de génération-recombinaison sont présents, $n-\eta_0=G-R$ où G et R représentent respectivement les taux de génération et de recombinaison. De façon plus générale, en multipliant les deux membres de l'équation de Boltzmann par un invariant collisionne $\chi(r, v, t)$ et en intégrant ensuite sur la vitesse, on obtient

$$\int \chi(r,\upsilon,t) \left(\frac{\partial(r,\upsilon,t)}{\partial t} + \frac{\partial(r,\upsilon,t)}{\partial r} + \frac{qE}{m_{t}^{*}} \frac{\partial(r,\upsilon,t)}{\partial \upsilon} \right) d\upsilon = \int \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \chi d\upsilon$$
(II.12)

On peut réécrire l'équation (II.12) sous la forme équivalente :

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \chi f d\upsilon - \int f \frac{\partial \chi}{\partial t} d\upsilon + \frac{\partial}{\partial r}\int \chi \upsilon f d\upsilon - \int \upsilon f \frac{\partial \chi}{\partial r} d\upsilon + \int \frac{\partial}{\partial \upsilon} (\chi \frac{qE}{m^*} f) d\upsilon - \int \frac{qE}{m^*} f \frac{\partial \chi}{\partial \upsilon} d\upsilon = \int \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} \chi d\upsilon \quad (\mathbf{II.13})$$

Phénomène et modalisation de transport

La fonction de distribution f tend vers 0 lorsque la vitesse v tend vers l'infini (comme la vitesse électronique ne peut jamais être infinie, la probabilité d'occupation d'un état par une particule dont ça vitesse tend vers l'infini est nul), le cinquième terme du premier membre de l'équation (**II.13**) est nul tout en utilisant les notations mentionnées dans les équations (**II.1**), (**II.2**), et (**II.3**). On a donc le théorème général de bilan suivant :

$$\frac{\partial}{\partial t}(n\overline{\chi}) - n\frac{\partial\overline{\chi}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t}(n\overline{\chi}t) - nt\frac{\partial\overline{\chi}}{\partial t} + n\frac{q \cdot E}{m^*}\frac{\partial\overline{\chi}}{\partial t} = \frac{\overline{\chi} - \chi_0}{\tau_{\chi}}n$$
(II.14)

On introduit alors l'équation de continuité du courant (**II.11**) et, en développant correctement, on arrive à l'équation du moment χ :

$$\frac{\partial \overline{\chi}}{\partial t} + \overline{\upsilon} + \frac{\partial \overline{\chi}}{\partial r} + \frac{1}{n} \frac{\partial}{\partial r} \left[n \left(\overline{\upsilon \chi} - \overline{\upsilon \chi} \right) \right] + \frac{q \cdot E}{n^*} \frac{\partial \overline{\chi}}{\partial \upsilon} = \frac{\overline{\chi} - \chi_0}{\tau_{\chi}} n$$
(II.15)

Remplaçons à présent le moment générique χ par le moment d'ordre 1, c'est à dire par v. Alors :

$$\frac{\partial \overline{\upsilon}}{\partial t} + \overline{\upsilon} \frac{\partial \overline{\upsilon}}{\partial r} + \frac{1}{n} \frac{\partial}{\partial r} \left[n(\overline{\upsilon^2} - \overline{\upsilon^2}) \right] + \frac{q \cdot E}{nt} = \frac{\overline{\upsilon}}{\tau_{\upsilon}}$$
(II.16)

Où T_{ν} est le temps de relaxation de la vitesse. L'équation relative au moment d'ordre 1 (**II.16**) est appelée équation de conservation de la vitesse.

Enfin, si l'on pose que

$$\chi = C = \frac{1}{2}m^* \upsilon^2 \qquad (II.17)$$

La méthode des moments appliquée à l'ordre 2 nous donne :

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + \overline{\upsilon} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial r} + \frac{1}{n} \frac{\partial}{\partial r} \left[n \left(\overline{\upsilon} \mathcal{E} - \overline{\upsilon} \mathcal{E} \right) \right] + \frac{q \cdot \mathbf{E}}{m^*} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \upsilon} = \frac{\overline{\mathcal{E}} - \mathcal{E}_0}{\tau_{\mathcal{E}}} n \qquad (II.18)$$

L'équation du troisième moment, ou équation de la conservation de l'énergie s'exprime alors comme

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + \bar{\upsilon} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial r} + \frac{1}{n} \frac{\partial}{\partial r} \Big[n \Big(\bar{\upsilon} \mathcal{E} - \bar{\upsilon} \mathcal{E} \Big) \Big] + q \cdot E \bar{\upsilon} = \frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_0}{\tau_{\mathcal{E}}} n \qquad (II.19)$$

Où τ est le temps de relaxation de l'énergie et 0 l'énergie des électrons à l'équilibre. Les équations de moments telles que l'équation de continuité, l'équation de la conservation de la vitesse et l'équation de la conservation de l'énergie, peuvent être abrégées dans l'ensemble d'équations suivantes : 0

$$\begin{bmatrix}
\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial n\bar{\upsilon}}{\partial r} = \frac{n - n_0}{\tau_n} \\
\frac{\partial \bar{\upsilon}}{\partial t} + \bar{\upsilon}\frac{\partial \bar{\upsilon}}{\partial r} + \frac{1}{n}\frac{\partial}{\partial r}\left[n(\bar{\upsilon}^2 - \bar{\upsilon}^2)\right] + \frac{q \cdot E}{m^*} = \frac{\bar{\upsilon}}{\tau_{\upsilon}} \\
\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + \bar{\upsilon}\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial r} + \frac{1}{n}\frac{\partial}{\partial r}\left[n(\bar{\upsilon}\mathcal{E} - \bar{\upsilon}\mathcal{E})\right] + q \cdot E\bar{\upsilon} = \frac{\bar{\mathcal{E}} - \mathcal{E}_0}{\tau_{\varepsilon}}n$$
(II.20)

II.2.4.Équation de Poisson

Dans le plus simple des cas, les porteurs des charges sont soumis à un champ électrique constant. Mais dans les composants micro-électroniques réels qui constituent le cadre de notre travail, les champs électriques aux quels sont soumises les particules n'est pas constant: ils varient dans l'espace (le canal du HEMT) et dans le temps, ce qui engendre des fluctuations, comme nous allons voir dans le chapitre ??, et dépendent fortement des conditions aux limites. En même temps, le champ électrique provoque le déplacement des électrons et induit une modification de leur distribution spatio-temporelle. Donc, il existe un lien étroit entre les expressions des moments (c'est à dire l'équation de Boltzmann) et le champ électrique dont il faut nécessairement rendre compte lors d'une étude du transport électronique.

Cela se fait par le biais de l'équation de Poisson.

Celle-ci découle des équations de Maxwell et plus particulièrement du théorème de Gauss local énoncé par la relation

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon}$$
 (II.21)

On peut écrire que la déférence de potentiels électriques V est fonction du champ électrostatique, nous avons alors

$$E = -\nabla V \qquad (II.22)$$

Le champ électrostatique E indique la direction de la plus rapide décroissance du potentiel électrostatique V. En remplaçant le champ électrostatique E dans la forme locale du théorème de Gauss, nous obtenons [15] :

$$\nabla^2 \cdot V = -\frac{\rho}{\varepsilon} \tag{II.23}$$

Cette dernière équation est dite de Poisson et elle relie le potentiel à la densité de charges ρ qui est donnée par [15] :

$$\rho = q[n(r,t) - N_D(r)] \qquad (II.24)$$

Où n(r, t) est la concentration des porteurs et $N_D(r)$ la concentration des atomes de dopage. La résolution de l'équation de Poisson ou l'équation de Laplace associée aux conditions aux limites nécessite l'utilisation de méthodes de résolutions numériques dont une description assez exhaustive est donnée dans la référence [16].

II.3.Modélisation du transport électronique

Dans la plupart des applications, il est très délicat de mettre en œuvre des simulations numériques des équations cinétiques à peu de frais. Pour cette raison, dès les années 1950 [17] on a cherché à développer des modèles approchant la réalité physique suffisamment pour donner des informations précises sur les systèmes modélisés, et qui soient moins coûteux numériquement que les modèles cinétiques. Par analogie avec la dynamique des gaz, des modèles de type dérive-diffusion ou hydrodynamique ont successivement vu le jour pour rendre compte du comportement du gaz d'électrons dans des semi-conducteurs. Dans la section présente, nous faisons une description non-exhaustive des modèles de simulation du transport électronique dans les dispositifs électroniques.

II.3.1.Modèle dérive-diffusion

Pour mieux comprendre le développement du modèle collisionne, nous allons dans ce paragraphe détailler la dérivation du modèle dérive-diffusion (DD) bien connu [13,19]. Considérons un gaz d'électrons dans un domaine de l'espace Ω (où Ω peut éventuellement être l'espace réel), soumis à un potentiel électrique V supposé donner. Les équations de DD décrivent l'évolution au cours du temps d'une quantité macroscopique : la densité électronique n(r, t) qui est une fonction du temps t et de la position r.

Phénomène et modalisation de transport

Si l'on note j(r, t) le flux de particules en un point r et à l'instant t, la conservation de la masse impose que la variation spatiale de ce flux soit égale à la variation temporelle de la densité, ce qui s'exprime par l'équation de continuité suivante :

$$\frac{\partial n(r,t)}{\partial t} + \frac{\partial j(r,t)}{\partial r} = 0$$
 (II.25)

Pour fermer le système d'équations DD, il reste à trouver une relation supplémentaire entre la densité de courant j et la densité n. Intuitivement, il semble clair que, du fait des interactions (répulsion électrostatique, collisions), les électrons auront tendance à fuir les zones de forte densité pour gagner les zones de faible densité. Ainsi, si les particules, à un instant donné, se répartissent dans l'espace selon un gradient de densité, le courant sera vraisemblablement dirigé selon le sens opposé à ce gradient. De même, les électrons sont accélérés par la force électrique, ce qui se traduit à l'échelle macroscopique par un mouvement de dérive du gaz d'électron dirigé dans le sens de cette force. Ceci s'exprime précisément selon loi de Fick [15]:

$$j(r,t) = -D\left(\frac{\partial n(r,t)}{\partial r} - n(r,t)\frac{\partial V}{\partial r}\right)$$
(II.26)

Où, d'après les considérations qui précédent, la matrice de diffusion D doit être positive. Son expression exacte dépend de la physique du problème considéré (en l'occurrence, du type d'interactions qui entraînent la diffusion, collisions, etc.).

Nous pouvons arriver aux équations DD (II.25) et (II.26) à partir de l'ensemble d'équations (II.20) en ne considérant que les moments d'ordre0etd'ordre1.Latroisièmeéquation de moment n'est pas prise en considération dans ce modèle et l'on suppose que l'énergie des particules (égale à $3K_BT_e/2$, où K_B est la constante de Boltzmann et T_e la température des particules) est constante quelle que soit la valeur du champ électrique local.

La théorie mathématique du modèle de DD dans le cas des semi-conducteurs est traitée dans ses grandes lignes par P.A. Markowich et Siegfried Selberherr dans les ouvrages donnés en références [20,21].

Le modèle de DD s'intéresse uniquement à la valeur moyenne des paramètres physiques: c'est donc un modèle macroscopique. La première approximation supposée, c'est à dire celle qui considère l'énergie électronique comme constante, limite fortement l'application d'un tel modèle dès lors que l'on s'intéresse, comme c'est le cas dans ce travail, à l'étude des phénomènes physiques rapides (de l'ordre de la picoseconde) dans des dispositifs submicroniques dans lesquels on doit considérer le phénomène d'électrons chauds.

II.3.2.Méthode Monte Carlo

La méthode Monte Carlo (MC) a été introduite en physique de la matière condensée par Metropolis et al. en 1953 [22]. Elle est généralement utilisée pour traiter le problème du transport électronique.

Elle porte ce nom parce qu'elle est basée sur l'utilisation d'un nombre aléatoires : ses simulations reposent sur une description en terme de position et de quantité de mouvement d'un ensemble de particules.

La méthode MC appliquée à notre domaine consiste à décomposer la trajectoire d'une particule en un grand nombre de séquences. Chaque séquence comprend un vol libre et une collision [23,24]. Pour cela, on définit l'état initial (position et vitesse) à t_0 de la particule, en général de façon aléatoire, puis on tire un premier nombre r_1 qui détermine la durée t_1 .



Figure II.1 : Organigramme d'une simulation Monte Carlo appliquée à l'étude du transport électronique dans les semi-conducteurs.

Phénomène et modalisation de transport

Entre les instants 0 et t_1 , la particule suit une trajectoire déterminée par les lois de la mécanique classique, ce qui permet de déterminer sa position et sa vitesse. Ensuite, plusieurs types de collision sont possibles, avec des probabilités déférentes : un notre nombre aléatoire t_2 sélectionne la collision que subit la particule. On répète cette séquence un grand nombre de fois.

L'organigramme de la **figure II.1**décrit le déroulement typique d'une simulation MC appliquée à l'étude du transport électronique dans un semi-conducteur. Les références [22–24] décrivent de façon plus détaillée cette méthode.

Le principal avantage de la méthode de MC est que, à chaque instant, la vitesse et l'énergie de chacun des porteurs de charges sont connues et qu'elle permet, de ce fait, l'extraction de n'importe quel paramètre de transport, qu'il s'agisse de la vitesse de dérive, de l'énergie, de la mobilité, du coefficient de diffusion, etc.

Le principal inconvénient de la méthode de Monte Carlo est qu'elle est lente : le nombre de séquences ou de particules simulées doit être d'autant plus grand que la précision recherchée est importante, ce qui implique un temps de calcul plus grand.

II.4.Conclusion

La résolution des équations de conservation unidimensionnelles permet d'étudier les paramètres physiques du transport, mais que le couplage de ces équations avec une équation de Poisson est nécessaire pour mettre en jeu une grandeur physique très importante : le champ électrique.

III.1.Introduction

L'intérêt principal de ce chapitre sera d'étudier le comportement de l'In Ga As du point de vue microscopique. Nous évaluerons la possibilité d'utiliser ce matériau dans les zones actives des dispositifs ultra-rapides capables d'osciller aux fréquences THz. En effet, la réalisation de nouveaux dispositifs pouvant fonctionner à très hautes fréquences exige des matériaux semiconducteurs ayant d'excellentes propriétés de mobilité et de transport. La réduction des dimensions et l'augmentation des vitesses, grâce à des matériaux à très haute mobilité, permettent d'avoir un transport balistique et, par conséquent, d'atteindre des fréquences de l'ordre du THz. Dans ce domaine, l'InGaAs montre un grand potentiel dû aux vitesses de seuil élevées. Ainsi, des récentes études ont montré que les transistors tels que les HEMT (High Electron Mobility Transistor) à canal $In_{0:53}Ga_{0:47}As$ et dont les dimensions ont atteint le domaine nanométrique peuvent fonctionner comme des cavités résonnantes pour des ondes de plasma électroniques. En effet, une fois le régime balistique atteint, les ondes de plasma oscillent à des fréquences pouvant atteindre plusieurs TH z, comme prévu théoriquement [25,26] et comme récemment confirmé expérimentalement [27].

Le but principal de ce chapitre est donc de mener une analyse approfondie des paramètres de transport de l'In Ga As, en commençant par une étude statique, qui nous permettra d'analyser les principaux effets physiques, et en passant en suite à une étude dynamique. Précisons que toutes les simulations concernent des matériaux à 300 K.

III.2.Paramètres cinétiques du matériau

Menons à présent une étude approfondie des propriétés de transport de matériau $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ Pour cela, nous utilisons un simulateur MC, développé dans notre équipe, permettant de calculer les principales grandeurs physiques qui caractérisent le transport électronique tout en mettant en évidence les principaux effets physiques qui interviennent dans ce type matériau. Pour plus de détail sur la méthode MC couplé avec l'équation de Poisson pseudo-2D utilisée dans nos calculs, consulter la référence [28]. Le modèle ici employé a été précédemment validé par comparaison avec des données expérimentales [29–31]. Les données d'entrée ont été obtenues en interpolant les valeurs des matériaux binaires correspondants [30, 32,33].

III.2.1.Diagramme de bandes

Le simulateur MC utilise un modèle à trois bandes, c'est à dire à trois vallées. La figure4.3donne l'allure du diagramme simple des bandes d'un matériau III-V. A l'équilibre thermique, c'est à dire en l'absence de champ électrique, les électrons sont très majoritairement dans la vallée de plus basse énergie : la vallée Γ. En augmentant le champ électrique régnant dans le matériau, les électrons vont progressivement gagner en énergie et passer dans les vallées supérieures (L, X) dans lesquelles la masse effective de l'électron est plus grande. La conséquence directe est une augmentation de la masse effective moyenne des électrons, une variation des probabilités de collision (différent dans chaque vallée) et donc des taux de relaxation.



Figure III.1 : Représentation schématique de la bande de conduction et le haut de la bande de valence du matériau dans les directions cristallographiques < 100 >et < 111 >.

III.2.2.Masse effective moyenne

La masse effective moyenne des électrons est calculée en effectuent la moyenne des masses effective des différent électrons dont l'énergie et la vallée ont été déterminées par MC en régime stationnaire :

$$m^{*} = \frac{m^{*}_{\Gamma} P \Gamma + m^{*}_{L} P L + m^{*}_{\chi} P X}{P \Gamma + P L + P X}$$
(III.1)

Où Pv et m_v^* sont la population électronique et la masse effective de la vallée V à l'énergie donnée.

La masse m_b^* varie avec l'énergie à cause de la non-parabolicité des bandes d'énergie et peut s'exprimer à travers la relation :

$$m^{*} = \frac{m^{*}_{V_{0}} (1 + 2\alpha \mathcal{C})}{1 - 2\alpha \frac{\hbar^{2} k^{2}}{m^{*}_{V_{0}} (1 + 2\alpha \mathcal{C})^{2}}}$$
(III.2)

Où \in est l'énergie de l'électron, m_0^* 0 la masse effective du fond de la vallée V et α le coefficient de non-parabolicité. Ces dernières grandeurs sont des données d'entrées du programme MC et sont données dans le **Tableau III.1**.

Tableau III.1 : Valeurs des énergies de fond de vallées, des paramètres de non-parabolicité et des masses effective en fond de vallée pour l' $In_{0.53}Ga_{0.47}$ As à 300 K.

| Paramètres | In _{0.53} Ga _{0.47} As | Référence |
|-----------------------|--|-----------|
| ET(eV) | 0.73 | [34] |
| EL(eV) | 1.344 | [35] |
| EX(eV) | 1.84 | [35] |
| $o\Gamma(eV^{-1})$ | 1.255 | [36] |
| $\alpha L(eV^{-1})$ | 0.461 | [36] |
| $\alpha X(eV^{-1})$ | 0.204 | [36] |
| $m_{\Gamma_0}^*(m_b)$ | 0.042 | [37] |

La **figure III.2** décrit les masses effectives de l' $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ non intentionnellement dopé ($N_D = 10^4 \alpha m^3$) en fonction de l'énergie moyenne des électrons pour une température de 300 K. L'effet des transferts en vallées secondaires qui fait augmenter la masse effective est sensible dès 0,4 eV (ce qui correspond à l'énergie d'équilibre dans un champ statique de quelques kV/cm).À basse énergie, la masse effective de l' $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ est faible (de l'ordre de

 $5 \times 10^{-32} Kg$) du fait de son petit gap. C'est pourquoi la mobilité dans ce matériau est un peu meilleure.



Figure III.2 : Masse effective moyenne en fonction de l'énergie moyenne des électrons, calculée par la simulation Monte Carlo de l'In Ga As massif à 300 K.

III.2.3.Taux de relaxation

Les interactions prises en considération dans les calculs MC sont : les collisions sur les impuretés ionisées, les collisions intervalles, les transitions dues à l'absorption de phonons optiques et acoustiques ainsi que le désordre d'alliage. Les transitions optiques ne sont prises en compte dans les calculs. L'ionisation par chocs est négligée. Le gaz électronique est supposé non dégénéré.

Les taux de relaxation sont facilement déterminés à partir de la réponse stationnaire du matériau soumis à un champ statique de norme E et des équations de conservation de la vitesse et de l'énergie [38] :

$$\upsilon_{v} = \frac{qE}{\upsilon n^{*}}$$
(III.3)

Et

$$\nu_{c} = \frac{qE\nu}{C - C_{0}}$$
(III.4)

Où $U_{\mathcal{O}}$ et $U_{\mathcal{C}}$ ont les taux de relaxation de la vitesse et de l'énergie respectivement, q la charge de l'électron, 0 l'énergie électronique à l'équilibre thermique, Uet la vitesse et l'énergie moyenne des électrons.

Nous reportons les résultats de ces calculs dans la **figure III.3** Nous constatons que le taux de relaxation de la vitesse augmente avec l'augmentation de l'énergie et par suite



Figure III.3: Taux de relaxation de la vitesse et de l'énergie de l' $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ en fonction de l'énergie moyenne à 300 K.

L'augmentation du champ électrique, les porteurs de plus en plus chauds voient leur probabilité d'interaction, notamment avec les phonons, augmenter. Il est également important de mentionner que l'énergie relaxe beaucoup moins vite que la vitesse.

III.3.Réponse à un champ électrique

Le matériau n'est ici soumis qu'à un champ électrique (échelon de champ électrique, champ électrique statique).

III.3.1.Étude transitoire

Pour avoir une idée du comportement du matériau en régime transitoire, on relève la réponse de la vitesse et de l'énergie à différent échelons de champ électrique (Figure III.4). À faible champ, l'énergie moyenne ne change pas et la vitesse moyenne se stabilise après une évolution monotone. À plus fort champ, on observe des pics de survitesse. En effet, si les électrons sont rapidement accélérés par le champ électrique, ils gagnent lentement en énergie. La vitesse peut dès lors temporairement dépasser très largement sa valeur stationnaire avant que l'énergie ne devienne suffisamment importante pour provoquer le transfert des électrons dans les vallées latérales dans lesquelles la masse effective est plus élevée, ce qui provoque de fait une diminution mécanique de la vitesse. La durée du régime



Figure III.4 : Réponse temporelle (a) de la vitesse et (b) de l'énergie moyennes à différents échelons de champ électrique.

Transitoire, quelques picosecondes, est ainsi imposée par le temps que met l'énergie à se stabiliser. Plus le champ électrique est important, plus le gain en énergie sera rapide et ce temps sera court.

L'effet de ce phénomène de transfert intervalles est également visible sur l'évolution de la vitesse stationnaire à champ électrique constant (**Figure III.5**). L'énergie stationnaire varie de façon monotone (**Figure III.5**). Elle reste quasiment constante pour des champs inférieurs à 1 kV/cm, ce qui assure la linéarité entre la vitesse moyenne et le champ électrique. On peut parler de régime ohmique. La valeur de la mobilité en régime ohmique d'environ $11000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ Vs est très élevée (à comparer avec celle du silicium de l'ordre de $1500 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ pour une concentration en donneurs équivalente et à 300 K [39]) du fait d'une faible masse effective.



Figure III.5 : Vitesse (a) et énergie (b) moyennes stationnaires à différents champs.

La vitesse stationnaire augmente jusqu'à ce que le champ vaille environ 4 kV/cm. À partir d'une telle valeur de champ, la majorité des électrons atteint des énergies lui permettant d'être transféré vers des vallées à plus faible mobilité. À fort champ, les électrons sont tous dans les vallées supérieures et l'interaction avec les phonons stabilise la vitesse.

III.3.2.Étude fréquentielle

En superposant un petit signal harmonique autour d'un point de fonctionnement caractérisé par un champ électrique E et une vitesse stationnaire v, on peut définir la mobilité différentielle en fréquence $\mu(f) = \delta u(f) / \delta E(f)$, paramètre intéressant notamment pour la génération d'oscillations ou pour la détection à haute fréquence. Pour calculer $\mu(f)$, on applique un échelon de champ électrique de faible amplitude. La dérivée de la réponse à cet échelon est une bonne approximation de la réponse impulsionnelle. Il ne reste plus qu'à en faire la transformée de Fourier discrète. Cette méthode présente l'avantage de fournir en une seule simulation tout le spectre de la mobilité différentielle [40].

Les réponses à un échelon de champ électrique sont présentées sur la (**Figure III.6**). Pour la vitesse, et la mobilité différentielle ainsi calculée est donnée dans la (**Figure III.7**). Pour différents points de fonctionnement. Le module et l'argument donnent respectivement l'amplitude relative et le déphasage des variations de vitesse par rapport au champ électrique en régime harmonique petit-signal.



Figure III.6 : Variation par rapport à la vitesse stationnaire de la vitesse moyenne en réponse à un échelon de champ électrique de 104 kV/cm appliqué à t = 0 pour différents champs électriques stationnaires.

On observe une coupure et une résonance aux alentours de 1 TH z. À fort champ, la fréquence de coupure (que l'on peut définir comme la fréquence du point d'intersection des deux asymptotes) est plus élevée car la relaxation de la vitesse est plus rapide (la vitesse suit plusfacilementlechampélectrique).Larésonanceestdueaucouplageentrelesphénomènes de relaxation de la vitesse, phénomène rapide, et de l'énergie. Plus la différence d'efficacité entre ces deux relaxations est importante, plus la résonance est marquée.

Le choix d'un modèle HD, prenant en compte les effets inertiels et dont les grandeurs sont indexées sur l'énergie moyenne des électrons, montre une nouvelle fois son intérêt : la mobilité est plus sensible au champ électrique dans le domaine TH z, la vitesse des électrons suit facilement le champ électrique dans cette plage de fréquence et l'onde de plasma peut être facilement excitée par une radiation électrique captée par les antennes placées sur les terminaux du HEMT. On confirme ainsi le bienfondé d'une modélisation totale d'un HEMT soumis à une excitation électrique TH z, qui peut être introduite dans notre modèle HD-pseudo 2D, et que nous allons mettre en œuvre dans le chapitre suivant.



Figure III.7 : La valeur moyenne de la mobilité différentielle en fonction de la fréquence pour différents champs électriques.

III.4.Conclusion

Nous avons commencé notre étude théorique par la simulation de l'In Ga As massif non dopé. Nous avons ainsi pu vérifier les excellentes propriétés de transport du matériau, notamment sa faible masse effective permettant une très haute mobilité statique (au-delà de 10000 cm²/Vs).

Ensuite, nous avons pu réaliser une étude fréquentielle de la réponse en vitesse du matériau d'intérêt par le calcul de la mobilité différentielle en fréquence à différents champs.

Enfin, cette étude nous a permis de mettre en évidence l'influence de l'excitation électrique sur le matériau et la possibilité d'utiliser le transistor HEMT à canal de semi-conducteur In0.53Ga0.47As comme un détecteur d'un signal TH z.

Conclusion générale

Conclusion générale

Conclusion général

Nous avons commencé notre étude théorique par la simulation de l'In Ga As massif non dopé. Cela nous a permis tout d'abord d'étudier le comportement stationnaire et transitoire du matériau soumis à un échelon de champ électrique. Nous avons ainsi pu vérifier les excellentes propriétés de transport du matériau, notamment sa faible masse effective permettant une très haute mobilité statique (au-delà de 10000 cm2/Vs). À cause des interactions des électrons avec les phonos optiques, c'est par suite le phénomène de la relaxation de la vitesse qui est mis en jeu. Ces deux points confirment le grand intérêt de ce matériau pour les applications hyperfréquences ou TH z.

Ensuite, nous avons pu réaliser une étude fréquentielle de la réponse en vitesse du matériau d'intérêt par le calcul de la mobilité différentielle en fréquence à différents champs. Celle-ci présente des coupures à quelques TH z à partir desquelles la mobilité différentielle décroît fortement. Ainsi, pour ces fréquences, la vitesse est plus sensible au champ accélérateur.

Enfin, cette étude nous a permis de mettre en évidence l'influence de l'excitation électrique sur le matériau et la possibilité d'utiliser le transistor HEMT à canal de semi-conducteur In0.53Ga0.47As comme un détecteur d'un signal TH z. Le choix d'un modèle complexe pouvant traité les phénomènes non stationnaires et la possibilité d'exciter l'onde de plasma dans le canal du transistor HEMT sont appropriés.

Forts de ces bonnes bases, nous pouvons poursuivre et nous attaquer à la simulation de transistor HEMT soumis à une excitation électrique TH z.

Bibliographie

- Jérôme faist «introduction à la physique des semi-conducteurs» université de neuch
 a. atelneuchatel, mai 2001
- A. Chavet P. Masson physique des semi-conducteurs départements Micro-électroniques télécommunications première année -2004/2005 école polytechnique universitaire de Marseille.
- K. Shinohara, Y. Yamashita, A. Endoh, I. Watanabe, K. Hikosaka, T. Mimura, S. Hiyamizu, and T. Matsui, "Nanogate inp-hemt technology for ultrahigh-speed performance," in *Indium Phosphide and Related Materials*, 2004. 16th IPRM. 2004 International Conference on, pp. 721–726, May 2004.
- M. Hashim, "Nanostructures of iii-v semiconductor for photonic, electronic, and sensing applications back to basics," in *Semiconductor Electronics (ICSE)*, 2010 IEEE International Conference on, pp. A9–A9, June 2010.
- H. Bach, A. Umbach, G. Unterborsch, W. Passenberg, C. Schramm, and H. Kunzel, "Novel high gate barrier alinas/gainas/inp hemt structure : Concept verification and key technologies," in *Solid State Device Research Conference, 1994. ESSDERC '94. 24th European*, pp. 619–622, Sept 1994.
- 6. A.ABDELALI, Role du rayonnement dans l'élaboration et l'étude de nanoagrégats semiconducteurs de ZnS, thèse de magister, université MENTOURI CONSTANTINE
- 7. F.BOUROUBA, Modélisation et simulation des contacts métal-semi-conducteur à barrière inhomogène, par Faculté des Sciences, département de Physique (Sétif).
- 8. Zarki Abd Erazzek «transport dans les semi-conducteurs» thèse de master université larbi Ben m'hidi (Oum ELBouaghi) 2011
- a .chovet, p. Masson «physique des semi-conducteurs» école polytechnique Département micro-électronique et télécommunications université de Marseille 2004/2005
- Zemmal badr Eddine «utilisation de la méthode non linéaire pour caractérisation du Mosfet» thèse de magister université larbi ben m'hidi (Oum ELBouaghi) 2010

- 11. S.M. Sze and KWOK. Ng, Physics of semiconductor devices, third edition, WileyInterscience, 2007.
- Cours: Philippe ROUX, Théorie générale simplifiée des semi-conducteurs, jonction PN au silicium, effet transistors bipolaire, 2008.
- 13. F. Reif, Fundamentals of statistical and thermal physics. Waveland Pr Inc., 2008.
- 14. J.-M. Rax., Physique des plasmas, Dunod., 2005.
- 15. J.-L. Delcroix and A. Bers, Physique des plasmas, EDP Sciences., 1994.
- 16. P.Noèlle, Physique statistique hors d'équilibre. CNRSEditions, EDPSciences., 2007.
- J. Piprek., Semiconductor Optoelectronic Devices: Introduction to Physics and Simulation. Academic Press. 2003.
- M. Pickering, An Introduction to Fast Fourier Transform Methods for Partial Differential Equations, with Applications. Research Studies Press. 1986.
- 19. W. Van Roosbroeck, "Theory of fow of electrons and holes in germanium and other semiconductors," Bell System Technical Journal, vol. 29, no. 4, pp. 560 607, 1950.
- Y. V. Nazarov and Y. M. Blanter, Quantum transport: introduction to nanoscience. Cambridge, UK. New York. Cambridge University Press. 2009.
- [P. A. Markowich, the Stationary Semiconductor Device Equations (Computational Microelectronics), vol. 67. WILEY-VCH Verlag, 1987.
- 22. Analysis and simulation of semiconductor devices. Siegfried Selberherr. Springer Vienna. 1984.
- 23. N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, "Equation of state calculations by fast computing machines," The Journal of Chemical Physics, vol. 21, no. 6, pp. 1087–1092, 1953.
- 24. J.-P. Nougier. III-V Microelectronics. Amsterdam: North-Holland., 1991.
- J. C. Allred and A. Newhouse, "Applications of the monte carlo method to architectural acoustics," The Journal of the Acoustical Society of America, vol. 30, no. 1, pp. 1–3, 1958.
- 26. M. Dyakonov and M. Shur, "Shallow water analogy for a ballistic field effect transistor: New mechanism of plasma wave generation by dc current," Phys. Rev. Lett., vol. 71, pp. 2465–2468, Oct 1993.
- S. Rudin, "Temperature dependence of the nonlinear plasma resonance in gated twodimensional semiconductor conduction channels," Applied Physics Letters, vol. 96, no. 25, pp. 252101–252101–3, 2010.

- 28. W. Knap, J. Lusakowski, T. Parenty, S. Bollaert, A. Cappy, V. V. Popov, and M. S. Shur, "Terahertz emission by plasma waves in 60 nm gate high electron mobility transistors," Applied Physics Letters, vol. 84, no. 13, 2004.
- 29. G. Sabatini, C. Palermo, P. Ziade, T. Laurent, H. Marinchio, H. Rodilla, J. Mateos, T. Gonzalez, R. Teissier, and L. Varani, "Monte carlo study of ballistic effects in high speed inas-based quantum hot electron transistor," in Infrared Millimeter and Terahertz Waves (IRMMW-THz), 2010 35th International Conference on, pp. 1–2, Sept 2010.
- 30. J. Mateos, T. Gonzalez, D. Pardo, V. Hoel, and A. Cappy, "Effect of the t-gate on the performance of recessed hemts. A Monte carlo analysis," Semiconductor Science and Technology, vol. 14, no. 9, p. 864, 1999.
- 31. J.Mateos, T.González, D.Pardo, V.Hoel, H.Happy, and A.Cappy, "Improvedmonte Carlo algorithm for the simulation of delta;-doped alinas/gainas hemts," Electron Devices, IEEE Transactions on, vol. 47, pp. 250–253, Jan 2000.
- 32. J. Mateos, T. González, D. Pardo, V. Hoel, and A. Cappy, "Monte carlo simulator forthedesign optimization flow-noisehemts," Electron Devices, IEEE Transactions on, vol. 47, pp. 1950–1956, Oct 2000.
- 33. M. Fischetti and S. Laux, "Monte carlo simulation of transport in technologically significant semiconductors of the diamond and zinc-blende structures. ii. sub micrometer mosfet's," Electron Devices, IEEE Transactions on, vol. 38, pp. 650–660, Mar 1991.
- 34. K. F. Brennan and D. H. Park, "Theoretical comparison of electron real-space transfer in classical and quantum two-dimensional heterostructure systems," Journal of Applied Physics, vol. 65, no. 3, 1989.
- S. Adachi, "Optical properties of in1-xgaxasyp1-y alloys," Phys. Rev. B, vol. 39, pp. 12612–12621, Jun 1989.
- 36. L. Massengill, T. Glisson, J. Hauser, and M. Littlejohn, "Transient transport in centralvalley-dominated ternary alloys," Solid-State Electronics, vol. 29, no. 7, pp. 725 – 734, 1986.
- 37. S. Ahmed, B. Nag, and M. Roy, "Hot-electron transport in in0.53ga0.47as," Solid-state Electronics, vol. 28, no. 12, pp. 1193 – 1197, 1985.
- 38. V. Gruzhinskis, E. Starikov, P. Shiktorov, L. Reggiani, M. Saraniti, and L. Varani, "Hydrodynamic analysis of DC and AC hot-carrier transport in semiconductors," Semiconductor Science and Technology, vol. 8, pp. 1283–1290, 1993.

- 39. C. Jacoboni, C. Canali, G. Ottaviani, and A. A. Quaranta, "A review of some charge transport properties of silicon," Solid-State Electronics, vol. 20, no. 2, pp. 77 89, 1977.
- 40. J.C.Vaissiere, J.P. Nougier, L. Varani, P. Houlet, L. Hlou, E.Starikov, P.Shiktorov, and L. Reggiani, "Small-signal analysis of the Boltzmann equation from harmonicand impulse-response methods," Phys. Rev. B, vol. 49, pp. 11144–11152, Apr 1994.

Glossaire

Glossaire

Glossaire

Détection: La détection d'un objet ou d'un phénomène est sa mise en évidence, généralement à l'aide d'un détecteur

Equation de poisson : C'est l'équation de Poisson, encore appelée par les physiciens l'équation de Maxwell-Gauss, sous sa forme locale. Dans la pratique, on utilise une autre notation, en employant l'opérateur laplacien et qui s'exprime par $\Delta V=div (\rightarrow gradV)$. Notre équation de Poisson s'écrit donc $\Delta V=-\rho(x, y) \in 0$

Fluctuation : Mouvement de balancement ou d'oscillation, comparable à celui des flots, qui affecte la masse d'un liquide.

Junction PN: En physique des semi-conducteurs, une jonction p-n désigne une zone du cristal où le dopage varie brusquement, passant d'un dopage p à un dopage n.

Méthode de Monte Carlo : Le terme méthode de Monte-Carlo, ou méthode Monte-Carlo, désigne une famille de méthodes algorithmiques visant à calculer une valeur numérique approchée en utilisant des procédés aléatoires, c'est-à-dire des techniques probabilistes.

Modèle dérive diffusion : Le modèle Dérive-Diffusion est le plus classiquement utilisé dans l'industrie des semi-conducteurs. Or les tailles des dispositifs diminuant, les effets quantiques de- viennent importants. Il devient donc nécessaire d'utiliser de nouveaux modèles prégnants en compte ces effets.

Modèle hydrodynamique :Le calage, la validation et l'assimilation de données pour les modèles hydrodynamiques de propagation de la marée, le long des côtes et sur le plateau continental, requièrent des mesures marégraphiques de qualité pour définir les conditions aux limites du modèles pour les limites ouvertes du large, se pose alors le problème de l'accès à des mesures de niveau marin sur des fonds de plusieurs centaines de mètres.

Ondes de plasma : En physique, une onde de plasma est une propagation concertée de particules et de champs.

Petit signal : Les petits signaux sont ceux suffisamment petits pour que les caractéristiques des composants ne varient pas trop et pouvoir rester dans une approximation linéaire.

Schottky : Une diode Schottky (nommée d'après le physicien allemand Walter H. Schottky) est une diode qui a un seuil de tension directe très bas et un temps de commutation très court.

Glossaire

Ceci permet la détection des signaux HF faibles et hyperfréquences, la rendant utile par exemple en radioastronomie. On l'utilise aussi pour sa capacité à laisser transiter de relativement fortes intensités pour le redressement de puissance avec des pertes par effet Joule réduites du fait de sa faible chute de tension.

Téra hertz: La bande de fréquences Téra hertz désigne les ondes électromagnétiques s'étendant de 100 GHz à 30 T Hz. Elle est intermédiaire entre les fréquences micro-ondes et les fréquences correspondant à l'infrarouge.

Transistor HEMT: Le MODFET ou transistor à effet de champ à dopage modulé est un type de transistor à effet de champ. Il est connu aussi sous le nom de HEMT, ou transistor à électron à haute mobilité. Comme les autres FET, les MODFET sont utilisés dans les circuits intégrés comme interrupteur numérique.


Annexe



Arséniure (minéral)



Arséniure d'Indium

Annexe





Gallium

Annexe



Résumé

Résumé

Le travail de cette mémoire sera présenté de la manière suivante :

Dans Le premier chapitre nous avons donné les notions fondamentales des semi-conducteurs et la jonction PN ainsi que les différents types des semi-conducteurs.

Dans le deuxième chapitre, nous présenterons le modèle hydrodynamique couplé avec l'équation de Poisson ainsi que la modélisation de la détection T Hz par les différentes électrodes du transistor HEMT.

Le troisième chapitre sera consacré à la présentation des propriétés physiques de l'In Ga As.

Abstract

The work of this thesis will be presented as follows:

In the first chapter we gave the fundamentals of semiconductors and the PN junction as well as the different types of semiconductors.

In the second chapter, we will present the hydrodynamic model coupled with the Poisson equation as well as the modeling of the T Hz detection by the different electrodes of the HEMT transistor.

The third chapter will be devoted to the presentation of the physical properties of In Ga As.

Key words

Semiconductors, PN junction, hydrodynamic model, Poisson equation, T Hz detection, HEMT transistor, In Ga As.

ملخص

سيتم تقديم عمل هذه الرسالة على النحو التالي:

قدمنا في الفصل الأول أساسيات أشباه الموصلات وتقاطع PN بالإضافة إلى الأنواع المختلفة من أشباه الموصلات.

في الفصل الثاني ، سوف نقدم النموذج الهيدروديناميكي المقترن بمعادلة بواسون بالإضافة إلى نمذجة الكشف عن THz بواسطة الأقطاب الكهربائية المختلفة لترانز ستور .HEMT

سيخصص الفصل الثالث لعرض الخصائص الفيزيائية لـ.In Ga As

الكلمات المفتاحية

أشباه الموصلات ، تقاطع PN ، النموذج الهيدروديناميكي ، معادلة بواسون ،TH z ، ترانزستور InGaAs، HEMT