



HAL
open science

Paramètres matériau pour la simulation de transistors bipolaires à hétérojonctions Si/SiGe et Si/SiGeC

Marc Michailat

► **To cite this version:**

Marc Michailat. Paramètres matériau pour la simulation de transistors bipolaires à hétérojonctions Si/SiGe et Si/SiGeC. Matière Condensée [cond-mat]. Université Paris Sud - Paris XI, 2010. Français. NNT: . tel-00461914

HAL Id: tel-00461914

<https://theses.hal.science/tel-00461914>

Submitted on 6 Mar 2010

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



THÈSE DE DOCTORAT

SPECIALITE : PHYSIQUE

*Ecole Doctorale « Sciences et Technologies de l'Information des
Télécommunications et des Systèmes »*

Présentée par :

Marc MICHAILLAT

Sujet :

**Paramètres Matériau pour la Simulation de Transistors Bipolaires à
Hétérojonctions Si/SiGe et Si/SiGeC**

Soutenue le 10 février 2010 devant les membres du jury :

Frédéric ANIEL	IEF – Université Paris-Sud 11	Directeur de thèse
Mireille MOUIS	IMEP-LAHC – Grenoble INP	Présidente du jury
Pierpaolo PALESTRI	DIEGM – Université d'Udine	Rapporteur
Denis RIDEAU	STMicroelectronics, Crolles	Responsable de thèse
Jean-Luc THOBEL	IEMN – Université Lille 1	Rapporteur
Luca VARANI	IES – Université Montpellier 2	Examineur

Table des matières

Liste des abréviations	9
Introduction	11
1 Problématique & méthode de résolution	13
1.1 Historique de la simulation Monte Carlo	13
1.1.1 Origines de la simulation Monte Carlo	13
1.1.2 Apparition des techniques Full-Band	14
1.1.3 Émergence du modèle standard dans le silicium	15
1.2 État de l’art de la simulation Monte Carlo	16
1.2.1 Transport dans les semiconducteurs de la colonne IV	16
1.2.2 Transport dans les alliages aléatoires	17
1.2.3 Transport dans les matériaux dopés	18
1.3 Contexte et objectifs de la thèse	19
2 La méthode Monte Carlo appliquée au transport	23
2.1 Principe de la méthode Monte Carlo	23
2.1.1 Définition générale de la méthode Monte Carlo	23
2.1.2 Génération d’un nombre aléatoire	24
2.1.3 Génération d’un nombre distribué	24
2.1.4 Génération d’un nombre discret	26
2.2 Application à la simulation du transport électronique	26
2.2.1 Algorithme d’un simulateur Monte Carlo	26
2.2.2 Définition du système physique	27
2.2.3 Initialisation de l’état de la particule	27
2.2.4 Accélération balistique	29
2.2.5 Sélection stochastique du type de l’interaction	30
2.2.6 Détermination de l’état après l’interaction	30
2.2.7 Collection des statistiques	31
2.3 Description numérique de la structure de bande	33
2.3.1 Discrétisation de l’espace réciproque	33
2.3.2 Interpolation de l’énergie	33
2.3.3 Calcul de la vitesse de groupe	36
2.3.4 Calcul de la densité d’états électroniques	36
2.3.5 Calcul numérique de l’état post-interaction	37
2.3.6 Cas particulier de la randomisation iso-énergie	38

3	Simulation du transport dans Si et Ge	41
3.1	La structure de bande	41
3.1.1	Structure de bande du silicium	41
3.1.2	Structure de bande du germanium	44
3.2	L'interaction porteur-phonon	47
3.2.1	Origine physique de l'interaction porteur-phonon	47
3.2.2	Modélisation de l'interaction porteur-phonon	50
3.2.3	Calibration du modèle de l'interaction porteur-phonon	52
3.3	L'ionisation par choc	57
3.3.1	Origine physique de l'ionisation par choc	57
3.3.2	Calcul des probabilités d'interaction	57
3.3.3	Génération de l'état post-ionisation	59
3.4	Simulation du transport dans Si	62
3.4.1	Distribution dans l'espace réciproque	62
3.4.2	Vitesse de dérive	64
3.4.3	Coefficient d'ionisation par choc	66
3.4.4	Efficacité quantique	66
3.4.5	Fonction de distribution	70
3.5	Simulation du transport dans Ge	71
3.5.1	Distribution dans l'espace réciproque	71
3.5.2	Vitesse de dérive	74
3.5.3	Coefficient d'ionisation par choc	74
3.5.4	Fonction de distribution	77
4	Modélisation des effets d'alliage dans SiGeC	79
4.1	Paramètre de maille du SiGeC	79
4.1.1	Loi de Dismukes	79
4.1.2	Loi de Vegard	79
4.1.3	État de contrainte du SiGeC sur substrat Si	81
4.2	Structure de bande du SiGeC	83
4.2.1	Structure de bande du SiGe	83
4.2.2	Effets du carbone sur la structure de bande	83
4.3	Modélisation de l'interaction porteur-phonon dans SiGeC	86
4.4	Modélisation de l'ionisation par choc dans SiGeC	87
4.4.1	Ionisation des électrons dans SiGeC	87
4.4.2	Ionisation des trous dans SiGeC	87
4.5	La diffusion sur potentiel d'alliage	87
4.5.1	Origine physique de la diffusion sur potentiel d'alliage	87
4.5.2	Modélisation de la diffusion sur potentiel d'alliage	89
4.6	Simulation du transport dans SiGe, SiC et SiGeC	90
4.6.1	Mobilité à faible champ dans SiGe	90
4.6.2	Mobilité à faible champ dans SiC	91
5	Modélisation des effets du dopage	95
5.1	La diffusion sur un potentiel coulombien écranté	95
5.1.1	Hypothèses initiales	96
5.1.2	Formalisme	96
5.1.3	Extraction des déphasages	97
5.1.4	Calcul des probabilités de diffusion	99
5.1.5	Paramétrisation du problème	99

5.1.6	Convergence des déphasages	101
5.1.7	Test et validation de l'algorithme	101
5.1.8	Loi de la somme de Friedel	102
5.2	L'interaction porteur-impureté ionisée	105
5.2.1	Cas d'une structure de bande analytique	105
5.2.2	Cas d'une structure de bande numérique	106
5.3	Le principe d'exclusion de Pauli	110
5.4	Simulation du transport dans SiGeC dopé	114
5.4.1	Mobilité en fonction du dopage dans Si	114
5.4.2	Mobilité en fonction du dopage dans Ge	116
6	Paramètres matériau & modèles analytiques	119
6.1	Mobilité à faible champ	119
6.1.1	Dépendance en température	119
6.1.2	Dépendance en dopage	120
6.1.3	Dépendance en taux de germanium et carbone	121
6.1.4	Modélisation des effets de la contrainte biaxiale	121
6.2	Temps de relaxation de l'énergie	126
6.3	Simulation d'un transistor bipolaire à hétérojonction	130
6.3.1	Équations hydrodynamiques	130
6.3.2	Résultats de simulation	132
	Conclusion	139
	Publications de l'auteur	141
	Références bibliographiques	149
	Table des figures	152
	Liste des tableaux	153
	Annexes	157
	A Diffusion sur potentiel d'alliage dans les ternaires	157
	B Mobilité des électrons dans Si contraint	159
	C Simulation multi-particule du transport transitoire	163
	D Publications en conférence	167

TABLE DES MATIÈRES

Remerciements

Cette thèse est le fruit d'une collaboration active entre le groupe TCAD du département Modeling à STMicroelectronics Crolles, et le groupe NAEL de l'Institut d'Electronique Fondamentale à Orsay.

A ce titre, je tiens à remercier Frédéric Aniel, Denis Rideau et Thierry Schwartzmann, qui ont su orienter et diriger les travaux de cette thèse, tout en me laissant une marge d'initiative très appréciable.

Je remercie également Clément Tavernier et Hervé Jaouen, pour avoir supervisé la création et le déroulement du projet de thèse.

Je n'oublie pas les membres du jury de cette thèse : Mireille Mouis, Pierpaolo Palestri, Jean-Luc Thobel et Luca Varani, leurs relectures attentives du manuscrit et la pertinence de leurs remarques m'ont été très bénéfiques.

J'adresse mes remerciements à Eloy Ramirez-Garcia et Nicolas Zerounian de l'IEF, l'ensemble de leur collaboration sur l'intégration de mes modèles dans le simulateur de dispositifs Silvaco Atlas a significativement contribué à la valorisation de ce travail de thèse.

Je remercie également Eric Tea de l'IEF, les échanges partagés avec Eric relativement à l'application de la théorie du décalage de la phase aux algorithmes Monte Carlo ont été particulièrement instructifs et fructueux.

Je tiens à remercier spécialement Pascal Lemoigne et Ardechir Pakfar, qui ont participé activement à l'implémentation de mes modèles de transport dans Sentaurus Device.

Enfin, je salue l'ensemble des membres de l'équipe TCAD, évoluer dans cette équipe au quotidien a été une partie de plaisir : El-Mehdi Bazizi, Pierre Boulenc, Erwan Dornel, Maxime Feraille, Vincent Fiori, Sébastien Gallois-Garreignot, Vincent Quenette, Andres Quiroga, Romuald Roucou, Olivier Saxod, Julien Singer, François Wacquand et Alban Zaka.

TABLE DES MATIÈRES

Liste des abréviations

BGN	Band Gap Narrowing
DOS	Density Of States
EMC	Ensemble Monte Carlo
FB	Full Band
HBT	Heterojunction Bipolar Transistor
HD	Hydrodynamic
HH	Heavy Hole
II	Impact Ionization
LH	Light Hole
MC	Monte Carlo
PEP	Pauli Exclusion Principle
PS	Phase Shift
SO	Spin Orbit

TABLE DES MATIÈRES

Introduction

La modélisation du transport des porteurs de charge dans les dispositifs semiconducteurs consiste à résoudre l'équation de Boltzmann dans un espace à 6 dimensions : aux 3 dimensions de l'espace réel s'ajoutent les 3 dimensions de l'espace réciproque, correspondant à l'espace des vecteurs d'onde des porteurs de charge. Si l'espace réel contient l'information sur la géométrie du dispositif semiconducteur (dimensions, champs électriques, densités de charges, etc.), l'espace réciproque décrit la structure électronique interne du matériau semiconducteur en chaque point du dispositif.

Il existe plusieurs techniques numériques permettant de résoudre l'équation de Boltzmann. Chacune de ces techniques propose un compromis spécifique entre l'exactitude physique du résultat, et les temps de calcul. Les modèles numériques qui minimisent le nombre des approximations utilisées, et des paramètres arbitraires introduits, nécessitent généralement des délais de calcul augmentant en conséquence. Les méthodes numériques les plus répandues pour la modélisation du transport des charges sont, par ordre de complexité croissante :

1. la méthode dérive-diffusion,
2. la méthode hydrodynamique, et
3. la méthode Monte Carlo (MC).

Parmi ces 3 approches, seule la méthode Monte Carlo permet une résolution à 6 dimensions de l'équation de Boltzmann, en utilisant une description tridimensionnelle de l'espace des vecteurs d'onde. Cependant, en pratique l'application d'algorithmes Monte Carlo à des systèmes semiconducteurs résulte dans des délais de simulations drastiquement longs, interdisant l'utilisation de cet outil dans le cadre d'une étude en ingénierie.

Les méthodes 1 et 2 ne considèrent que 2 à 3 dimensions de l'espace réel dans la résolution de l'équation de Boltzmann. La propagation des particules dans l'espace réciproque n'est pas considérée, et la structure de bande est généralement prise en compte par un ensemble de paramètres scalaires (bande interdite, masses effectives, masses de densité d'états, etc.). Cette approche volontairement approximative permet de minimiser les délais de calcul, en se focalisant sur la structure du dispositif. Les paramètres de structure de bande permettent en outre, dans la plupart des cas, la prise en compte des caractéristiques essentielles de la dispersion. L'efficacité numérique de ces méthodes ont fait des techniques dérive-diffusion et hydrodynamique les outils les plus largement employés dans le domaine de la modélisation numérique des composants.

Dans l'optique d'optimiser les performances électriques des systèmes semiconducteurs, l'ingénierie des matériaux constitue un outil fondamental à disposition des ingénieurs. L'introduction d'une contrainte mécanique dans la couche

active, ou la modification du matériau employé, peut altérer significativement le transport des porteurs de charge dans le dispositif. A ce titre, la modélisation rigoureuse du transport doit prendre en compte ces modifications, afin de pouvoir simuler leur impact éventuel sur le comportement du dispositif. Dans les outils avancés de type Monte Carlo, les effets induits par la contrainte et la composition du matériau sont intrinsèquement pris en compte dans la structure de bande, et dans les modèles d'interaction. Dans les outils rapides de type dérive-diffusion ou hydrodynamique, toutes les propriétés du matériau constituant le milieu de propagation sont décrites indirectement par l'intermédiaire de paramètres scalaires. L'utilisation de ces outils numériques requiert donc l'implémentation de paramètres matériaux pertinents.

L'optimisation des performances électroniques des transistors bipolaires en silicium a conduit à l'introduction successive de germanium et de carbone dans la base du transistor : la base est alors constituée d'une couche de SiGeC contrainte sur substrat silicium, et le dispositif devient un transistor bipolaire à hétérojonction (HBT). Ces composants sont particulièrement performants dans le domaine des hautes fréquences : leur fréquence de transition f_T peut s'élever à 300 GHz pour un fonctionnement à température ambiante. Les efforts actuels d'optimisation des performances dynamiques du HBT SiGeC ont pour objectif d'élever le f_T à 500 GHz, notamment dans le cadre du projet de recherche européen DOTFIVE [1]. La simulation prédictive de ces dispositifs nécessite la prise en compte des effets conjugués des propriétés spécifiques de l'alliage ternaire, et de la contrainte biaxiale induite par le désaccord de maille. En particulier, l'emploi de simulateurs dérive-diffusion ou hydrodynamique pour modéliser ces transistors nécessite l'implémentation de paramètres matériaux adaptés, c'est-à-dire relatifs aux alliages ternaires SiGeC contraints biaxialement sur Si.

On peut obtenir les paramètres matériau requis par détermination expérimentale, ou par calcul théorique. Dans le cas particulier des alliages SiGe et SiGeC, les données expérimentales existant sont insuffisantes pour permettre une caractérisation exhaustive de ces matériaux. La problématique de cette thèse s'inscrit donc dans le calcul par simulation numérique des propriétés électroniques des alliages SiGe et SiGeC, pour pallier aux données expérimentales lacunaires, et pour fournir un ensemble de paramètres matériaux physiques aux outils de simulation de type hydrodynamique.

Afin de calculer les propriétés électroniques des alliages SiGeC, nous allons appliquer une méthode de simulation Monte Carlo aux matériaux considérés. Cette approche consiste à appliquer un algorithme de propagation de type MC à un système homogène et stationnaire représentatif du matériau. Cette technique de calcul a déjà été largement appliquée aux matériaux semiconducteurs communs (silicium, germanium, composés III-V). Elle permet en outre d'avoir accès à des quantités microscopiques difficilement accessible à la mesure directe.

Notre méthodologie de modélisation des transistors HBT SiGeC avancés est donc hybride, et combine d'une part la simulation Monte Carlo, utilisée pour l'extraction des propriétés électroniques des alliages SiGeC, et d'autre part l'emploi de techniques conventionnelles d'ingénierie comme la simulation hydrodynamique, basée sur les paramètres matériau issus du calcul Monte Carlo. Cette approche hybride permet d'inclure le détail des spécificités des matériaux introduits dans la structure du transistor, tout en bénéficiant de délais de simulation réduits, i.e. compatibles avec les activités d'ingénierie en environnement industriel.

Chapitre 1

Problématique et méthode de résolution

1.1 Historique de la simulation Monte Carlo

1.1.1 Origines de la simulation Monte Carlo

L'application de la méthode Monte Carlo à la modélisation du transport des charges libres dans un matériau semiconducteur, a été introduite dès la fin des années 1960 [2]. Les premières techniques Monte Carlo ont été développées dans le but de résoudre l'équation de Boltzmann dans les matériaux massifs, et de calculer la fonction de distribution des porteurs de charge dans l'espace réciproque. Dans le cadre de cette approche, le matériau semiconducteur est modélisé comme un milieu homogène, c'est-à-dire dont les propriétés sont invariantes dans l'espace réel. L'étude du transport des charges par méthode Monte Carlo permet alors d'investiguer les propriétés électroniques intrinsèques du matériau modélisé.

Les premiers algorithmes MC s'appuient sur des structures de bande analytiques. Afin de reproduire le plus fidèlement possible la dispersion réelle du matériau, les formalismes analytiques utilisés se complexifient progressivement :

1. les dispersions sphériques sont isotropes et caractérisées par une masse effective unique ;
2. les dispersions elliptiques introduisent l'anisotropie via l'utilisation de 2 masses effectives longitudinale et transverse ;
3. les dispersions non-paraboliques introduisent un coefficient supplémentaire afin de rendre la dispersion plus réaliste à hautes énergies.

La multiplicité des minima locaux caractérisant la structure des bandes de conduction est modélisée par un ensemble de vallées satellites, traitées distinctement. Malgré la complexification des formalismes de dispersion, et l'augmentation du nombre des paramètres employés, les descriptions analytiques des structures de bande échouent à reproduire la dispersion réelle à hautes énergies, i.e. au-delà de 1 eV [3].

Les mécanismes de diffusion pris en compte se limitent initialement aux interactions porteur-phonon, et porteur-impureté ionisée. Les modèles probabilistes

associés à ces interactions sont également basés sur la description analytique de la structure de bande. A ce titre, l'interaction porteur-phonon est décrite par une multiplicité de mécanismes intra- et inter-vallées, quantifiant la probabilité de transition entre 2 vallées identiques ou distinctes. L'interaction porteur-impureté est considérée comme une transition intra-vallée, et la probabilité d'interaction associée est généralement calculée via le formalisme de Brooks-Herring [4]. La symétrie parabolique des structures de bande permet de générer l'état post-interaction de la particule de façon angulaire : le vecteur d'onde de la particule diffusée est calculé comme l'image par rotation du vecteur d'onde incident.

A hautes énergies, les approximations analytiques de la structure de bande ne sont plus valides, et les résultats obtenus par simulation MC deviennent physiquement aberrants. Afin de dépasser la limitation en énergie intrinsèque aux dispersions analytiques, des méthodes numériques ont été développées pour pouvoir décrire la structure de bande exacte : on parle de simulateurs Full-Band.

1.1.2 Apparition des techniques Full-Band

Au début des années 1980, plusieurs travaux présentent des modèles Monte Carlo basés sur une description numérique de la structure de bande [5, 6, 7]. La 1^{re} zone de Brillouin est discrétisée en éléments finis cubiques, définissant un maillage sur lequel la structure de bande est préalablement tabulée. La propagation de la particule dans l'espace réciproque demande alors un traitement spécifique, pour le calcul de l'énergie et de la vitesse de groupe du porteur. La génération stochastique de l'état post-diffusion de la particule est effectuée par l'emploi d'une réjection discrète, en associant un poids statistique à tous les éléments du maillage susceptibles de contenir l'état diffusé.

La première formulation numérique du modèle d'interaction porteur-phonon a été proposée par Fischetti et Laux en 1988 [8]. Ce modèle s'affranchit du concept des vallées individuelles, et abandonne la distinction établie arbitrairement entre les transitions intra- et inter-vallées. Grâce à cette formulation numérique, le nombre des constantes de couplage introduites dans le modèle de la probabilité d'interaction est drastiquement réduit. De plus la dispersion des phonons est plus physiquement décrite que dans les modèles analytiques, si bien que tous les modes de phonon donnent lieu à des interactions strictement inélastiques.

L'emploi de dispersions Full-Band, couplées à des modèles d'interaction intégrés numériquement, permet dès lors la simulation du transport des porteurs de charge à hautes énergies, jusqu'à 3 eV. Les algorithmes Monte Carlo ont alors accès aux phénomènes physiques se manifestant chez les porteurs énergétiques, au premier rang desquels figure l'ionisation par choc. L'ionisation est introduite comme un mécanisme d'interaction supplémentaire susceptible de diffuser la particule Monte Carlo. La probabilité d'ionisation par choc est alors modélisée par une formule analytique de Keldysh [9], et l'état post-ionisation de la particule est généré de façon approximative, soit dans un minima de la structure de bande ($E' = 0$) [5], soit dans un état décalé en énergie de la valeur exacte de la bande interdite du matériau ($E' = E - E_g$) [8, 10].

Dotés de ces modèles numériques, les programmes Monte Carlo sont capables de simuler les propriétés électroniques des matériaux soumis à des champs électriques forts. Le protocole de calibration des modèles d'interaction consiste alors à ajuster les constantes de couplages de l'interaction porteur-phonon sur

les caractéristiques expérimentales vitesse-champ, et à choisir arbitrairement les paramètres de Keldysh du modèle d'ionisation pour reproduire les mesures du coefficient d'ionisation par choc.

1.1.3 Émergence du modèle standard dans le silicium

Malheureusement, la procédure de calibration basée sur la reproduction des 2 caractéristiques expérimentales clés (vitesse de dérive et coefficient d'ionisation en fonction du champ électrique) ne permet pas d'aboutir à la détermination d'une solution *unique*. Plusieurs combinaisons de préfacteurs distinctes peuvent produire des résultats équivalents : une probabilité d'interaction porteur-phonon élevée, couplée à une probabilité d'ionisation arbitrairement forte, produit les mêmes résultats en terme de coefficient d'ionisation qu'une probabilité porteur-phonon faible, associée à une probabilité d'ionisation faible.

A la fin des années 1980, les différents modèles Full-Band publiés dans la littérature divergent quand à l'amplitude physique des probabilités d'interaction électron-phonon et d'ionisation par choc des électrons dans le silicium, comme le montrent les figures 1.1a et 1.1b.

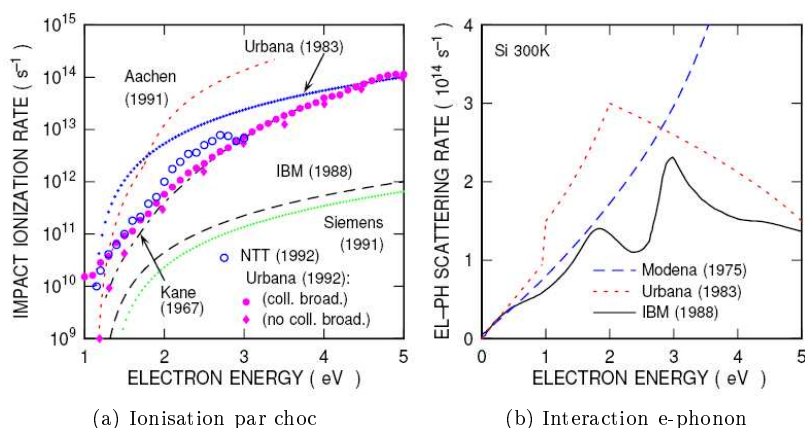


FIG. 1.1: Amplitudes des probabilités d'ionisation par choc (Fig. 1.1a) et d'interaction électron-phonon (Fig. 1.1b) dans le silicium (d'après [11]). Le désaccord est manifeste entre les différents modèles Full-Band reportés à la fin des années 1980.

La percée qui va permettre la résolution du problème est la détermination expérimentale et théorique de la probabilité d'ionisation par choc des électrons dans le silicium. Expérimentalement, les travaux de Cartier *et al.* publiés en 1993 [12] établissent une formulation empirique pour la dépendance en énergie du taux d'ionisation par choc, issue de mesures de spectroscopie photoélectronique X¹. Théoriquement, le calcul numérique de la probabilité d'ionisation par choc par des méthodes *ab initio* est entrepris par plusieurs études [13, 14, 15]. Ces études théoriques et expérimentales permettent l'établissement d'un consensus

¹X-Ray photoemission spectroscopy (XPS) en Anglais

pour la probabilité d'ionisation par choc des électrons dans le silicium, visible en figure 1.2a. La détermination exacte du taux d'ionisation supprime un degré de liberté au processus de calibration, et concomitamment un accord global apparaît pour l'amplitude totale de la probabilité d'interaction électron-phonon (cf. Fig. 1.2b) : on parle du *modèle standard* du transport des électrons dans le silicium.

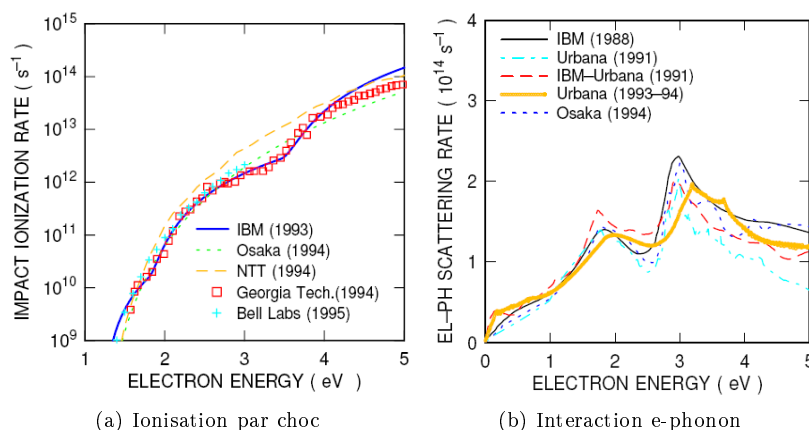


FIG. 1.2: Amplitudes des probabilités d'ionisation par choc (Fig. 1.2a) et d'interaction électron-phonon (Fig. 1.2b) dans le silicium (d'après [11]). Les différentes modélisations convergent vers un consensus dans les années 1990.

La modélisation du transport des trous dans le silicium va suivre la voie tracée par le modèle standard des électrons. Dans les années 1990, les écarts d'amplitude sont drastiques entre les divers modèles décrivant l'interaction trou-phonon [16, 17, 18]. Le calcul exact de la probabilité d'ionisation par choc initiée par les trous [19, 20, 21], ainsi que des mesures de l'efficacité quantique à très hautes énergies [18], où l'influence des ionisations initiées par les trous secondaires devient significative, permettent l'émergence d'un consensus autour d'une solution unique pour la dépendance en énergie de la probabilité d'interaction trou-phonon dans le silicium. Dès lors un modèle standard général est établi pour la modélisation du transport à haute énergie des porteurs de charge dans le silicium.

1.2 État de l'art de la simulation Monte Carlo

1.2.1 Transport dans les semiconducteurs de la colonne IV

Les algorithmes Monte Carlo pour la simulation du transport des charges tendent à améliorer le caractère prédictif de leurs résultats. Cette course à l'exactitude physique requiert, d'une part de minimiser le nombre de paramètres empiriques introduits arbitrairement dans les modèles, d'autre part d'éviter d'avoir recours à des approximations dans la construction des modèles physiques.

Concernant la simulation du transport des porteurs dans le silicium, les algorithmes Monte Carlo les plus élaborés intègrent des modèles exclusivement numériques [3, 22] :

- Les structures de bandes sont calculées par des méthodes *ab initio* ou pseudo-empiriques (EPM, Tight-Binding, *k.p.*, etc.) et sont tabulées numériquement ;
- Le modèle d'interaction porteur-phonon intègre une description numérique anisotrope exacte de la dispersion phononique ; l'utilisation de constantes de couplages arbitraires est remplacée par un développement de l'Hamiltonien d'interaction intégrant un pseudopotentiel et les fonctions d'ondes incidente et réfléchie ;
- Le modèle d'ionisation par choc est calculé numériquement, en cohérence avec la structure de bande et avec le potentiel coulombien écranté de l'interaction inter-porteur ; la probabilité d'ionisation résultante est anisotrope, conserve exactement l'énergie et le vecteur d'onde des particules interagissant, et ne contient aucun paramètre d'ajustement.

L'emploi de ces modèles permet de reproduire correctement de nombreux résultats expérimentaux dans une large gamme de champs électriques, à savoir les caractéristiques expérimentales de vitesse de dérive, les coefficients d'ionisation et les mesures d'efficacité quantique.

La modélisation du transport des charges dans le germanium massif par technique Monte Carlo a été relativement peu étudiée. Plusieurs modèles Full-Band ont néanmoins été appliqués aux deux types de porteurs [19, 23, 24, 25]. Parmi ces études, seule la référence [19] a utilisé un modèle physique d'ionisation par choc, dérivé de calculs *ab initio*. Il est remarquable qu'à l'heure actuelle, aucun modèle standard n'a été établi pour les probabilités d'interaction électron-et trou-phonon dans le germanium.

1.2.2 Transport dans les alliages aléatoires

La modélisation du transport dans les alliages aléatoires par méthode Monte Carlo requiert l'inclusion de 2 composantes spécifiques :

1. La structure de bande prise en compte est celle de l'alliage considéré, décrite dans le cadre théorique du potentiel virtuel cristallin ;
2. Le mécanisme de diffusion sur potentiel d'alliage est pris en compte par la spécification d'un modèle d'interaction supplémentaire.

Dans le cas des matériaux semiconducteurs de la colonne IV, l'alliage aléatoire binaire $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ a fait l'objet de très nombreuses études théoriques. L'approche Monte Carlo a notamment été largement utilisée pour modéliser le transport des électrons [26, 27, 28, 29] et des trous [10, 30, 31, 32] dans les alliages SiGe. Cependant, la grande majorité des algorithmes MC présentés parmi ces travaux utilisent des structures de bandes analytiques, et sont par conséquent seulement valides dans la gamme des basses énergies, pour l'extraction des mobilités à faible champ notamment. Seuls les modèles numériques proposés dans les travaux de Buffer [27, 32] incluent la dispersion Full-Band du SiGe, et peuvent être utilisés pour simuler le transport des électrons et des trous dans les alliages SiGe soumis à des champs électriques élevés.

Le transport des porteurs de charge dans les alliages aléatoires binaires $\text{Si}_{1-y}\text{C}_y$ et ternaires $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ a été très peu investigué par simulation.

Les mobilités des électrons ont notamment été calculées par méthode Monte Carlo dans les alliages SiC [33, 34] et SiGeC [35]. Ces 3 références emploient une bande de conduction analytique composée de 6 vallées Δ , essentiellement similaire à celle du silicium. Parmi ces 3 études, seuls les travaux de Chang [34] incluent un modèle de diffusion sur potentiel d’alliage réalistiquement calibré sur des mesures de mobilité dans des couches de SiC.

A notre connaissance, aucune étude théorique du transport des trous dans les alliages $\text{Si}_{1-y}\text{C}_y$ et $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ n’a été reportée.

1.2.3 Transport dans les matériaux dopés

Dans un algorithme de simulation Monte Carlo, les effets induits par l’ionisation des espèces dopantes sont généralement décrits par 2 modèles spécifiques :

1. L’action diffusivité des dopants ionisés est modélisée par l’introduction d’un mécanisme d’interaction porteur-impureté ionisée ;
2. La dégénérescence qui apparaît lorsque le dopage atteint de très fortes concentrations, est modélisée par l’implémentation du principe d’exclusion de Pauli.

L’implémentation du modèle d’interaction porteur-impureté ionisée dans un simulateur Monte Carlo est reconnue pour être particulièrement problématique, du fait de la très forte amplitude des probabilités d’interaction généralement associées à ce mécanisme [36]. C’est pourquoi plusieurs travaux ont orienté leurs efforts vers la formulation de modèles efficacement implémentables dans un algorithme MC [36, 37, 38, 39]. Ces modèles théoriques ne sont donc pas développés dans le but de fournir une description physiquement exacte, mais privilégient la rapidité d’exécution du programme. Le gain en efficacité permis par ces modèles repose essentiellement sur la diminution drastique de la probabilité d’interaction, associée à une relaxation importante du vecteur d’onde au cours de la diffusion : on modélise des interactions fréquentes mais peu effectives, par des interactions rares mais modifiant substantiellement l’état incident. Les modélisations efficaces proposées s’appuient sur l’argument de l’interférence du 3^e corps² [36, 40], ou sur l’approximation de la fréquence de relaxation du moment [37, 38, 39].

Parallèlement à ces travaux d’optimisation, de nombreuses études cherchent à formuler une modélisation physique la plus rigoureuse possible de l’interaction porteur-impureté ionisée. A ce titre, le formalisme théorique proposé dans les références [41, 42] à la fin des années 1990 semble constituer la modélisation la plus exacte de l’interaction porteur-impureté. En prenant en compte la dispersion de la longueur d’écrantage, l’interaction sur potentiels multiples et le facteur de forme atomique de l’impureté, le modèle des Ref. [41, 42] parvient à reproduire la dépendance en dopage des mobilités expérimentales dans une gamme de concentration extrêmement large³. De plus, les résultats théoriques sont dépendants du type (donneur ou accepteur) et de la nature (P, As, etc.) de l’élément dopant, en accord avec les résultats expérimentaux de référence de Masetti *et al.* [43]. Cependant, plusieurs composantes de la modélisation des Ref. [41, 42] ont été critiquées dans le commentaire de la Ref. [44], remettant en question la capacité du modèle théorique à décrire l’influence de l’élément dopant [45].

² *third-body interference* en Anglais
³ $10^{15} \text{ cm}^{-3} \leq N_i \leq 10^{21} \text{ cm}^{-3}$

La modélisation du principe d'exclusion de Pauli au sein d'un algorithme MC a été implémentée avec succès par la méthode Lugli-Ferry [46]. Cette technique modélise la dégénérescence quantique par l'application d'une procédure de réjection à la probabilité d'occupation de l'état final. La souplesse de cette méthode, applicable aux structures de bande analytiques et numériques, aux algorithmes mono- et multi-particule, et à tous les niveaux de dégénérescence, a entraîné son utilisation dans un très grand nombre de publications [8, 42, 47], faisant de cette méthode répandue la technique standard de modélisation du PEP. Les limitations d'ordre numérique de la méthode standard Lugli-Ferry pouvant résulter dans une probabilité d'occupation dépassant localement l'unité, une correction numérique est proposée dans la Ref. [48] pour minimiser ces erreurs.

1.3 Contexte et objectifs de la thèse

Les transistors bipolaires à hétérojonction avancés utilisent des bases composées de couches de SiGeC fortement dopées et contraintes sur silicium. La simulation TCAD du transport des charges dans ces structures nécessite par conséquent la prise en compte des profils de germanium et de carbone [49]. Les divers modèles employés décrivent les propriétés électroniques spécifiques du matériau en chaque point de la structure. A ce titre, ces modèles doivent dépendre des concentrations en germanium, carbone et espèces dopantes définissant localement la composition du matériau.

Dans une simulation de transport de type dérive-diffusion ou hydrodynamique, les diverses propriétés électroniques du matériau s'organisent généralement en 2 ensembles :

1. les propriétés de structure de bande, à savoir la largeur de bande interdite, les masses effectives de courbure, la masse effective de densité d'états, etc. ;
2. les propriétés de transport des charges, à savoir la mobilité à faible champ, la vitesse de saturation, le coefficient d'ionisation, le temps de relaxation de l'énergie, etc.

Les propriétés de structure de bande peuvent être mesurées (par exemple, mesure de bande interdite par photoluminescence) ou calculées par simulation *ab initio*. Les propriétés de transport des charges peuvent également être mesurées (par exemple, mesure de mobilité par effet Hall), ou calculées par résolution de l'équation de Boltzmann appliquée à un système homogène et stationnaire représentatif du matériau considéré.

La problématique de cette thèse est apparue du fait de l'insuffisance des données expérimentales caractérisant les propriétés de transport des charges libres dans les alliages SiGe et SiGeC. La faible quantité des résultats expérimentaux publiés ne constitue pas un ensemble suffisamment exhaustif pour permettre la formulation de modèles empiriques, décrivant par exemple la mobilité des trous dans le SiGe. Ces lacunes dans notre connaissance expérimentale des propriétés de transport des alliages SiGe et SiGeC résulte dans l'utilisation de modèles approximatifs, assimilant souvent les propriétés peu connues des alliages SiGe et SiGeC à celles du silicium massif, et ainsi affecte notre méthodologie de simulation. Dans l'optique d'améliorer la prédictivité de nos simulations de transistors HBT, il est donc nécessaire de formuler une modélisation physique des propriétés de transport des alliages SiGe et SiGeC contraints sur Si.

Les matériaux définissant le cadre de notre étude correspondent aux alliages binaires $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ et ternaires $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ utilisés dans la conception des bases des transistors HBT. Dans ce contexte technologique, les alliages synthétisés intègrent généralement des concentrations relatives limitées en germanium et carbone :

$$\begin{cases} 0 \leq x \leq 30\% \\ 0 \leq y \leq 1\% \end{cases} \quad (1.1)$$

Dans les alliages SiGeC étudiés, le carbone sera donc toujours l'espèce largement minoritaire.

Les couches de SiGeC constituant la base étant épitaxiées pseudomorphiquement sur substrat Si, elles sont soumises à une contrainte biaxiale induite par le désaccord de maille entre la couche et le substrat massif. Les propriétés électroniques pertinentes à modéliser dans le cadre de notre étude sont celles des alliages SiGeC biaxialement contraints sur Si. En outre, les bases des transistors HBT sont fortement dopées durant la phase de fabrication industrielle. Il est donc nécessaire de prendre en compte l'influence des concentrations des espèces dopantes sur les propriétés électroniques du matériau.

Les propriétés de transport requises dans les simulateurs de type dérive-diffusion ou hydrodynamique sont relatives au comportement du matériau soumis à des champs électriques faibles (e.g. mobilité ohmique), intermédiaires (e.g. temps de relaxation), ou forts (e.g. coefficient d'ionisation). La modélisation physique de ces propriétés requiert donc de se doter de méthodes de calcul capables de résoudre l'équation de Boltzmann en milieu homogène pour un champ électrique quelconque. En particulier, la méthode de modélisation doit rester valide lorsque le champ appliqué est suffisamment fort pour exciter les porteurs de charge en-dehors de l'état d'équilibre thermodynamique.

Afin de satisfaire l'ensemble de ces contraintes numériques, on applique la méthode Monte Carlo à la résolution de l'équation de Boltzmann dans le milieu homogène défini par l'alliage ternaire $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ dopé et contraint sur Si. Cette approche numérique présente les avantages suivants :

- La souplesse de cette méthode permet de décrire chaque caractéristique du milieu de propagation (fractions molaires x et y , concentration du dopage) de façon indépendante, par l'implémentation d'un modèle d'interaction spécifique ;
- L'utilisation de structures de bande numériques dans un simulateur MC Full-Band garantit la description exacte du transport à hautes énergies, c'est-à-dire lorsque les porteurs sont très éloignés de l'état d'équilibre thermodynamique ;
- Le formalisme des modèles MC est suffisamment complexe pour minimiser le nombre des paramètres arbitraires utilisés, et pour fournir une description physique prédictive du système modélisé.

Les inconvénients notoires de la méthode Monte Carlo sont intrinsèquement liés à sa nature statistique :

- Les résultats produits sont affectés par une incertitude statistique ;
- Les délais de simulation nécessaires à l'établissement d'une convergence statistique satisfaisante peuvent être prohibitivement longs. De nombreuses techniques efficaces d'optimisation numérique permettent cependant de minimiser ces délais de convergence [39, 50].

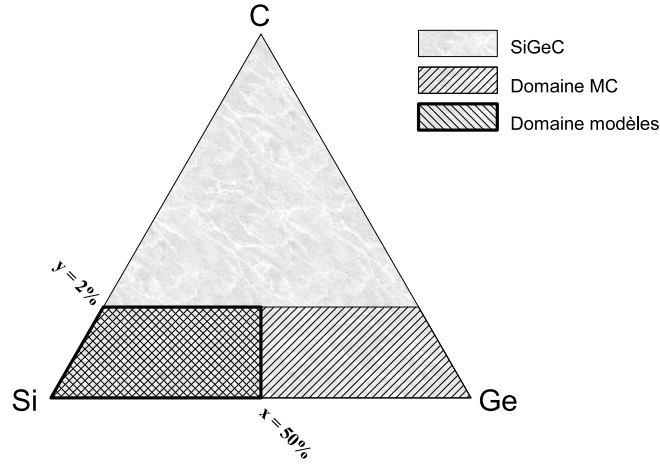


FIG. 1.3: Illustration schématique des domaines de validité respectifs des simulations Monte Carlo et des modèles analytiques dérivés, dans la gamme des alliages ternaires $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$.

La figure 1.3 illustre schématiquement la gamme des compositions (x, y) couverte par nos modèles Monte Carlo. Les matériaux purs accessibles à nos simulations sont le silicium et le germanium. Les modèles analytiques dérivés des résultats MC sont typiquement restreints à la gamme des compositions suivantes :

$$\begin{cases} 0 \leq x \leq 50\% \\ 0 \leq y \leq 2\% \end{cases} \quad (1.2)$$

La gamme des compositions industrielles (1.1) étant incluse dans le domaine de validité (1.2) des modèles analytiques, ceux-ci sont implémentables dans les simulateurs de dispositifs de type HBT.

CHAPITRE 1. PROBLÉMATIQUE & MÉTHODE DE RÉOLUTION

Chapitre 2

La méthode Monte Carlo appliquée à la simulation du transport électronique dans un matériau semiconducteur

2.1 Principe de la méthode Monte Carlo

2.1.1 Définition générale de la méthode Monte Carlo

On appelle *méthode Monte Carlo* toute méthode visant à calculer une valeur numérique en utilisant des procédés aléatoires, c'est-à-dire des techniques probabilistes¹. Le nom de cette méthode, qui fait allusion aux jeux de hasard pratiqués au casino de Monte-Carlo de Monaco, a été inventé en 1947 par Nicholas Metropolis.

La méthode Monte Carlo connaît des applications très nombreuses et diversifiées dans la résolution de problèmes mathématiques, physiques ou statistiques. Elle est souvent utilisée lorsque la solution mathématique recherchée n'est pas accessible par une méthode déterministe, ou encore lorsque les seules méthodes déterministes possibles sont construites sur des approximations jugées trop drastiques. Basée sur la génération répétée de nombres aléatoirement distribués, la technique Monte Carlo s'appuie sur la puissance de calcul des ordinateurs, souvent par l'intermédiaire d'algorithmes récursifs.

Du fait de sa nature stochastique, la méthode Monte Carlo est massivement employée pour modéliser numériquement le comportement de systèmes physiques quantiques, c'est-à-dire régis par des lois probabilistes². En particulier, la modélisation du mouvement des porteurs de charge libres dans les matériaux semiconducteurs par approche Monte Carlo a fait l'objet de travaux nombreux et intensifs dans la communauté scientifique depuis la fin des années 1960 [2].

¹définition *Wikipédia*

²par opposition aux systèmes physiques macroscopiques régis par des lois déterministes, par exemple dans le cadre de la mécanique newtonienne

2.1.2 Génération d'un nombre aléatoire

La pierre angulaire de tout algorithme Monte Carlo est la génération de *nombres aléatoires*³, c'est-à-dire de variables aléatoires dont la densité de probabilité est constante. Pour produire une suite r_n de nombres aléatoires, on utilise la méthode de *génération à congruence linéaire* [2]. Cette méthode calcule les termes r_n de façon itérative, selon :

$$r_n = pr_{n-1} \pmod{q} \quad (2.1)$$

Il est plus commode de disposer de nombres aléatoires normalisés entre 0 et 1. Une telle suite s_n s'obtient immédiatement depuis la suite brute r_n :

$$s_n = r_n/q$$

Les constantes numériques p et q doivent être choisies de manière à garantir le caractère aléatoire de la suite r_n . De nombreuses combinaisons (p, q) ont été reportées, toutes proposant un compromis entre la rapidité du calcul et le respect de plusieurs critères statistiques (non-périodicité de la suite, etc.). Dans ce qui suit, on choisit d'adopter le générateur de Park-Miller⁴ [51], défini par :

$$\begin{aligned} r_0 &= 1 \\ p &= 7^5 \\ q &= 2^{31} - 1 \end{aligned}$$

Il faut noter que, pour une valeur initiale r_0 donnée, la suite de nombres r_n est définie de façon tout à fait déterministe, c'est pourquoi on parle d'une suite de nombres *pseudo-aléatoires*. Une suite pseudo-aléatoire ne fait que reproduire le comportement statistique du hasard.

Dans la suite de ce document, on notera r tout nombre pseudo-aléatoire généré entre 0 et 1 selon la suite (2.1).

2.1.3 Génération d'un nombre distribué

La modélisation de phénomènes stochastiques par méthode MC est basée sur la génération de variables aléatoires distribuées. On s'intéresse ici au cas le plus général où la variable x est distribuée entre les points a et b suivant une fonction $f(x)$ quelconque. En utilisant la *technique de réjection*, on va pouvoir générer stochastiquement une série de valeurs de x . La puissance de la technique de réjection réside dans la souplesse de son utilisation. En effet, aucun critère de dérivabilité, d'intégrabilité ou de continuité n'est requis pour la fonction f . La distribution f de x doit seulement être positive et bornée entre a et b . Notons C une borne supérieure de f entre a et b .

La méthode de réjection opère en deux temps :

1. On génère une abscisse aléatoire x_r et une ordonnée aléatoire associée y_r , respectivement définies par :

$$\begin{aligned} x_r &= a + (b - a)r \\ y_r &= Cr' \end{aligned}$$

³ *random numbers* en Anglais

⁴ aussi connu sous l'appellation de générateur MINSTD

Le couple (x_r, y_r) définit les coordonnées d'un point aléatoire M_r .

- On applique la réjection à la valeur x_r générée pour la variable x . La valeur x_r est acceptée si :

$$y_r \leq f(x_r) \tag{2.2}$$

c'est-à-dire si le point aléatoire M_r est situé sous la courbe d'équation $y = f(x)$. Si $y_r > f(x_r)$, la valeur x_r est rejetée et un nouveau couple (x_r, y_r) est généré, ainsi de suite jusqu'au respect de la condition d'acceptation. La probabilité d'acceptation de x_r étant proportionnelle à $f(x_r)$, c'est bien la fonction f qui va gouverner la fréquence de génération des valeurs x_r .

La figure 2.1 illustre le résultat de la génération par réjection de N nombres, distribués entre 0 et 1 selon une fonction f gaussienne.

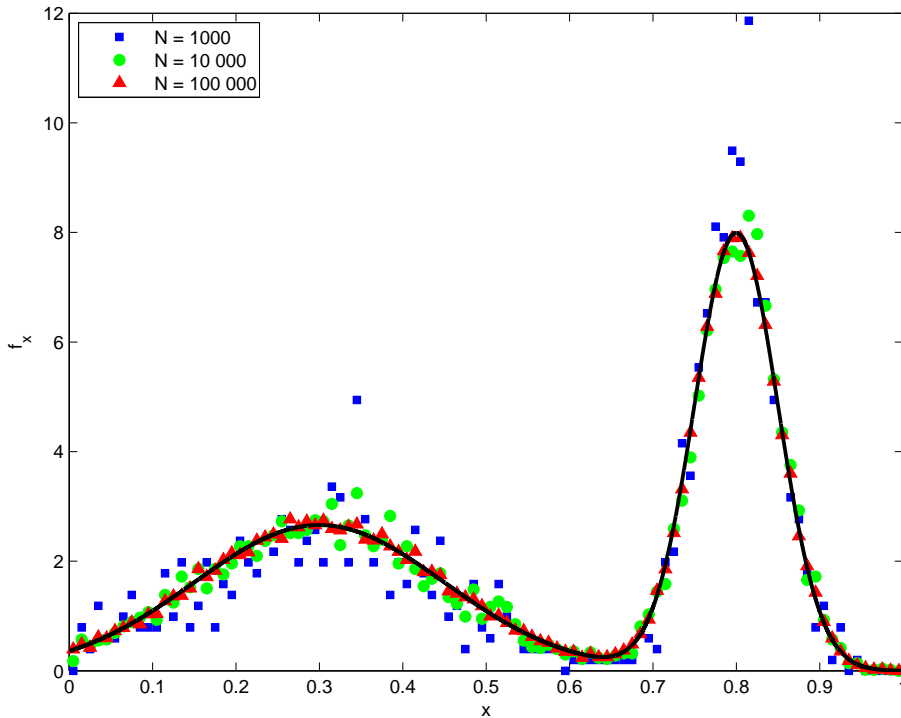


FIG. 2.1: Génération stochastique de N nombres distribués entre 0 et 1 selon une fonction f . Ici la fonction f est la somme de 2 gaussiennes (ligne continue).

On peut remarquer que, si la fonction f est très fortement piquée en un point x_p , le maximum $C \geq f(x_p)$ sera très supérieur à $f(x_r)$ pour tous les x_r qui ne sont pas au voisinage de x_p . Dans de telles conditions, la probabilité d'acceptation de x_r chute drastiquement, et un grand nombre de paires (x_r, y_r) doivent être générées pour trouver un x_r vérifiant (2.2). Pour améliorer l'efficacité de l'algorithme de réjection, on pourra alors avoir recours à une technique de réjection plus optimisée, appelée *technique combinée* (cf. Ref. [2], p. 699).

2.1.4 Génération d'un nombre discret

Si la variable aléatoire x est discrète, i.e. si x ne peut prendre de valeur que dans un ensemble discret de n éléments $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$, on utilise la *réjection discrète*. Si on note P_i la probabilité liée à chaque valeur x_i , on génère un nombre aléatoire

$$y_r = Pr$$

où

$$P = \sum_{i=1}^n P_i$$

est la probabilité totale. La valeur x_j de x retenue par la réjection est celle dont l'indice j est le plus petit entier vérifiant :

$$\sum_{i=1}^j P_i \geq y_r$$

La probabilité de sélection de x_i est bien proportionnelle à la probabilité associée P_i , et l'ordre d'indexation des valeurs x_i n'a aucune influence sur la sélection stochastique.

2.2 Application à la simulation du transport électronique

2.2.1 Algorithme d'un simulateur Monte Carlo

La méthode Monte Carlo appliquée au transport électronique dans un semiconducteur, consiste à simuler le mouvement des porteurs de charge libres (électrons et trous) au sein du cristal. Ce mouvement est induit par deux ensembles de phénomènes physiques :

1. les forces motrices qui accélèrent les porteurs de charge, à savoir les forces induites par les champs électrique, magnétique et gravitationnel. En raison de la masse infinitésimale de l'électron⁵, l'action de son poids est toujours négligeable devant celle des forces électromagnétiques, aussi le champ gravitationnel est-il toujours ignoré.
2. les mécanismes de *diffusion*⁶ qui freinent les porteurs de charge en détruisant leur quantité de mouvement. Dans un cristal semiconducteur, les porteurs de charge élémentaires sont susceptibles d'être diffusés par l'action de potentiels perturbateurs. Ces potentiels diffuseurs sont d'origines diverses :
 - vibrations interatomiques du réseau cristallin (*phonons*),
 - excitation d'une charge de valence par une charge libre (*ionisation par choc*),
 - collisions entre porteurs de charge (*électron-électron*, *électron-trou*, *trou-trou*),
 - impuretés neutres et ionisées dans les semiconducteurs dopés,

⁵ $m_0 = 9.109382 \cdot 10^{-31} \text{kg}$

⁶*scattering* en Anglais

- potentiel d’alliage dans les alliages aléatoires,
- défauts dans les réseaux non-parfaits (dislocations, centres de recombinaison, *clusters*, etc.),
- potentiel de surface à l’interface entre le milieu semiconducteur et une couche isolante (interface Si-SiO₂ dans les MOSFET silicium).

L’approche Monte Carlo consiste à modéliser le mouvement des porteurs de charge comme une succession d’accélération balistiques induites par le champ électrique, interrompues par des diffusions sur les potentiels perturbateurs présents dans le milieu de propagation. Assez naturellement, l’algorithme de la simulation va donc s’organiser de façon itérative, chaque cycle itératif consistant en un doublet *accélération-diffusion*.

L’algorithme global du programme Monte Carlo présenté dans ce document est explicité dans la figure 2.2. Les sections suivantes détaillent le contenu de chaque partie composant le corps de l’algorithme.

2.2.2 Définition du système physique

Préalablement à toute simulation, le système physique étudié doit être défini. Dans le cadre de la simulation du transport dans un matériau semiconducteur homogène, cette définition inclut globalement trois ensembles de paramètres :

1. Le type de la particule porteuse de charge dont on simule le transport, à savoir *électron* (charge élémentaire négative) ou *trou* (charge élémentaire positive).
2. La nature du matériau semiconducteur constituant le milieu de propagation. Puisque notre étude est relative aux alliages ternaires Si_{1-x-y}Ge_xC_y utilisés dans l’industrie de la microélectronique, les paramètres de définition sont :
 - la concentration relative⁷ en germanium, notée x ;
 - la concentration relative en carbone, notée y ;
 - la concentration et le type des espèces dopantes implantées dans le matériau. Un atome dopant est de type *donneur* (resp. *accepteur*) si son ionisation au sein du réseau donne lieu à la création d’une charge libre de type électron (resp. trou). Les concentration des dopants donneurs et accepteurs sont respectivement notées N_D et N_A et sont usuellement exprimées en cm⁻³.
3. Les conditions physiques auxquelles le matériau est soumis :
 - la température du réseau cristallin, notée T ;
 - le champ électrique externe, sous la forme d’un vecteur \vec{F} ;
 - l’état de contrainte du matériau, spécifié par un tenseur de déformation ϵ .

2.2.3 Initialisation de l’état de la particule

Lors de la première itération de l’algorithme, l’état de la particule doit être initialisé. Pour optimiser la convergence statistique des résultats, il est préférable de choisir un état initial physiquement pertinent, c’est-à-dire suffisamment proche de l’état moyen vers lequel la simulation va converger [2]. Le présent algorithme initialise l’état de la particule en la supposant originellement à

⁷aussi appelée *fraction molaire*

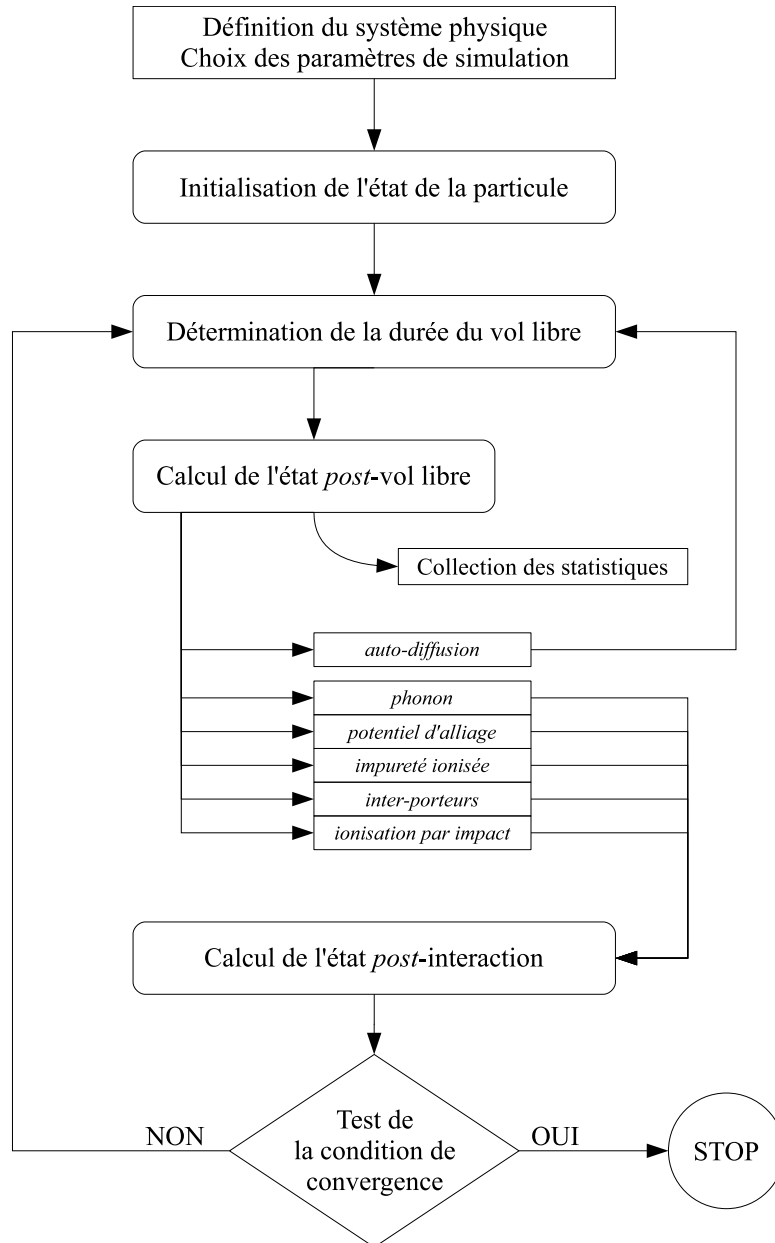


FIG. 2.2: Algorithme de notre programme de simulation Monte Carlo mono-particule à champ constant. Tous les types d'interaction pris en compte sont spécifiés.

l'équilibre thermodynamique. Puisque les deux types de particules dont on modélise le transport sont des *fermions*, la loi statistique décrivant leur distribution énergétique à l'équilibre thermodynamique est celle de Fermi-Dirac :

$$f_0(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E-E_F}{k_B T}\right)} \quad (2.3)$$

La fonction f_0 explicitée dans (2.3) est la probabilité qu'un état d'énergie E soit occupé. Dans un matériau semiconducteur, la distribution en énergie des porteurs libres est donnée par la *densité en énergie*⁸ $n(E)$, qui correspond à la concentration de porteurs dont l'énergie cinétique est comprise entre E et $E + dE$. La densité $n(E)$ d'états occupés à l'énergie E est le produit de la probabilité d'occupation à l'énergie E par la densité d'états à l'énergie E :

$$n(E) = f(E)\mathcal{D}(E) \quad (2.4)$$

En se basant sur la condition initiale de l'équilibre thermodynamique, on pourra donc calculer l'énergie initiale E_i de la particule en appliquant une technique de réjection (cf. § 2.1.3) à la distribution $n_0(E)$ définie par :

$$n_0(E) = f_0(E)\mathcal{D}(E) \quad (2.5)$$

Une fois déterminée l'énergie initiale E_i , le vecteur d'onde initial k_i de la particule est ensuite calculé par randomisation sur la surface iso-énergie $\{E = E_i\}$ (cf. § 2.3.6).

2.2.4 Accélération balistique

Lors des phases d'accélération balistique par le champ électrique, le porteur de charge est modélisé comme une particule ponctuelle soumise à la seule force du champ : on parle d'une phase de *vol libre*⁹. L'application de la deuxième loi de Newton¹⁰ à la particule de charge q et de vecteur d'onde \vec{k} s'écrit :

$$\dot{p} = \hbar \dot{k} = \sum_i \vec{F}_i = q\vec{F} \quad (2.6)$$

L'intégration de l'équation (2.6) sur la durée Δt_{ff} du vol libre donne :

$$\vec{\Delta k} = \frac{1}{\hbar} q\vec{F} \Delta t_{\text{ff}} \quad (2.7)$$

Comme le montre l'équation (2.7), l'action exercée par le champ électrique \vec{F} sur le porteur de charge au cours du vol libre résulte en une translation de son vecteur d'onde colinéairement à \vec{F} . La durée du vol libre est calculée stochastiquement suivant [2] :

$$\Delta t_{\text{ff}} = -\Gamma_{\text{max}}^{-1} \ln(r) \quad (2.8)$$

où le terme Γ_{max} est la valeur maximale de la probabilité totale d'interaction de la particule avec les différents potentiels diffuseurs. Les probabilités d'interaction dépendant généralement de l'énergie cinétique E du porteur de charge, il

⁸souvent appelée *fonction de distribution*

⁹*free flight* en Anglais

¹⁰ou *principe fondamental de la dynamique de translation (PFDT)*

est primordial de pouvoir estimer l'énergie maximale E_{\max} accessible à la particule pendant la simulation. Γ_{\max} prendra la valeur du maximum de $\Gamma(E)$ dans l'intervalle $[0, E_{\max}]$.

Le calcul de la durée Δt_{ff} suivant (2.8) suppose que la probabilité d'interaction soit constante et égale à Γ_{\max} . Pour corriger cette approximation, il faut introduire un mécanisme de diffusion supplémentaire, appelé *auto-diffusion*¹¹. Ce mécanisme fictif est une diffusion neutre i.e. qui ne modifie pas l'état de la particule : l'énergie et le vecteur d'onde sont conservés au cours d'une auto-diffusion. La fonction de probabilité Γ_{self} associée à l'auto-diffusion est introduite de telle façon que la somme totale des probabilités de diffusion, incluant la probabilité d'auto-diffusion, soit constante et égale à Γ_{\max} :

$$\Gamma_{\text{self}}(E) = \Gamma_{\max} - \Gamma(E)$$

2.2.5 Sélection stochastique du type de l'interaction

A la fin de chaque phase de vol libre, la particule est soumise à l'action d'une diffusion. Tout processus de diffusion est modélisé comme un mécanisme modifiant instantanément l'état quantique du porteur de charge. Cet état est totalement défini, dans un milieu homogène¹², par les 3 informations suivantes :

1. énergie E ,
2. indice ν de la bande occupée,
3. vecteur d'onde \vec{k} .

La modélisation de la diffusion de la particule consiste dans un premier temps, à choisir la nature de la diffusion parmi les différents mécanismes diffuseurs ; dans un second temps, à calculer l'altération de l'état de la particule par l'action du potentiel diffuseur : on parle d'état *post-diffusion*¹³.

Le choix de la source de diffusion, tout comme le calcul de l'état post-diffusion, obéit à des lois stochastiques. Si le milieu de propagation contient n types de potentiels diffuseurs, les probabilités de diffusion P_i associées à ces interactions constituent un spectre probabiliste discret. Le processus qui donnera lieu à la diffusion sera donc stochastiquement déterminé en appliquant la technique de réjection discrète à la suite $\{P_1(E), P_2(E), \dots, P_n(E)\}$, où E est l'énergie du porteur à la fin du vol libre.

2.2.6 Détermination de l'état après l'interaction

Le calcul de l'état post-diffusion dépendra de 3 ensembles de conditions :

1. l'état de la particule juste avant la diffusion ;
2. la nature physique de l'interaction, qui détermine comment les propriétés physiques de la particule sont altérées par la diffusion ;
3. les approximations établies pour construire le modèle numérique du mécanisme de diffusion.

¹¹ *self-scattering* en Anglais

¹² Dans un milieu non-homogène, le vecteur position \vec{x} est une composante supplémentaire de l'état de la particule.

¹³ *post-scattering state* en Anglais

L'état post-diffusion (k', E_{ν}') sera donc calculé en appliquant aux propriétés de l'état pré-diffusion (k, E_{ν}) le modèle numérique de l'interaction. Parmi les différents types d'interaction possibles, on distingue généralement :

- les interactions *élastiques*, au cours desquelles l'énergie de la particule est conservée : c'est notamment le cas des interactions avec impuretés neutres ou ionisées, de la diffusion sur potentiel d'alliage, de la diffusion sur rugosité de surface, etc.
- les processus *faiblement inélastiques*, qui donnent lieu à un échange d'énergie entre le porteur de charge et le centre diffuseur de l'ordre de quelques meV. Citons par exemple les interactions particule-phonon ou encore les interactions inter-particules. Certains modèles théoriques assimilent par approximation certaines de ces interactions à des phénomènes élastiques, notamment les interactions avec les phonons acoustiques.
- les processus *hautement inélastiques*, où les échanges d'énergies sont de l'ordre de l'électronvolt. Ces interactions font toujours intervenir des processus de franchissement de bande interdite, i.e. de création ou de recombinaison de paires électron-trous : on parle respectivement d'*ionisation par choc* et de *recombinaison Auger*. Les transferts énergétiques accompagnant ces collisions sont nécessairement supérieures à l'amplitude E_g de la bande interdite, d'où leur caractère hautement inélastique.

2.2.7 Collection des statistiques

L'algorithme mono-particule exposé en figure 2.2 permet d'obtenir des résultats statistiques moyens, représentatifs d'un état électrique stationnaire du matériau. La technique utilisée pour calculer la valeur moyenne $\langle A \rangle$ d'une variable A est la méthode de la *moyenne ergodique* [2]. La valeur moyenne $\langle A \rangle$ est calculée comme la moyenne de la suite des valeurs prises par A à la fin de chaque vol libre :

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A_{\text{ff},i} \quad (2.9)$$

où $A_{\text{ff},i}$ désigne la valeur de A à la fin du i^{e} vol libre.

Comme tout résultat statistique, la valeur moyenne $\langle A \rangle$ est affectée par une incertitude statistique. Cette composante de bruit va globalement diminuer avec le nombre N de vols libres simulés, selon une dépendance caractéristique en $1/\sqrt{N}$. Les figures 2.3a, 2.3b et 2.3c illustrent l'évolution des résultats moyens issus de notre algorithme, avec le nombre N de vols libres, pour un maximum de 10^6 vols libres. La figure 2.3a expose la convergence statistique des 3 composantes du vecteur vitesse d'un électron soumis à un champ électrique appliqué suivant la direction x . Comme prévu, les 2 composantes V_y et V_z transverses au champ convergent progressivement vers zéro, alors que la composante V_x tend vers une résultante non-nulle due au champ appliqué. L'observation de la courbe de convergence 2.3c met en évidence une évolution discontinue caractéristique du coefficient d'ionisation par choc. Le coefficient α étant proportionnel au nombre d'ionisations par choc, il est incrémenté chaque fois que la particule est relaxée par une ionisation par choc.

CHAPITRE 2. LA MÉTHODE MONTE CARLO APPLIQUÉE AU TRANSPORT

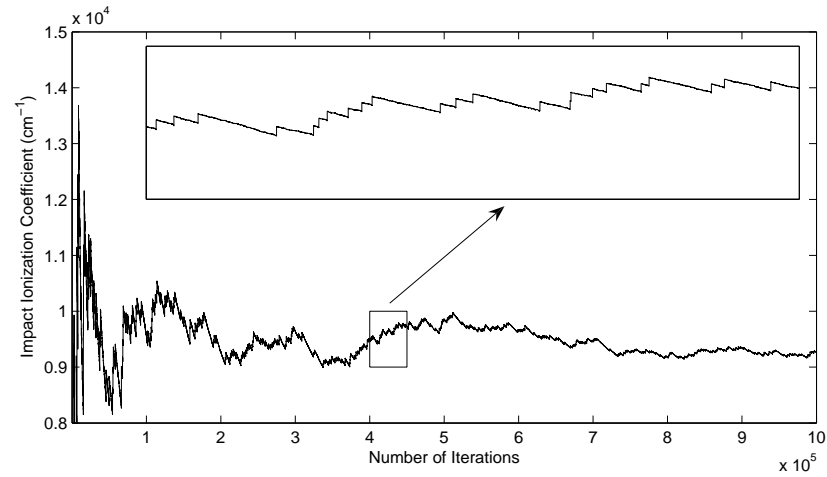
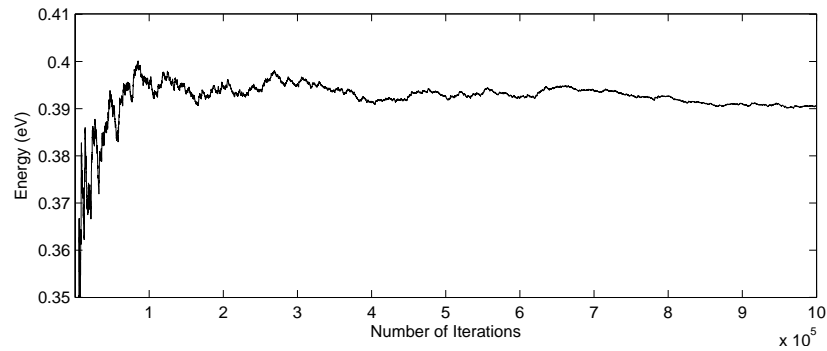
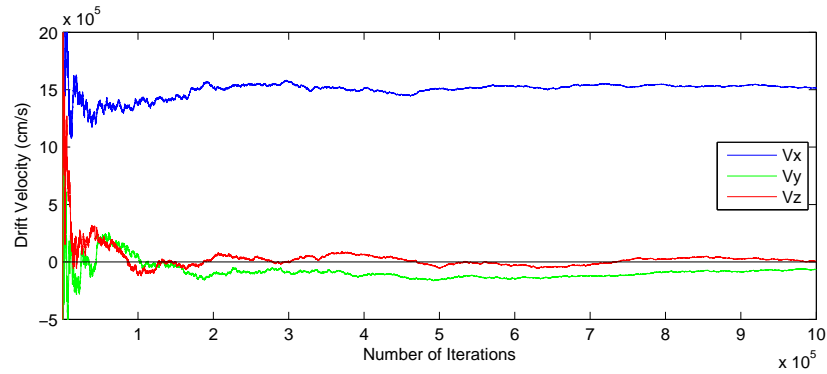


FIG. 2.3: Convergence statistique des résultats de simulation collectés sur un million d'itérations Monte Carlo. Les résultats sont relatifs au transport des électrons dans Si à 300 K. Le champ électrique appliqué dans la direction (100) est respectivement égal à 1 kV/cm, 100 kV/cm et 300 kV/cm pour le calcul de la vitesse (Fig. 2.3a), de l'énergie (Fig. 2.3b) et du coefficient d'ionisation (Fig. 2.3c).

2.3 Description numérique de la structure de bande

2.3.1 Discrétisation de l'espace réciproque

Lorsque la relation de dispersion $E(k)$ est trop complexe pour être décrite par une formulation analytique, on a alors recours à une description numérique de la structure de bande : on parle d'une description *Full-Band* de la dispersion. Comme toute approche numérique, l'approche Full-Band consiste à discrétiser l'espace de la variable k en éléments finis [8]. On choisit de mailler le volume de la 1^{re} zone de Brillouin en tétraèdres [52, 53]. Sur chaque noeud du maillage tétraédrique, la valeur de l'énergie associée à chaque bande est calculée et stockée préalablement à la simulation Monte Carlo. De cette façon, la structure de bande est discrétisée sur le volume de l'espace réciproque.

Le maillage est calculé par le logiciel de maillage 3D Setaurus Mesh. Ce logiciel permet de générer des maillages tridimensionnels incluant des zones de raffinement localisées. Les dispersions respectives des bandes de conduction et de valence étant qualitativement différentes, on développe un maillage spécifique à chaque type de bande.

Maillage des bandes de conduction

Dans l'espace réciproque, les porteurs de charge sont, dans des conditions proches de l'équilibre thermodynamique, essentiellement distribués au voisinage des minima de la structure de bande. Les minima de bande seront donc des régions dans lesquelles la particule va passer la majorité de la durée de sa propagation. Il est donc essentiel de privilégier la précision de la structure de bande au voisinage de ses minima, au détriment des zones de l'espace réciproque qui sont rarement visitées par la particule. Dans cette optique, on construit un maillage non-homogène, localement raffiné à proximité des minima de la bande de conduction. La figure 2.4 illustre le maillage adaptatif résultant, incluant des zones de raffinement aux points Γ , X et L. Toutes les bandes de conduction prises en compte sont discrétisées sur ce maillage.

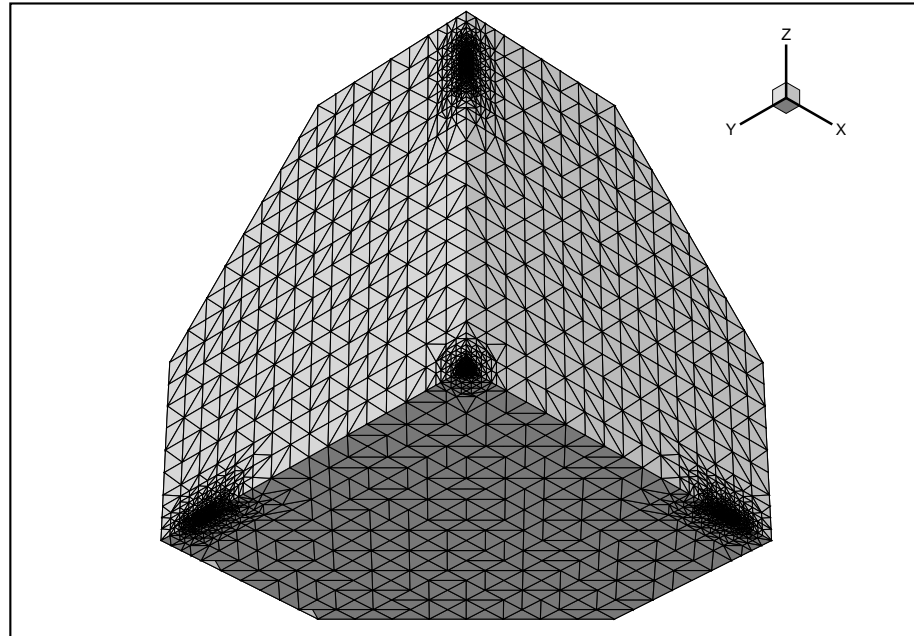
Maillage des bandes de valence

La dispersion des bandes de valence est caractérisée par son unique minima au point Γ . La propagation du vecteur d'onde des trous sera donc essentiellement confinée au voisinage du centre de la zone de Brillouin. Par conséquent, on construit un maillage spécifique raffiné en centre de zone, visible en figure 2.5.

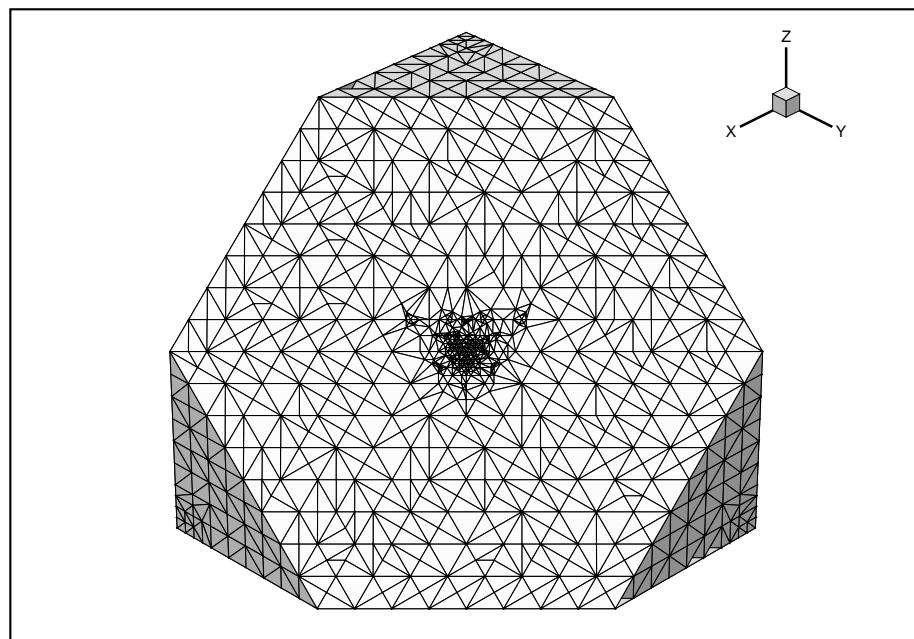
2.3.2 Interpolation de l'énergie

La discrétisation de la structure de bande implique la nécessité d'une méthode d'interpolation. L'énergie $E_\nu(K)$ de la bande ν au point K est calculée par interpolation linéaire entre les 4 sommets de l'unique tétraèdre contenant K [50].

Si on note S_1, S_2, S_3 et S_4 les 4 sommets de l'élément de volume contenant K , on définit les *coordonnées barycentriques* de K dans le repère $\{S_1, S_2, S_3, S_4\}$



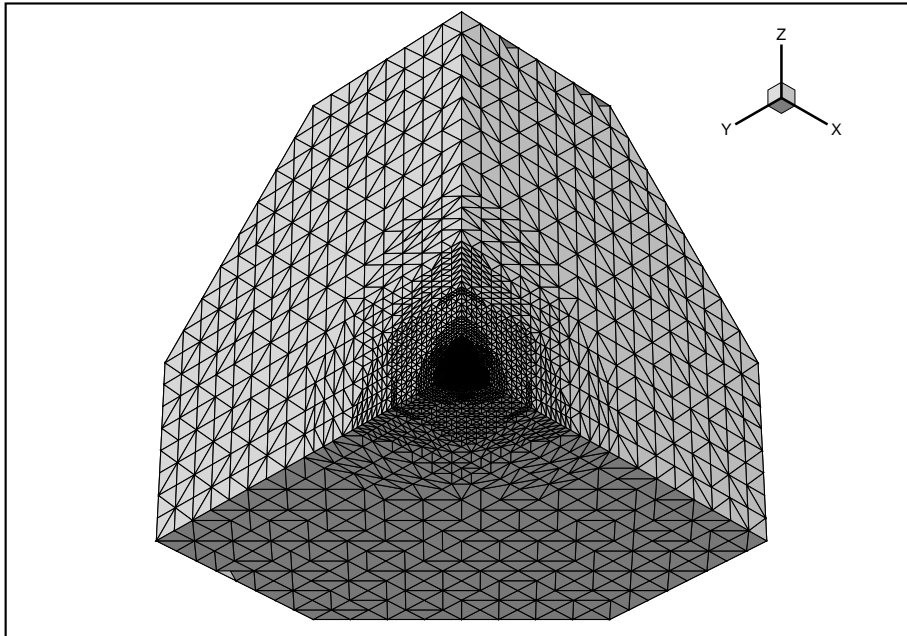
(a) Vue interne



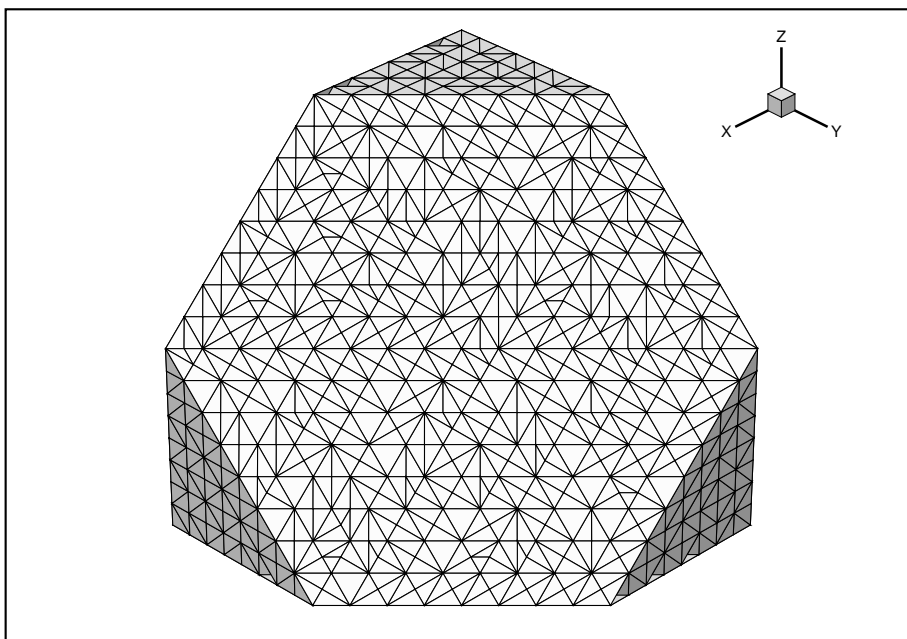
(b) Vue externe

FIG. 2.4: Maillage tétraédrique d'un 8^e de la zone de Brillouin pour la discrétisation de la dispersion des bandes de conduction. Des zones de raffinement sont visibles au voisinage des points Γ , X (Fig. 2.4a) et L (Fig. 2.4b).

2.3. DESCRIPTION NUMÉRIQUE DE LA STRUCTURE DE BANDE



(a) Vue interne



(b) Vue externe

FIG. 2.5: Maillage tétraédrique d'un 8^e de la zone de Brillouin pour la discrétisation de la dispersion des bandes de valence. Une unique zone de raffinement centrée en Γ (Fig. 2.5a) est visible.

comme l'unique suite de coefficients $\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4\}$ vérifiant¹⁴ :

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^4 \alpha_i \overrightarrow{KS_i} &= \overrightarrow{0} \\ \sum_{i=1}^4 \alpha_i &= 1 \end{cases} \quad (2.10)$$

Les coefficients barycentriques constituent un groupe de poids permettant d'interpoler linéairement toute fonction dont la valeur est connue aux sommets. Si les énergies de la bande ν associées aux sommets $\{S_1, S_2, S_3, S_4\}$ sont respectivement $\{E_{\nu,1}, E_{\nu,2}, E_{\nu,3}, E_{\nu,4}\}$, l'interpolation linéaire de l'énergie de la bande ν au point K est calculée selon :

$$E_\nu(K) = \sum_{i=1}^4 \alpha_i E_{\nu,i} \quad (2.11)$$

A l'interface entre 2 tétraèdres adjacents, le point K est coplanaire avec les 3 sommets délimitant la face commune. Dans ces conditions géométriques, le coefficient barycentrique associé au 4^e sommet extérieur à l'interface est nul. Le développement en coordonnées barycentriques est donc conservé lorsque le point K traverse l'interface, ce qui assure la continuité de l'interpolation linéaire de l'énergie à l'interface entre les éléments de volume tétraédriques du maillage.

2.3.3 Calcul de la vitesse de groupe

Le calcul de la vitesse de groupe de la particule est une opération effectuée très fréquemment au cours de la simulation Monte Carlo. La vitesse de groupe v d'une particule de vecteur d'onde k dépend du gradient de la structure de bande $E(k)$ selon [8] :

$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E_\nu(k) \quad (2.12)$$

Le calcul de $v(k)$ se ramène donc à l'extraction du gradient $\nabla_k E$ au point k . Par cohérence avec l'interpolation linéaire de la dispersion $E(k)$ dans les tétraèdres, le gradient $\nabla_k E_\nu(k)$ est considéré comme constant dans chaque élément tétraédrique [53]. Pour calculer le gradient $\nabla_T E_\nu$ de la bande ν dans l'élément $S_1 S_2 S_3 S_4$, on résout le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \overrightarrow{\nabla_T E_\nu} \cdot \overrightarrow{S_1 S_2} &= E_{\nu,2} - E_{\nu,1} \\ \overrightarrow{\nabla_T E_\nu} \cdot \overrightarrow{S_1 S_3} &= E_{\nu,3} - E_{\nu,1} \\ \overrightarrow{\nabla_T E_\nu} \cdot \overrightarrow{S_1 S_4} &= E_{\nu,4} - E_{\nu,1} \end{cases} \quad (2.13)$$

Cette méthode permet un calcul rapide du gradient de l'énergie dans l'élément de volume T . Le calcul du gradient de la dispersion $\nabla_T E_\nu$ est également utilisé pour la détermination de la densité d'états en énergie (cf. § 2.3.4).

2.3.4 Calcul de la densité d'états électroniques

La *densité d'états électroniques*¹⁵ est une quantité fondamentale dans un algorithme Monte Carlo. Lorsqu'on l'exprime comme une fonction de l'énergie

¹⁴Le centre G du tétraèdre est l'unique point dont les coordonnées barycentriques dans le repère des sommets vérifient $\alpha_i = 1/4 \quad \forall i$.

¹⁵*density of states* en Anglais

E du porteur, la densité d'états $\mathcal{D}(E)$ désigne le nombre d'états¹⁶ disponibles dans le cristal entre les énergies E et $E + dE$. Cette quantité intervient très souvent dans le calcul des probabilités d'interaction, la probabilité qu'un porteur d'énergie initiale E soit diffusé vers un état final d'énergie E' étant toujours proportionnelle au nombre d'états disponibles à l'énergie E' , c'est-à-dire à $\mathcal{D}(E')$.

La densité d'états en énergie dépend exclusivement de la structure de bande. L'utilisation d'une dispersion de type Full-Band induit la nécessité de calculer la fonction densité d'états $\mathcal{D}(E)$ numériquement. Pour intégrer numériquement la quantité $\mathcal{D}(E_0)$, on procède en deux étapes :

1. On sélectionne l'ensemble des tétraèdres dont l'intersection avec la surface iso-énergie $\{E = E_0\}$ est non-nulle. Un tétraèdre $S_1S_2S_3S_4$ est sélectionné s'il existe une bande ν telle que :

$$\min(E_{\nu,i}) \leq E_0 \leq \max(E_{\nu,i})$$

2. On calcule la contribution de chaque tétraèdre T sélectionné, selon [50] :

$$\mathcal{D}_T(E_0) = \frac{d_{sp}}{(2\pi)^3} \frac{A_\nu(E_0)}{\nabla_T E_\nu} \quad (2.14)$$

Le terme $A_\nu(E_0)$ désigne l'aire de l'intersection de la surface iso-énergie $\{E_\nu = E_0\}$ avec le tétraèdre T . Le coefficient d_{sp} correspond à la dégénérescence de spin. La densité d'états est dite *totale* si $d_{sp} = 2$; on parle de densité d'états *par spin* pour $d_{sp} = 1$. La densité intégrée $\mathcal{D}(E_0)$ s'obtient finalement en sommant toutes les contributions élémentaires (2.14).

2.3.5 Calcul numérique de l'état post-interaction

Lorsque l'espace réciproque est numériquement discrétisé, le calcul stochastique du vecteur d'onde de l'état post-diffusion requiert un traitement spécifique. La recherche numérique de l'état post-diffusion consiste à parcourir l'ensemble du maillage de la zone de Brillouin, et à attribuer un poids statistique W_m à chaque tétraèdre [3]. Si on considère la diffusion d'une particule initialement dans un état (k, E_ν) , la valeur du poids W_m assignée à l'élément m doit quantifier la probabilité pour que le vecteur d'onde de l'état diffusé $(k', E'_{\nu'})$ soit inclut dans le tétraèdre m .

La façon de calculer la probabilité W_m dépendra de la nature physique du mécanisme de diffusion. D'une manière générale le poids W_m , associé à un tétraèdre de centre k'_m , peut s'exprimer sous la forme suivante :

$$W_m = \sum_{\nu'} f(q_m) \cdot g(\nu, \nu'; k, k'_m) \cdot \mathcal{D}_m(E'_{\nu'}) \quad (2.15)$$

où $q_m = k'_m - k$ est le *vecteur d'onde de transfert*¹⁷ échangé par la particule au cours de l'interaction. Dans l'équation (2.15), la fonction f de q_m est déterminée par la forme $V(r)$ du potentiel diffuseur, tandis que la fonction g décrit l'influence conjointe des fonctions d'onde des états incident et diffusé sur la probabilité de la transition. Comme toute probabilité d'interaction, le poids W_m est proportionnel à la densité d'états finale $\mathcal{D}_m(E'_{\nu'})$.

¹⁶ par unité de volume

¹⁷ *wave-vector transfer* en Anglais

Le calcul de la suite de poids statistiques W_m associés aux éléments finis du maillage constitue un spectre probabiliste discret quantifiant la distribution des états post-diffusion potentiels. La génération stochastique de l'état diffusé est obtenue en appliquant une réjection discrète à la suite des W_m . Une fois que le tétraèdre m' contenant l'état final a été déterminé, on génère aléatoirement le vecteur d'onde k' dans m' sur la surface iso-énergie $\{E = E'\}$. Si on note O l'origine de l'espace réciproque, et U, V, W les 3 points délimitant l'intersection triangulaire de cette surface avec l'élément m' , k' est calculé selon [3] :

$$\vec{k}' = r_1 \left[(1 - r_2)\vec{UV} + r_2\vec{UW} \right] + \vec{OU} \quad (2.16)$$

où r_1, r_2 sont 2 nombres aléatoires générés entre 0 et 1.

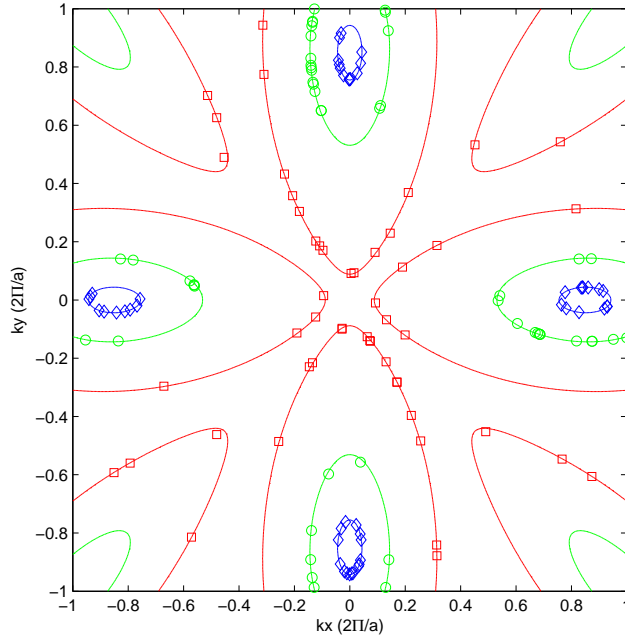
2.3.6 Cas particulier de la randomisation iso-énergie

La *randomisation iso-énergie* est un cas particulier de calcul numérique de l'état post-diffusion, pour lequel on place le vecteur d'onde diffusé k' sur la surface iso-énergie $\{E = E'\}$ de façon aléatoire. Le poids statistique W_m de l'élément m sera alors seulement déterminé par sa contribution $\mathcal{D}_m(E')$ à la densité d'états totale $\mathcal{D}(E')$:

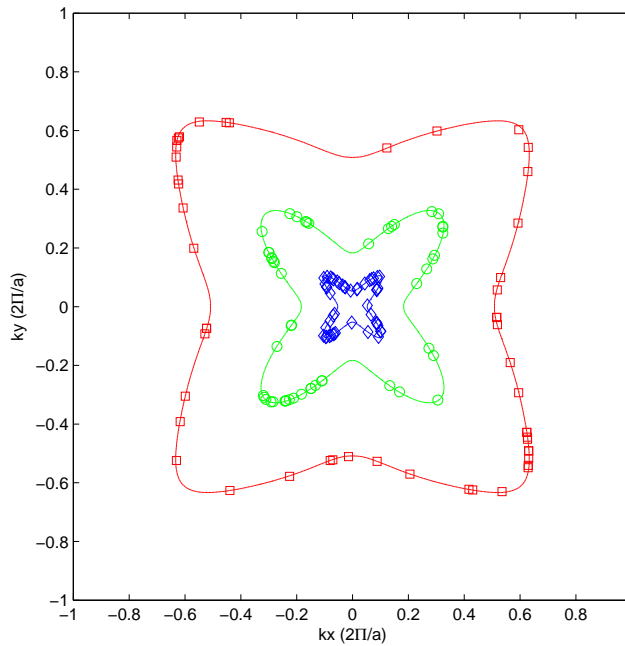
$$W_m = \sum_{\nu'} \mathcal{D}_m(E'_{\nu'}) \quad (2.17)$$

L'expression (2.17) est précisément un cas particulier du formalisme général (2.15) avec $f = g = 1$. La figure 2.6 illustre le résultat de la randomisation de 50 vecteurs d'onde sur différentes surfaces iso-énergie de la structure de bande du silicium. Le caractère aléatoire de la distribution des points est visible par l'homogénéité de leur répartition.

2.3. DESCRIPTION NUMÉRIQUE DE LA STRUCTURE DE BANDE



(a) Randomisation sur la 1^{ère} bande de conduction



(b) Randomisation sur la bande de trous lourds

FIG. 2.6: Randomisation sur 3 surfaces iso-énergie de la plus basse bande de conduction (Fig. 2.6a) et de la plus basse bande de valence (Fig. 2.6b) du silicium massif. Les surfaces iso-énergie bleue, verte et rouge correspondent respectivement à des énergies de 50 meV, 500 meV et 2 eV. Sur chaque surface iso-énergie, 50 vecteurs d'onde sont randomisés (symboles).

CHAPITRE 2. LA MÉTHODE MONTE CARLO APPLIQUÉE AU
TRANSPORT

Chapitre 3

Simulation du transport électronique homogène dans un semiconducteur intrinsèque de type IV : cas du silicium et du germanium

3.1 La structure de bande

3.1.1 Structure de bande du silicium

La structure de bande du silicium est calculée par méthode *Tight-Binding* [54, 55]. La dispersion obtenue est affichée dans la figure 3.1a. La caractéristique principale de la structure de bande du silicium, à savoir la bande interdite¹ indirecte d'une largeur de 1,12 eV, est clairement visible.

Bandes de conduction

Les bandes de conduction du silicium possèdent plusieurs minima locaux situés en différents points de l'espace réciproque. Les plus bas minima de la 1^{re} bande de conduction sont localisés le long des 6 axes principaux. Ils constituent le centre des 6 vallées Δ du silicium, dont les coordonnées vérifient :

$$\begin{aligned}\Delta_{100} &= (\pm 0,85 ; 0 ; 0)2\pi/a \\ \Delta_{010} &= (0 ; \pm 0,85 ; 0)2\pi/a \\ \Delta_{001} &= (0 ; 0 ; \pm 0,85)2\pi/a\end{aligned}$$

Ces 6 vallées dégénérées possèdent à basse énergie une symétrie ellipsoïdale, i.e. leur dispersion peut être décrite analytiquement par une équation de type :

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_l^2}{m_l} + \frac{k_t^2}{m_t} \right) \quad (3.1)$$

¹ *band gap* en Anglais

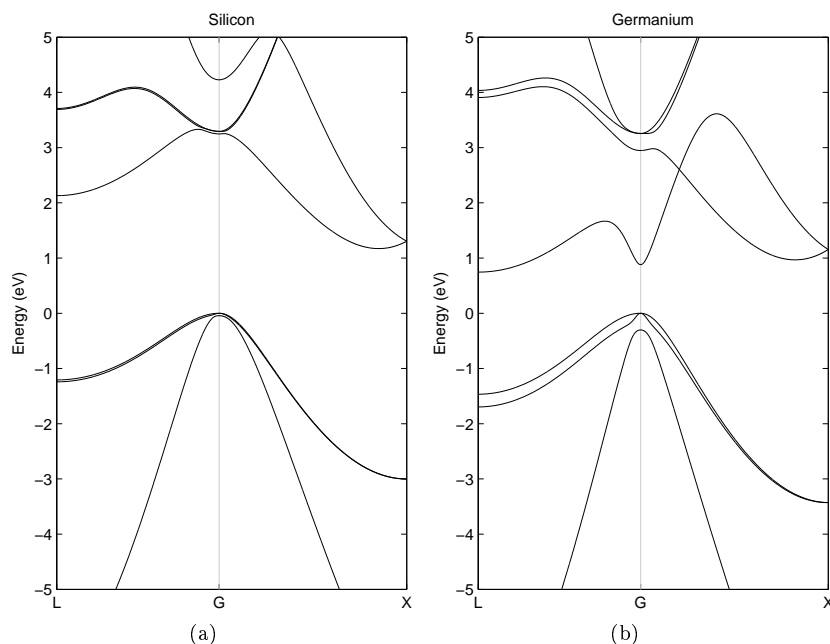


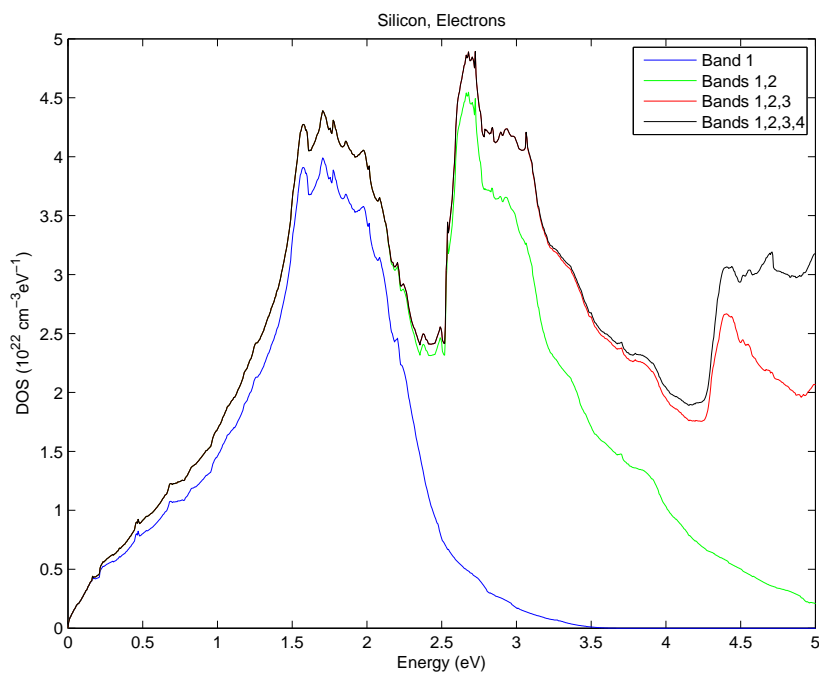
FIG. 3.1: Structures de bande du silicium massif (Fig. 3.1a) et du germanium massif (Fig. 3.1b) calculées par méthode *Tight-Binding*. L , Γ et X sont les points de haute symétrie de l'espace réciproque.

où les termes m_l et m_t sont usuellement appelés *masses effectives longitudinale* et *transverse*. Une telle dispersion résulte en une surface iso-énergie en ellipsoïdes, visibles en figure 3.3a.

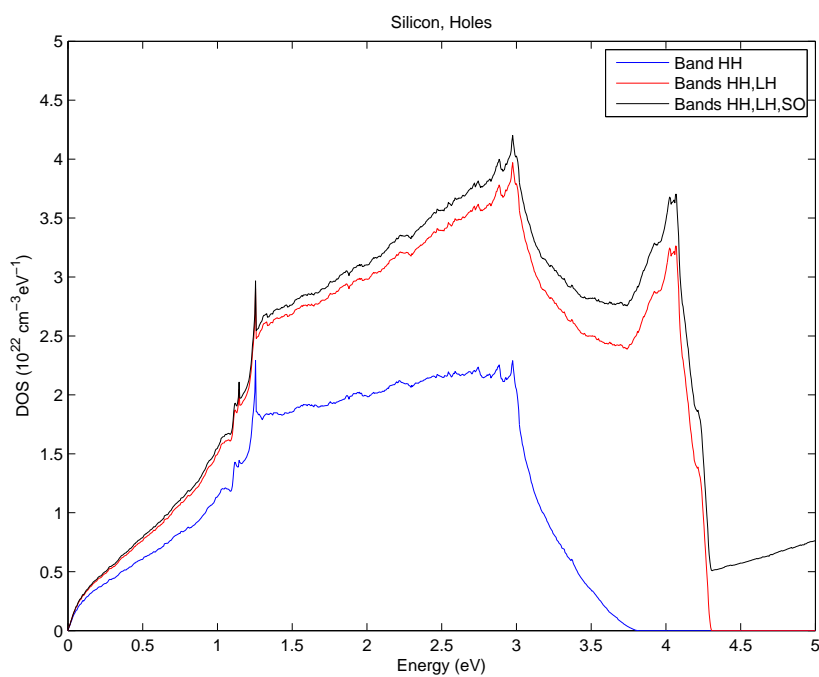
Lorsque l'énergie augmente au-delà de quelques centaines de meV au-dessus du minimum de bande, la description analytique (3.1) n'est plus adaptée à la dispersion réelle, comme l'illustre la figure 3.3c. La condition de continuité imposée à la relation de dispersion aux limites de la 1^{re} zone de Brillouin induit une forte distorsion des ellipsoïdes. En outre, à $E \approx 150\text{meV}$, la 2^e bande de conduction apparaît centrée au point X . A ces énergies, il devient nécessaire de recourir à une description numérique de la structure de bande. Il est notable que la localisation des porteurs de charge dans l'espace réciproque évolue drastiquement lorsqu'ils acquièrent de l'énergie. Si à basse énergie, ils sont essentiellement localisés au voisinage direct des vallées Δ , au-delà de 1 eV la surface iso-énergie s'étend aux points L , X et K – cf. Fig. 3.3e.

Le calcul numérique de la densité d'états associée à la dispersion des bandes de conduction du silicium est illustré en figure 3.2a. La contribution de chaque bande η à la densité totale est indiquée. La délocalisation globale des porteurs induite par l'expansion de la dispersion se traduit ici par une forte augmentation de la densité d'états quand l'énergie augmente. Cette augmentation est directement corrélée à l'accroissement de l'aire de la surface iso-énergie.

3.1. LA STRUCTURE DE BANDE



(a)



(b)

FIG. 3.2: Densité d'états des électrons (Fig. 3.2a) et des trous (Fig. 3.2b) dans le silicium massif. La densité totale (courbe noire) est la somme des densités associées aux 4 plus basses bandes de conduction et aux 3 plus basses bandes de valence.

Bandes de valence

Les bandes de valence du silicium sont toutes centrées en Γ . Les 1^{re}, 2^e et 3^e bandes sont respectivement appelées *bande de trous lourds*², *bande de trous légers*³ et *bande de spin-orbite*⁴. Les bandes HH et LH sont dégénérées en Γ au minimum de la dispersion. La bande SO est décalée en Γ d'une quantité $\Delta_{SO} = 44\text{meV}$.

Le formalisme analytique le plus simple pour décrire la dispersion des trous, caractérisée par un minimum unique en Γ , est la dispersion sphérique :

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (3.2)$$

La dispersion réelle des bande de valence est fortement anisotrope, et ne peut par conséquent pas être décrite par une dispersion sphérique, intrinsèquement isotrope. L'anisotropie des bandes de valence est visible dans les figures 3.4a à 3.4c, qui montrent les surfaces iso-énergie des bandes HH, LH et SO. Ici encore, la nécessité de l'emploi de techniques numériques pour décrire la dispersion des trous est mise en évidence.

La figure 3.2b expose le résultat de l'intégration numérique de la densité d'états associée aux bandes de valence du silicium. La bande SO, qui reste très localisée en centre de zone à hautes énergies, contribue relativement peu à la densité d'états totale. La brusque diminution de la densité d'états visible à 4,2 eV au-dessus du minimum de bande, est dû à la disparition des bandes HH et LH à ces énergies.

3.1.2 Structure de bande du germanium

La structure de bande du germanium est également caractérisée par une bande interdite indirecte, d'une amplitude de 0,66 meV à température ambiante. La dispersion de valence et de conduction, calculée par méthode *Tight-Binding*, est exposée en figure 3.1b.

Bandes de conduction

A basse énergie, la bande de conduction du germanium est structurée différemment de celle du silicium. La 1^{re} bande admet 8 minima situés aux points L , c'est-à-dire aux centres des faces externes obliques de la 1^{re} zone de Brillouin :

$$L = (\pm 0, 5; \pm 0, 5; \pm 0, 5)2\pi/a$$

La dispersion au voisinage de ces 8 minima étant elliptique, la structure de bande du germanium est composée à basse énergie de 8 vallées L . Chaque vallée L étant tronquée par la limite de la zone de Brillouin, seules 4 vallées L ⁵ contribuent à la surface iso-énergie (cf. Fig. 3.3b) et à la densité d'états.

Pour la gamme des énergies supérieures à 200 meV, la structure de bande s'étend et se complexifie. Des vallées supérieures en énergies apparaissent localement aux points Γ et X , comme le montre la figure 3.3d. A ces énergies

² *heavy-hole (HH) band* en Anglais

³ *light-hole (LH) band* en Anglais

⁴ *spin-orbit (SO) band* en Anglais

⁵ ou 8 demi-vallées L

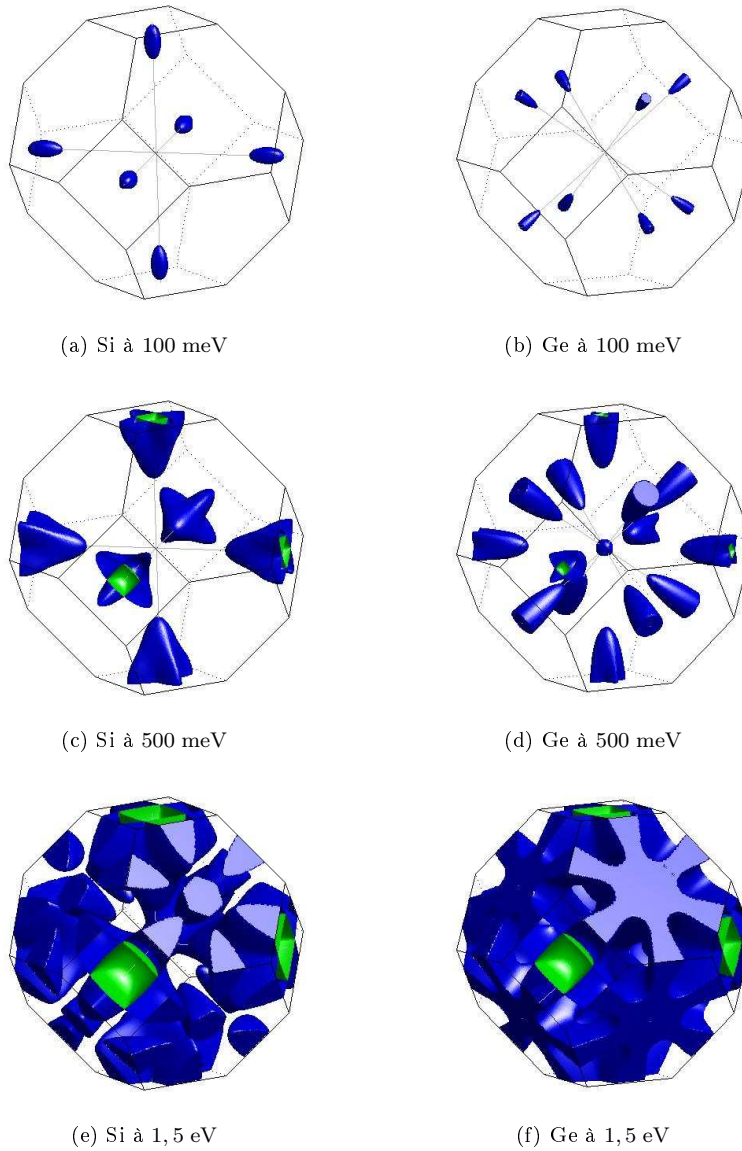


FIG. 3.3: Surfaces iso-énergie des bandes de conduction du silicium (Fig. 3.3a, 3.3c, 3.3e) et du germanium (Fig. 3.3b, 3.3d, 3.3f). Les 1^{re} et 2^e bande de conduction correspondent respectivement aux surfaces bleue et verte.

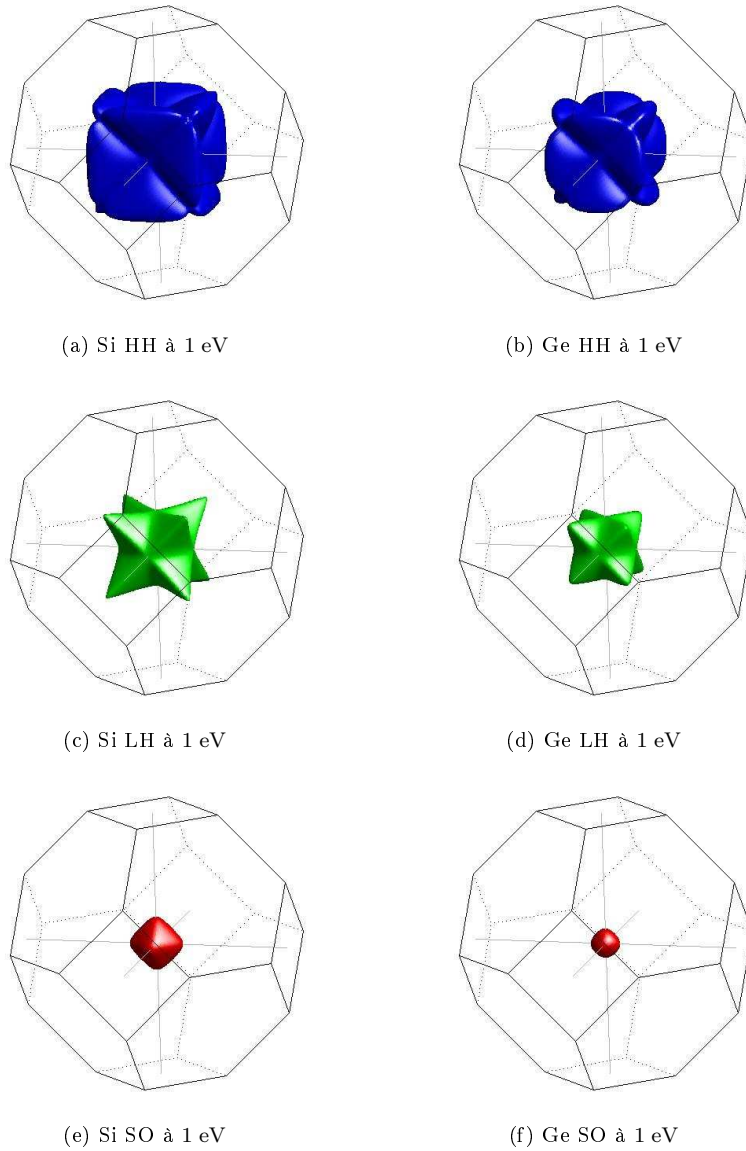


FIG. 3.4: Surfaces iso-énergie des bandes de valence du silicium (Fig. 3.4a, 3.4c, 3.4e) et du germanium (Fig. 3.4b, 3.4d, 3.4f). Les bandes de trous lourds, légers et spin-orbite correspondent respectivement aux surfaces bleue, verte et rouge.

intermédiaires, la distribution des électrons dans l'espace réciproque se répartit entre plusieurs types de vallées de symétries et de masses effectives différentes : on parle de transport *multi-vallée*.

Au-delà de 1 eV, la dispersion s'étend loin des centres L , X et Γ , les bandes supérieures deviennent accessibles aux porteurs de charge et la surface iso-énergie s'étend à l'ensemble de la zone de Brillouin (cf. Fig. 3.3f). A ces hautes énergies, le concept de *vallée* n'est plus pertinent comme la distribution des porteurs se délocalise des centres et s'homogénéise : on parle de transport *multi-bande*.

Bandes de valence

Les bandes de valence du germanium sont structurées de façon qualitativement similaire à celles du silicium, c'est-à-dire en 3 bandes HH, LH et SO centrées en Γ . La dispersion des bandes de trous du Ge se distingue globalement de celles du Si par des masses effectives plus faibles, qui résultent en des bandes sensiblement plus localisées (cf. Fig. 3.4b, 3.4d et 3.4f) et une densité d'états des trous plus faible (cf. Fig. 3.5b), et par un décalage de la bande de spin-orbite plus important ($\Delta_{SO} = 302\text{meV}$).

3.2 L'interaction porteur-phonon

3.2.1 Origine physique de l'interaction porteur-phonon

Dans un cristal semiconducteur à température non-nulle, les atomes du réseau oscillent autour de leur position d'équilibre [56]. Ces oscillations donnent lieu localement à des perturbations dans le potentiel périodique cristallin, qui peuvent être décrites comme des oscillateurs harmoniques quantiques : on parle de *phonons*. Chaque phonon du réseau cristallin est associé à la propagation d'un potentiel perturbateur, et constitue donc une source potentielle de diffusion pour les porteurs de charge libres. C'est cette interaction fondamentale entre les porteurs et les vibrations des atomes du cristal qui est à l'origine de la résistance électrique intrinsèque des semiconducteurs.

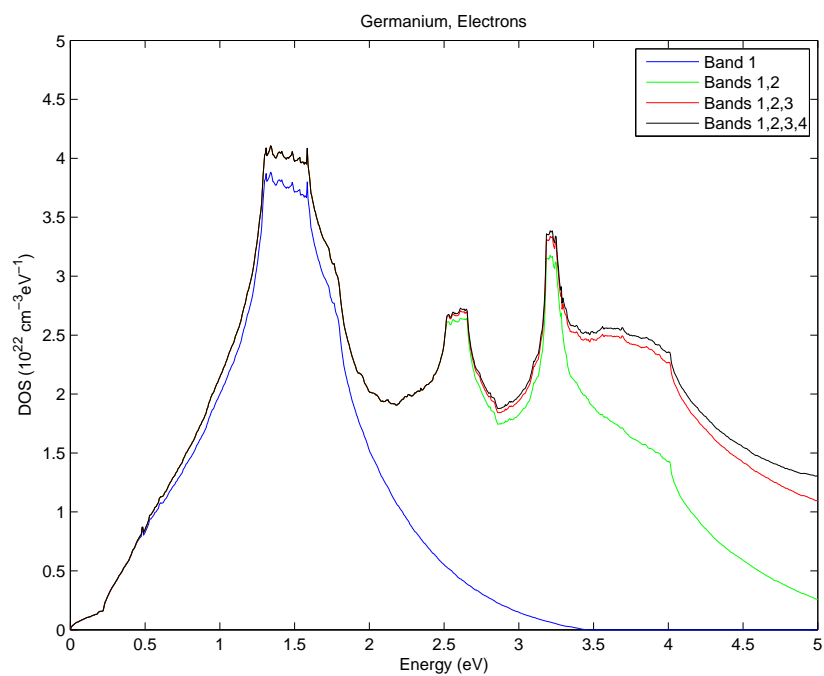
Comme tout oscillateur harmonique quantique, l'énergie des phonons est quantifiée selon :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$$

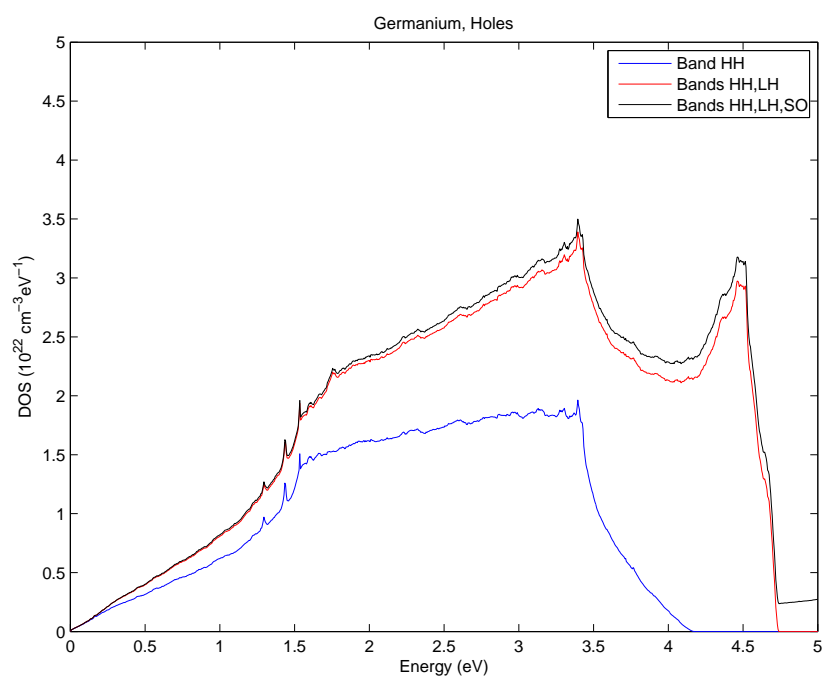
où n est un entier positif ou nul ($n \geq 0$). Du fait de la périodicité de l'arrangement atomique cristallin, l'état vibratoire de chaque atome est conditionné par celui de chacun des atomes voisins. De ce système périodique émerge un nombre fini de modes vibratoires pour la propagation des phonons. Chaque mode phononique est caractérisé par sa relation de dispersion $\omega(q)$. Parmi les modes possibles, on discerne :

- les modes *acoustiques* caractérisés par une vitesse de groupe finie et une énergie nulle pour $q = 0$:

$$\left. \frac{d\omega_{ac}}{dq} \right|_{q=0} \neq 0 \quad ; \quad \omega_{ac}(0) = 0$$



(a)



(b)

FIG. 3.5: Densité d'états des électrons (Fig. 3.5a) et des trous (Fig. 3.5b) dans le germanium massif.

3.2. L'INTERACTION PORTEUR-PHONON

- les modes *optiques* caractérisés par une vitesse de groupe nulle et une énergie finie pour $q = 0$:

$$\left. \frac{d\omega_{op}}{dq} \right|_{q=0} = 0 \quad ; \quad \omega_{op}(0) \neq 0$$

Chaque matériau semiconducteur est caractérisé par des modes phononiques spécifiques. La représentation de la dispersion $\omega(q)$ des modes de phonons d'un matériau est appelée diagramme de dispersion. Les figures 3.6a et 3.6b représentent les diagrammes respectifs du silicium et du germanium.

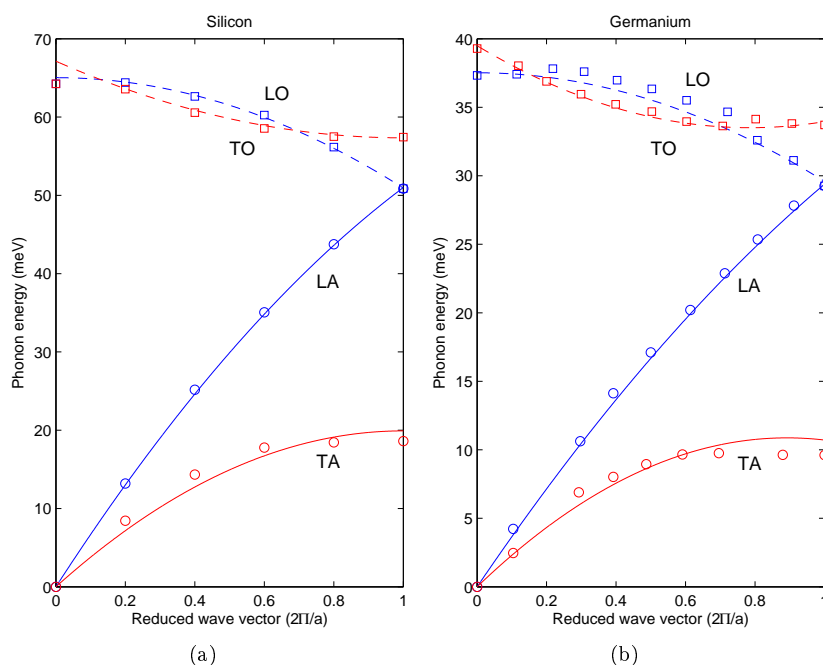


FIG. 3.6: Diagrammes de dispersion des phonons suivant la direction (100) dans le silicium et le germanium massifs. Les symboles figurent les résultats de mesures expérimentales (cf. [57, 58]). Les lignes représentent notre approximation quadratique.

L'interaction porteur-phonon est intrinsèquement inélastique, i.e. elle donnera toujours lieu à un échange d'énergie entre le porteur libre et le réseau cristallin. Lors d'un processus d'absorption (*resp.* émission) d'un phonon η de vecteur d'onde q , l'énergie du porteur est augmentée (*resp.* réduite) du quantum $\hbar\omega_\eta(q)$. Il est remarquable que le processus d'émission phononique est accessible au porteur seulement si l'énergie de celui-ci est supérieure au seuil d'émission du phonon. En particulier, l'émission de phonons optiques, très énergétiques, est impossible pour un porteur suffisamment froid.

3.2.2 Modélisation de l'interaction porteur-phonon

L'interaction porteur-phonon dans les matériaux purs Si et Ge est essentiellement modélisée suivant l'approche proposée par Fischetti *et al.* [8]. Notre description de la perturbation phononique s'appuie sur les approximations suivantes :

- La population des phonons est supposée à l'équilibre thermodynamique. Dans le cadre de cette hypothèse, la probabilité d'occupation n_ω d'un niveau d'énergie $E_\omega = \hbar\omega$ par un phonon est donnée par le statistique de Bose-Einstein :

$$n_\omega = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1} \quad (3.3)$$

- La dispersion des phonons est supposée isotrope, i.e. l'énergie $\hbar\omega(\vec{q})$ associée à un phonon de longueur d'onde \vec{q} est décrite par une fonction de son module q .
- Seuls les phonons de 1^{er} ordre sont considérés. Les phonons d'ordre supérieur, i.e. d'énergie E_n avec $n \geq 2$ sont négligés. En effet, au regard de la statistique de Bose-Einstein (3.3), ces modes sont nécessairement très minoritairement peuplés.

Dans la modélisation de la relation de dispersion des phonons, 4 modes de vibration sont pris en compte :

1. le mode longitudinal acoustique (LA),
2. le mode transverse acoustique (TA),
3. le mode longitudinal optique (LO),
4. le mode transverse optique (TO).

A chacun de ces modes η est associée une dispersion isotrope quadratique [59], qui s'écrit :

$$\omega_\eta(\vec{q}) = \omega_0 + v_s q + c q^2 \quad (3.4)$$

Les coefficients de l'équation (3.4) sont déterminés par ajustement sur la dispersion mesurée expérimentalement dans la direction (100) (cf. Fig. 3.6). Les valeurs obtenues pour les coefficients dans Si et Ge sont reportées dans le tableau 3.1.

L'application de la règle d'or de Fermi à l'interaction particule-phonon permet d'écrire la probabilité totale d'interaction porteur-phonon comme un calcul intégral sur l'espace réciproque. La probabilité pour un porteur libre de vecteur d'onde k appartenant à la bande ν d'interagir avec un mode η de phonon est donnée par :

$$P_{\eta,\nu}(k) = \sum_{\nu'} \int \frac{\pi}{\rho\omega_\eta(q)} \Delta_\eta(q)^2 \times |\mathcal{I}(\nu, \nu'; k, k')|^2 \times [n_\eta(q) + 1/2 \pm 1/2] \times \delta(E_\nu - E_{\nu'} \mp \hbar\omega_\eta(q)) \cdot d^3 k' \quad (3.5)$$

où les signes supérieurs et inférieurs correspondent à l'émission et à l'absorption du phonon, respectivement. Dans (3.5), le vecteur d'onde q du phonon diffuseur est égal à la variation du vecteur d'onde de la particule au cours de l'interaction. q est appelé *vecteur d'onde de transfert* et la loi de conservation appliquée au vecteur d'onde s'écrit :

$$k' = k \mp q$$

3.2. L'INTERACTION PORTEUR-PHONON

Matériau	Mode	ω_0 10 ¹³ rad/s	v_s 10 ³ m/s	c 10 ⁻⁷ m ² /s
Si	LA	0,00	9,01	-2,00
	TA	0,00	5,23	-2,26
	LO	9,88	0,00	-1,60
	TO	10,2	-2,57	1,11
Ge	LA	0,00	4,90	-0,90
	TA	0,00	3,20	-1,55
	LO	5,70	0,00	-0,90
	TO	6,00	-2,00	1,10

TAB. 3.1: Coefficients pour l'approximation quadratique des dispersions de phonon dans le silicium et le germanium. Les valeurs des paramètres pour le silicium proviennent de la Ref. [59].

L'emploi de la fonction de Dirac δ dans (3.5) permet de restreindre l'intégrale aux seuls points k' vérifiant la loi de conservation de l'énergie :

$$E'_{\nu'} = E_\nu \mp \hbar\omega_\eta(q)$$

Afin de calculer la probabilité d'interaction porteur-phonon de façon cohérente avec la structure de bande Full-Band des porteurs libres, on doit procéder à une intégration numérique de l'expression (3.5). L'intégrale sur l'espace réciproque traitée numériquement devient une somme discrète sur l'ensemble des tétraèdres m de centre k'_m susceptibles de contenir le vecteur d'onde diffusé k' :

$$P_{\eta,\nu}(k) = \sum_{\nu',m} \frac{\pi}{\rho\omega_\eta(q_m)} \Delta_\eta^2 \times |\mathcal{I}(k, k'_m)|^2 \times [n_\eta(q_m) + 1/2 \pm 1/2] \times \mathcal{D}_m(E'_{\nu'}) \quad (3.6)$$

Dans la somme (3.6), le terme $\mathcal{D}_m = \frac{A_\nu(E')}{\nabla_m E_\nu}$ correspond à l'intersection de l'élément m avec la surface iso-énergie $\{E = E'\}$. \mathcal{D}_m est proportionnel à la contribution élémentaire (2.14) de l'élément m à la densité d'états totale $\mathcal{D}(E')$.

Le facteur $\mathcal{I}(k, k')$ figurant dans les expressions (3.5) et (3.6) est l'*intégrale de recouvrement*⁶. Cette intégrale quantifie le degré de corrélation entre les fonctions d'onde de l'état incident et de l'état final. Les fonctions d'onde associées aux électrons et aux trous étant caractérisées par des symétries très différentes, on adopte en conséquence des formalismes distincts pour la modélisation de l'intégrale de recouvrement. Dans le cas des électrons, l'intégrale \mathcal{I}_e est calculée dans le cadre de l'approximation de Nordheim [23, 59, 60] :

$$\mathcal{I}_e(\nu, \nu'; k, k') = \mathcal{I}_e(q) = 3 \frac{\sin(qR_{ws}) - qR_{ws} \cos(qR_{ws})}{(qR_{ws})^3} \quad (3.7)$$

où R_{ws} est le rayon de Wigner-Seitz. Il est remarquable que le formalisme (3.7) ne considère pas les indices des bandes ν et ν' occupées par les états initial

⁶ *overlap factor* en Anglais

$\nu\nu'$	$A_{\nu\nu'}$	$B_{\nu\nu'}$
11	1	3
22	1	3
33	5/8	0
12	3	-3
13	3/8	0
23	3/8	0

TAB. 3.2: Paramètres pour la formulation angulaire des intégrales de recouvrement des trous.

et final. A l'inverse, la symétrie des fonctions d'onde de trous varie fortement d'une bande à l'autre, et les indices de bande de valence doivent impérativement être considérés dans l'évaluation des intégrales de recouvrement de trous \mathcal{I}_h . On adopte dans cette étude l'approche de Wiley [61], qui a proposé des formules analytiques distinctes pour les transitions intrabandes ($\nu' = \nu$) et interbandes ($\nu' \neq \nu$) :

$$\mathcal{I}_h(\nu, \nu'; k, k') = \mathcal{I}_h(\nu, \nu'; \theta) = 1/2\sqrt{A_{\nu\nu'} + B_{\nu\nu'} \cos^2 \theta} \quad (3.8)$$

où l'angle $\theta = (\vec{k}, \vec{k}')$ correspond à l'angle orienté entre les vecteurs d'onde incident et diffusé. Les paramètres $A_{\nu\nu'}$ et $B_{\nu\nu'}$ sont régis par la nature de la transition [62, 63]. Les valeurs prises par ces paramètres figurent dans la table 3.2⁷.

Le terme Δ_η est un *potentiel de déformation*, aussi appelé *constante de couplage*. Dans le cadre de notre modèle, ces constantes seront traitées comme des paramètres empiriques, c'est-à-dire que leurs valeurs seront arbitrairement déterminées de façon à reproduire certains résultats expérimentaux. La méthodologie de calibration utilisée, ainsi que les valeurs choisies pour les potentiels de déformation, seront exposés dans le paragraphe suivant (cf. § 3.2.3).

Dans les matériaux purs (Si ou Ge), on modélise l'interaction porteur-phonon par 8 processus inélastiques distincts, chacun des 4 modes phononiques η pouvant donner lieu à une émission ou une absorption par le porteur de charge. Dans chaque matériau, le formalisme de l'équation (3.6) est appliqué en utilisant les paramètres de dispersion (ω_0 , v_s et c – cf. Tab. 3.1), les constantes physiques (ρ , a et R_{ws} – cf. Tab. 4.1) et les constantes de couplage (Δ_η – cf. Tab. 3.3) spécifiques du milieu.

3.2.3 Calibration du modèle de l'interaction porteur-phonon

La modélisation de l'interaction porteur-phonon par le formalisme (3.6) exige la détermination préalable des potentiels de déformation Δ_η . Le choix de ces paramètres est naturellement très influent sur le comportement de l'algorithme Monte Carlo. Aussi il est essentiel de déterminer ces paramètres par comparaison avec un ensemble de résultats expérimentaux de référence. Ces mesures expérimentales doivent être suffisamment nombreuses et indépendantes pour

⁷ Les bandes de valence HH, LH et SO sont respectivement indexées selon $\nu = 1, 2$ et 3.

permettre la validation d'un unique ensemble de constantes Δ_η . L'unicité de la solution garantit nécessairement son caractère physique et non-arbitraire.

L'ensemble de résultats expérimentaux définissant le référentiel de notre calibration est constitué des données suivantes :

1. vitesse de dérive à 300 K,
2. coefficient d'ionisation par choc à 300 K, et
3. efficacité quantique à 300 K.

La validation d'un ensemble de paramètres Δ_η sera donc conditionné par l'obtention d'un accord entre les résultats de simulation Monte Carlo, et ces 3 références expérimentales. La méthodologie de calibration employée s'appuie sur les tendances suivantes :

- Plus les préfacteurs Δ_η sont forts, plus la vitesse de dérive calculée est faible, plus la distribution des porteurs est froide⁸ et par conséquent plus le coefficient d'ionisation par choc est faible (et inversement) ;
- A probabilité d'interaction porteur-phonon (3.6) constante, plus le ratio Δ_{op}/Δ_{ac} est fort⁹, plus les porteurs sont froids ;
- L'efficacité quantique est une mesure du ratio P_{ii}/P_{ph} de la probabilité d'ionisation par choc sur la probabilité totale d'interaction porteur-phonon.

Le formalisme choisi pour les constantes de couplage est celui explicité dans la Ref. [18]. Les potentiels de déformation Δ_η sont modélisés tels que leur carré soit une fonction linéaire de l'énergie incidente du porteur de charge. En outre, on associe aux modes acoustiques (LA, TA) et optiques (LO, TO) des préfacteurs spécifiques :

$$\Delta_{ac}(E_\nu) = \sqrt{A_{ac} + B_{ac}E} \cdot q \quad (3.9)$$

$$\Delta_{op}(E_\nu) = \sqrt{A_{op} + B_{op}E} \quad (3.10)$$

Pour éviter aux potentiels de déformation d'atteindre des valeurs physiquement aberrantes à hautes énergies, la variation linéaire dans (3.9) et (3.10) est interrompue au-delà d'une énergie seuil introduite arbitrairement, notée E_{th} :

$$\forall E > E_{th} : \quad \Delta_\eta(E) = \Delta_\eta(E_{th}) \quad (3.11)$$

Les valeurs attribuées aux paramètres des équations (3.9), (3.10) et (3.11) à l'issue du processus de calibration, sont reportées dans le tableau 3.3. Une comparaison exhaustive entre les résultats de simulation Monte Carlo et les mesures de référence sera exposée dans les sections ultérieures : les paragraphes § 3.4 et § 3.5 sont respectivement consacrés à la validation de notre calibration dans Si et Ge.

Les constantes de couplage Δ_η ayant été déterminés par calibration, l'amplitude totale de la probabilité d'interaction porteur-phonon P_{ph} est explicitement connue. Il est intéressant (voire nécessaire) de comparer la probabilité totale issue de notre calibration, à celles qui ont été reportées dans la littérature. Cette étude comparative nécessite d'exprimer la probabilité d'interaction $P(k)$, définie localement dans l'espace réciproque d'après (3.5), comme une fonction de l'énergie E du porteur de charge. La probabilité d'interaction à l'énergie E est

⁸i.e. plus l'énergie moyenne des porteurs est basse

⁹i.e. plus les modes optiques sont prépondérants sur les modes acoustiques

Matériau	Porteur	A_{ac} eV ²	B_{ac} eV	A_{op} eV ² cm ⁻²	B_{op} eVcm ⁻²	E_{th} eV
Si	e	6,0	-2,0	$2,5 \times 10^{17}$	$-8,0 \times 10^{16}$	2,0
	h	8,0	-3,0	$2,0 \times 10^{17}$	$-9,0 \times 10^{16}$	1,5
Ge	e	10,0	-5,0	$7,0 \times 10^{17}$	$-3,5 \times 10^{17}$	1,5
	h	10,0	-3,0	$6,0 \times 10^{17}$	$-2,5 \times 10^{17}$	2,0

TAB. 3.3: Potentiels de déformation de l'interaction electron- et trou-phonon dans le silicium et le germanium.

donc calculée comme la valeur moyenne de la probabilité anisotrope $P(k)$ sur l'ensemble des vecteurs d'onde k constituant la surface iso-énergie $\{E_k = E\}$ [8, 22] :

$$P(E) = \frac{1}{\mathcal{D}(E)} \sum_{\eta, \nu, m} P_{\eta, \nu}(k_m) \mathcal{D}_m(E_\nu) \quad (3.12)$$

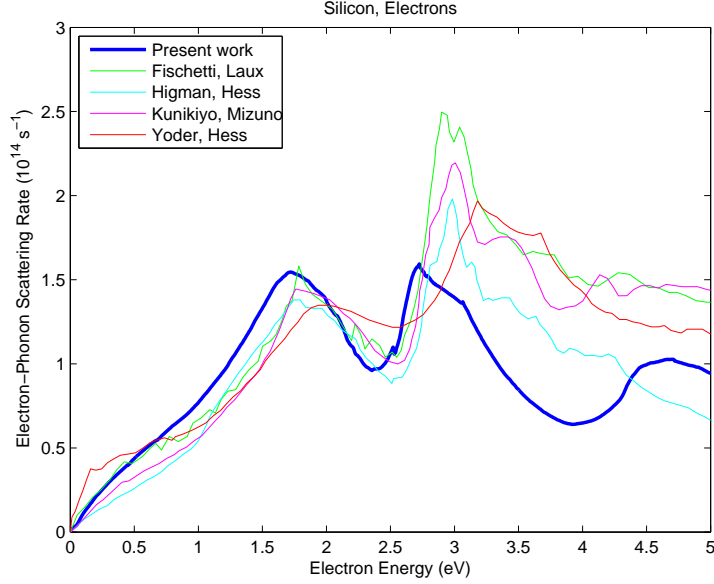
où $\mathcal{D}(E)$ est la densité d'états totale à l'énergie E , qui vérifie :

$$\mathcal{D}(E) = \sum_{\nu, m} \mathcal{D}_m(E_\nu)$$

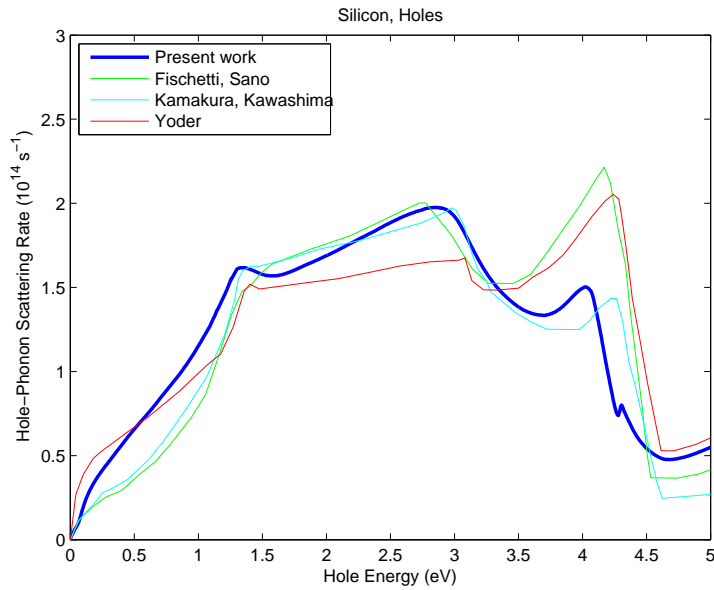
Dans le cas du silicium, les probabilités totales d'interaction porteur-phonon, intégrées suivant (3.12), sont exposées dans les figures 3.7a et 3.7b. La dépendance en énergie de nos probabilités d'interaction est en excellent accord avec les calculs Full-Band issus de la littérature. Notre modélisation est en phase avec le *modèle standard* établi par les références [64] et [18], relativement au transport des électrons et des trous dans le silicium massif.

Cependant dans le cas du germanium, aucun modèle standard n'existe à l'heure actuelle. En effet, les publications relatives à l'étude du transport dans le germanium étant beaucoup moins nombreuses que celles relatives au silicium, les références disponibles ne sont pas assez nombreuses pour permettre l'émergence d'un consensus global. De plus, si plusieurs études publiées ont appliqué des techniques numériques Full-Band à la simulation du transport des porteurs de charge dans le germanium [16, 19, 23, 24, 25], seule la Ref. [16] parmi ces dernières a reporté la probabilité d'interaction électron-phonon (cf. Fig. 3.8a). Il est remarquable que le désaccord est important entre nos résultats et ceux publiés par Fischetti en 1991. Il est cependant essentiel de souligner que notre calibration de la probabilité électron-phonon dans Ge s'appuie sur une probabilité d'ionisation exacte dérivée de calculs *ab initio* (cf. § 3.3.2), tandis que l'étude de Fischetti décrit la probabilité d'ionisation par une formule de Keldysh arbitrairement paramétrée, ce qui, de l'avis de l'auteur lui-même¹⁰, introduit une grande incertitude sur la calibration des potentiels de déformation, et par conséquent sur la probabilité d'interaction calculée. Dans le cas de l'interaction trou-phonon dans le germanium, aucune étude ayant publié la probabilité d'interaction n'a été trouvée. La dépendance en énergie de notre probabilité calibrée est visible en figure 3.8b. La valeur de notre calibration est ici encore garantie par l'emploi

¹⁰"As stated previously, the uniqueness of the solution to this "fitting" problem is highly questionable." Ref. [16], pp. 638-639

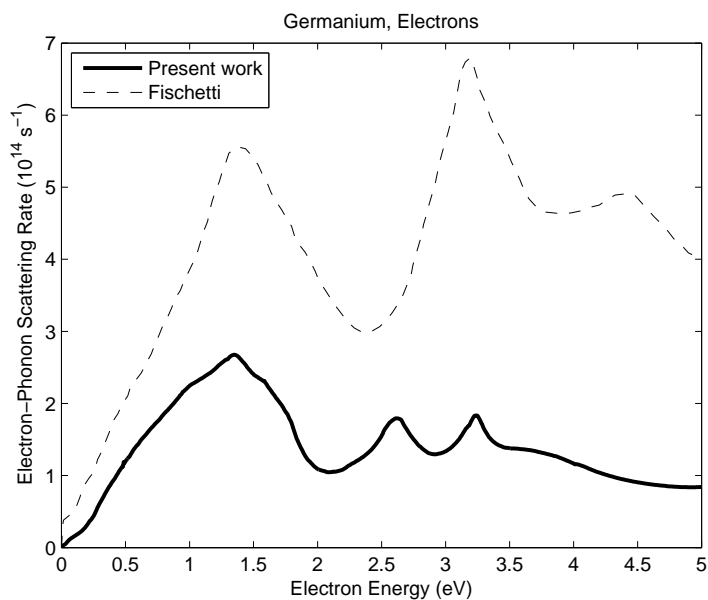


(a)

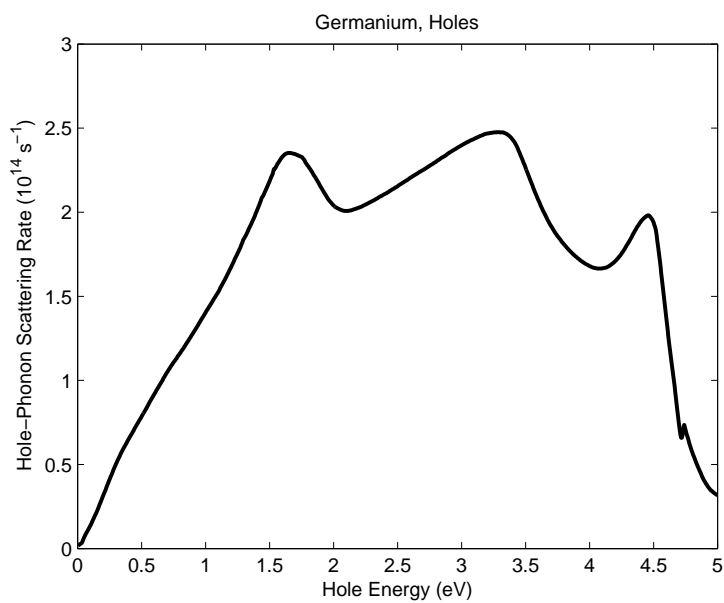


(b)

FIG. 3.7: Probabilités totales d'interaction électron-phonon (Fig. 3.7a) et trou-phonon (Fig. 3.7b) dans le silicium massif. Les fonctions de probabilité issues de nos calibrations sont comparées aux résultats de référence de la communauté scientifique basés sur des calculs Full-Band (Ref. [64] pour les électrons, Ref. [18] pour les trous).



(a)



(b)

FIG. 3.8: Probabilités totales d'interaction électron-phonon (Fig. 3.8a) et trou-phonon (Fig. 3.8b) dans le germanium massif. Les fonctions de probabilité issues de nos calibrations sont comparées aux résultats Full-Band de la Ref. [16].

d'un taux d'ionisation calculé par méthode *ab initio*, et par un accord global entre nos simulations de transport et les données expérimentales de référence. On peut souhaiter que nos résultats pour les électrons et les trous, illustrés dans les figures 3.8a et 3.8b, pourront contribuer à l'émergence d'un modèle standard spécifique au germanium, relativement aux probabilités d'interaction électron-et trou-phonon.

3.3 L'ionisation par choc

3.3.1 Origine physique de l'ionisation par choc

Dans le cadre usuel de l'étude du transport électronique à champ faible ou intermédiaire, les porteurs de charges quasi-libres sont dans un état relativement proche de l'équilibre thermodynamique. L'énergie cinétique communiquée aux porteurs par le champ est essentiellement relaxée via les phonons du réseau cristallin. Les mécanismes d'interaction qui dominent dans un tel régime sont des interactions élastiques (impuretés ionisées, désordre d'alliage, rugosité d'interface), ou des interactions inélastiques impliquant de faibles échanges d'énergies, c'est-à-dire n'excédant pas quelques dizaines de meV (phonons, collisions inter-porteurs).

Dans le domaine particulier des champs électriques forts, les porteurs libres acquièrent de l'énergie, quittent leur état de quasi-équilibre, et *escaladent* la structure de bande. Lorsque l'énergie cinétique d'un porteur libre dépasse la largeur de bande interdite E_g , le mécanisme de l'ionisation par choc devient accessible au porteur. Dans une telle configuration, il lui est possible d'exciter par collision un électron de la bande de valence¹¹, permettant ainsi l'accès à la bande de conduction. Il est évident que pour l'activation d'un tel processus, l'énergie-seuil est la valeur de la bande interdite E_g . Si on considère le bilan des porteurs libres en présence, on remarque que chaque processus d'ionisation par choc résulte en la création de 2 porteurs de charge, c'est-à-dire d'une paire électron-trou. Ainsi lorsque le champ électrique devient assez fort pour induire une haute fréquence d'ionisation par choc, le nombre de porteurs libres augmente exponentiellement : on parle d'*effet avalanche*. La figure 3.9 illustre le processus de l'ionisation par choc *directe* initiée par un électron¹² dans l'espace réciproque.

Notons en outre qu'il existe plusieurs mécanismes d'ionisation par choc dits *indirects*. Ces processus sont assistés par des absorptions phononiques, ou bien utilisent l'intermédiaire de niveaux profonds. Dans cette étude, on se limitera à l'ionisation par choc directe, qui est le mécanisme prépondérant dans les semi-conducteurs de haute qualité cristallographique.

3.3.2 Calcul des probabilités d'interaction

Le calcul *ab initio* de la probabilité d'ionisation par choc est un calcul numérique complexe et fastidieux. Il fait intervenir un potentiel d'interaction coulombien écranté, les fonctions d'onde des états incidents, la fonction diélectrique

¹¹Il est important de noter que l'électron excité n'est pas initialement un porteur de charge ; en effet, appartenant à la bande de valence, il est lié à un atome du réseau. C'est pourquoi l'ionisation par choc n'est pas considérée comme une interaction inter-porteur.

¹²L'ionisation par choc initiée par un trou est un processus exactement symétrique par rapport à la bande interdite.

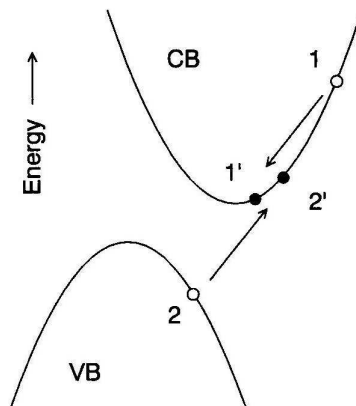


FIG. 3.9: Schéma d'une ionisation par choc initiée par un électron (d'après [15]). 1 et 2 représentent les états électroniques incidents ; 1' et 2' sont les états électroniques post-diffusion.

et enfin la structure de bande ; il requiert en outre plusieurs intégrations sur la zone de Brillouin¹³. Le résultat d'une intégration numérique *ab initio* est un taux d'ionisation par choc P_{ii} intrinsèquement anisotrope, i.e. fonction du vecteur d'onde incident k [13, 14, 65]. L'implémentation d'un tel taux d'interaction dans un algorithme Monte Carlo est particulièrement lourde, c'est pourquoi plusieurs auteurs de calculs *ab initio* fournissent une formule analytique pour approximer le taux P_{ii} . Le plus souvent, cette formule se présente comme une simple fonction de l'énergie en puissance :

$$P_{ii}(E) = P_0 \times (E - E_0)^{\alpha_0} \quad (3.13)$$

Dans l'expression (3.13), P_0 est un préfacteur, α_0 l'exposant et le paramètre E_0 est le seuil effectif du taux P_{ii} .

L'approximation analytique (3.13) est souvent nommée *formule de Keldysh* [9]. Lorsque ses coefficients P_0 , α_0 et E_0 sont ajustés sur des résultats *ab initio*, elle permet de modéliser correctement et efficacement le taux d'ionisation par choc [15, 20] (cf. Fig. 3.10). C'est par conséquent cette approche que nous adopterons pour décrire l'ionisation par choc dans le silicium, le germanium, les alliages SiGe, et ce pour les ionisations initiées par les électrons comme par les trous. Le tableau 3.4 synthétise les paramètres de la formule de Keldysh utilisés pour les matériaux purs Si et Ge, pour chaque type de porteur. Il est important de souligner que chaque jeu de paramètres provient d'un ajustement sur des résultats *ab initio*, dont les références sont également spécifiées en dernière colonne de la table 3.4. En aucun cas ces coefficients n'ont été introduits de façon arbitraire.

La figure 3.11 illustre les taux d'ionisation par choc résultant de l'application à la formule (3.13) des paramètres de la table 3.4. Dans le cas des électrons comme dans celui des trous, il apparaît que la probabilité d'ionisation est activée

¹³pour le détail du calcul numérique dans le silicium, voir par exemple les Ref. [3, 15] pour les électrons, [20] pour les trous

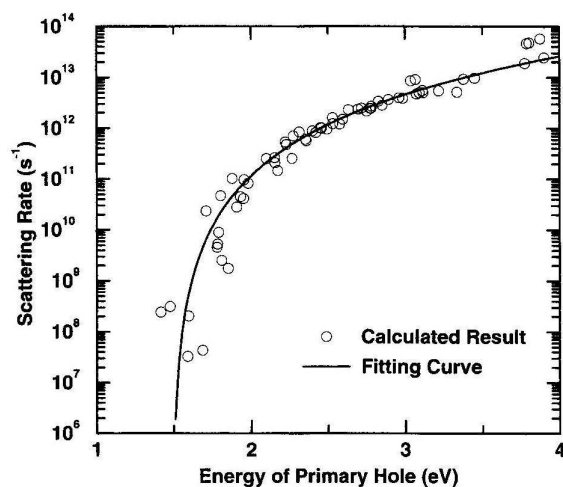


FIG. 3.10: Probabilité d'ionisation par choc des trous dans le silicium (d'après [20]). Les symboles désignent la probabilité anisotrope *ab initio*. La ligne continue représente la formule isotrope de Keldysh intégrant les paramètres ajustés de la table 3.4.

plus tôt dans le germanium que dans le silicium. Ce décalage en énergie, introduit par les paramètres de seuil effectif E_0 , résulte en des taux d'ionisation plus forts pour Ge que pour Si. Il s'explique par l'infériorité de la valeur de la bande interdite du germanium, comparée à celle du silicium (cf. table 4.1).

Dans le cas des alliages SiGe, il n'existe à la connaissance de l'auteur pas de travaux ayant rigoureusement dérivé le taux P_{ii} et sa dépendance en x . Une méthode d'interpolation phénoménologique a donc été mise en place, laquelle permet de calculer le taux $P_{ii}(E, x)$ depuis les taux P_{ii}^{Si} et P_{ii}^{Ge} (cf. § 4.4).

3.3.3 Génération de l'état post-ionisation

Une fois définie la fonction P_{ii} quantifiant la probabilité d'ionisation, il faut modéliser la modification de l'état du porteur de charge induit par la collision. La spécificité de l'ionisation par choc est la génération d'une paire électron-trou

Matériau	Porteur	P_0 ($\text{eV}^{-\alpha_0} \text{s}^{-1}$)	α_0	E_0 (eV)	Référence
Si	e	$1,0 \times 10^{11}$	4,6	1,1	[15]
	h	$1,14 \times 10^{12}$	3,4	1,49	[20]
Ge	e	$4,0 \times 10^{11}$	4,8	0,8	[19]
	h	$1,2 \times 10^{12}$	3,8	1,0	[21]

TAB. 3.4: Paramètres de Keldysh pour la dépendance en énergie du taux d'ionisation par choc.

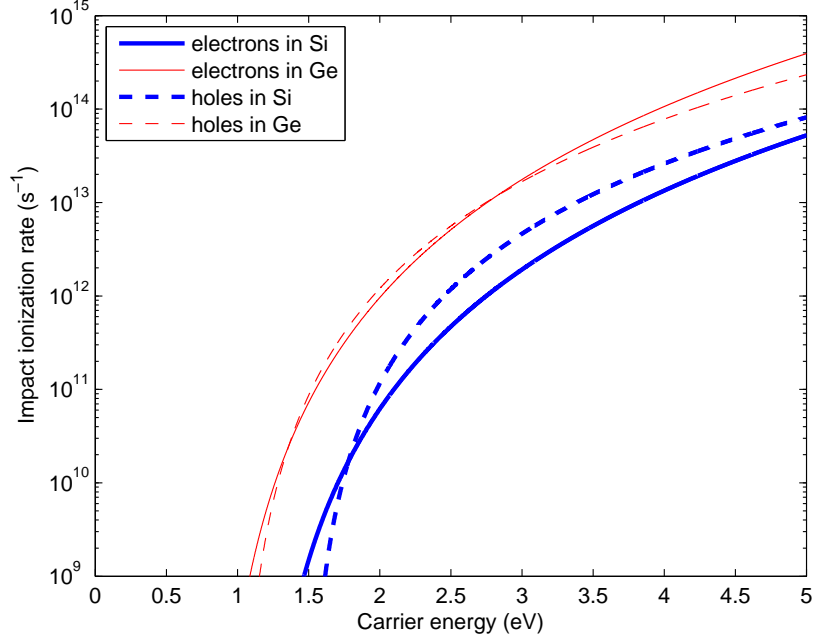


FIG. 3.11: Approximation analytique de la probabilité d'ionisation par choc, par emploi d'une formule de Keldysh. Les courbes bleues caractérisent l'ionisation par choc dans le silicium, les courbes rouges sont relatives au germanium.

à chaque interaction. Etant donnée la nature *mono-particule* de notre algorithme de simulation Monte Carlo, il se pose le problème de la modélisation de ces porteurs générés. Puisque notre programme mono-particule doit permettre l'extraction de propriétés électroniques moyennes, il repose sur l'hypothèse d'un milieu homogène (i.e. invariant dans l'espace) et stationnaire (i.e. invariant dans le temps). En se basant sur cette hypothèse, on peut considérer que la densité des porteurs libres soit globalement constante, c'est-à-dire non-modifiée par les processus d'ionisation. Notre algorithme négligera donc la génération de la paire électron-trou supplémentaire, et se focalisera sur la modélisation de l'état électronique diffusé¹⁴.

La façon la plus simple de modéliser l'état post-ionisation consiste à supposer que l'énergie cinétique perdue par la particule incidente au cours de l'impact est constante et égale à la valeur E_g de la bande interdite [8, 10] :

$$E_{1'} = E_1 - E_g \quad (3.14)$$

Cette méthode déterministe ne permet pas de prendre en compte les détails de la structure de bande, ni la distribution des états finaux accessibles.

Cependant les travaux *ab initio* modernes ont pu décrire de façon plus précise la distribution statistique de l'état post-ionisation [15, 20, 66]. Ces calculs numériques ont notamment permis de formuler analytiquement la fonction de

¹⁴noté $1'$ dans la figure 3.9

Matériau	Porteur	a	b (eV)	m (eV ^{1-p})	n (eV)	p	Référence
Si	e	0,29	0,32	0,17	1,059	1,0	[15]
	h	0,375	0,476	0,053	1,41	1,7	[20]
Ge	e	0,29	0,233	0,17	0,759	1,0	
	h	0,375	0,292	0,053	0,92	1,7	

TAB. 3.5: Paramètres pour la distribution gaussienne de l'énergie du porteur après ionisation par choc.

distribution de l'énergie $E_{1'}$ de la particule diffusée. Cette distribution est, à l'image de la formule de Keldysh, extraite depuis des résultats *ab initio* ; elle est formulée comme une distribution gaussienne dont les caractéristiques (valeur moyenne $\langle E_{1'} \rangle$ et écart type $\sigma_{1'}$) sont fonctions de l'énergie initiale E_1 [15, 20] :

$$P_{E_1}(E_{1'}) = \frac{1}{\sigma_{1'}\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{E_{1'} - \langle E_{1'} \rangle}{\sigma_{1'}} \right)^2 \right] \quad (3.15)$$

$$\langle E_{1'} \rangle = aE_1 - b \quad (3.16)$$

$$\sigma_{1'} = m(E_1 - n)^p \quad (3.17)$$

Les paramètres des équations (3.16) et (3.17), pour Si, Ge, et les deux types de porteurs, sont reportés dans le tableau 3.5. Notons que la formulation analytique de la distribution en énergie des porteurs après ionisation par choc, sur la base de résultats numériques *ab initio*, a seulement été reportée pour le silicium. Afin de disposer de données équivalentes pour le germanium, on remplace la variable E_1 dans (3.16) et (3.17) par $E_1 + (E_0^{Si} - E_0^{Ge})$, où E_0 est le seuil effectif de la formule de Keldysh.

Les distributions gaussiennes issues de la formulation analytique (3.15) sont illustrées dans la figure 3.12, pour le cas des électrons dans le silicium. Trois distributions en énergie issues de trois énergies initiales distinctes sont comparées, ceci afin de mettre en évidence l'influence de l'état *pré-diffusion* sur la distribution *post-diffusion*. Il apparaît que, pour une énergie cinétique initiale E_1 immédiatement supérieure au seuil effectif E_0 de l'ionisation, la distribution est très localisée et située au bas de la bande. Dans ce cas, la distribution est assimilable à un pic de Dirac centré en $E_{1'} = 0$, et notre méthode distribuée est quasi-équivalente à l'approximation (3.14). Cependant, lorsque l'énergie initiale E_1 augmente, l'augmentation de la densité des états finaux accessibles induit un fort élargissement de la distribution gaussienne. En outre, on remarque que l'énergie perdue par le porteur incident au cours de l'interaction augmente fortement avec son énergie initiale : pour $E_1 = 3,0\text{eV}$, l'énergie moyenne perdue est de l'ordre de 2,5eV, soit plus de 2 fois l'amplitude de la bande interdite. Ceci illustre les limites des modèles simplistes de type (3.14).

Les modèles analytiques choisis pour modéliser la probabilité d'interaction et la distribution en énergie post-diffusion nous permettent dès lors d'implémenter de façon directe et efficace le mécanisme de l'ionisation par choc dans notre algorithme de simulation Monte Carlo. Le vecteur d'onde post-ionisation de la particule est généré par randomisation sur la surface iso-énergie $\{E = E_{1'}\}$

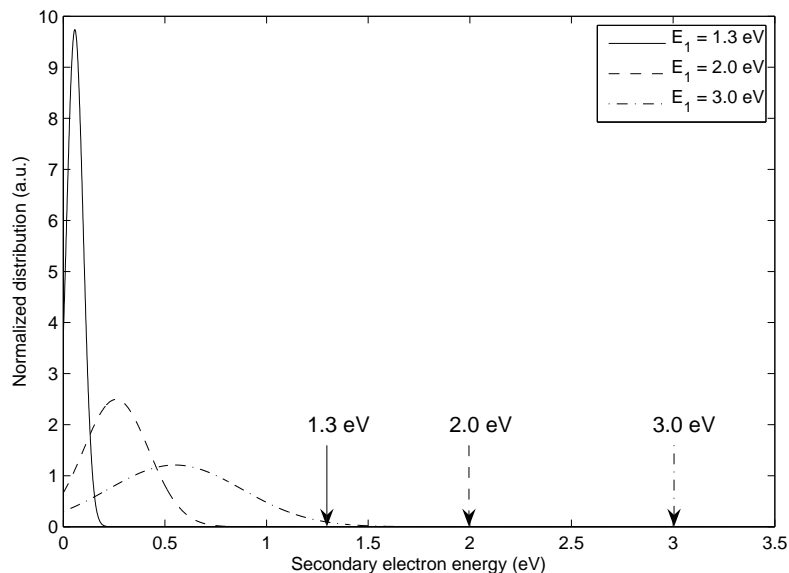


FIG. 3.12: Distribution gaussienne en énergie de l'électron après ionisation par choc. La distribution P_{E_1} est tracée pour 3 énergies initiales E_1 . Pour chaque distribution, le niveau de l'énergie de l'électron incident est indiqué par une flèche verticale.

(cf. § 2.3.6).

3.4 Simulation du transport dans Si

Dans les sections précédentes, tous les modèles nécessaires à la simulation du transport des porteurs de charge dans le silicium et le germanium massifs, à savoir les structures de bande, modèles d'interaction porteur-phonon et d'ionisation par choc, ont été définis et explicités. Nous sommes dès lors en mesure de modéliser le transport homogène dans ces matériaux par un algorithme Monte Carlo mono-particule. Les deux prochaines sections § 3.4 et § 3.5 sont respectivement consacrées à la présentation des résultats de simulation obtenus pour Si et Ge. La pertinence des modèles physiques employés est évaluée par une analyse comparative systématique avec les données expérimentales.

3.4.1 Distribution dans l'espace réciproque

Dans un premier temps, il est intéressant de visualiser la distribution spatiale des particules Monte Carlo dans l'espace réciproque. Cette distribution permet d'identifier les régions de la structure de bande qui contribuent au transport des porteurs de charge. On choisit de s'intéresser à la distribution dans l'espace des vecteurs d'onde pour 2 cas distincts :

1. Pour un champ électrique appliqué de 1 kV/cm, les porteurs sont proches de l'équilibre thermodynamique et sont distribués essentiellement au voisinage des minima de la structure de bande.
2. Pour un champ électrique appliqué de 100 kV/cm, les porteurs sont fortement accélérés. L'énergie acquise par les porteurs sous l'action motrice du champ résulte dans une augmentation de leur énergie moyenne : l'équilibre thermodynamique est brisé.

Ces 2 configurations vont nous permettre de mettre en évidence l'effet de l'échauffement des porteurs sur leur distribution dans l'espace réciproque. Le code couleur utilisé dans les figures 3.13a, 3.13b, 3.14a et 3.14b est un gradient linéaire associé à l'énergie de la particule.

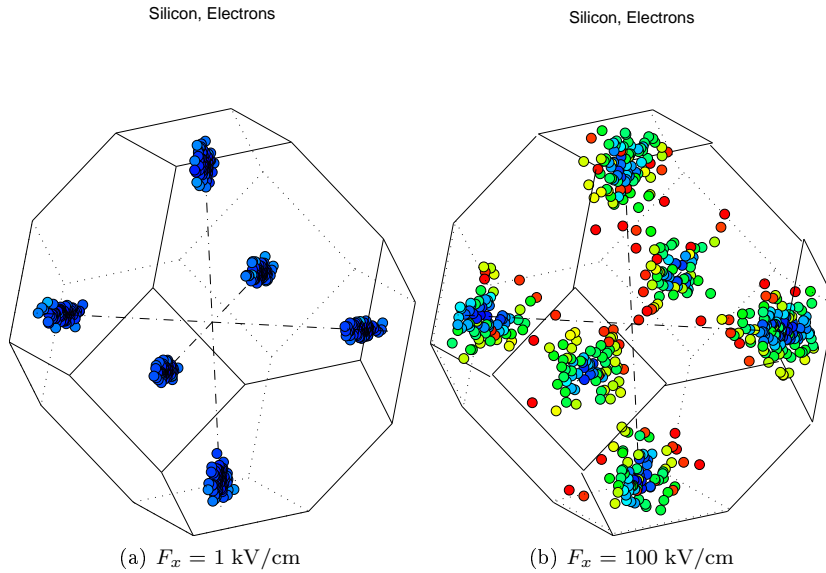


FIG. 3.13: Distribution des électrons dans la zone de Brillouin du silicium à 300 K, pour 2 champs électriques appliqués.

Les figures 3.13a et 3.13b sont relatives aux distributions des électrons. A l'équilibre thermodynamique, les particules sont très localisées autour des centres des 6 vallées Δ . Sous l'action d'un champ électrique fort, les électrons acquièrent de l'énergie et se délocalisent sensiblement des 6 minima de la dispersion : on parle d'élargissement de la distribution.

La distribution des trous à l'équilibre est très concentrée en Γ , i.e. au voisinage de l'unique minima des bandes de valence (cf. Fig. 3.14a). L'application d'un champ électrique important induit l'échauffement des trous ; leur distribution s'élargit en centre de zone de Brillouin (cf. Fig. 3.14b).

3.4.2 Vitesse de dérive

Le premier résultat fondamental dans le cadre de l'étude quantitative du transport des charges libres dans un semiconducteur est la vitesse de groupe

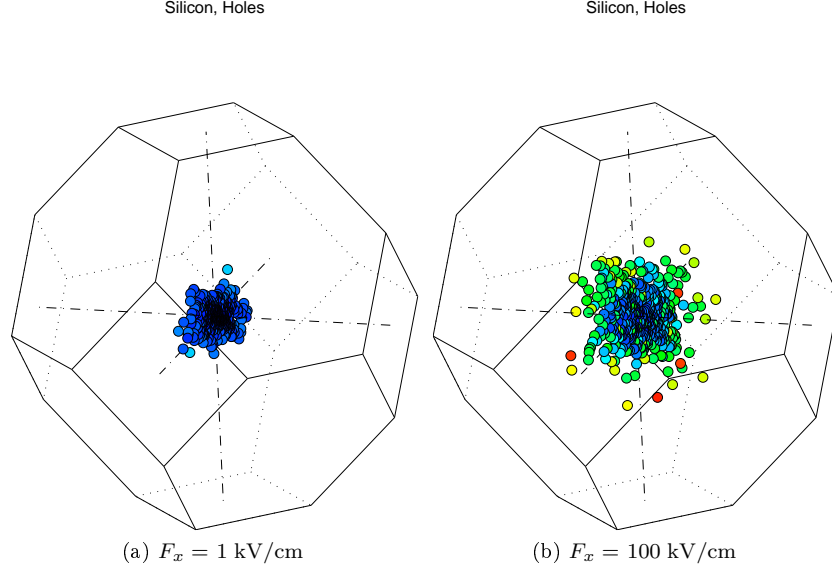


FIG. 3.14: Distribution des trous dans la zone de Brillouin du silicium à 300 K, pour 2 champs électriques appliqués.

moyenne qu'ils acquièrent en réponse à l'application d'un champ électrique donné : on parle de *vitesse de dérive*. Les graphes 3.15a et 3.16a illustrent les caractéristiques vitesse-champ respectivement obtenues par simulation Monte Carlo du transport des électrons et des trous dans Si. L'évolution concomitante de l'énergie moyenne des porteurs, tracée en fonction du champ électrique, constitue la caractéristique énergie-champ, visible en figure 3.15b pour les électrons, en figure 3.16b pour les trous. On peut identifier 3 régimes ou domaines différents dans la constitution des caractéristiques vitesse- et énergie-champ :

1. Le régime linéaire correspond aux champs électriques faibles compris approximativement entre 0 et quelques kV/cm. Ce régime est caractérisé par une réponse linéaire de la vitesse de dérive v_d à l'application du champ électrique F :

$$v_d = \mu F \quad (3.18)$$

Le coefficient de proportionnalité noté μ dans (3.18) est la *mobilité à faible champ*, ou *mobilité ohmique* des porteurs. C'est une propriété fondamentale du matériau qui quantifie son caractère conducteur. Le régime linéaire s'établissant pour les champs faibles, il correspond au transport de charges libres dans un état proche de l'équilibre thermodynamique. L'énergie moyenne des porteurs est constante et égale à l'énergie thermique : le régime linéaire est ainsi clairement identifiable par le palier initial de la caractéristique énergie-champ. La rupture de l'équilibre thermodynamique par l'application de champs plus élevés résulte dans la fin de la validité de la relation linéaire (3.18), et induit la sortie du régime linéaire.

2. Le régime de transition s'établit entre les régimes linéaire et saturé. Il s'établit dans la gamme des champs intermédiaires, approximativement

3.4. SIMULATION DU TRANSPORT DANS SI

Matériau	Porteur	μ_{mc} cm ² /Vs	μ_{exp} cm ² /Vs
Si	e	1518	1500
	h	564	500
Ge	e	3562	3800
	h	1814	1800

TAB. 3.6: Mobilité des électrons et des trous dans le silicium et le germanium à 300 K. Les résultats de simulation sont comparés aux données expérimentales de la Ref. [68].

entre 3 et 100 kV/cm. Au niveau de la dynamique des charges, il est caractérisé par l'échauffement progressif des porteurs libres.

- Le régime de saturation est celui des champs électriques forts, il s'établit au-delà de 100 kV/cm. Dans ce domaine, le transport des charges est fortement *hors d'équilibre*. La vitesse de dérive atteint une valeur limite maximale, globalement constante : on parle de *vitesse de saturation*, usuellement notée v_{sat} . Les particules deviennent très énergétiques et, dès lors que leur énergie atteint l'amplitude de la bande interdite, peuvent provoquer l'ionisation par choc. Au-delà de plusieurs centaines de kV/cm, l'ionisation par choc devient le mécanisme dominant du processus de relaxation de l'énergie des porteurs.

La vitesse de dérive des porteurs dans un semiconducteur est mesurable directement par la méthode du temps de vol¹⁵. Cette technique est basée sur la mesure du délai nécessaire à des porteurs de charge photo-excités, soumis à une différence de potentiel, pour se propager sur une distance connue [67]. Les caractéristiques vitesse-champ des électrons (cf. Fig. 3.15a) et des trous (cf. Fig. 3.16a) mettent en évidence un excellent accord entre nos résultats de simulation et les mesures par méthode du temps de vol. Le calcul de la pente de la caractéristique vitesse-champ dans son régime linéaire permet d'extraire directement la mobilité des porteurs. Un comparatif est établi entre les mobilités théoriques et expérimentales dans le tableau 3.6. Les mesures de mobilité des porteurs dans le silicium sont correctement reproduites par nos simulations. Il n'est cependant pas possible de valider expérimentalement la caractéristique énergie-champ résultant de nos simulations. En effet, il n'existe pas de technique expérimentale permettant de mesurer directement l'énergie moyenne des porteurs. On peut néanmoins obtenir une indication indirecte sur l'échauffement des porteurs via les mesures du coefficient d'ionisation par choc.

3.4.3 Coefficient d'ionisation par choc

On définit le coefficient d'ionisation par choc, noté α , comme l'inverse de la distance moyenne parcourue par un électron ou un trou avant de produire une ionisation par choc. Le coefficient α constitue donc un indice quantifiant la fréquence des ionisations par choc provoquées par le gaz de porteurs libres. La

¹⁵ *time-of-flight technique* en Anglais

probabilité d'ionisation par choc étant une fonction très fortement croissante de l'énergie du porteur, la fréquence moyenne des ionisations dépendra de la distribution en énergie des porteurs. On voit donc comment la donnée du coefficient d'ionisation α renseigne indirectement sur l'énergie moyenne d'une population de porteurs.

Le calcul du coefficient α par méthode Monte Carlo peut s'effectuer de plusieurs façon différentes. Une première technique consiste à compter le nombre n_{ii} d'ionisations par choc induites par la particule pendant une durée de propagation Δt . La période moyenne d'ionisation de la particule est alors directement donnée par le ratio $\Delta t/n_{ii}$ et la distance moyenne de propagation avant ionisation s'obtient comme le produit de la période d'ionisation par la vitesse de dérive :

$$\alpha^{-1} = v_d \frac{\Delta t}{n_{ii}} \quad (3.19)$$

Une seconde approche consiste à calculer la distance parcourue par la particule dans l'espace réel [5]. Cette distance de propagation est la somme des trajets élémentaires δd effectués lors des phases successives d'accélération balistique. A chaque phase balistique, sous l'action du champ F , la particule dérive sur la distance δd et acquiert la quantité d'énergie δE :

$$\delta E = eF\delta d$$

Le coefficient d'ionisation s'écrit alors comme l'inverse du parcours moyen par ionisation :

$$\alpha^{-1} = \frac{\sum \delta d}{n_{ii}} = \frac{\sum \delta E/eF}{n_{ii}} \quad (3.20)$$

Ces deux techniques de calcul distinctes sont physiquement équivalentes, et produisent par conséquent des résultats numériques similaires pour le coefficient d'ionisation α .

Les coefficients d'ionisation par choc des électrons et des trous ont été beaucoup mesurés dans le silicium. Les résultats de ces mesures fournissent une référence précieuse pour évaluer le comportement de nos modèles à hautes énergies. Les figures 3.15c et 3.16c comparent les résultats obtenus par simulation Monte Carlo pour les coefficients d'ionisation respectifs des électrons et des trous, avec les données expérimentales publiées. On peut constater la très bonne adéquation existant entre mesure et modélisation, pour les deux types de porteurs de charge.

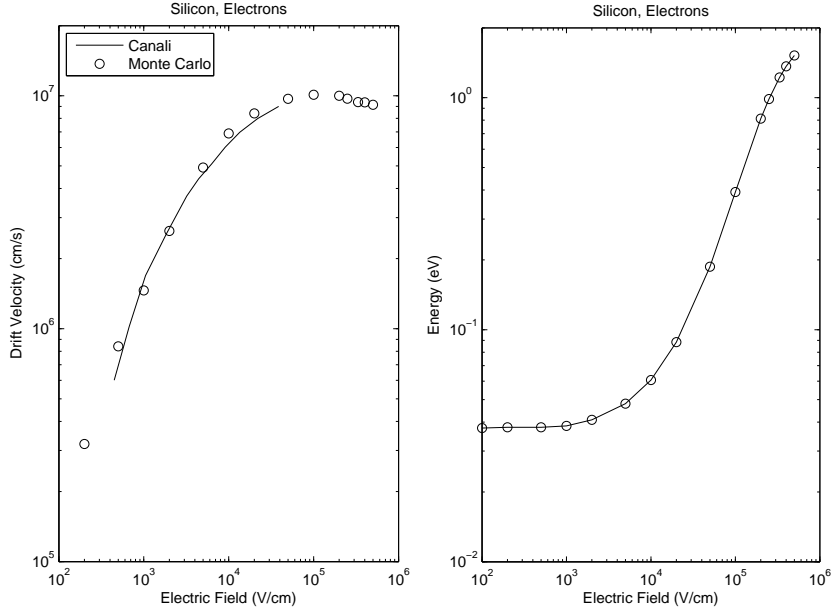
3.4.4 Efficacité quantique

L'efficacité quantique¹⁶ est un indice quantifiant le pouvoir de génération de paires électron-trou dans un matériau semiconducteur. Cet indice, noté Φ , est défini comme le nombre de paires électron-trou générées en moyenne par un électron incident d'énergie E . On peut analyser la dépendance en énergie de l'efficacité quantique en définissant 3 gammes d'énergies :

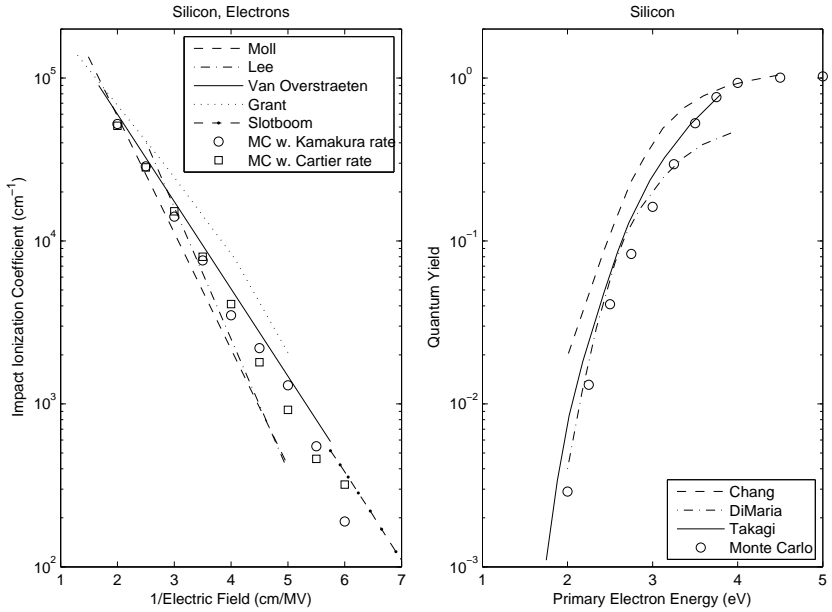
1. Pour $E < E_g$, l'électron incident est trop faiblement énergétique pour pouvoir exciter un électron de la bande de valence : la probabilité d'ionisation par choc est nulle. Dans cette gamme d'énergies, on a $\Phi(E) = 0$.

¹⁶ *quantum yield* en Anglais

3.4. SIMULATION DU TRANSPORT DANS SI

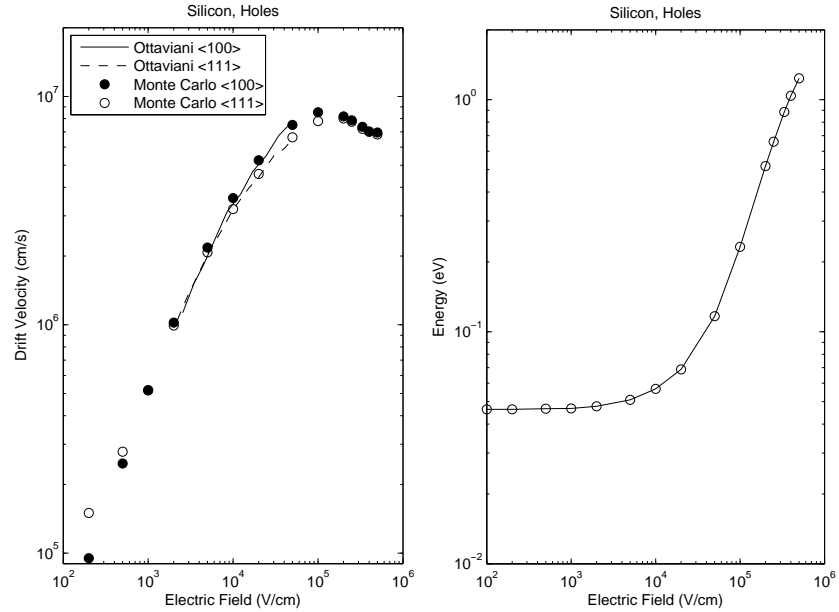


(a) Vitesse de dérive en fonction du champ (b) Energie moyenne en fonction du champ

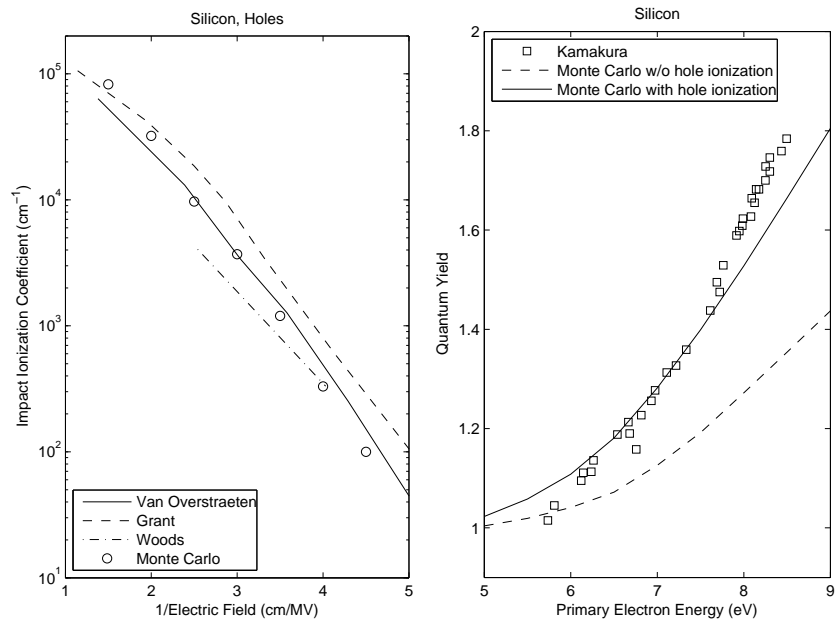


(c) Coefficient d'ionisation par choc en fonction du champ (d) Efficacité quantique en fonction de l'énergie initiale de l'électron incident

FIG. 3.15: Résultats pour les propriétés de transport des électrons à moyenne et haute énergie dans le silicium intrinsèque massif. Les symboles circulaires représentent les simulations Monte Carlo, les lignes sont les résultats expérimentaux. Les références expérimentales sont [67] pour la Fig. 3.15a, [69, 70, 71, 72, 73] pour la Fig. 3.15c et [74, 75, 76] pour la Fig. 3.15d.



(a) Vitesse de dérive en fonction du champ (b) Energie moyenne en fonction du champ



(c) Coefficient d'ionisation par choc en fonction du champ (d) Efficacité quantique en fonction de l'énergie initiale de l'électron incident

FIG. 3.16: Résultats pour les propriétés de transport des trous à moyenne et haute énergie dans le silicium intrinsèque massif. Les symboles circulaires représentent les simulations Monte Carlo, les lignes sont les résultats expérimentaux (sauf Fig. 3.16d). Les références expérimentales sont [77] pour la Fig. 3.16a, [71, 72, 78] pour la Fig. 3.16c et [18] pour la Fig. 3.16d.

2. Pour $E_g < E < 5$ eV, l'énergie de l'électron incident devient suffisante pour générer l'ionisation par choc. Cependant, à ces énergies la dynamique de l'électron est largement dominée par l'émission phononique : la trajectoire la plus probable pour l'électron incident est une succession d'émissions de phonons, aboutissant à la relaxation de l'énergie de l'électron en-deçà du seuil d'ionisation. Parmi une population d'électrons incidents, seule une minorité statistique d'entre eux vont provoquer une ionisation, et l'efficacité quantique, quoique non-nulle, est très inférieure à 1. Aux niveaux d'énergie supérieurs, la probabilité d'ionisation croît rapidement. L'efficacité quantique augmente en conséquence et tend progressivement vers 1 : à ce stade, la majorité des électrons injectés provoquent une ionisation par choc au cours du processus de relaxation de leur énergie vers l'équilibre thermodynamique. La donnée expérimentale de l'efficacité quantique mesurée dans cette gamme d'énergie constitue une information fondamentale sur le transport à très hautes énergies des *électrons* : l'indice Φ renseigne sur le poids statistique relatif des probabilités d'ionisation $P_{ii}(E)$ et d'interaction électron-phonon $P_{ph}(E)$, c'est-à-dire sur le ratio P_{ii}/P_{ph} .
3. Pour $E > 5$ eV, l'électron incident est tellement énergétique qu'il va pouvoir provoquer directement ou indirectement plusieurs ionisations par choc. Pendant le processus direct, l'électron incident génère successivement plusieurs ionisations. De façon indirecte, ce sont les paires électron-trou générées par l'électron incident qui vont provoquer des ionisations de 2nd ordre. Ainsi, lorsque l'énergie incidente de l'électron dépasse 5 eV, l'efficacité quantique va progressivement dépasser l'unité. Il est remarquable que parmi les ionisations de 2nd ordre causées par les porteurs secondaires, certaines sont provoquées par les trous excités dans la bande de valence. Ainsi, la mesure de Φ dans cette gamme d'énergies extrêmes fournit un indicateur relatif au transport à hautes énergies des *deux types de porteurs*.

La simulation de l'efficacité quantique par méthode Monte Carlo requiert la mise en place d'un algorithme spécifique, capable de simuler la propagation des deux types de porteurs. La méthode de calcul de $\Phi(E_0)$ consiste à injecter un électron d'énergie E_0 et à simuler sa dynamique de transport, sans champ électrique appliqué. L'électron injecté va naturellement tendre à atteindre l'équilibre thermodynamique en relaxant son énergie via des interactions électron-phonon et des ionisations par choc. A chaque paire électron-trou créée, la trajectoire dans l'espace réciproque des porteurs secondaires générés est également simulée, afin de prendre en compte les ionisations de 2nd ordre, 3^e ordre, etc. On interrompt le suivi des particules dont l'énergie devient inférieure au seuil effectif d'ionisation, celles-ci ne pouvant plus contribuer à l'efficacité quantique. Pour chaque niveau initial E_0 , plusieurs milliers d'injections sont simulées afin de minimiser le bruit statistique affectant l'efficacité quantique $\Phi(E_0)$, laquelle est finalement calculée comme le ratio du nombre d'ionisations par choc simulées sur le nombre d'injections à l'énergie initiale E_0 [65].

Les résultats de simulation de l'efficacité quantique du silicium sont exposés dans les figures 3.15d et 3.16d. La figure 3.15d est spécifique aux faibles niveaux d'injection, pour lesquels l'efficacité quantique est inférieure à l'unité. Dans cette gamme d'énergie, seul l'électron incident peut contribuer à Φ . Le très bon accord constaté entre les mesures de l'indice d'efficacité quantique et

les simulations constitue la validation définitive de notre modèle d'interaction électron-phonon. La figure 3.16d est consacrée aux forts niveaux d'injection, pour lesquels l'efficacité quantique dépasse l'unité. Afin d'identifier la contribution des trous secondaires à l'indice Φ , nous avons procédé à 2 séries de simulations, respectivement avec et sans l'inclusion du transport des trous secondaires. Les données expérimentales de l'efficacité quantique excédant l'unité mènent aux conclusions suivantes [18] :

- Il est nécessaire de prendre en compte la propagation des trous secondaires et les ionisations d'ordres supérieurs, pour expliquer les résultats expérimentaux ;
- Les mesures d'efficacité quantique supérieures à l'unité permettent de valider les modèles de transport des trous à haute énergie ;
- La très bonne concordance obtenue entre les résultats de mesure et de simulation valide la calibration de notre modèle d'interaction trou-phonon.

3.4.5 Fonction de distribution

La fonction de distribution ou densité en énergie $n(E)$ constitue un résultat fondamental de toute simulation de transport de charges. Cette fonction indique les détails de la distribution en énergie de la population des porteurs libres représentatifs de l'état moyen d'énergie $\langle E \rangle$. La densité à l'énergie E est définie par la concentration de porteurs dont l'énergie cinétique est comprise entre E et $E + dE$. L'extraction de cette quantité par méthode Monte Carlo nécessite la spécification préalable d'une discrétisation numérique de la variable énergie E . On peut définir la variable discrétisée E_j par un pas constant ΔE :

$$E_j = j \cdot \Delta E \quad (3.21)$$

La fonction de distribution va être tabulée sur l'échelle des énergies définie par (3.21). La densité n_j associée à l'énergie E_j est calculée en utilisant la méthode statistique standard de l'ensemble synchrone (cf. éq.(2.9)) :

$$\langle n_j \rangle = \frac{N_c}{\Delta E} \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \delta_j(E_i) \quad (3.22)$$

avec

$$\begin{aligned} \delta_j(E_i) &= 1 \quad \text{si } E_j \leq E_i < E_{j+1} \\ \delta_j(E_i) &= 0 \quad \text{sinon} \end{aligned}$$

Dans l'équation (3.22), E_i est la valeur prise par l'énergie de la particule à la fin du i^{e} vol libre, et N_c indique la densité totale de porteurs libres. La suite des n_j associée à l'échelle des énergies E_j correspond à la distribution numérique calculée par l'algorithme Monte Carlo.

Les fonctions de distribution des électrons et des trous dans le silicium, calculées pour plusieurs champs électriques, sont exposées dans les figures 3.17a et 3.17b, respectivement. L'effet du champ électrique sur la distribution des porteurs est clairement visible : l'augmentation du champ entraîne l'élargissement de la distribution, traduisant l'échauffement progressif des porteurs de charge. L'observation attentive de la fonction de distribution des électrons obtenue pour un champ de 300 kV/cm révèle la présence d'un *épaulement* situé

au voisinage de 2,6 eV, également constaté dans la Ref. [3]. Cette accumulation locale des électrons est due au pic que présente la probabilité d'interaction électron-phonon aux mêmes énergies. Ce détail de la distribution électronique à fort champ illustre comment la probabilité d'interaction porteur-phonon, calculée en cohérence avec une structure de bande réaliste, détermine la distribution des porteurs à haute énergie.

Plusieurs résultats supplémentaires relatifs à la simulation du transport des porteurs de charge dans le silicium sont présentés en annexe, à savoir le calcul de la mobilité des électrons dans le silicium biaxialement contraint (cf. annexe B), et une investigation du dépassement transitoire de vitesse des électrons et des trous dans le silicium massif (cf. annexe C).

3.5 Simulation du transport dans Ge

3.5.1 Distribution dans l'espace réciproque

A l'équilibre thermodynamique, les électrons occupant la bande de conduction du germanium sont localisés dans les 8 demi-vallées L , aux frontières de la 1^{re} zone de Brillouin (cf. Fig. 3.18a). Du fait de la très faible masse transverse caractérisant la dispersion ellipsoïdale du Ge au voisinage de ses minima¹⁷, les électrons à l'équilibre sont confinés le long du grand axe des vallées L . Lorsque les électrons de conduction sont accélérés par un champ électrique fort, ils accèdent très rapidement aux vallées supérieures Γ et Δ , celles-ci étant particulièrement proches en énergie. La population électronique résultante est remarquablement délocalisée, et occupe tous les points de haute symétrie de l'espace réciproque, comme l'illustre la figure 3.18b.

La structure des bandes de valence de Si et Ge étant qualitativement similaires, les distributions de trous dans les deux matériaux sont comparables : la population de porteurs est centrée en centre de zone et s'étend radialement sous l'action motrice d'un fort champ électrique. Toutefois, on peut remarquer que la distribution des trous à l'équilibre thermodynamique est sensiblement plus étendue dans le cas du Si que du Ge (cf. Figs. 3.14a et 3.19a). Cette différence est causée par la supériorité de la masse de densité d'états du silicium sur celle du germanium :

$$m_{dos}^{Si}/m_0 = 0,87 \quad \text{et} \quad m_{dos}^{Ge}/m_0 = 0,38$$

A fort champ, les trous s'éloignent du centre de zone Γ et les effets induits par la géométrie des minima de bande s'amenuisent : les distributions de trous énergétiques deviennent globalement similaires pour Si (Fig. 3.14b) et Ge (Fig. 3.19b).

3.5.2 Vitesse de dérive

Les caractéristiques vitesse-champ des électrons et des trous dans le germanium massif à 300 K sont reportées dans les figures 3.20a et 3.21a. Les caractéristiques énergie-champ correspondantes sont présentées dans les figures 3.20b et 3.21b. Bien que l'observation des résultats de vitesse de dérive fasse apparaître un bon accord global entre simulation et mesure, on peut remarquer une

¹⁷ $m_t^L/m_0 = 0,08$ pour Ge

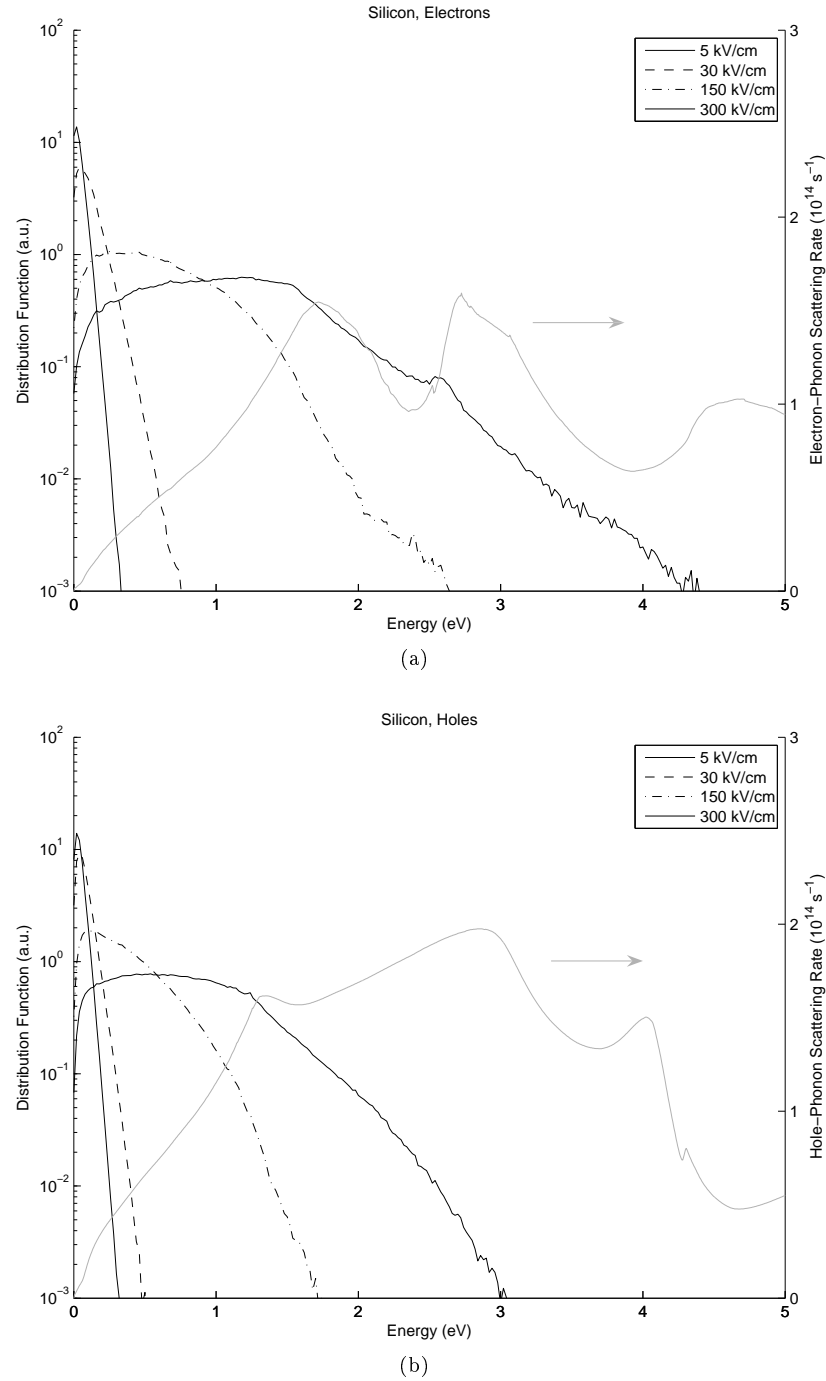


FIG. 3.17: Fonctions de distribution en énergie des électrons (Fig. 3.17a) et des trous (Fig. 3.17b) dans le silicium massif à 300 K, pour plusieurs champs électriques appliqués. Les probabilités totales d'interaction électron- et trou-phonon sont également tracées (lignes continues grises).

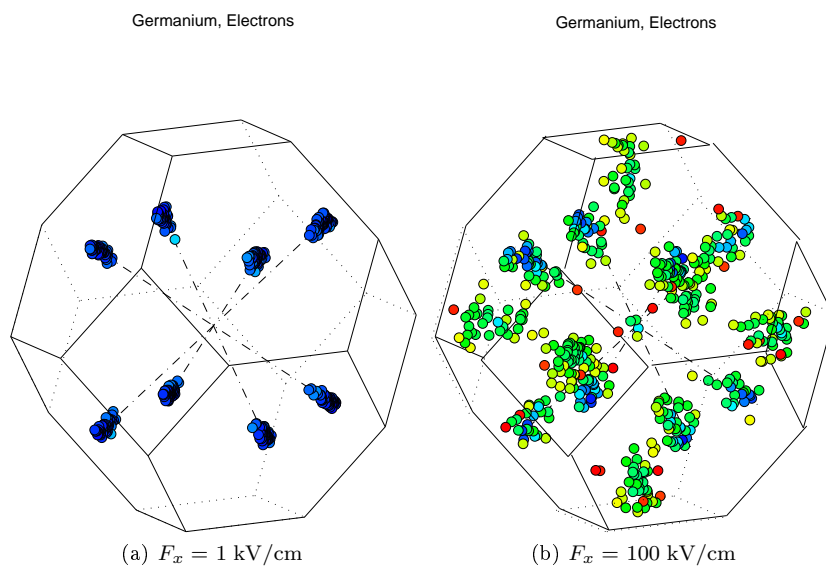


FIG. 3.18: Distribution des électrons dans la zone de Brillouin du germanium à 300 K, pour 2 champs électriques appliqués.

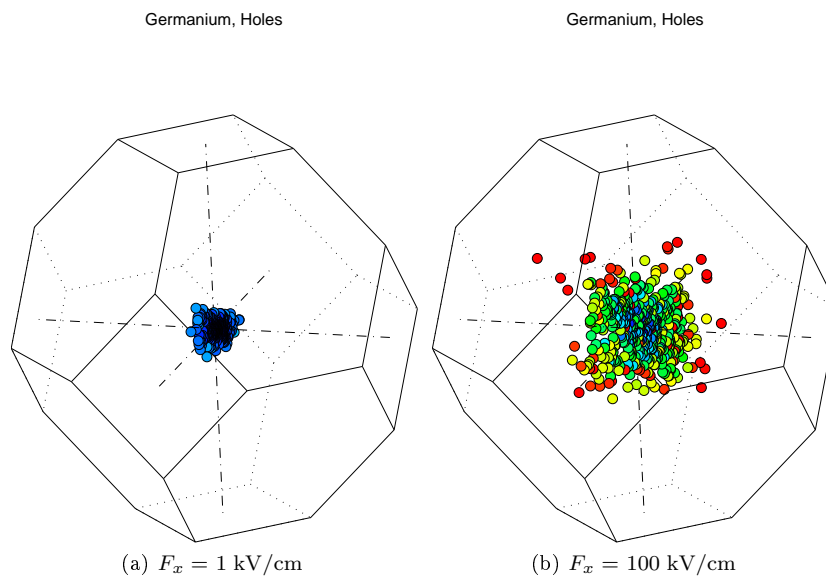


FIG. 3.19: Distribution des trous dans la zone de Brillouin du germanium à 300 K, pour 2 champs électriques appliqués.

divergence notable dans la caractéristique de vitesse des électrons : au-delà de 3 kV/cm, nos résultats théoriques tendent à surestimer la vitesse des électrons mesurée expérimentalement. Il est d'autant plus difficile d'expliquer la cause de cet écart que les mesures de vitesse de dérive ne sont pas disponibles pour les champs excédant 10 kV/cm. En outre, le très faible nombre des études expérimentales publiées relativement aux propriétés électriques du germanium constitue un réel obstacle à l'interprétation de cette divergence. Ayant conscience de l'écart existant entre nos simulations et l'unique référence expérimentale disponible [79] dans la gamme des champs intermédiaires, on peut seulement souligner le très bon accord existant dans le régime linéaire (cf. Tab. 3.6), et préciser que la variation des préfacteurs empiriques Δ_η ne permet pas de réduire le désaccord observé.

3.5.3 Coefficient d'ionisation par choc

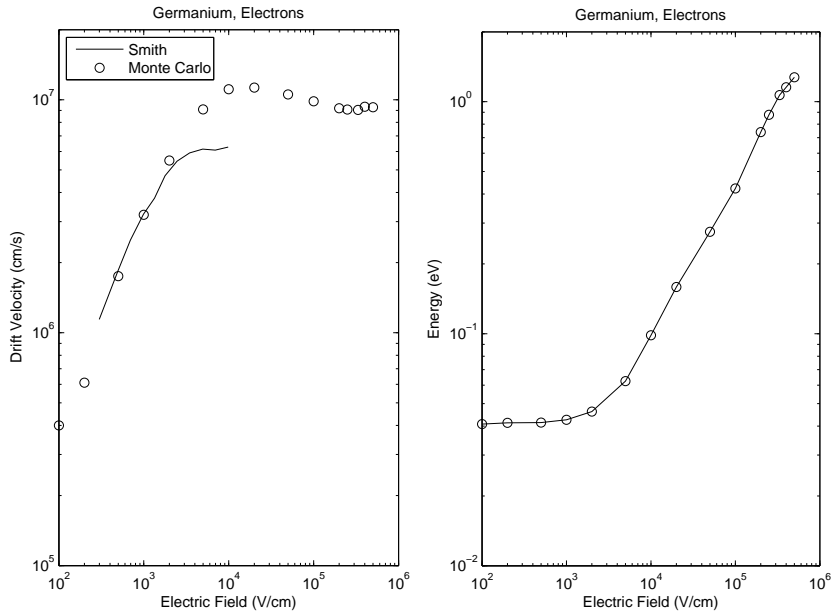
Les résultats à forts champs pour le coefficient d'ionisation par choc des électrons et des trous dans le germanium sont illustrés dans les figures 3.20c et 3.21c. Concernant l'ionisation des électrons, le coefficient calculé par simulation est sensiblement plus faible que les résultats expérimentaux. On doit préciser que l'obtention d'un coefficient d'ionisation supérieur par ajustement de la calibration induit une augmentation de la vitesse de dérive à fort champ : l'amélioration du consensus simulation-mesure au niveau du coefficient d'ionisation résulte dans sa détérioration au niveau de la caractéristique vitesse-champ. A la vue de cette situation délicate, notre stratégie de calibration consiste ici à obtenir le meilleur compromis, c'est-à-dire à atteindre un accord intermédiaire sur toute la gamme des champs électriques, plutôt que de rechercher un consensus parfait sur un résultat spécifique. A ce titre les résultats de simulation présentés pour le transport des électrons dans Ge, pour des champs électriques appliqués entre 0, 1 et 500 kV/cm, représentent le meilleur accord global obtenu avec les données expérimentales. Ici encore, la faible quantité des travaux expérimentaux publiés relativement au coefficient d'ionisation des porteurs dans le germanium est pénalisante. Concernant l'ionisation des trous, les résultats de simulation sont très proches des diverses lois linéaires empiriques publiées pour le coefficient d'ionisation [80, 81].

A notre connaissance, l'efficacité quantique dans le germanium n'a pas été mesurée. L'établissement d'un modèle standard pour les interactions porteur-phonon dans Ge, analogue à celui déterminé dans Si, ne pourra se faire sans cette donnée expérimentale. L'amplitude de nos modèles d'interaction électron-et trou-phonon à hautes énergies ne peut donc pas être définitivement validée. Néanmoins, le bon accord globalement atteint par nos résultats de simulation avec un nombre important de données expérimentales, dans une large gamme de champs électriques, relativement aux deux types de porteurs, constitue une validation suffisamment solide des modèles physiques employés.

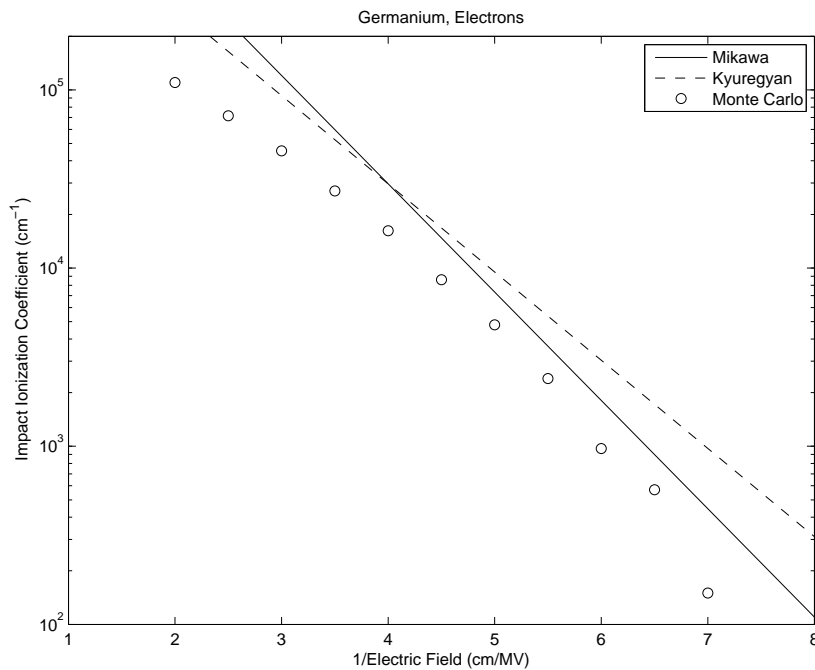
3.5.4 Fonction de distribution

Les distributions en énergie des électrons et des trous dans le germanium, calculées par simulation pour différents champs électriques, sont visibles dans les figures 3.22a et 3.22b. Les fonctions de distribution des électrons sont remarquables par la présence d'une *marche* située vers 0, 2 eV, observation également

3.5. SIMULATION DU TRANSPORT DANS GE

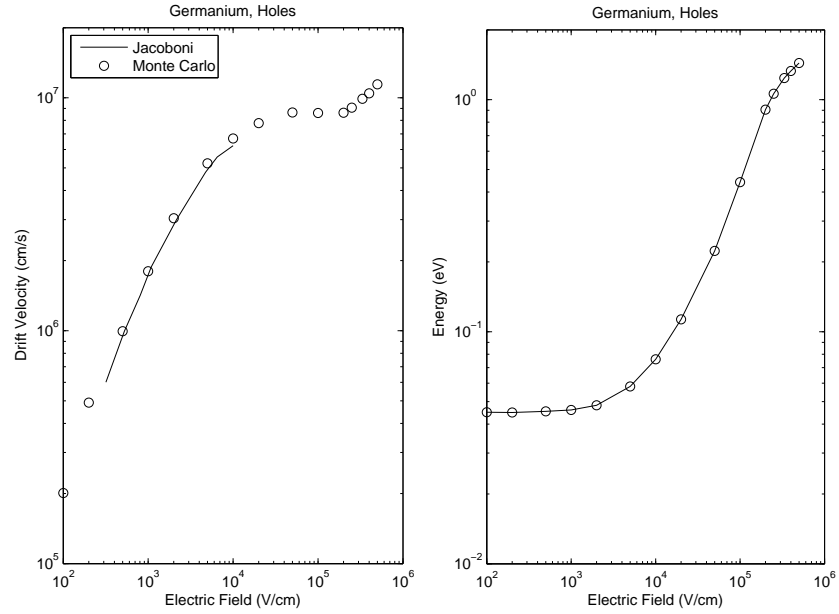


(a) Vitesse de dérive en fonction du champ (b) Energie moyenne en fonction du champ

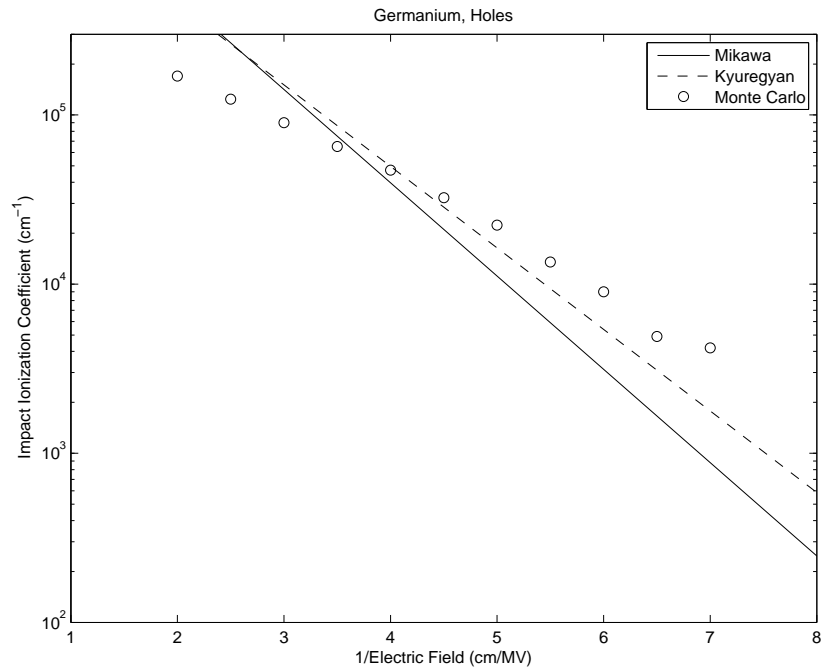


(c) Coefficient d'ionisation par choc en fonction du champ

FIG. 3.20: Résultats pour les propriétés de transport des électrons à moyenne et haute énergie dans le germanium intrinsèque massif. Les symboles circulaires représentent les simulations Monte Carlo, les lignes sont les résultats expérimentaux. Les références expérimentales sont [79] pour la Fig. 3.20a et [80, 81] pour la Fig. 3.20c.



(a) Vitesse de dérive en fonction du champ (b) Energie moyenne en fonction du champ



(c) Coefficient d'ionisation par choc en fonction du champ

FIG. 3.21: Résultats pour les propriétés de transport des trous à moyenne et haute énergie dans le germanium intrinsèque massif. Les symboles circulaires représentent les simulations Monte Carlo, les lignes sont les résultats expérimentaux. Les références expérimentales sont [82] pour la Fig. 3.21a et [80, 81] pour la Fig. 3.21c.

formulée dans la Ref. [24]. Cette discontinuité locale de la distribution correspond à l'énergie des 6 vallées Δ . L'apparition des vallées Δ à cette énergie induit une forte augmentation de la densité d'états accessibles, laquelle provoque une accumulation locale d'électrons. Cette discontinuité dans la distribution en énergie des électrons illustre comment le caractère multi-vallée de la bande de conduction du germanium influence la dynamique des électrons libres.

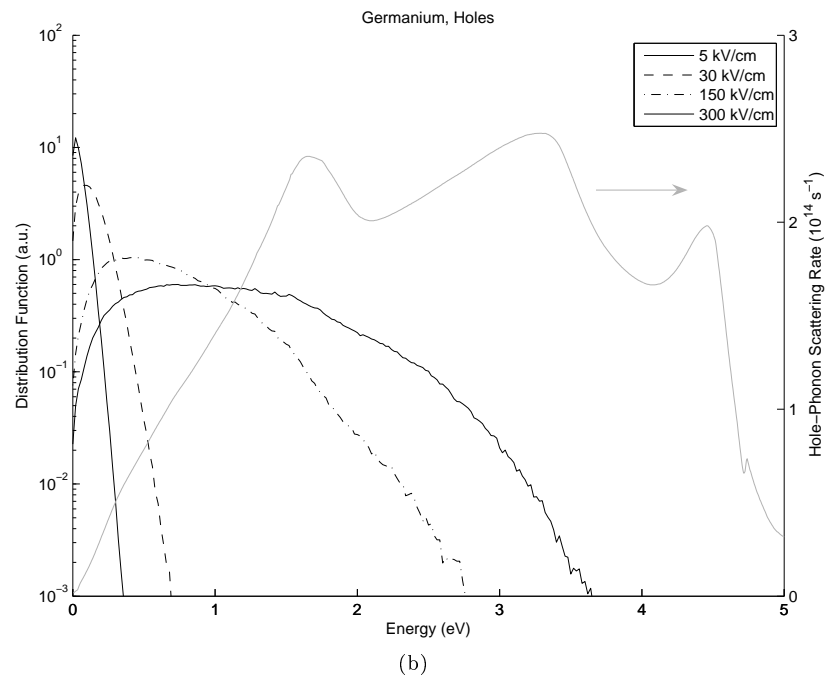
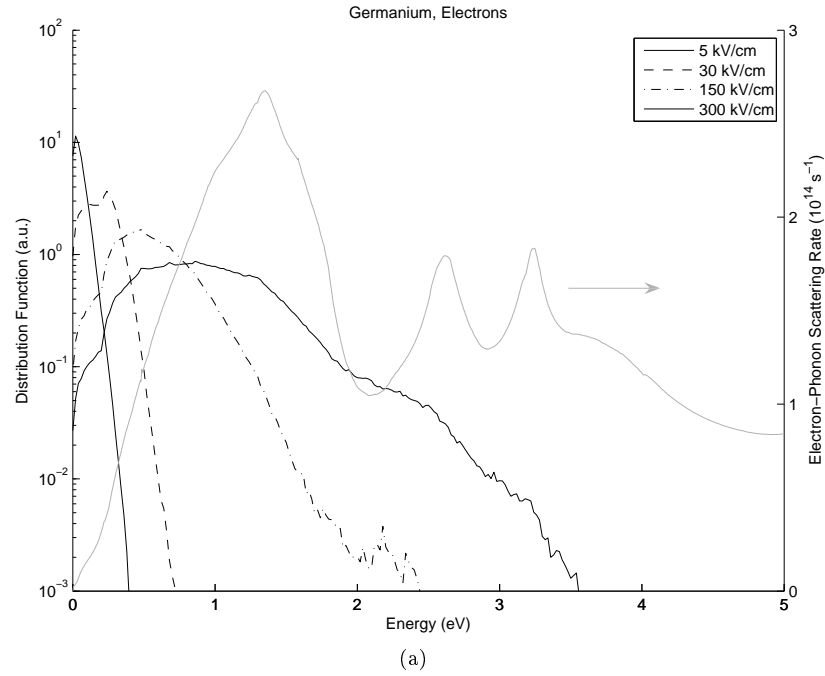


FIG. 3.22: Fonctions de distribution en énergie des électrons (Fig. 3.22a) et des trous (Fig. 3.22b) dans le germanium massif à 300 K, pour plusieurs champs électriques appliqués. Les probabilités totales d'interaction électron- et trou-phonon sont également tracées (lignes continues grises).

Chapitre 4

Modélisation des effets d'alliage pour la simulation du transport électronique dans les alliages ternaires SiGeC

4.1 Paramètre de maille du SiGeC

4.1.1 Loi de Dismukes

La structure cristalline du germanium est caractérisée par un paramètre de maille a_{Ge} légèrement supérieur à celui du silicium, comme on peut le voir dans le tableau 4.1. Par conséquent, le paramètre de maille de l'alliage $Si_{1-x}Ge_x$ sera une fonction $a(x)$ naturellement croissante. L'évolution du paramètre de maille de l'alliage SiGe a notamment été mesurée par Dismukes [83], lequel a pu dériver de ses mesures une loi empirique analytique :

$$a(x) = (1 - x)a_{Si} + xa_{Ge} - x(1 - x) \times 0,026674\text{Å} \quad (4.1)$$

Et par application numérique (en Å) :

$$a(x) = 5,431 + 0,200326x + 0,026674x^2 \quad (4.2)$$

La formule (4.2) induit un accroissement quasi-linéaire du paramètre de maille de l'alliage SiGe avec la fraction molaire relative x .

4.1.2 Loi de Vegard

Le paramètre de maille des alliages ternaires $Si_{1-x-y}Ge_xC_y$ est usuellement calculé en utilisant la loi de Vegard, qui établit une simple interpolation linéaire entre les paramètres de maille respectifs de Si, Ge et C [84, 85] :

$$a(x, y) = (1 - x - y)a_{Si} + xa_{Ge} + ya_C \quad (4.3)$$

Paramètre	Si	Ge	C	Unité
E_g	1,12	0,66	5,47	eV
a	5,431	5,658	3,567	Å
R_{ws}	2,122	2,211	1,394	Å
ρ	2,329	5,323	3,515	g/cm ³
ϵ	11,9	16,2	5,7	-
c_{11}	165,77	128,53	1076,4	GPa
c_{12}	63,93	48,26	125,2	GPa

TAB. 4.1: Propriétés de Si, Ge et C à température ambiante. Les paramètres tabulés sont, dans l'ordre, les bande interdite, paramètre de maille, rayon de Wigner-Seitz, densité, constante diélectrique relative et constantes élastiques.

Il apparait immédiatement que le formalisme purement linéaire de Vegard ne peut pas se réduire à celui de Dismukes pour le cas limite où $y = 0$. La loi de Vegard n'est donc pas satisfaisante. On choisit d'établir un formalisme pour le paramètre de maille du SiGeC qui soit cohérent avec l'équation de Dismukes. On propose d'écrire le paramètre de maille du SiGeC comme une interpolation linéaire entre le paramètre de maille du SiGe et celui du carbone :

$$a(x, y) = (1 - y)a_{SiGe} + ya_C \quad (4.4)$$

$$a(x, y) = (1 - y)a(x') + ya_C \quad (4.5)$$

$$x' = \frac{x}{1 - y} \quad (4.6)$$

Dans l'équation (4.5), la fonction $a(x')$ est l'équation de Dismukes appliquée à la fraction molaire x' définie dans (4.6). On peut vérifier que notre formalisme se réduit à celui de Dismukes pour $y = 0$, et intègre la dépendance linéaire en y suggérée par la loi de Vegard. La loi d'évolution du paramètre de maille dans les alliages SiGeC exprimée selon l'équation (4.5) est tracée dans la figure 4.1. Les paramètres de maille qui caractérisent la cristallisation du Ge et du C sous forme de structure diamant sont respectivement supérieur et très inférieur à celui du Si. En conséquence la variation du paramètre de maille du SiGeC va être régie par deux tendances inverses :

- l'augmentation de la fraction molaire x en Ge va induire un accroissement du paramètre de maille de l'alliage;
- à l'inverse, l'augmentation de la fraction molaire y en C va fortement réduire la paramètre de maille de l'alliage.

Pour certaines compositions particulières (x_0, y_0) , ces deux tendances opposées se neutralisent mutuellement. Le paramètre de maille de l'alliage ternaire $Si_{1-x_0-y_0}Ge_{x_0}C_{y_0}$ est alors exactement égal à celui du silicium massif : on dit que l'alliage est *compensé*¹ [86, 87, 88].

¹ *strain-compensated* en Anglais

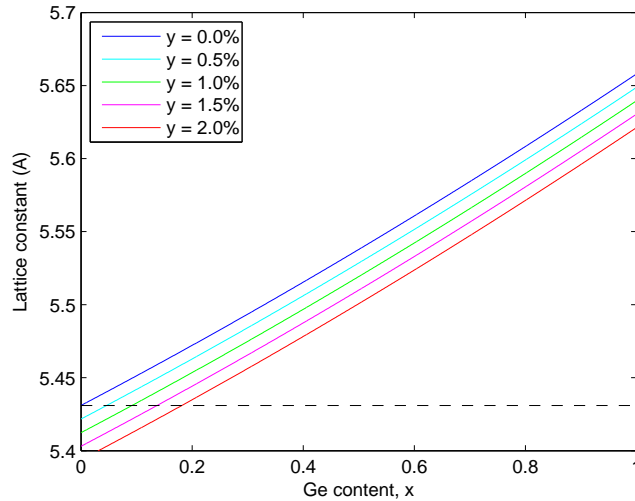


FIG. 4.1: Paramètre de maille du SiGeC en fonction de la concentration relative en Ge, pour plusieurs concentrations en C. La courbe bleue correspond à la loi de Dismukes pour SiGe. La courbe en pointillés indique la valeur du paramètre de maille de Si. Les intersections des courbes avec la ligne pointillée correspondent aux conditions (x, y) de compensation.

4.1.3 État de contrainte du SiGeC sur substrat Si

Lorsqu'une couche de SiGeC est déposée par épitaxie sur un substrat épais de Si², les concentrations relatives en Ge et C dans l'alliage vont déterminer la nature de la contrainte mécanique qui affecte la couche épitaxiée. On distingue 3 configurations mécaniques possibles pour la couche pseudomorphique :

- Si la concentration en Ge est dominante sur la concentration en C, le paramètre de maille de l'alliage relaxé est *supérieur* au paramètre de maille du silicium. La couche de SiGeC va se déformer élastiquement pour adapter son paramètre de maille à celui du substrat dans le plan de l'interface. La croissance pseudomorphique de la couche de SiGeC sur substrat Si induit l'apparition dans la couche épitaxiée d'une *contrainte biaxiale en compression* (cf. Fig. 4.2a).
- Si la concentration en C est dominante sur la concentration en Ge, le paramètre de maille de l'alliage relaxé est *inférieur* au paramètre de maille du silicium. L'adaptation du différentiel de paramètre de maille par la couche épitaxiée résulte dans un état de *contrainte biaxiale en tension* (cf. Fig. 4.2b).
- Si les concentrations de Ge et C sont introduites dans des proportions vérifiant la condition particulière de la compensation, le paramètre de maille de l'alliage relaxé est *identique* à celui du substrat. La croissance pseudomorphique par épitaxie n'introduit aucune contrainte dans la couche de SiGeC : on dit que la couche épitaxiée est *relaxée* (cf. Fig. 4.2c).

²On ne s'intéresse ici qu'au seul cas d'une croissance *pseudomorphique*, dans laquelle il y a adaptation entre le paramètre de maille de la couche et celui du substrat.

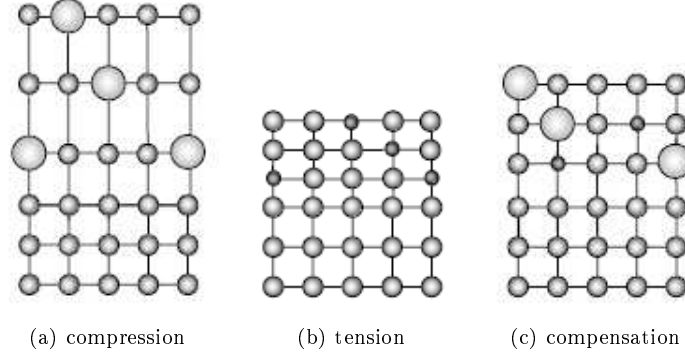


FIG. 4.2: Croissance pseudomorphique d'une couche de SiGeC adaptée au substrat Si (d'après [85]). En fonction de la composition de l'alliage, 3 configuration mécaniques sont possibles.

Dans le cas d'une croissance adaptée, l'état de déformation du SiGeC est anisotrope. Dans le plan du substrat, le paramètre de maille longitudinal a_{\parallel} est égal à celui du Si, tandis que dans la direction transverse le paramètre de maille a_{\perp} est libre et se déforme élastiquement. Le tenseur de déformation associé est dit biaxial, et il s'écrit :

$$[\epsilon(x, y)] = \begin{bmatrix} \epsilon_{\parallel} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{\parallel} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{\perp} \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

Les termes diagonaux du tenseur (4.7) vérifient :

$$\begin{aligned} \epsilon_{\parallel} &= \frac{a_{Si} - a(x, y)}{a(x, y)} \\ \epsilon_{\perp} &= -2 \frac{c_{12}(x, y)}{c_{11}(x, y)} \times \epsilon_{\parallel} \end{aligned}$$

où les constantes élastiques c_{11} et c_{12} de l'alliage sont interpolées linéairement entre les valeurs respectives de Si, Ge et C, selon [88] :

$$c_{11}(x, y) = (1 - x - y) \cdot c_{11}^{Si} + x \cdot c_{11}^{Ge} + y \cdot c_{11}^C$$

Une couche adaptée en compression est caractérisée par un tenseur vérifiant :

$$a(x, y) > a_{Si} \quad \Rightarrow \quad \epsilon_{\parallel} < 0 \quad \text{et} \quad \epsilon_{\perp} > 0$$

Inversement, le tenseur de contrainte caractéristique d'une couche en tension vérifie :

$$a(x, y) < a_{Si} \quad \Rightarrow \quad \epsilon_{\parallel} > 0 \quad \text{et} \quad \epsilon_{\perp} < 0$$

Dans le cas particulier de la compensation de la couche de SiGeC, le tenseur de déformation est nul.

Il est fondamental de considérer l'état de contrainte de l'alliage SiGeC épitaxié sur substrat de silicium. En effet, toute contrainte mécanique affectant un matériau semiconducteur altère drastiquement sa structure de bande, et modifie de façon concomitante ses propriétés électroniques.

4.2 Structure de bande du SiGeC

4.2.1 Structure de bande du SiGe

La relation de dispersion dans les alliages aléatoires binaires $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ est calculée par méthode *Tight-Binding* [54, 55]. L'évolution de la structure de bande du SiGe non-contraint avec la fraction molaire en Ge est illustrée dans la figure 4.3a, qui détaille la position relative en énergie des minima locaux de la dispersion. Concernant la structure des bandes de conduction, on observe une transition entre une dispersion de type Si, et une dispersion de type Ge :

- Pour $x \leq 83\%$, les minima des bandes de conduction sont constitués par 6 vallées Δ , de façon analogue au silicium. A l'équilibre thermodynamique, les électrons de conduction occupent très majoritairement ces vallées Δ .
- Pour $x > 83\%$, les vallées L deviennent moins énergétiques que les vallées Δ , et deviennent de fait la région de l'espace réciproque contribuant majoritairement au transport des électrons libres. Cependant, les vallées satellites Δ et Γ sont seulement éloignées de quelques centaines de meV, et restent accessibles aux électrons de conduction : toutes les vallées contribuent significativement au transport des électrons, même dans des conditions proches de l'équilibre thermodynamique.

La structure de la dispersion des trous dans le SiGe reste qualitativement similaire sur toute la gamme des x . Les bandes de trous lourds et légers sont dégénérées au point Γ , et le décalage de spin-orbite augmente régulièrement entre les valeurs du Si et du Ge.

L'effet de la contrainte biaxiale compressive, induite par la croissance pseudomorphique du SiGe sur un substrat Si massif, sur la structure de bande du SiGe est illustré par la figure 4.3b. Au niveau des bandes de conduction, la contrainte en compression provoque une levée de dégénérescence des vallées Δ : les 2 vallées Δ_{001} sont décalées vers les énergies hautes, et les 4 vallées Δ_{100} et Δ_{010} sont abaissées en énergie et deviennent concomitamment les plus bas minima de la dispersion dans toute la gamme des x . Il est particulièrement remarquable que le transport des électrons dans le germanium s'effectue dans les vallées Δ lorsqu'il est contraint biaxialement sur un substrat de silicium. La perturbation induite par la contrainte biaxiale va également produire une levée de dégénérescence au niveau des bandes de valence : les bandes de trous lourds et de trous légers se décalent en centre de zone, et la bande de spin-orbite s'écarte davantage du minimum de la dispersion.

4.2.2 Effets du carbone sur la structure de bande

Dans le cadre de la présente étude, la modélisation de l'effet du carbone en site substitutionnel sur la structure de bande des alliages ternaires aléatoires $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ va être traitée de façon phénoménologique. Il est nécessaire de rappeler que, la solubilité du carbone dans le SiGe étant très réduite, il est difficile d'incorporer des quantités importantes d'atomes de carbone substitutionnels dans une matrice de SiGe. Les plus fortes fractions molaires ont été obtenues par des techniques d'épitaxie en phase vapeur³, et atteignent 2% dans des couches de SiGeC [89]. L'influence du carbone, présent en proportion très

³ *Chemical Vapor Deposition (CVD)* en Anglais

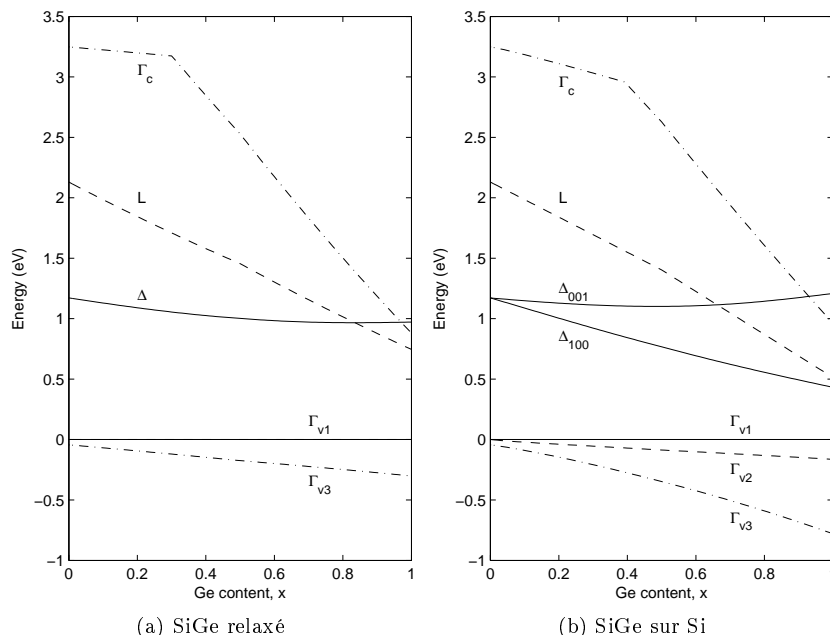


FIG. 4.3: Energies des points de haute symétrie dans la structure de bande du SiGe en fonction de la fraction molaire en Ge. Les 2 configurations du SiGe relaxé (Fig. 4.3a) et contraint en compression sur substrat Si (Fig. 4.3b) sont considérées. Le référentiel des énergies est pris au plus haut point des bandes de valence.

minoritaire dans le SiGeC cristallin, sur la structure de bande de l'alliage ternaire, est relativement peu connue.

Parmi les études expérimentales ayant investigué les propriétés électriques des alliages SiGeC, on peut notamment citer les travaux de Chang [90]. Il a utilisé des techniques de magnéto-transport pour mesurer les masses effectives des trous dans des couches contraintes de SiGeC intégrant jusqu'à 0,6% de carbone substitutionnel. Les résultats de l'étude [90] sont exposés dans la figure 4.4 : les masses effectives des trous mesurées ne dépendent pas significativement de la fraction molaire y en carbone. Ces résultats semblent indiquer la faible influence du C sur la structure des bandes de valence du $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$. L'auteur de ces résultats expérimentaux en conclut que la structure des bandes de valence du $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ est essentiellement similaire à celle du $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ⁴.

L'étude théorique de la structure de bande du $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ a été notamment entreprise dans les travaux de Orner et Kolodzey [91]. Ces auteurs ont appliqué des techniques de calcul LCAO⁵ pour modéliser la structure de bande d'alliages $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ comportant entre 0 et 100% de carbone substitutionnel. L'effet de l'introduction de 10% de C dans un cristal de SiGe est illustré

⁴"It shows for the first time that the valence band structure of the compressively strained $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ is similar to that of $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$." Ref. [90], p. 86

⁵Linear Combination of Atomic Orbitals en Anglais

4.2. STRUCTURE DE BANDE DU SIGEC

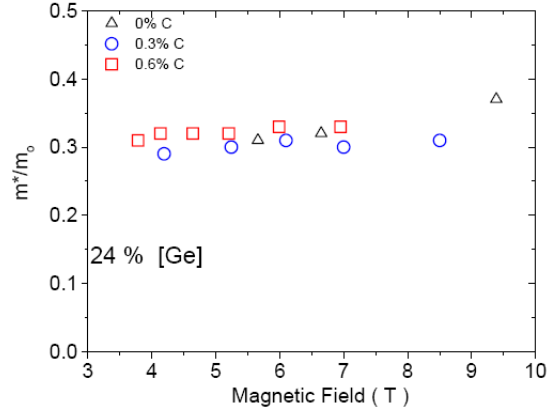


FIG. 4.4: Masses effectives des trous dans des couches de SiGeC contraintes sur Si, mesurées pour plusieurs champs magnétiques appliqués (d'après [90]).

par les figures 4.5a et 4.5b. Même pour une fraction molaire théorique aussi élevée que 10%, le carbone n'altère pas significativement la structure de bande du SiGeC. Les résultats de cette étude théorique semblent indiquer que la structure de bande d'alliages ternaires $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ contenant moins de 2% de carbone doit être très proche de celle des alliages binaires $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, comme les auteurs l'ont suggéré⁶.

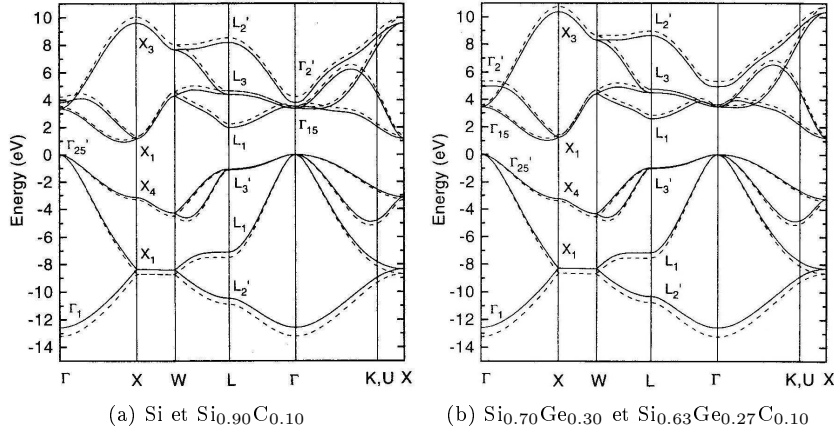


FIG. 4.5: Structures de bande de Si, SiGe et SiGeC calculées par méthode LCAO (d'après [91]). Les dispersions des alliages sans et avec carbone correspondent aux lignes continues et pointillées, respectivement.

La considération de ces éléments expérimentaux et théoriques nous amène à adopter une approche phénoménologique dans la modélisation de la relation de

⁶"In general, alloys with one dominant element had a band structure characteristic of that element." Ref. [91], p. 6779

dispersion des alliages ternaires SiGeC. La structure de bande du $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ avec $y \leq 2\%$ est assimilée à celle du $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$. La fraction molaire du C est seulement prise en compte dans la spécification du tenseur de contrainte biaxial, lorsque l'alliage est épitaxié sur un substrat de Si :

$$E_\nu(x, y, \vec{k}) = E_\nu[x, \epsilon(x, y), \vec{k}] \quad (4.8)$$

où le tenseur $\epsilon(x, y)$ a été précédemment explicité dans (4.7). L'influence du carbone sur la structure de bande via le tenseur $\epsilon(x, y)$ va permettre la modélisation des effets de compensation de contrainte.

4.3 Modélisation de l'interaction porteur-phonon dans SiGeC

Dans un alliage aléatoire ternaire, la multiplicité des liaisons inter-atomiques possibles induit la présence de nombreux modes de vibration différents pour les phonons. Si on considère un alliage SiGeC, les modes Si-Si caractéristiques des liaisons entre atomes de silicium cohabitent avec les modes Ge-Ge, C-C et les modes hybrides Si-Ge, Si-C et Ge-C. Naturellement la prépondérance relative de ces modes dépend des concentrations relatives x et y .

Modéliser la multiplicité des modes associés aux phonons dans un tel alliage implique le choix d'hypothèses simplificatrices. Le programme de simulation développé dans le cadre de cette thèse a recours aux simplifications suivantes :

1. La dispersion des modes Si-Si est celle du silicium massif (Fig. 3.6a) ;
2. La dispersion des modes Ge-Ge est celle du germanium massif (Fig. 3.6b) ;
3. Les modes C-C, très minoritaires du fait de l'improbabilité de la formation des liaisons C-C, sont négligés ;
4. Les modes mixtes Si-Ge, Si-C et Ge-C sont négligés.

En s'appuyant sur ces approximations, il s'agit ensuite de construire un modèle d'interaction porteur-phonon dans SiGeC, basé sur les modèles de phonons respectivement définis et calibrés dans Si et Ge. Un schéma phénoménologique d'interpolation a notamment été proposé par Bufler [32] pour calculer la probabilité d'interaction porteur-phonon dans SiGe. Cette probabilité est simplement obtenue par interpolation linéaire entre les probabilités respectivement associées aux phonons Si-Si et Ge-Ge. Ainsi, pour chaque mode de vibration η (LA, TA, LO, TO), la probabilité associée est, dans un alliage $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ contenant une fraction x de Ge :

$$P_{\eta,\nu}(x, y, k) = (1 - x) \cdot P_{\eta,\nu}^{\text{Si}}(k) + x \cdot P_{\eta,\nu}^{\text{Ge}}(k) \quad (4.9)$$

Dans l'expression (4.9), le terme $P_{\eta,\nu}^{\text{Si}}$ désigne la probabilité d'interagir avec le mode η d'un phonon Si-Si. La multiplicité des modes de phonons modélisés (4 modes Si-Si et 4 modes Ge-Ge, soit 8 modes dans les alliages) fournit un spectre probabiliste suffisant pour décrire la physique de l'interaction porteur-phonon dans les alliages aléatoires SiGeC.

4.4 Modélisation de l'ionisation par choc dans SiGeC

4.4.1 Ionisation des électrons dans SiGeC

L'évolution globale de la structure de la bande de conduction en fonction de x a été exposée précédemment (cf. § 4.2.1) : la bande de conduction est de type Si pour les concentrations x inférieures à 83% ; elle devient de type Ge pour les concentrations x supérieures⁷. Cette discontinuité intrinsèque nous amène à considérer deux domaines pour la définition du modèle d'ionisation par choc des électrons dans les alliages $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$:

- pour $x \leq 83\%$, les modèles utilisés pour la probabilité d'interaction et les distributions post-diffusion sont ceux du silicium ;
- pour $x > 83\%$, les modèles utilisés sont ceux du germanium.

Aucune information n'a été trouvée concernant l'ionisation par choc des porteurs de charge dans le carbone cristallisé en structure diamant. Par conséquent, la fraction molaire y n'est pas prise en compte dans nos modèles décrivant l'ionisation par choc dans SiGeC.

4.4.2 Ionisation des trous dans SiGeC

En ce qui concerne la bande de valence, la structure de la dispersion est qualitativement similaire pour Si et Ge. Pour cette raison, on choisit de construire le modèle d'ionisation par choc des trous dans SiGe par interpolation entre Si et Ge. Ainsi, la probabilité d'ionisation par choc $P_{ii}(x, E)$ des trous dans SiGe est modélisée par une formule de Keldysh (3.13) dont les paramètres résultent d'une interpolation linéaire entre les paramètres respectifs de Si et Ge. La figure 4.6 illustre les taux d'interaction résultant de cette interpolation, pour plusieurs valeurs de x . La concentration relative en carbone est ici encore négligée.

4.5 La diffusion sur potentiel d'alliage

Dans les sections précédentes, les modèles décrivant l'interaction porteur-phonon et l'ionisation par choc, initialement définis dans les matériaux purs, ont été adaptés et leur formalisme a été étendu au cas des alliages aléatoires. La modélisation du transport des charges libres dans ces alliages nécessite dès lors la prise en compte d'un mécanisme d'interaction supplémentaire, qui traduit l'action perturbatrice des discontinuités du potentiel cristallin.

4.5.1 Origine physique de la diffusion sur potentiel d'alliage

Dans un alliage binaire aléatoire de type A_{1-x}B_x , le potentiel cristallin $V(r)$ n'est pas périodique. A chaque site atomique, la probabilité de présence d'un atome de type A (resp. B) est égale à $(1-x)$ (resp. x). Le potentiel cristallin fluctue donc de façon aléatoire dans l'espace entre le potentiel atomique V_A au voisinage des atomes de type A, et le potentiel V_B au voisinage des atomes de type B, comme le montre la figure 4.7. Ces fluctuations aléatoires de potentiel

⁷tout au moins dans le cas d'un alliage SiGe relaxé

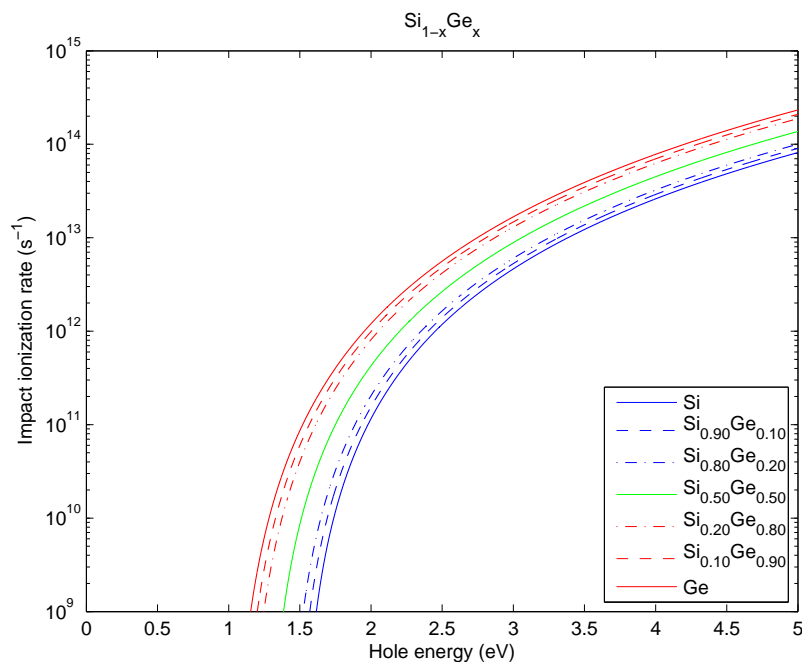


FIG. 4.6: Interpolation du taux d'ionisation par choc des trous dans l'alliage SiGe.

induisent donc localement des discontinuités dans le potentiel cristallin V , et seront à l'origine d'un phénomène de diffusion élastique des porteurs de charge libres : on parle de *diffusion sur potentiel d'alliage*⁸. Il est important de noter que ce phénomène de diffusion est de nature intrinsèquement quantique, et n'est pas lié à la présence éventuelle de défauts dans le réseau cristallin.

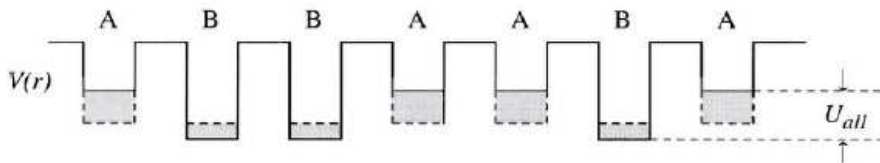


FIG. 4.7: Représentation schématique du potentiel atomique (ligne continue) et du potentiel virtuel moyen (ligne pointillée) dans un alliage binaire aléatoire $A_{1-x}B_x$ (d'après [56]).

Dans un alliage binaire $A_{1-x}B_x$, l'importance de la diffusion sur potentiel d'alliage, c'est-à-dire son influence effective sur le transport des porteurs libres, dépendra essentiellement de 2 paramètres :

⁸ *alloy scattering* en Anglais

1. la fraction molaire relative x , qui caractérise le degré de désordre de l'alliage binaire $A_{1-x}B_x$. Le désordre est maximal pour $x = 1 - x = 0.5$, il est nul pour $x = 0$ ou $x = 1$;
2. l'amplitude de la marche de potentiel U caractérisant la discontinuité du potentiel cristallin entre 2 atomes A et B⁹. Cette discontinuité est la source du phénomène de diffusion des porteurs : c'est le *potentiel d'alliage* de l'alliage binaire $A_{1-x}B_x$, noté U_{A-B} .

Dans le cas d'un alliage aléatoire ternaire de type $A_{1-x-y}B_xC_y$, la description du potentiel cristallin nécessite l'introduction d'un second potentiel d'alliage U_{A-C} quantifiant le différentiel de potentiel entre les atomes A et C. La marche de potentiel U_{B-C} est entièrement déterminée par la donnée des 2 potentiels U_{A-B} et U_{A-C} , suivant :

$$U_{B-C} = U_{A-C} - U_{A-B} \quad (4.10)$$

On peut dès lors construire un modèle de diffusion sur potentiel d'alliage dans les ternaires, basé sur 2 potentiels d'alliage U_{A-B} et U_{A-C} .

4.5.2 Modélisation de la diffusion sur potentiel d'alliage

Le formalisme utilisé dans notre algorithme pour calculer la probabilité d'interaction associée à la diffusion sur potentiel d'alliage, est celui introduit par Bufler [32]. Son modèle est adapté aux structures de bande numériques, et applicable à la diffusion des électrons comme à celle des trous. Dans l'alliage binaire $Si_{1-x}Ge_x$, le taux d'interaction est exprimé comme une fonction de l'énergie cinétique E du porteur, selon :

$$P_{alloy}(x, E) = \frac{2\pi}{\hbar} \Omega_c \cdot \mathcal{D}(E) \cdot x(1-x) \cdot U_{Si-Ge}^2 \quad (4.11)$$

où $\Omega_c = \frac{a(x)^3}{4}$ est le volume de la maille élémentaire, $\mathcal{D}(E)$ est la densité d'états par spin intégrée numériquement, et U_{Si-Ge} est le potentiel d'alliage effectif. Le paramètre U_{Si-Ge} est introduit phénoménologiquement, c'est-à-dire comme un paramètre d'ajustement dont la calibration doit permettre au modèle de reproduire certains résultats expérimentaux (cf. § 4.6).

L'extension du formalisme (4.11) spécifique aux alliages binaires $Si_{1-x}Ge_x$, au cas plus général des alliages ternaires $Si_{1-x-y}Ge_xC_y$ est établie via l'introduction du second potentiel d'alliage effectif U_{Si-C} :

$$P_{alloy}(x, y, E) = \frac{2\pi}{\hbar} \Omega_c \cdot \mathcal{D}(E) \cdot \left[x(1-x) \cdot U_{Si-Ge}^2 + y(1-y) \cdot U_{Si-C}^2 - 2xy \cdot U_{Si-Ge} \cdot U_{Si-C} \right] \quad (4.12)$$

Les détails de la dérivation théorique du formalisme étendu (4.12) sont explicités en annexe A. Dans les cas particuliers où $x = 0$, $y = 0$ ou $x + y = 1$, qui définissent les 3 compositions particulières où l'alliage ternaire est réduit à un alliage binaire, on peut vérifier que la formule étendue (4.12) rejoint l'équation (4.11) spécifique aux binaires. Dans les 3 cas limites suivants :

$$x = 0 \quad \text{et} \quad y = 0$$

⁹Cette marche de potentiel est notée U_{all} dans la figure 4.7

ou

$$x = 1 \quad \text{et} \quad y = 0$$

ou

$$x = 0 \quad \text{et} \quad y = 1$$

pour lesquels l'alliage ternaire $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ est réduit à un matériau pur Si, Ge ou C, on vérifie également que la probabilité de diffusion sur potentiel d'alliage P_{alloy} s'annule.

Le second aspect de la modélisation de la diffusion sur potentiel d'alliage concerne le calcul de l'état électronique post-diffusion. Etant donnée la nature strictement élastique de cette interaction, le vecteur d'onde diffusé k' est nécessairement situé sur la surface iso-énergie d'équation $\{E = E'\}$. L'action du potentiel d'alliage sur le vecteur d'onde de la particule est donc modélisée par une randomisation iso-énergie du vecteur d'onde incident (cf. § 2.3.6).

4.6 Simulation du transport dans SiGe, SiC et SiGeC

Afin de pouvoir disposer d'un outil de simulation prédictif, il est impératif de calibrer le modèle (4.12) via ses 2 paramètres-clefs $U_{\text{Si-Ge}}$ et $U_{\text{Si-C}}$. Cette calibration doit reposer sur un ensemble de mesures de référence. La validation du modèle théorique formulé est entièrement conditionnée par l'accord trouvé entre ces résultats expérimentaux et ceux issus du simulateur calibré. Les mesures de référence choisies pour calibrer notre modèle de diffusion doivent mettre en évidence les influences respectives des fractions molaires x et y en germanium et carbone, sur les propriétés de transport du SiGeC. La mesure de la mobilité à faible champ dans les alliages binaires constitue à cet égard une information de référence.

4.6.1 Mobilité à faible champ dans SiGe

La dépendance en x de la mobilité des porteurs de charge dans les alliages $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ est une donnée expérimentale fondamentale, qui permet de mettre en évidence les effets liés à la diffusion sur le potentiel d'alliage. Pour calibrer le paramètre $U_{\text{Si-Ge}}$ spécifique à la diffusion des électrons, on compare nos résultats de simulation à champ faible avec les résultats expérimentaux issus des références [92, 93, 94]. Ces travaux ont fourni des mobilités électroniques mesurées sur toute la gamme des x , dans des échantillons essentiellement intrinsèques (i.e. très faiblement dopés), et relaxés. La technique de calibration du paramètre $U_{\text{Si-Ge}}$ s'appuie sur les tendances suivantes :

- Pour $U_{\text{Si-Ge}} = 0$ eV, la probabilité d'interaction P_{alloy} est nulle, et le modèle numérique de diffusion sur potentiel d'alliage est désactivé. Dans cette configuration, la mobilité calculée surestime drastiquement la mobilité mesurée, prouvant qu'il est nécessaire de prendre en compte le modèle de diffusion sur potentiel d'alliage pour réconcilier la théorie et la mesure [95].
- Lorsqu'on augmente la valeur du potentiel effectif $U_{\text{Si-Ge}}$, la probabilité associée augmente et la diffusion sur potentiel d'alliage devient statistiquement prépondérante sur les interactions porteur-phonon. L'amplitude

Référence	U_{Si-Ge}		U_{Si-C}	
	e	h	e	h
Notre modèle	0,4	0,5	2,8	2,2
[32]	–	0,7	–	–
[95]	0,7	$0,9 \pm 0,1$	–	–
[97, 98]	0,54	0,81	–	–
[34]	–	–	1,75	–
[35]	0,8	–	$1,6 \pm 0,4$	–

TAB. 4.2: Potentiels effectifs utilisés dans le modèle de diffusion sur potentiel d’alliage dans SiGe (Ref. [32, 95, 97, 98]), SiC (Ref. [34]) et SiGeC (Ref. [35], notre modèle). Les potentiels U sont exprimés en eV.

de la probabilité P_{alloy} est maximale pour $x = 50\%$, ce qui résulte dans une mobilité minimale obtenue dans la gamme des alliages intermédiaires. L’accord de notre modèle avec les mesures est exposé dans la figure 4.8a. L’écart aux valeurs expérimentales est minimal pour un potentiel d’alliage effectif calibré à $U_{Si-Ge} = 0,4$ eV.

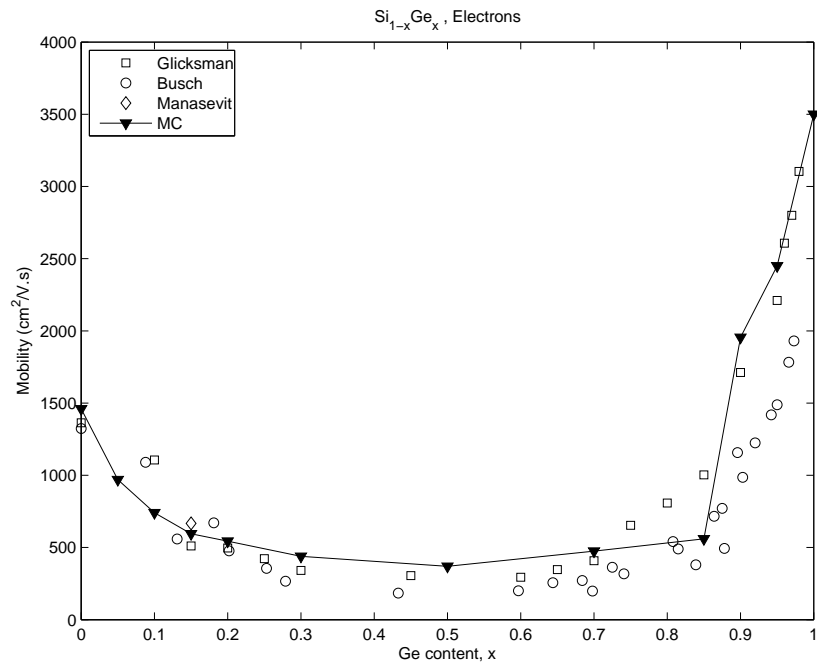
Dans le cas du transport des trous dans SiGe, on sélectionne en tant que sources expérimentales les références [93, 96]. Afin de permettre une détermination fine du potentiel d’alliage effectif affectant le transport des trous, Gaworzewski *et al.* ont focalisé leur étude sur des échantillons relaxés à faible teneur en Ge ($x \leq 13\%$), faiblement dopés en Bore. En activant nos modèles de diffusion sur impuretés ionisées¹⁰ aux concentrations correspondantes, on peut calibrer précisément notre potentiel U_{Si-Ge} . La calibration du potentiel d’alliage relatif aux trous est optimale pour $U_{Si-Ge} = 0,5$ eV comme le montre la figure 4.8b.

4.6.2 Mobilité à faible champ dans SiC

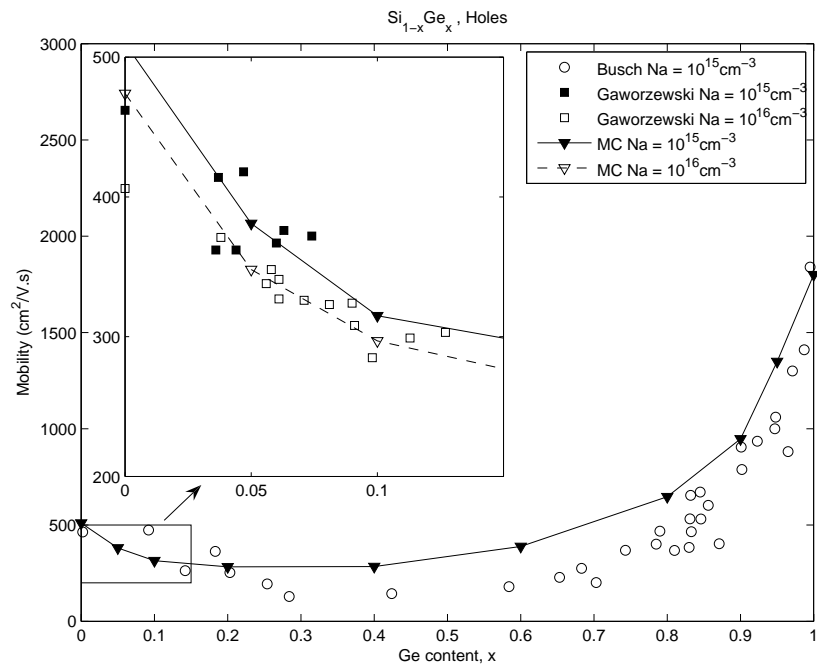
La détermination du second potentiel effectif d’alliage U_{Si-C} obéit à une méthodologie identique, appliquée dans le cadre des alliages binaires $Si_{1-y}C_y$. Le choix des références expérimentales pertinentes est restreint aux échantillons respectant les critères suivants :

1. Les couches de SiC doivent être monocristallines et pseudomorphiques ;
2. Le carbone doit être majoritairement présent en site substitutionnel, i.e. la concentration en C substitutionnel doit approcher la concentration totale en C. Ce critère permet de négliger l’influence des atomes de C interstitiels sur les résultats expérimentaux. Le carbone en site interstitiel constitue un défaut dans la périodicité du cristal, par conséquent son effet sur le transport des porteurs libres ne peut être modélisé par la diffusion sur potentiel d’alliage.
3. Les autres espèces présentes (dopants N, dopants P, Ge) doivent être introduites en concentrations globalement constantes dans la série des échantillons, ceci afin de pouvoir discriminer les effets dus à la seule variation de la concentration en C.

¹⁰cf. § 5.2



(a)



(b)

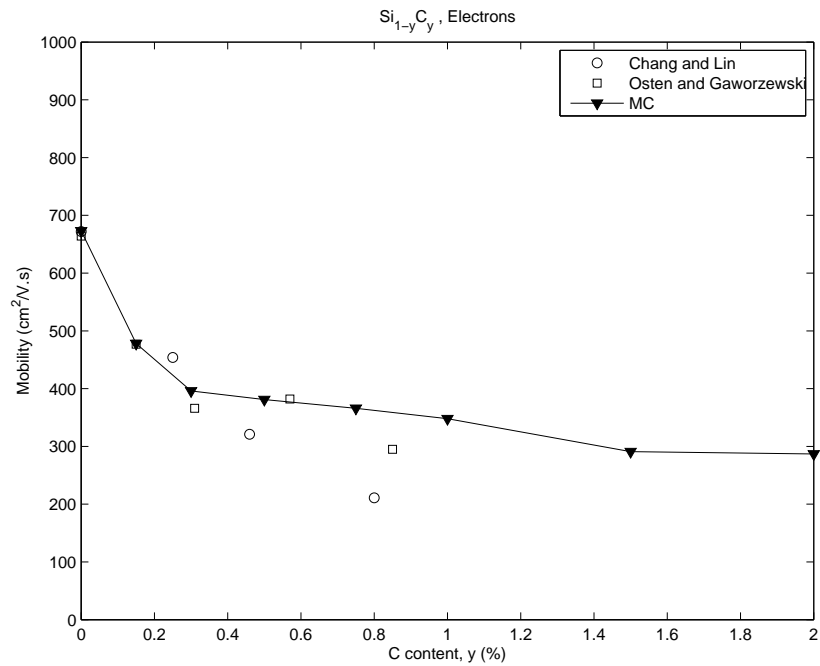
FIG. 4.8: Comparaison entre simulation et mesure pour la mobilité à faible champ des électrons (Fig. 4.8a) et des trous (Fig. 4.8b) dans le SiGe relaxé à température ambiante.

Les études expérimentales de référence sont des mesures de mobilité longitudinale dans des couches de Si(Ge)C contraintes biaxialement en tension sur substrat massif de silicium. Reproduire ces résultats par simulation impose de prendre en compte la contrainte biaxiale dans nos modèles de transport :

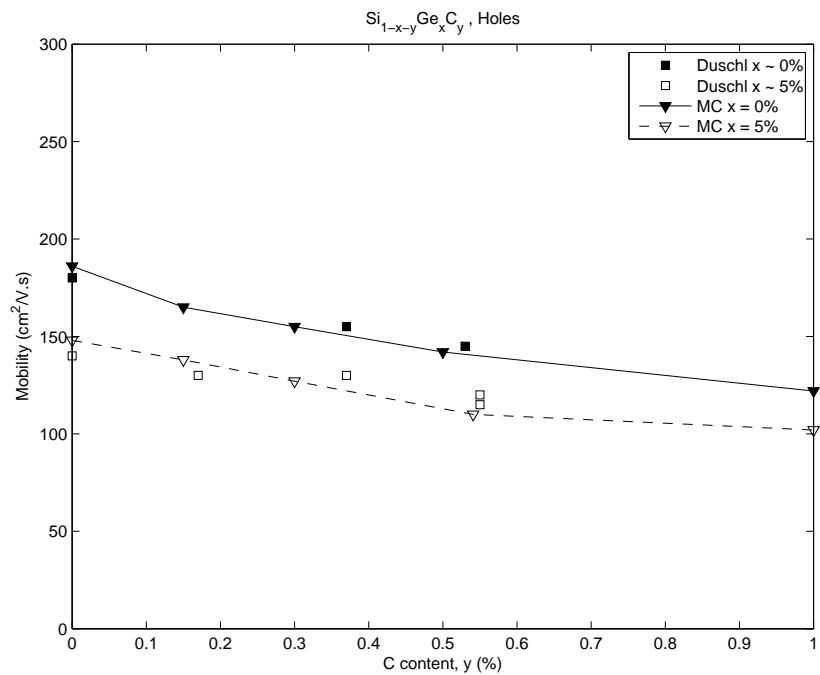
- Les structures de bandes sont calculées en prenant en compte le tenseur de déformation biaxial $\epsilon(x, y)$ défini dans (4.7) ;
- Les probabilités d’interaction électron- et trou-phonon sont intégrées sur les structures de bandes contraintes ;
- Les probabilités de diffusion sur potentiel d’alliage (4.12) intègrent la densité d’états contrainte.

Les résultats de simulation pour les mobilités longitudinales des électrons et des trous sont comparés aux mesures des références [34, 99, 100] dans les figures 4.9a et 4.9b. L’accord entre simulation et mesure est obtenu pour une paramétrisation de $U_{Si-C} = 2,8$ eV pour le transport des électrons, $U_{Si-C} = 2,2$ eV pour celui des trous.

Le tableau 4.2 fait la synthèse des potentiels d’alliage effectifs employés dans notre modèle de diffusion sur potentiel d’alliage dans SiGeC. Les valeurs issues de notre calibration sont comparées avec les paramètres reportés dans la littérature. Il est remarquable que le potentiel d’alliage U_{Si-C} est notablement supérieur au potentiel d’alliage U_{Si-Ge} , pour les deux types de porteurs.



(a) Mobilité longitudinale des électrons dans SiC contraint sur Si



(b) Mobilité longitudinale des trous dans SiC et SiGe_{0.05}C contraint sur Si

FIG. 4.9: Comparaison entre simulation et mesure pour la mobilité longitudinale des électrons (Fig. 4.9a) et des trous (Fig. 4.9b) dans SiC et SiGeC contraint sur Si. Les mesures ayant été effectuées sur des couches dopées, les simulations Monte Carlo doivent inclure les modèles d'interaction sur dopants ionisés.

Chapitre 5

Modélisation des effets du dopage pour la simulation du transport électronique dans les alliages SiGeC dopés

5.1 La diffusion sur un potentiel coulombien écranté

Lorsque le matériau semiconducteur est dopé par des atomes de type donneur ou accepteur, les porteurs de charge vont être influencés par la charge ionique des dopants. Cette interaction de type coulombienne entre un centre ionisé fixe et une charge mobile est remarquable par les propriétés suivantes :

- du fait de la masse bien plus importante de l'ion du réseau cristallin, l'interaction est toujours supposée purement élastique, c'est-à-dire ne donnant lieu à aucun échange d'énergie entre l'ion et le porteur de charge.
- en fonction de la nature du dopage (donneur ou accepteur) et du type du porteur de charge dont on simule le transport (électron ou trou), l'interaction coulombienne sera attractive ou répulsive. Si les modèles les plus répandus (e.g. modèles de type Brooks-Herring [4] ou Conwell-Weisskopf [101]) ne prennent pas en compte le *signe* de l'interaction, on verra plus loin que le modèle que nous proposons permet d'établir une distinction entre les configurations attractive et répulsive, cette distinction étant indispensable à la description du transport des porteurs minoritaires.
- du fait de la nature diélectrique du matériau semiconducteur, le potentiel coulombien ne peut être considéré comme nu¹, à l'instar du cas typique de l'interaction entre 2 charges dans le vide. Dans le cas d'un semiconducteur à température non-nulle, toute interaction coulombienne se verra influencée par la présence des porteurs de charge libres : on parle d'*écrantage* du potentiel. En pratique, le nuage de porteurs libres va modifier sa distribution spatiale pour compenser localement la charge de l'ion dopant. Cette redistribution va induire une réduction de la portée effective du potentiel électrostatique créé par l'ion dopant.

¹ *bare potential* en Anglais

La méthode du décalage de la phase² est une approche numérique permettant de calculer les probabilités de diffusion d'une particule sur un potentiel sphérique. Cette méthode a été largement appliquée aux interactions entre porteurs libres et centres dopants ionisés dans les semiconducteurs [102, 103, 104, 105, 106]. A la différence des modèles couramment employés, lesquels permettent généralement la formulation d'une formule analytique simple pour les probabilités d'interaction, les résultats des calculs par décalage de la phase doivent être tabulés. Cette contrainte supplémentaire permet cependant de s'affranchir de plusieurs approximations dont la validité s'avère souvent discutable.

5.1.1 Hypothèses initiales

La méthode du décalage de la phase s'appuie sur plusieurs hypothèses initiales. Il est fondamental de toujours garder ces hypothèses à l'esprit afin de ne pas appliquer les résultats obtenus en dehors de leur domaine de validité.

1. Le potentiel diffuseur est supposé *sphérique*, i.e. il ne doit dépendre que de la variable radiale r qui quantifie la distance séparant les 2 charges en interaction : $V(r, \theta, \phi) = V(r)$.
2. Le porteur de charge est traité comme une particule libre de masse effective m^* , i.e. la relation de dispersion de son énergie cinétique doit être modélisable par celle d'une bande sphérique, de type (3.2).
3. Les phénomènes de diffusion successifs affectant le transport de la particule libre sont supposés indépendants, i.e. la densité des centres diffuseurs est supposée suffisamment faible pour qu'à chaque instant au plus un potentiel coulombien influence sa dynamique.

5.1.2 Formalisme

L'équation de Schrödinger pour une particule libre de masse effective m^* et de vecteur d'onde k , plongée dans un potentiel sphérique $V(r)$, s'écrit [103] :

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(r) \right) u = Eu \quad (5.1)$$

où u est la fonction d'onde de la particule.

Dans le cas particulier d'un potentiel sphérique, u peut être développée sur la base des fonctions harmoniques sphériques $Y_l^m(\theta, \phi)$ selon :

$$u(r, \theta, \phi) = \sum_{l,m} B_l^m S_l(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

où la forme particulière de $S_l(r)$ dépend de la dépendance radiale de $V(r)$.

On pourra séparer la part radiale de u de sa part angulaire et ainsi se ramener à une équation de Schrödinger strictement radiale. En procédant aux changements de variable suivants :

$$\begin{aligned} x &= kr \\ R_l &= x S_l \\ U(x) &= \frac{V(r)}{E(k)} \end{aligned}$$

²*phase-shift method* en Anglais

l'équation (5.1) devient [47, 103] :

$$-\frac{\partial^2 R_l}{\partial x^2} + \left(\frac{l(l+1)}{x^2} + U(x) - 1 \right) R_l = 0 \quad (5.2)$$

qui est une équation différentielle linéaire du 2nd ordre.

Dans le cas particulier où le potentiel $V(r)$ est nul partout, on peut montrer la solution particulière correspondante, notée $R_l^{(0)}$, converge vers la forme asymptotique suivante :

$$\lim_{x \rightarrow \infty} R_l^{(0)}(x) = \sin \left(x - \frac{l\pi}{2} \right) \quad (5.3)$$

Si on introduit un potentiel sphérique $V(r)$ non-nul, le comportement asymptotique de l'amplitude radiale R_l va, en réponse au potentiel V , subir un déphasage δ_l :

$$\lim_{x \rightarrow \infty} R_l(x) = \sin \left(x - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right) \quad (5.4)$$

Ainsi la série des déphasages δ_l pour $l = 0, 1, \dots, n$ caractérise entièrement la réponse de la particule incidente au potentiel diffuseur V .

5.1.3 Extraction des déphasages

Au regard de la forme asymptotique (5.4), il est évident que la méthode la plus intuitive pour extraire le déphasage δ_l consisterait à identifier l'argument du sinus de la forme asymptotique de $R_l(x)$, par le calcul de $\sin^{-1}(R_l(x))$ en un point x suffisamment grand. Cependant en pratique il s'avère que cette approche est limitée par la lenteur de la convergence de $R_l(x)$ vers sa forme sinusoïdale (5.3). Une approche plus adaptée a été proposée par Boardman et Henry [102], consistant à comparer la convergence de la fonction d'onde perturbée $R_l(x)$ avec celle de la fonction d'onde non-perturbée $R_l^{(0)}(x)$. La différence entre la n ième racine de $R_l(x)$ et la n ième racine de $R_l^{(0)}(x)$ converge rapidement vers δ_l avec le nombre n de fois où $R_l(x)$ s'annule. Il s'agira donc de résoudre numériquement 2 équations différentielles de concert, à savoir l'équation (5.2) pour les 2 cas suivants :

1. $U(x) = V/E$ où V est le potentiel coulombien écranté représentant l'action des dopants ionisés (cas perturbé) ;
2. $U(x) = 0$ pour tout x (cas non-perturbé).

On doit donc se munir d'une technique numérique de type *multi-pas*³ adaptée à la résolution d'équations différentielles linéaires du 2nd ordre. Dans le formalisme usuel dédié aux équations différentielles, la fonction inconnue est notée y et est fonction de la variable x . Une équation différentielle quelconque du 2nd ordre s'écrit :

$$y''(x) = f(x, y)$$

Dans le cas d'une équation différentielle *linéaire*, la fonction f est de type :

$$y''(x) = f(x, y) = u(x) + v(x)y \quad (5.5)$$

³ *multistep* en Anglais

L'équation différentielle (5.2) correspond effectivement au formalisme (5.5), avec les équivalences suivantes :

$$\begin{aligned} y &= R_l \\ u &= 0 \\ v &= \frac{l(l+1)}{x^2} + U(x) - 1 \end{aligned}$$

En présence d'une telle équation, la méthode de Numerov nous permet de déterminer la fonction solution $R_l(x)$ itérativement, en utilisant un algorithme à double pas. La discrétisation de la variable x en une suite régulière x_n caractérisée par le pas h tel que

$$x_{n+1} - x_n = h$$

est liée à une suite $y_n = f(x_n)$. La formule de Numerov établit une relation entre la n ième valeur de la suite y_n et les 2 termes de rang immédiatement inférieur y_{n-1} et y_{n-2} , et permet donc un calcul itératif des y_n , i.e. de $y(x)$:

$$y_n = 2y_{n-1} - y_{n-2} + \frac{h^2}{12}(f_n + 10f_{n-1} + f_{n-2})$$

Dans notre cas particulier, la relation de Numerov se simplifie davantage [107] :

$$y_n = \frac{2y_{n-1} - y_{n-2} + \frac{h^2}{12}(10v_{n-1}y_{n-1} + v_{n-2}y_{n-2})}{1 - \frac{h^2v_n}{12}} \quad (5.6)$$

où les termes v_n contiennent l'information sur le potentiel diffuseur, et sont explicitement connus pour tout $x_n \neq 0$.

Comparée à un algorithme à simple pas classique de type Euler, notre méthode permet, à pas h équivalents, une évaluation plus précise des y_n successifs. En revanche, l'initialisation du calcul à double pas requiert 2 conditions initiales y_0 et y_1 , contre seulement 1 valeur dans le cas d'un simple pas. Il est évident que ces conditions initiales devront être correctement posées, en accord avec les spécificités physiques de notre problème, sous peine de voir une fonction y qui, bien que solution mathématique de l'équation (5.2), ne soit pas une solution physique. On doit en outre veiller à ce que le pas incrémentiel h soit suffisamment fin pour capturer la fonction solution y . En pratique, on choisit⁴ :

$$h = 10^{-4}$$

Tout potentiel coulombien tend vers l'infini lorsque la distance inter-charges r tend vers 0, et ce quelle que soit la force de l'écrantage. Il en résulte naturellement l'impossibilité pour la charge mobile de se trouver « à la place » du centre ionisé; on dit que l'amplitude de la fonction d'onde de la particule chargée s'annule en $r = 0$, ce qui nous fournit une condition initiale appropriée :

$$\lim_{x \rightarrow 0} R_l(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad y_0 = 0$$

La fonction $v(x)$ n'étant pas définie en $x = 0$, on débute le calcul en $x_0 = h$. La constante adoptée en tant que seconde condition initiale y_1 est de moindre

⁴les variables x comme h sont sans dimension

n	x_n	y_n
0	h	0
1	$2h$	$\frac{(2h)^{l+1}}{(2l+1)!!}$

TAB. 5.1: Initialisation du double pas.

importance. En effet, sa valeur influe seulement sur l'*amplitude* de la fonction solution y et pas sur sa *phase*. Puisque nous sommes seulement intéressés par les *racines* de la fonction solution y i.e. par les valeurs de x annulant $y(x)$, on vérifie que n'importe quelle valeur strictement positive de y_1 convient et que son choix n'a pas d'influence sur les déphasages extraits. Par soucis de rigueur, on utilise pour y_1 la valeur de la solution particulière non-perturbée $y_1^{(0)}$, dont on connaît l'expression [108].

Le tableau 5.1 résume les conditions initiales employées.

5.1.4 Calcul des probabilités de diffusion

On a vu plus haut que les déphasages δ_l caractérisent entièrement l'interaction de la particule incidente sur le potentiel diffuseur. De fait l'ensemble des sections de diffusion quantifiant la magnitude de l'interaction en termes probabilistes vont s'exprimer en fonction des δ_l .

Ainsi les section différentielle de collision $\sigma(\theta)$, section totale de collision σ_C et section de relaxation du moment σ_M s'écrivent respectivement [47, 103, 108] :

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin(\delta_l) P_l(\cos \theta) \right|^2 \quad (5.7)$$

$$\sigma_C = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\delta_l) \quad (5.8)$$

$$\sigma_M = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \sin^2(\delta_l - \delta_{l+1}) \quad (5.9)$$

5.1.5 Paramétrisation du problème

L'approche numérique explicitée plus haut est applicable à n'importe quel potentiel diffuseur V , sous réserve qu'il soit sphérique. Le potentiel pertinent dans le cadre de notre étude est un potentiel coulombien écrané, lequel s'exprime comme un potentiel électrostatique atténué :

$$V(r) = \mp \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 r} \exp\left(-\frac{r}{\lambda_s}\right) \quad (5.10)$$

où les signes supérieur et inférieur correspondent respectivement à un potentiel attractif et répulsif.

L'atténuation du potentiel via l'écranage est quantifiée par la *longueur d'écranage*⁵, notée λ_s dans (5.10). Cette grandeur homogène à une distance peut

⁵ *screening length* en Anglais

être interprétée comme la portée effective du potentiel coulombien ; au-delà de cette distance, l'influence de la charge ionique est annulée par le nuage des charges libres. La longueur d'écrantage dépend par conséquent fortement de la concentration des porteurs libres, i.e. de celle des impuretés ionisées.

Ainsi notre équation différentielle (5.2) initiale est conditionnée par 3 paramètres (dont 2 sont effectifs via le terme $U = V/E$) :

1. l'indice quantique de moment orbital l ,
2. le vecteur d'onde k ,
3. la longueur d'écrantage λ_s .

Comme on le verra au paragraphe suivant, l'équation (5.2) doit être résolue aux ordres l successifs jusqu'à la satisfaction du critère de convergence. Les différentes quantités convergées ($\sigma(\theta)$, σ_C , σ_M) sont donc paramétrées par les 2 variables k et λ_s . Il en découle directement la nécessité de définir un maillage bidimensionnel de l'espace (k, λ_s) .

En fait, si on observe l'équation différentielle (5.2), une 3^e variable apparaît implicitement dans le terme $U = V/E$ via la relation de dispersion (3.2) : la masse effective m^* . Le traitement du transport de porteurs de types différents (électrons ou trous), dans plusieurs matériaux distincts (Si, Ge, $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, etc.) implique l'utilisation de masses effectives différentes. Afin d'éviter de répéter la résolution numérique du problème pour chaque masse effective, Meyer et Bartoli ont introduit un formalisme spécifique, qui remplace les 2 paramètres (k, λ_s) par un couple de variables indépendantes du matériau ou du porteur considéré, notées (y, F) [103]. Cette technique permet de tabuler les quantités intéressantes sur un maillage bidimensionnel de l'espace (y, F) une fois pour toutes.

La variable y est reliée à k via la relation :

$$y = \pm ka_0/2 \quad (5.11)$$

où a_0 est le rayon effectif de Bohr⁶ :

$$a_0 = \frac{4\pi\hbar^2\epsilon\epsilon_0}{m^*e^2} \quad (5.12)$$

y est de signe positif si l'interaction coulombienne est attractive, de signe négatif si l'interaction est répulsive.

La variable F est proportionnelle à la longueur d'écrantage λ_s :

$$F = \frac{2\lambda_s}{a_0} \quad (5.13)$$

⁶La masse effective m^* qui figure dans la définition (5.12) est celle de la relation de dispersion (3.2). Comme suggéré par Meyer et Bartoli dans [103], il est pertinent de choisir pour m^* la masse effective de densité d'état de chaque vallée dégénérée. Afin d'éliminer toute ambiguïté, cette masse sera dès lors notée m_{val}^* , et sera notamment distinguée de la masse effective de densité d'état *totale*, laquelle sera notée m_{dos}^* . En présence de ν vallées dégénérées ellipsoïdales, ces masses s'écrivent respectivement :

$$\begin{aligned} m_{val}^* &= m_l^{1/3} m_t^{2/3} \\ m_{dos}^* &= \nu^{2/3} \left(m_l^{1/3} m_t^{2/3} \right) \end{aligned}$$

L'espace (y, F) est donc une image des variables *énergie* et *niveau de dopage*. La correspondance entre y et l'énergie E du porteur est explicitée par les relations (5.11) et (3.2). La correspondance entre F et le niveau de dopage N_i dépend elle-même du formalisme utilisé pour calculer la longueur d'écrantage $\lambda_s(N_i)$. La méthode que l'on adoptera ici pour établir cette correspondance, nommée *loi de la somme de Friedel*, sera explicitée plus loin dans cette section. En pratique, on utilise un maillage de résolution 48×18 , soit 864 points, pour notre espace (y, F) ⁷. Afin de minimiser l'erreur d'interpolation sur notre espace paramétrique, toutes les quantités $\sigma(y, F)$ sont interpolées de façon logarithmique entre les noeuds.

5.1.6 Convergence des déphasages

L'extraction des déphasages δ_l aux ordres l successifs doit aboutir au calcul des quantités probabilistes (5.7), (5.8) et (5.9). Ces sommes sur l'indice l ne présentant pas de borne supérieure, il devient nécessaire d'établir un critère de convergence en l . Lorsque ce critère est atteint à l'ordre l_0 , la convergence est supposée atteinte, le calcul est stoppé et la contribution de tous les termes d'ordre $l > l_0$ est supposée négligeable.

En outre, il existe une expression analytique du déphasage δ_l basée sur l'approximation de Born. Ce déphasage de Born, noté δ_l^B est calculé suivant [102, 103] :

$$\delta_l^B(y, F) = \frac{1}{y} \int_0^\infty j_l^2(x) x e^{-x/|y|F} dx \quad (5.14)$$

Les déphasages de Born sont connus pour être une bonne approximation des déphasages numériques dans la limite d'un potentiel $U(x)$ faible devant le terme d'énergie cinétique $\frac{l(l+1)}{x^2}$. En fait, on peut vérifier que la solution numérique exacte δ_l tend asymptotiquement vers la solution de Born δ_l^B lorsque l'ordre l augmente. On pourra donc se ramener au calcul plus rapide de l'intégrale (5.14) aux ordres l élevés. En pratique, on utilise les paramètres de convergence spécifiés dans la Ref. [103], i.e. un maximum de 49 déphasages sont calculés numériquement. Si à l'ordre $l = 49$ la convergence de la somme considérée n'est pas atteinte, on continue son calcul aux ordres l supérieurs en utilisant les déphasages de Born.

5.1.7 Test et validation de l'algorithme

Dans les paragraphes précédents, nous avons décrit la technique numérique utilisée et la paramétrisation du problème. Il est ensuite nécessaire de valider le comportement quantitatif du programme de calcul des déphasages $\delta_l(y, F)$ en comparant nos résultats à ceux publiés par les auteurs de la Ref. [103]. En prenant soin de tester notre programme pour des couples identiques (y, F) de l'espace des paramètres, on peut effectuer une comparaison pertinente de notre algorithme et de celui des auteurs.

Les figures 5.1a à 5.1f reproduisent respectivement les figures 1 à 6 de la référence [103], et comparent les résultats des auteurs à ceux produits par notre

⁷A titre de comparaison, le maillage adopté par Kay et Tang [47] est résolu en 11×8 , soit 88 points.

algorithme. Les quantités tracées sont les fonctions S_0 et H_0 , définies par :

$$S_0(y, F) = \frac{\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\delta_l(y, F)}{yF^2}$$

$$H_0(y, F) = \frac{8y^2 \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \sin^2 [\delta_l(y, F) - \delta_{l+1}(y, F)]}{\ln(b+1) - b/(b+1)}$$

où

$$b = 4y^2 F^2$$

A la vue des figures 5.1, il apparaît clairement l'excellent accord entre les résultats de référence et ceux présentés ici. Ce travail comparatif constitue une validation du comportement quantitatif de notre algorithme. On peut dès lors exploiter notre programme pour générer les sections de diffusion pertinentes à notre étude.

5.1.8 Loi de la somme de Friedel

Cette loi⁸, inhérente à la théorie du décalage de phase, permet d'établir de façon autocohérente une corrélation entre la longueur d'écrantage λ_s (ou le paramètre F) et le niveau de dopage N_i [47, 102, 103].

Il existe plusieurs niveaux d'approximation pour exprimer l'évolution de l'écrantage en fonction de la concentration des charges libres. Le formalisme le plus répandu est celui de *Debye-Hückel* :

$$\lambda_{DH} = \left(\frac{\epsilon\epsilon_0 k_B T}{e^2 N_i} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5.15)$$

L'écrantage de Debye-Hückel est valide dans le cas d'un semiconducteur *non-dégénéré*, ce qui correspond en pratique à des niveaux de concentrations dopantes N_i faibles à intermédiaires. Lorsque les niveaux de dopage sont très élevés, le matériau devient dégénéré et la formule de Debye-Hückel n'est plus applicable. Pour prendre en compte la dégénérescence, on a alors recours au formalisme de Thomas-Fermi, lequel est valide pour tous les niveaux de dopage :

$$\lambda_{TF} = \left(\frac{\epsilon\epsilon_0 k_B T}{e^2 N_i} \frac{\mathcal{F}_{1/2}(\eta_i)}{\mathcal{F}_{-1/2}(\eta_i)} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5.16)$$

où $\eta_i = (E_{F_i} - E_c)/k_B T$ est le niveau de Fermi réduit⁹, et \mathcal{F}_m est l'intégrale de Fermi d'ordre m .

⁸ *Friedel Sum Rule (FSR)* en Anglais

⁹ η_i est calculé suivant la formule analytique de Nilsson [109] :

$$\eta_i = \frac{\ln r_i}{1 - r_i} + \left(\frac{3\sqrt{\pi} r_i}{4} \right)^{\frac{2}{3}} + \frac{8\sqrt{\pi} r_i}{3(4 + \sqrt{\pi} r_i)^2}$$

avec $r_i = \frac{N_i}{N_c}$

avec $N_c = 2 \left(\frac{m_{dos}^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}$

5.1. LA DIFFUSION SUR UN POTENTIEL COULOMBIEN ÉCRANTÉ

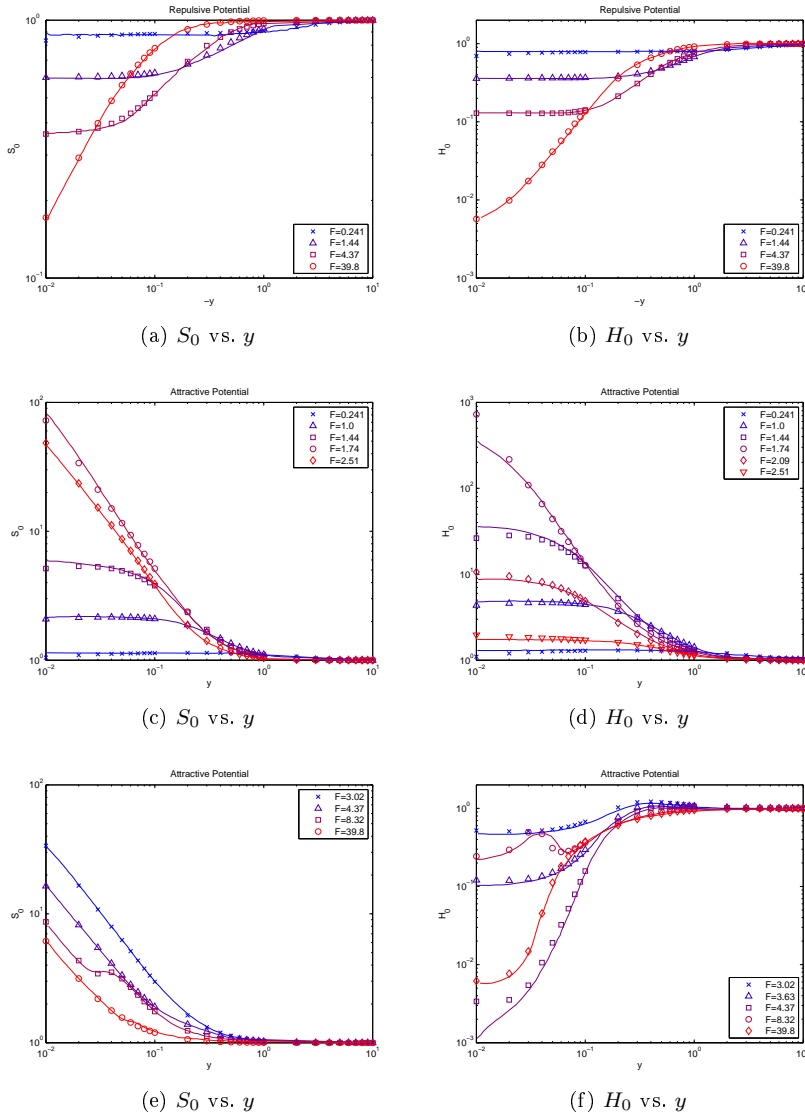


FIG. 5.1: Graphes de $S_0(y, F)$ et $H_0(y, F)$ en fonction de y pour différentes valeurs de F . Les symboles indiquent les résultats de notre algorithme, les lignes pleines représentent les résultats de la Ref. [103].

Contrairement aux formules (5.15) et (5.16), la loi de la somme de Friedel ne fournit pas explicitement la relation entre λ_s et N_i . Friedel part du principe selon lequel un centre dopant ionisé va induire localement une redistribution spatiale des porteurs de charge libres, telle que la charge de l'ion soit complètement compensée par l'écrantage à l'infini. Cette considération aboutit à une égalité reliant la charge de l'ion dopant aux déphasages δ_l caractérisant la réponse des porteurs libres au potentiel ionique perturbateur :

$$1 = \frac{2\nu}{\pi} \int_0^\infty f_0(1 - f_0)S(z, F)dz \quad (5.17)$$

où ν est le nombre vallées dégénérées, $z = E/k_B T$ est l'énergie réduite du porteur libre, $f_0(z) = (1 + e^{z-\eta_i})^{-1}$ est la fonction de distribution de Fermi-Dirac, et le terme S est une somme pondérée des déphasages δ_l :

$$S(z, F) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) \cdot \delta_l[y(z), F] \quad (5.18)$$

Il est essentiel de souligner que seuls les déphasages δ_l des porteurs qui contribuent à l'écrantage sont sommés dans S . Ainsi, en présence de porteurs de charge minoritaires, il est évident que ce sont essentiellement les porteurs majoritaires qui participent à l'écrantage électrostatique. En conséquence, les déphasages qui figurent dans la somme (5.18) sont toujours relatifs à un potentiel coulombien $V(r)$ attractif.

Afin d'illustrer cette notion, si on prend l'exemple du transport dans le silicium, l'écrantage des potentiels coulombiens sera :

- dans le cas d'un dopage de type donneur, dû aux électrons de dégénérescence $\nu = 6$ et de masse effective $m_{val}^* = 0,32m_0$;
- dans le cas d'un dopage de type accepteur, dû aux trous de dégénérescence $\nu = 1$ et de masse effective $m_{val}^* = 0,87m_0$.

L'application de la loi de la somme de Friedel à ces 2 configurations distinctes aboutira donc à 2 longueurs d'écrantages différentes. Au regard des relations (5.15) et (5.16), il est évident que cette distinction n'est pas accessible aux formalismes classiques de Debye-Hückel ou Thomas-Fermi, lesquels dépendent seulement de l'amplitude du niveau de dopage, et pas de son type.

En pratique, afin de déterminer la correspondance entre F (ou λ_s) et N_i , on utilise un algorithme itératif classique. Pour chaque valeur du dopage N_0 dont on veut connaître le paramètre équivalent F_0 , on commence par évaluer la partie droite de (5.17), notée $\mathcal{I}(F)$ ¹⁰ pour une valeur initiale de F arbitrairement faible. L'algorithme se poursuit en incrémentant progressivement le paramètre F , puis en ajustant le pas incrémental ΔF , jusqu'à ce que l'intégrale $\mathcal{I}(F)$ vérifie l'égalité (5.17). La condition d'arrêt de l'algorithme est atteinte lorsque la loi de Friedel est vérifiée avec une erreur inférieure à 0,1 %¹¹.

La figure 5.2 compare la dépendance en dopage de λ_s induite par les différents modèles considérés ici, dans le cas du silicium. L'écrantage issu de la loi de la somme de Friedel est tracé pour les 2 configurations d'un dopage du type donneur ($Nd \gg Na$), où les potentiels coulombiens sont essentiellement écrantés par les électrons de conduction, et du type accepteur ($Nd \ll Na$), où

¹⁰ on a donc $\mathcal{I}(F) = \frac{2\nu}{\pi} \int_0^\infty f_0(1 - f_0)S(z, F)dz$

¹¹ ce qui correspond au critère $|\mathcal{I}(F) - 1| \leq 1/1000$

les potentiels coulombiens sont essentiellement écrantés par les trous de valence. On observe que les trois modèles sont équivalents pour les concentrations faibles à intermédiaires, i.e. inférieures à 10^{19} cm^{-3} ; en outre à de telles concentrations l'écrantage n'est pas sensible à la nature du dopage. Au-delà de 10^{19} cm^{-3} , le silicium devient dégénéré et l'approximation de Debye-Hückel n'est plus valide. Jusqu'à 10^{20} cm^{-3} , l'influence de la nature du dopage sur la longueur d'écrantage est quasiment inexistante; il faut atteindre des niveaux extrêmes de dopage supérieurs à 10^{20} cm^{-3} pour qu'une différence significative apparaisse.

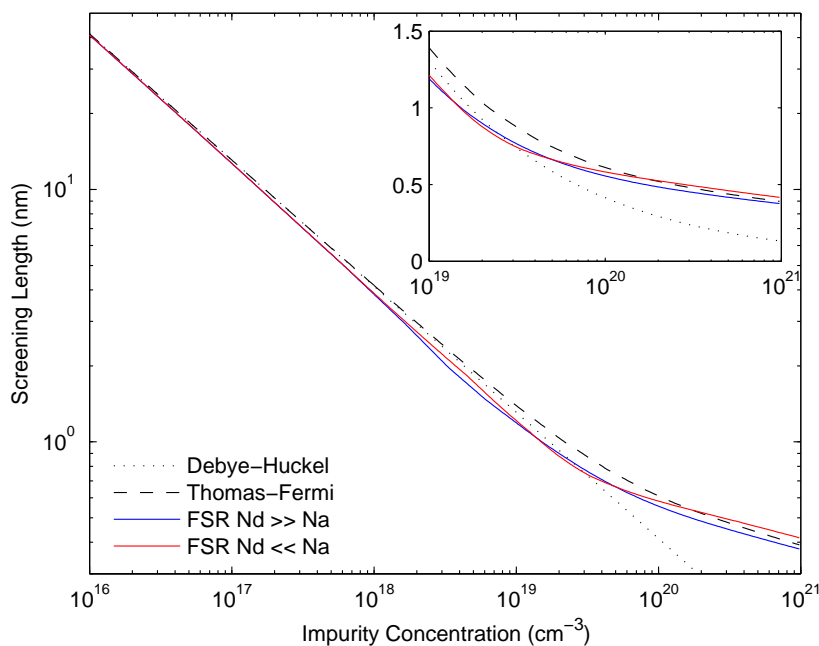


FIG. 5.2: Longueur d'écrantage en fonction de la densité du dopage, suivant les formalismes de Debye-Hückel, Thomas-Fermi et Friedel. Seul l'écrantage calculé suivant la somme de Friedel permet une distinction quantitative en fonction de la nature des dopants.

5.2 L'interaction porteur-impureté ionisée

Une fois que les différentes sections de diffusion (5.7), (5.8) et (5.9) ont été tabulées sur notre maillage bidimensionnel de l'espace (y, F) , il s'agit de calculer les quantités probabilistes pertinentes à une simulation Monte Carlo, et à implémenter ces probabilités au sein de notre algorithme de simulation.

5.2.1 Cas d'une structure de bande analytique

La théorie du décalage de la phase étant fondée sur l'hypothèse d'une dispersion sphérique, les sections de diffusion calculées sont naturellement adaptées

aux simulateurs Monte Carlo à structure de bande analytique sphérique [47]. Dans ce cas, la probabilité d'interaction porteur-impureté ionisée est directement corrélée à la section totale de collision (5.8), selon :

$$P_{imp} = N_i \cdot v(k) \cdot \sigma_C \quad (5.19)$$

où N_i est la densité des centres dopants ionisés diffuseurs et $v(k)$ est la vitesse de groupe du porteur de charge. Dans la cas d'une dispersion sphérique de $E(k)$, la vitesse $v(k)$ est isotrope¹², et la probabilité d'interaction P_{imp} est directement paramétrable en fonction de l'énergie E du porteur de charge.

Le calcul du vecteur d'onde post-interaction est effectué analytiquement, en utilisant la technique de rotation angulaire spécifique aux modèles Monte Carlo à bande sphérique. La symétrie sphérique de la dispersion résulte dans la conservation de la norme du vecteur d'onde au cours de l'interaction. On peut donc calculer le vecteur d'onde diffusé k' comme l'image par rotation d'angle θ du vecteur d'onde incident k . L'angle polaire de diffusion est distribué selon la probabilité différentielle angulaire $P(\theta)$, laquelle est corrélée à la section différentielle de collision (5.7), selon :

$$P(\theta) = \frac{\pi \sigma(\theta) \sin \theta}{2 \sigma_C} \quad (5.20)$$

L'application d'une réjection stochastique sur la distribution angulaire (5.20) permet de générer l'angle de rotation, et de calculer le vecteur d'onde k' . La figure 5.3 illustre l'évolution de la distribution angulaire normalisée avec la concentration N_i des impuretés ionisées. Il est remarquable que, pour de faibles densités en dopants ionisés, la probabilité angulaire est très fortement piquée dans le domaine des angles faibles. Pour une densité de 10^{15} cm^{-3} , l'angle moyen de rotation du vecteur d'onde est de $0,7^\circ$: numériquement, le vecteur d'onde de la particule est quasiment inchangé après l'interaction coulombienne.

L'utilisation de ce modèle dans un simulateur Monte Carlo à structure de bande analytique pose plusieurs problèmes d'ordre numérique :

- L'efficacité numérique de l'algorithme Monte Carlo est drastiquement dégradée par l'emploi du modèle de diffusion (5.20). Au cours de la simulation de la propagation de la particule dans l'espace réciproque, le programme va être très fréquemment interrompu par le calcul d'une interaction particule-impureté résultant dans une modification négligeable de l'état de la particule.
- La modification très fréquente du vecteur d'onde de la particule, par applications de rotations d'angle négligeable, introduit une importante composante de bruit qui va affecter la précision statistique des résultats, et augmenter la durée de simulation nécessaire à l'obtention d'une convergence.

5.2.2 Cas d'une structure de bande numérique

L'emploi des sections de diffusion (5.7), (5.8) et (5.9) dans un simulateur MC à structure de bande numérique nécessite une approche spécifique. Les structures Full-Band ne possédant pas de symétrie sphérique, le calcul du vecteur

¹² $v(k) = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(k) = \frac{\hbar k}{m^*} = \sqrt{\frac{2E}{m^*}}$

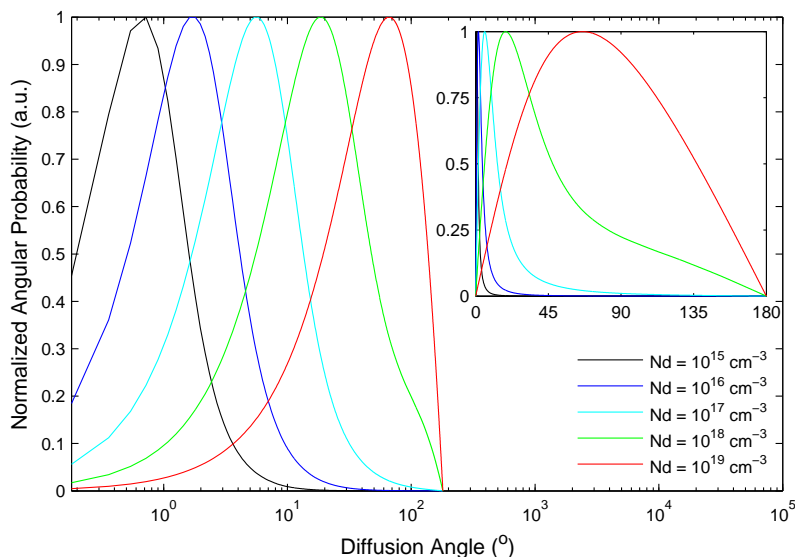


FIG. 5.3: Probabilité différentielle angulaire d'interaction électron-impureté ionisée dans le silicium, pour plusieurs concentrations en dopage donneur. L'encart montre la même figure avec une échelle angulaire linéaire.

d'onde diffusé par rotation d'angle θ est strictement non-applicable. On choisit d'adopter la méthode proposée par Buffer [38,39], qui consiste à utiliser comme probabilité d'interaction non pas la probabilité totale de collision, mais la fréquence de relaxation du moment¹³. Si la probabilité de collision correspond à la fréquence des interactions subies par la particule, la fréquence de relaxation du moment quantifie l'inverse du délai moyen nécessaire à une *modification substantielle* du vecteur d'onde. La fréquence de relaxation du moment étant significativement plus faible que la fréquence de collision, son intégration dans un algorithme Monte Carlo résulte dans un gain remarquable en terme d'efficacité du programme, i.e. de temps de simulation. Le modèle de la Ref. [39] dérive la fréquence de relaxation du moment du formalisme de Brooks-Herring, lequel n'est pas sensible au signe du potentiel coulombien diffuseur. Afin de pouvoir discriminer le transport des porteurs majoritaires, et celui des minoritaires, il est nécessaire d'introduire des préfacteurs arbitraires devant les fréquences de relaxation obtenues par Buffer.

Dans l'optique de bénéficier de l'important gain en temps de calcul, tout en conservant la distinction physique entre les interactions attractives et répulsives, on choisit d'adapter la méthode de la fréquence de relaxation du moment dans le cadre théorique du décalage de la phase. La probabilité d'interaction porteur-impureté ionisée est assimilée à la fréquence de relaxation du moment, laquelle est directement corrélée à la section de relaxation du moment :

$$P_{imp} = P_M \cdot N_i \cdot v(k) \cdot \sigma_M \quad (5.21)$$

¹³inverse momentum relaxation time en Anglais

où la section σ_M est calculée suivant la somme (5.9). Le terme P_M dans (5.21) est un préfacteur empirique constant, dont la valeur est calibrée sur des mesures de mobilité (cf. § 5.4). On peut exprimer la probabilité (5.21) comme une fonction de l'énergie E du porteur. Les déphasages δ_l intervenant dans le calcul de la section σ_M étant différents en fonction du signe du potentiel coulombien diffuseur, 2 fonctions de probabilités distinctes sont obtenues :

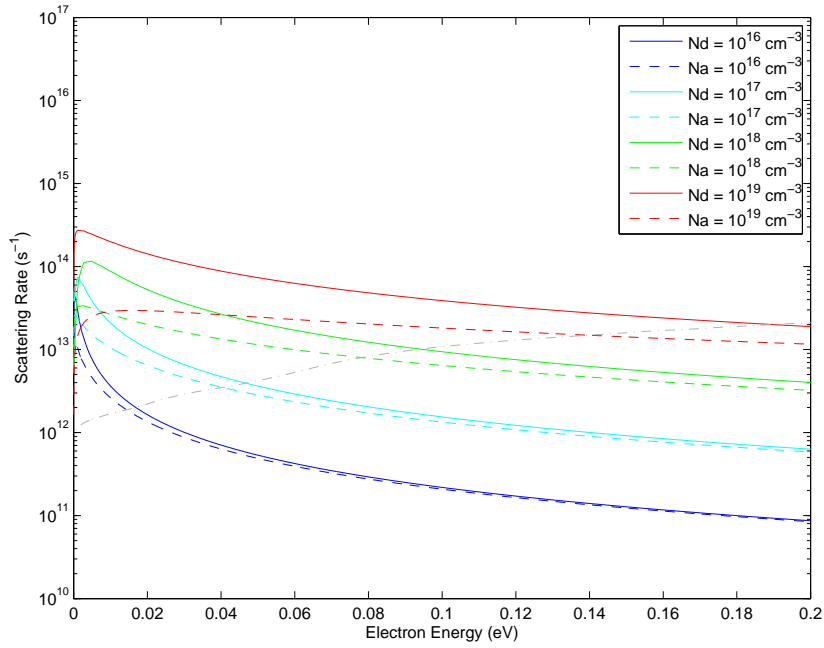
1. La probabilité d'interaction $P_{imp}^{maj}(E)$, décrivant la diffusion des porteurs majoritaires, intègre les déphasages relatifs au potentiel écranté attractif ;
2. La probabilité d'interaction $P_{imp}^{min}(E)$, décrivant la diffusion des porteurs minoritaires, intègre les déphasages relatifs au potentiel écranté répulsif.

Les fréquences de relaxation du moment exprimées dans (5.21), quantifiant les probabilités d'interaction électron- et trou-impureté ionisée dans Si, sont tracées dans les figures 5.4a et 5.4b. L'aptitude du formalisme du décalage de la phase à établir une distinction entre les porteurs majoritaires et minoritaires y est mise en évidence. L'analyse de ces figures permet d'identifier plusieurs tendances :

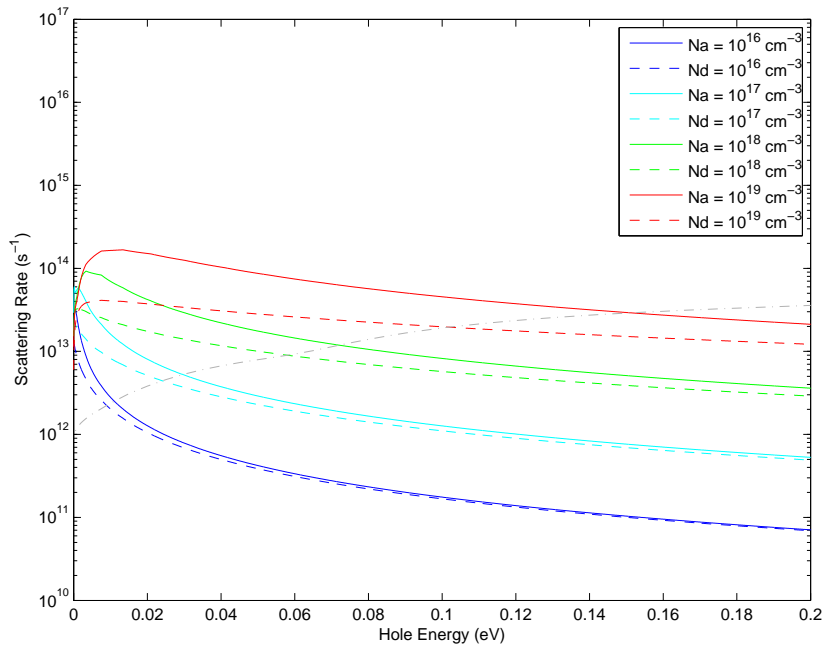
- D'un point de vue général, les taux d'interaction présentent des amplitudes relativement modérées, caractérisées par des maxima de l'ordre de quelques 10^{13} s^{-1} . Cette caractéristique est très favorable à une implémentation au sein d'un simulateur Monte Carlo ; en effet, l'utilisation de fréquences d'interaction très élevées impose le choix d'un pas temporel Δt drastiquement fin dans l'algorithme de propagation, ce qui résulte en un fort accroissement des temps de calcul.
- L'amplitude des fréquences de relaxation est fortement croissante avec la concentration des dopants. Cette tendance indique que plus le matériau semiconducteur est dopé, plus la relaxation du vecteur d'onde de la particule est effectif durant sa propagation, c'est-à-dire plus le porteur de charge est ralenti.
- Une troisième tendance qualitative remarquable est l'accroissement de la distinction entre transport majoritaire et minoritaire avec le niveau de dopage. A faibles concentrations, les interactions des porteurs majoritaires et minoritaires se produisent à la même fréquence. Lorsque la densité du dopage augmente, le taux d'interaction (5.21) devient de plus en plus sensible au signe de l'interaction coulombienne : les porteurs majoritaires sont plus fréquemment diffusés que les porteurs minoritaires.

Il sera vu dans le paragraphe § 5.4 comment ces caractéristiques du modèle de relaxation du moment influencent les propriétés de transport des charges libres dans les matériaux dopés.

Le second aspect de la modélisation de l'interaction porteur-impureté concerne le calcul de l'état électronique diffusé. L'utilisation de fréquences de relaxation du moment pour modéliser la probabilité d'interaction est intrinsèquement liée à une génération stochastique purement aléatoire du vecteur d'onde, c'est-à-dire à la randomisation de l'état diffusé [38, 39]. Si la structure de bande est décrite de façon numérique, l'état post-interaction de la particule est généré par randomisation élastique sur la surface iso-énergie définie par l'énergie incidente (cf. § 2.3.6). Cette modélisation est donc particulièrement adaptée aux simulateurs Full-Band. Le modèle de la relaxation du moment consiste donc à modéliser des diffusions très fréquentes modifiant faiblement l'état quantique de la particule, par des interactions relativement peu probables qui altèrent



(a)



(b)

FIG. 5.4: Probabilités d'interaction électron- et trou-impureté ionisée en fonction de l'énergie à différents niveaux de dopage dans le silicium. Les courbes pleines correspondent aux porteurs majoritaires, les courbes en pointillés aux porteurs minoritaires. Les probabilités totales d'interaction électron- et trou-phonon sont également indiquées (lignes discontinues grises).

significativement le vecteur d'onde de la particule.

5.3 Le principe d'exclusion de Pauli

Le principe d'exclusion de Pauli¹⁴ est une loi de la mécanique quantique selon laquelle 2 fermions ne peuvent occuper le même état quantique simultanément. Dans un matériau semiconducteur, l'application de ce principe d'exclusion aux électrons de conduction et aux trous de valence est appelée *dégénérescence*. Cette dégénérescence va limiter la disponibilité de certains états quantiques (k, ν) , et ainsi altérer le transport des porteurs de charge. En pratique, les effets liés à la dégénérescence se manifestent lorsque les états quantiques accessibles du système sont fortement peuplés. Le principe d'exclusion de Pauli est par conséquent effectif lorsque la concentration des porteurs libres devient très élevée. Dans l'optique de modéliser le transport des charges libres dans des semiconducteurs fortement dopés à température ambiante, il devient donc nécessaire de prendre en compte les effets de la dégénérescence.

Considérons la diffusion d'une particule dans un état incident k vers un état final k' induite par l'action d'un potentiel de perturbation quelconque. La probabilité $P(k, k')$ que la transition ait lieu entre les états k et k' est proportionnelle à la probabilité $f(k)$ que l'état initial soit occupé, et proportionnelle à la probabilité $[1 - f(k')]$ que l'état final soit vide, c'est-à-dire disponible [46] :

$$P(k, k') = S(k, k') \times f(k) \times [1 - f(k')] \quad (5.22)$$

Le terme $S(k, k')$ dans (5.22) est la probabilité d'interaction, et correspond à la probabilité que la transition ait lieu lorsque les états initial et final sont respectivement occupé et vide. Dans la simulation du transport par approche Monte Carlo standard, on assimile usuellement la probabilité de transition $P(k, k')$ à la probabilité d'interaction $S(k, k')$. En effet, la particule Monte Carlo dont on modélise la transition occupe nécessairement l'état initial : on a donc $f(k) = 1$. De plus, l'hypothèse d'un système non-dégénéré permet de négliger le PEP, ce qui mène à l'approximation $f(k') = 0$. La simulation par méthode MC de systèmes dégénérés doit prendre en compte le facteur d'occupation $[1 - f(k')]$ dans l'évaluation de la probabilité de transition.

La difficulté de la prise en compte du facteur $[1 - f(k')]$ dans l'expression exacte (5.22) de la probabilité de transition, réside dans le fait que la probabilité d'occupation $f(k)$ est inconnue a priori, puisqu'elle constitue un des résultats de la simulation. On peut cependant contourner cette difficulté en prenant en compte le facteur d'occupation via une procédure de réjection [46]. Lorsqu'un mécanisme d'interaction est stochastiquement sélectionné (auto-diffusion exclue) pour la particule incidente dans l'état (k, ν) , un état final potentiel (k', ν') est calculé suivant la probabilité différentielle $S(k, k')$. Un nombre aléatoire r compris entre 0 et 1 est ensuite généré :

- si $r < [1 - f_{\nu'}(k')]$, l'état final k' est vide, et la particule incidente est diffusée vers l'état final (k', ν') ;
- si $r > [1 - f_{\nu'}(k')]$, l'état final k' est occupé, et la transition est impossible par application du PEP. La particule incidente n'est pas diffusée et subit une nouvelle accélération balistique depuis l'état (k, ν) .

¹⁴ *Pauli Exclusion Principle (PEP)* en Anglais

Le point-clef de cette méthode de réjection consiste par conséquent à évaluer la probabilité d'occupation $f(k)$ au cours de la simulation. La spécificité de notre approche, à savoir la simulation d'un système homogène et stationnaire, autorise l'évaluation de la fonction $f(k)$ par un algorithme MC mono-particule¹⁵. Notre dispersion numérique étant multi-bande, la donnée du vecteur d'onde k de la particule n'est pas suffisante pour définir exhaustivement son état quantique : l'indice ν de la bande occupée est une composante supplémentaire de son état. La fonction de probabilité d'occupation f est donc dépendante de 4 variables scalaires : k_x , k_y , k_z et ν . Afin de calculer numériquement la probabilité d'occupation, on discrétise l'espace réciproque par un maillage cubique homogène. La zone de Brillouin est divisée en éléments cubiques de dimensions Δk_x , Δk_y et Δk_z telles que :

$$\Delta k_x = \Delta k_y = \Delta k_z = \Delta k = \frac{1}{50} \times \frac{2\pi}{a}$$

Pour chaque élément discret m du maillage, un indice d'occupation entier $n_{\nu,m}$ va être attribuée à la bande ν . A la fin de chaque vol libre, l'élément cubique m occupé par le vecteur d'onde de la particule (k, ν) est détecté, et son indice d'occupation $n_{\nu,m}$ est incrémenté de 1. La probabilité locale $f_{\nu,m}$ est alors proportionnelle au ratio de l'indice d'occupation sur le nombre total N de vols libres simulés :

$$f_{\nu,m} = K \times \frac{n_{\nu,m}}{N} \quad (5.23)$$

Il s'agit dès lors de normaliser la quantité $f_{\nu,m}$, c'est-à-dire de déterminer la constante de proportionnalité notée K dans (5.23) pour que la fonction calculée corresponde à la probabilité que l'état quantique (k_m, ν) soit occupé par un porteur de charge. Dans un matériau semiconducteur, la densité de porteurs libres N_c est donnée par l'intégrale de la probabilité d'occupation sur l'espace réciproque :

$$N_c = \sum_{\nu} \int \frac{2}{(2\pi)^3} f(k, \nu) \cdot d^3k \quad (5.24)$$

Si on discrétise la fonction $f(k, \nu)$ sur le maillage cubique précédemment défini, l'équation (5.24) est intégrable numériquement selon :

$$N_c = \sum_{\nu,m} \frac{2}{(2\pi)^3} \times (\Delta k)^3 \times f_{\nu,m} \quad (5.25)$$

L'utilisation de la définition (5.23) dans (5.25) produit :

$$N_c = \frac{2}{(2\pi)^3} (\Delta k)^3 K \times \sum_{\nu,m} \frac{n_{\nu,m}}{N} \quad (5.26)$$

Comme la définition même de $n_{\nu,m}$ implique $\sum_{\nu,m} n_{\nu,m} = N$, l'équation (5.26) nous fournit le préfacteur de normalisation de la probabilité d'occupation :

$$K = \frac{N_c (2\pi)^3}{2 (\Delta k)^3} \quad (5.27)$$

¹⁵Dans le cas d'un système transitoire, l'évaluation de la probabilité d'occupation $f(k, t)$ nécessite l'emploi d'un algorithme multi-particule.

et la probabilité d'occupation normalisée est calculée numériquement selon :

$$f_{\nu,m} = \frac{N_c(2\pi)^3}{2(\Delta k)^3} \times \frac{n_{\nu,m}}{N} \quad (5.28)$$

En pratique, notre modélisation du principe d'exclusion de Pauli s'appuie sur une procédure de réjection appliquée à la probabilité d'occupation discrétisée selon (5.28). A chaque fois qu'un mécanisme d'interaction interrompt l'accélération balistique de la particule, l'état final (k', ν') est calculé en négligeant le PEP. L'élément cubique m' contenant le vecteur d'onde diffusé k' est ensuite détecté, et la probabilité d'occupation locale $f_{\nu',m'}$ est évaluée. Finalement, la comparaison de $f_{\nu',m'}$ avec un nombre aléatoire compris entre 0 et 1 conduit à l'autorisation ou à l'interdiction de la transition.

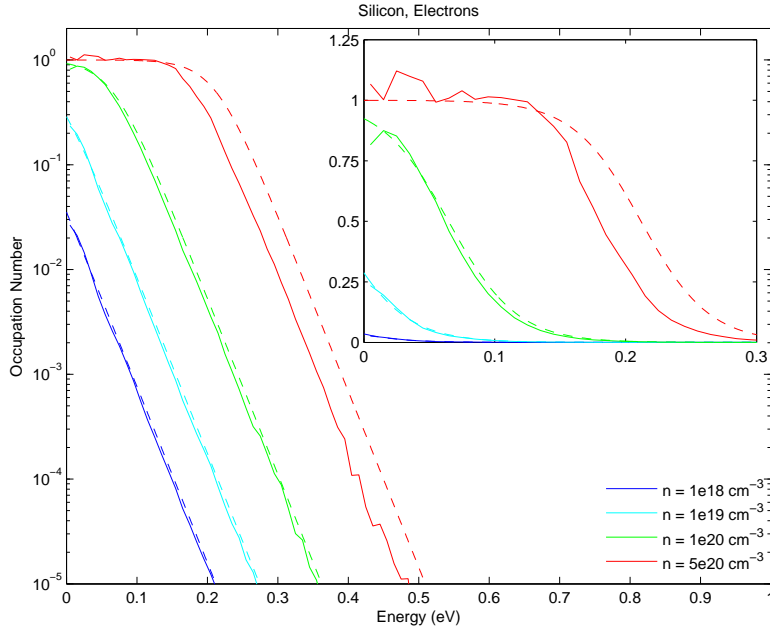
Afin de tester l'implémentation de notre modélisation numérique du PEP, il est très utile de mettre en évidence les effets de la dégénérescence sur la distribution des porteurs en énergie. Les figures 5.5a et 5.5b montrent les probabilités d'occupation en énergie des électrons et des trous dans le silicium fortement dopé, obtenues par simulation Monte Carlo pour des porteurs de charge soumis à des champs électriques faibles. Dans ces conditions proches de l'équilibre thermodynamique, les probabilités d'occupation simulées peuvent être comparées aux distributions analytiques de Fermi-Dirac (cf. éq. (2.3)). La fonction de Fermi-Dirac $f_0(E)$ décrit la probabilité qu'un état d'énergie E soit occupé par un fermion à l'équilibre thermodynamique, dans un système arbitrairement dégénéré. Ces fonctions peuvent donc être considérées comme des références pour évaluer notre modélisation du PEP. L'observation des figures 5.5a et 5.5b conduit aux conclusions suivantes :

1. Pour des concentrations de porteurs inférieures à 10^{19} cm^{-3} à température ambiante, le système est non-dégénéré. A ces concentrations faibles, le PEP n'est pas effectif et la probabilité d'occupation des porteurs est donnée par la distribution statistique de Maxwell-Boltzmann :

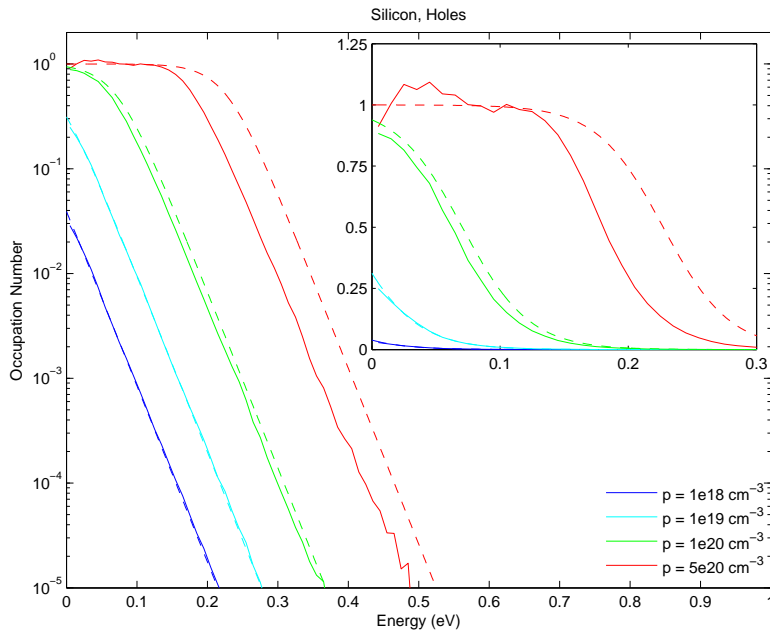
$$f_0(E) = \exp\left(-\frac{E - E_F}{k_B T}\right)$$

Au niveau du modèle numérique, le terme de densité N_c présent au numérateur de (5.28) est si faible que la probabilité d'occupation $f_{\nu,m}$ est négligeable. Les réjections dues au PEP sont trop rares pour avoir une influence statistique sur le transport des porteurs.

2. Pour des concentrations supérieures à 10^{20} cm^{-3} , le système de fermions composé par les porteurs libres devient dégénéré. Les minima de la structure de bande deviennent saturés en porteurs, comme la probabilité d'occupation atteint 1 à basse énergie. Le transport des porteurs de charge est fortement influencé par la dégénérescence, laquelle pousse les porteurs vers les énergies hautes, augmente concomitamment l'énergie moyenne du gaz de particules et élargit sa distribution. Au voisinage des centres de vallées, la probabilité d'occupation $f_{\nu,m}$ tend localement vers 1, ce qui interdit toute transition vers les minima de la structure de bande. Cette restriction diminue la fréquence à laquelle les porteurs sont diffusés, ce qui entraîne l'échauffement de leur distribution.
3. L'observation attentive des probabilités d'occupation calculées permet de constater que la fonction de probabilité dépasse occasionnellement l'unité



(a)



(b)

FIG. 5.5: Probabilité d'occupation en énergie des électrons (Fig. 5.5a) et des trous (Fig. 5.5b) dans le silicium massif à 300 K, pour plusieurs concentrations de porteurs libres. Les lignes continues représentent les fonctions de probabilité issues des simulations Monte Carlo, les lignes pointillées sont les distributions de Fermi-Dirac. Le champ électrique appliqué pour les simulations est de 1 kV/cm pour les électrons 2 kV/cm pour les trous.

[48]. Ce dépassement est dû aux limitations d'ordre numérique (pas du maillage cubique, nombre de vols libres simulés, bruit statistique, etc) qui affectent notre méthode de modélisation.

Les résultats de nos simulations indiquent que, malgré la présence d'une erreur numérique, notre modélisation du PEP par l'application d'une technique de réjection à la probabilité d'occupation locale, permet de décrire correctement les effets d'échauffement liés à la dégénérescence.

5.4 Simulation du transport dans SiGeC dopé

5.4.1 Mobilité en fonction du dopage dans Si

L'évolution de la mobilité à faible champ en fonction de la concentration du dopage dans le silicium, a été l'objet de très nombreuses études expérimentales. Ces données permettent de mieux comprendre comment les espèces dopantes ionisées altèrent les propriétés de transport du silicium. A ce titre, les mesures de mobilité dans un matériau semiconducteur dopé ont usuellement pour objectif l'investigation d'un ou plusieurs des 3 effets suivants :

1. influence de la densité des centres dopants ionisés ;
2. influence du type des centres dopants (donneur ou accepteur) ;
3. influence de l'élément dopant (P, As, etc).

Afin de vérifier la validité de nos modèles théoriques visant à décrire les effets induits par les dopants ionisés sur le transport des charges, il est essentiel de pouvoir reproduire par la simulation les résultats expérimentaux. Pour ce faire, on simule le transport des électrons et des trous soumis à un champ électrique faible (typiquement 1 kV/cm) dans un milieu contenant une densité N_i d'impuretés ionisées, en incluant les modèles des interactions porteur-phonon, porteur-impureté ionisée et le modèle du principe d'exclusion de Pauli. La structure de bande utilisée est réduite aux 2 premières bande de conduction, et aux 3 plus basses bandes de valence. En faisant varier le paramètre initial N_i , on peut extraire la dépendance en dopage de la mobilité théorique.

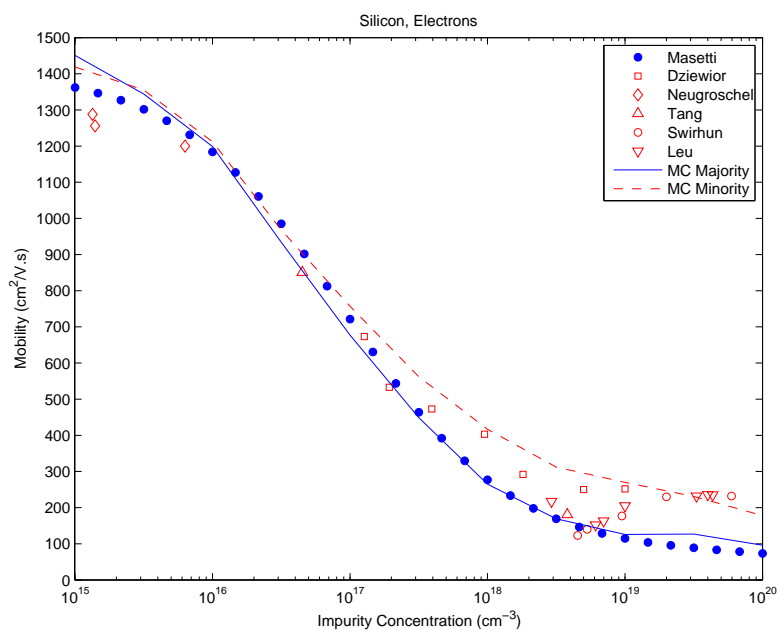
Pour simuler la propagation des porteurs majoritaires, i.e. des porteurs libres issus de l'ionisation de l'espèce dopante, on inclut la probabilité d'interaction porteur-impureté calculée pour un potentiel coulombien attractif, et la densité N_c des porteurs libres prise en compte dans le modèle numérique (5.28) du PEP est supposée égale à N_i :

$$N_{c,maj} = N_i$$

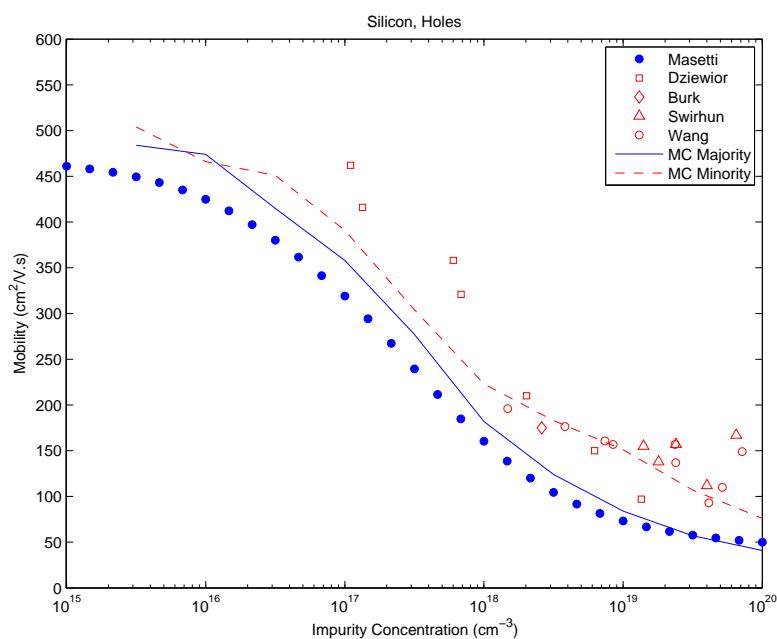
Pour simuler la propagation des porteurs minoritaires, la probabilité de diffusion sur impuretés ionisées est dérivée d'un potentiel répulsif. L'application du modèle de dégénérescence (5.28) à la population des porteurs minoritaires nécessite la spécification de la densité des minoritaires. On choisit d'étudier le transport des porteurs minoritaires dans des conditions telles que leur influence sur la population des porteurs majoritaires reste négligeable. Ce critère est respecté lorsque la concentration des minoritaires est faible devant celle des majoritaires, on définit donc la densité des minoritaires par [62] :

$$N_{c,min} = 0,001 \times N_i$$

5.4. SIMULATION DU TRANSPORT DANS SIGEC DOPÉ



(a)



(b)

FIG. 5.6: Résultats pour la mobilité à faible champ des électrons (Fig. 5.6a) et des trous (Fig. 5.6b) dans le silicium en fonction de la concentration des dopants. Les lignes représentent les simulations Monte Carlo, les symboles sont les résultats expérimentaux. Les lignes et symboles bleus (resp. rouges) sont relatifs aux mobilités des porteurs majoritaires (resp. mineurs). Les références expérimentales sont [43, 110, 111, 112, 113, 114, 115] pour la Fig. 5.6a et [43, 110, 116, 117, 118, 119] pour la Fig. 5.6b.

La comparaison entre résultats théoriques et expérimentaux pour la mobilité des électrons et des trous dans le silicium dopé est établie dans les figures 5.6a et 5.6b.

Dans le cas de la mobilité des électrons majoritaires et minoritaires, on observe un excellent accord entre simulation et mesure lorsque le préfacteur empirique P_M du modèle (5.21) pour la fréquence de relaxation du moment est fixé à :

$$P_M^e = 4,0$$

Ce préfacteur d'ajustement permet de prendre en compte de façon globale l'ensemble des phénomènes diffusifs non-explicitement modélisés. Dans les milieux fortement dopés, ces mécanismes bien que d'origines diverses, sont essentiellement de nature coulombienne : citons notamment les interactions inter-porteur (électron-électron [120,121,122], électron-trou [62,63], trou-trou), porteur-plasmon [105,106] et porteur-impureté neutre [123]. Les caractéristiques des probabilités d'interaction électron-impureté mises en évidence dans la figure 5.4a influencent fortement les résultats théoriques. La forte augmentation des fréquences de relaxation du moment avec la densité du dopage, résulte dans la diminution drastique de la mobilité à faible champ. De plus, l'accroissement de la différenciation entre les probabilités d'interaction attractive et répulsive, conduit à une forte distinction entre les mobilités majoritaire et minoritaire : à fort dopage, les porteurs minoritaires sont systématiquement plus mobiles que les porteurs majoritaires.

Les résultats de simulation pour la mobilité des trous majoritaires et minoritaires sont en bon accord avec les données expérimentales avec un préfacteur constant calibré à :

$$P_M^h = 5,0$$

L'écart existant entre la mobilité théorique et la mobilité expérimentale de la Ref. [43] pour les concentrations dopantes faibles i.e. inférieures à 10^{17} cm^{-3} (cf. Fig. 5.6b) s'explique par les différentes mobilités intrinsèques de référence utilisées : notre modèle d'interaction trou-phonon, calibré sur les mesures de vitesse de dérive de la Ref. [77], produit une mobilité intrinsèque théorique égale à $564 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ (cf. Tab. 3.6), tandis que la formule empirique de la Ref. [43] emploie un paramètre de mobilité intrinsèque égal à $470,5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$.

Notre modèle de relaxation du moment permet donc de décrire efficacement la diffusion des porteurs de charge sur les centres dopants ionisés, en proposant un formalisme commun aux deux types de porteurs. Un très bon accord quantitatif est atteint entre les résultats théoriques et expérimentaux pour la mobilité des porteurs dans le silicium dopé P et N, par l'introduction d'un seul paramètre empirique.

5.4.2 Mobilité en fonction du dopage dans Ge

La mobilité à faible champ dans le germanium dopé a été très peu mesurée ; à notre connaissance, seuls les travaux de Prince publiés en 1953 [124] ont investigué ces propriétés. Dans la référence [124], les effets de la température et de la concentration des dopants sur la mobilité ohmique des électrons et des trous minoritaires ont été mesurés dans des échantillons de germanium massif. Il est remarquable que le domaine des concentrations mesurées est restreint à la gamme des densités faibles à intermédiaires ($10^{13} \text{ cm}^{-3} \leq N_i \leq 10^{17} \text{ cm}^{-3}$),

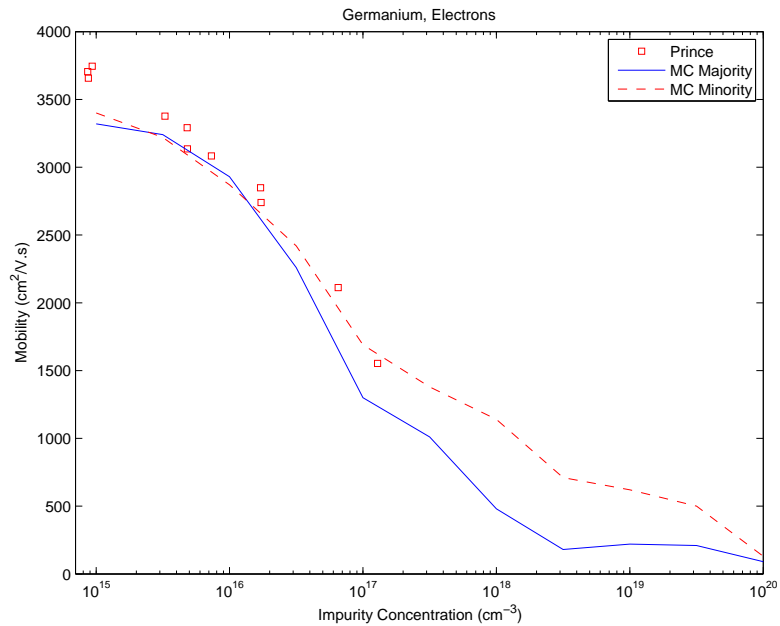
et que par conséquent aucune information n'existe relativement aux mobilités dans le Ge fortement dopé.

Malgré ces données expérimentales lacunaires, on peut comparer les résultats de nos simulations Monte Carlo de transport dans le germanium aux mesures existantes : ces comparatifs pour la mobilité des électrons et des trous sont reportés respectivement dans les figures 5.7a et 5.7b. On constate que, avec des préfacteurs empiriques $P_M^{e,h}$ identiques à ceux utilisés dans Si, les modèles théoriques s'accordent avec les tendances expérimentales. Ces résultats montrent que les préfacteurs des fréquences de relaxation du moment (5.21) peuvent être considérés comme des constantes indépendantes du matériau. A ce titre, les préfacteurs employés pour modéliser les interactions porteur-impureté dans les alliages SiGeC prendront les valeurs calibrées dans le silicium.

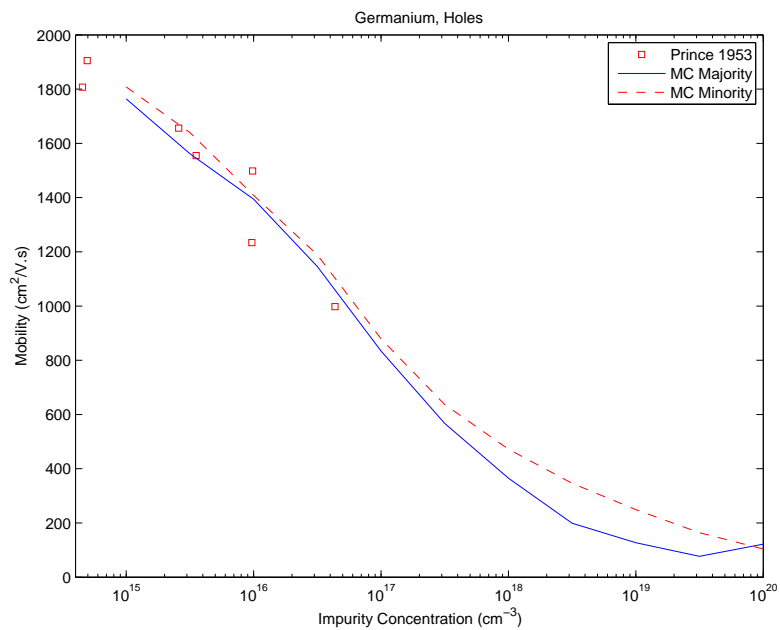
Les principaux effets induits par l'ionisation des impuretés dopantes substitutionnelles dans un cristal semiconducteur, à savoir :

1. la relaxation du vecteur d'onde des porteurs de charge par diffusion élastique sur les potentiels ioniques, et
2. l'échauffement du gaz de porteurs libres, consécutif à la dégénérescence des états occupés aux fortes densités dopantes,

ont été décrits par l'introduction de 2 modèles spécifiques. Ces modèles reproduisent efficacement les propriétés expérimentales des porteurs de charge dans les matériaux dopés.



(a)



(b)

FIG. 5.7: Résultats pour la mobilité à faible champ des électrons (Fig. 5.7a) et des trous (Fig. 5.7b) dans le germanium en fonction de la concentration des dopants. Les lignes représentent les simulations Monte Carlo, les symboles sont les résultats expérimentaux. Les lignes et symboles bleus (resp. rouges) sont relatifs aux mobilités des porteurs majoritaires (resp. minoritaires). La référence expérimentale est [124].

Chapitre 6

Extraction des paramètres matériau et formulation des modèles analytiques

6.1 Mobilité à faible champ

La mobilité ohmique caractérise la réponse du matériau à l'application d'un champ électrique faible. C'est une caractéristique électronique fondamentale du matériau. Dans l'optique de simuler des transistors bipolaires intégrant des couches de SiGeC, il est essentiel de modéliser rigoureusement les mobilités des électrons et des trous dans ces alliages ternaires. Les sections suivantes explicitent les différentes composantes de notre modèle analytique de mobilité. Chaque composante se focalise sur la modélisation d'un effet physique spécifique. L'ensemble des paramètres du modèle analytique de mobilité sont calibrés sur les résultats de référence de nos simulations Monte Carlo¹. Les valeurs assignées aux différents paramètres du modèle sont exposées dans les tableaux 6.1 et 6.2, pour les mobilités des électrons et des trous respectivement.

6.1.1 Dépendance en température

On commence par décrire la dépendance en température de la mobilité dans un matériau massif pur et non-dopé. Dans ces conditions, la mobilité des porteurs est uniquement limitée par les phonons du réseau. La mobilité μ exprimée en fonction de la température T peut alors s'écrire selon une loi empirique de type [124, 125, 126] :

$$\mu(T) = \mu_L \times \left(\frac{T}{300} \right)^{-\gamma} \quad (6.1)$$

où le terme μ_L désigne la mobilité limitée par les phonons à 300 K, et l'exposant γ est un paramètre empirique. L'expression de μ_L sera détaillée plus loin ; elle intègre une dépendance en contrainte ajustée sur les résultats MC. L'ensemble de nos simulations de transport ayant été effectuées à température ambiante, le coefficient γ dans l'expression (6.1) est issu d'études expérimentales : les

¹à l'exception des paramètres gouvernant la dépendance en température

exposants γ spécifiques aux mobilités des porteurs dans Si et Ge proviennent des références [68] et [124], respectivement.

6.1.2 Dépendance en dopage

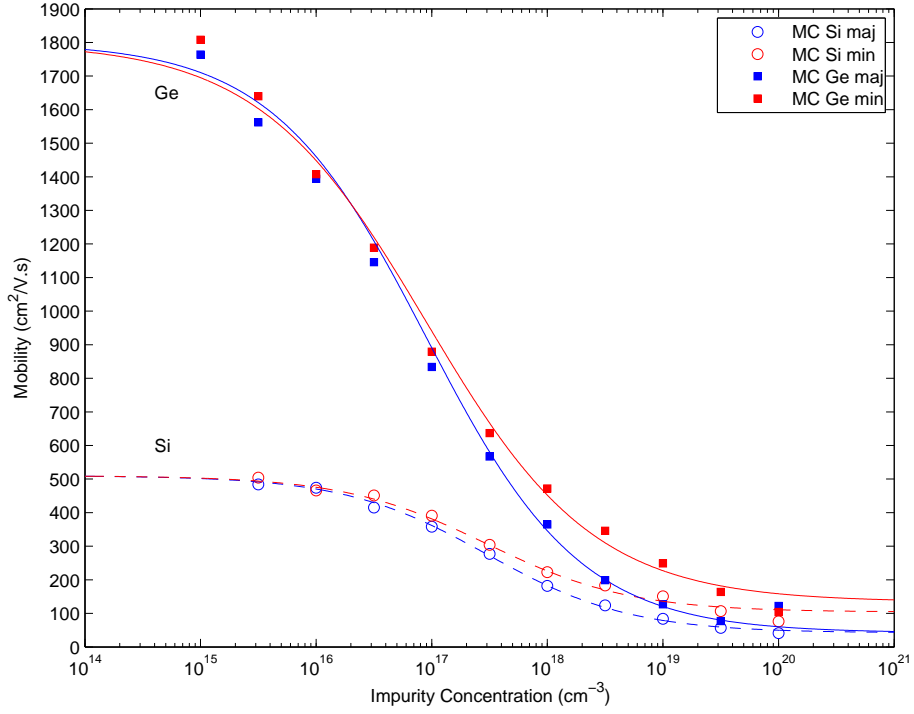


FIG. 6.1: Dépendance en dopage du modèle analytique de mobilité des trous dans le silicium et le germanium. Le modèle analytique (courbes) est ajusté sur les résultats Monte Carlo (symboles). Les lignes et symboles bleus (resp. rouges) sont relatifs aux mobilités des trous majoritaires (resp. minoritaires).

La dépendance en dopage de la mobilité est décrite par une formule de Caughey-Thomas [125, 127, 128]. Afin de découpler les effets des dopants donneurs et accepteurs, le formalisme de Caughey-Thomas est étendu aux 2 types de dopants selon la méthode proposée par Reggiani *et al.* [129, 130] :

$$\mu(N_A, N_D, T) = \mu_S + \frac{\mu_L \left(\frac{T}{300}\right)^{-\gamma} - \mu_S}{1 + \left(\frac{N_A}{C_a}\right)^{\alpha_a} + \left(\frac{N_D}{C_d}\right)^{\alpha_d}} \quad (6.2)$$

avec

$$\mu_S = \frac{\mu_a N_A + \mu_d N_D}{N_A + N_D} \quad (6.3)$$

Le terme μ_S explicité dans l'équation (6.3) désigne la mobilité de saturation, c'est-à-dire la valeur limite minimale de la mobilité aux fortes concentrations dopantes. Les paramètres quantifiant les dépendances en dopage donneur et

dopage accepteur du modèle de mobilité (6.2) sont calibrés indépendamment sur les résultats de simulation MC (cf. Fig. 6.1) :

1. Les paramètres C_a , α_a et μ_a spécifient les effets du dopage accepteur ;
2. Les paramètres C_d , α_d et μ_d décrivent les effets du dopage donneur.

La technique de calibration employée consiste à déterminer la combinaison des paramètres minimisant la moyenne quadratique de l'écart entre le modèle analytique (6.2) et les simulations de référence [43].

6.1.3 Dépendance en taux de germanium et carbone

L'équation (6.2) décrit la variation de la mobilité des porteurs dans un matériau semiconducteur dopé. Ce formalisme est donc adapté à la modélisation de la mobilité dans le silicium et le germanium massifs. Dans les alliages $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$, les différentes contributions à la mobilité sont combinées selon la loi de Matthiessen :

$$\frac{1}{\mu(x, y, N_A, N_D, T)} = \frac{1-x}{\mu^{Si}} + \frac{x}{\mu^{Ge}} + \frac{x(1-x)}{C_x^0 + xC_x^1 + x^2C_x^2} + \frac{y(1-y)}{C_y} - \frac{xy}{C_{xy}} \quad (6.4)$$

L'expression (6.4) est l'extension du formalisme de la Ref. [131] spécifique aux alliages binaires SiGe, au cas plus général des alliages ternaires SiGeC où le carbone est introduit en proportions minoritaires. Dans (6.4), les mobilités μ^{Si} et μ^{Ge} sont calculées suivant la formule (6.2) en utilisant les paramètres respectifs du Si et du Ge. Les dépendances en température, dopage accepteur et dopage donneur dans (6.4) sont donc implicitement contenues dans les termes de mobilité μ^{Si} et μ^{Ge} . Les paramètres de courbure² C_x^i , C_y et C_{xy} modélisent la dégradation de la mobilité due à la diffusion sur potentiel d'alliage. Ces paramètres sont calibrés sur les résultats de simulation MC pour la mobilité dans les alliages intrinsèques relaxés :

1. Les paramètres C_x^0 , C_x^1 et C_x^2 sont ajustés sur la mobilité relaxée dans $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (cf. Fig. 6.2a) ;
2. Le paramètre C_y est réglé sur la mobilité relaxée dans $\text{Si}_{1-y}\text{C}_y$ (cf. Fig. 6.2b) ;
3. Une fois que les paramètres C_x^i et C_y sont fixés, C_{xy} est finalement calibré sur la mobilité relaxée dans $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ (cf. Fig. 6.2c et 6.2d).

6.1.4 Modélisation des effets de la contrainte biaxiale

A ce stade du développement du modèle analytique, le formalisme (6.4) est capable de reproduire la mobilité des porteurs de charge dans les alliages ternaires SiGeC dopés non-contraints. Lorsque la couche de $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ est déformée biaxialement sur un substrat massif de silicium (cf. § 4.1.3), la mobilité devient une propriété anisotrope quantifiée par un tenseur [27, 132] :

$$[\mu] = \begin{bmatrix} \mu_{\parallel} & 0 & 0 \\ 0 & \mu_{\parallel} & 0 \\ 0 & 0 & \mu_{\perp} \end{bmatrix} \quad (6.5)$$

² *bowing parameters* en Anglais

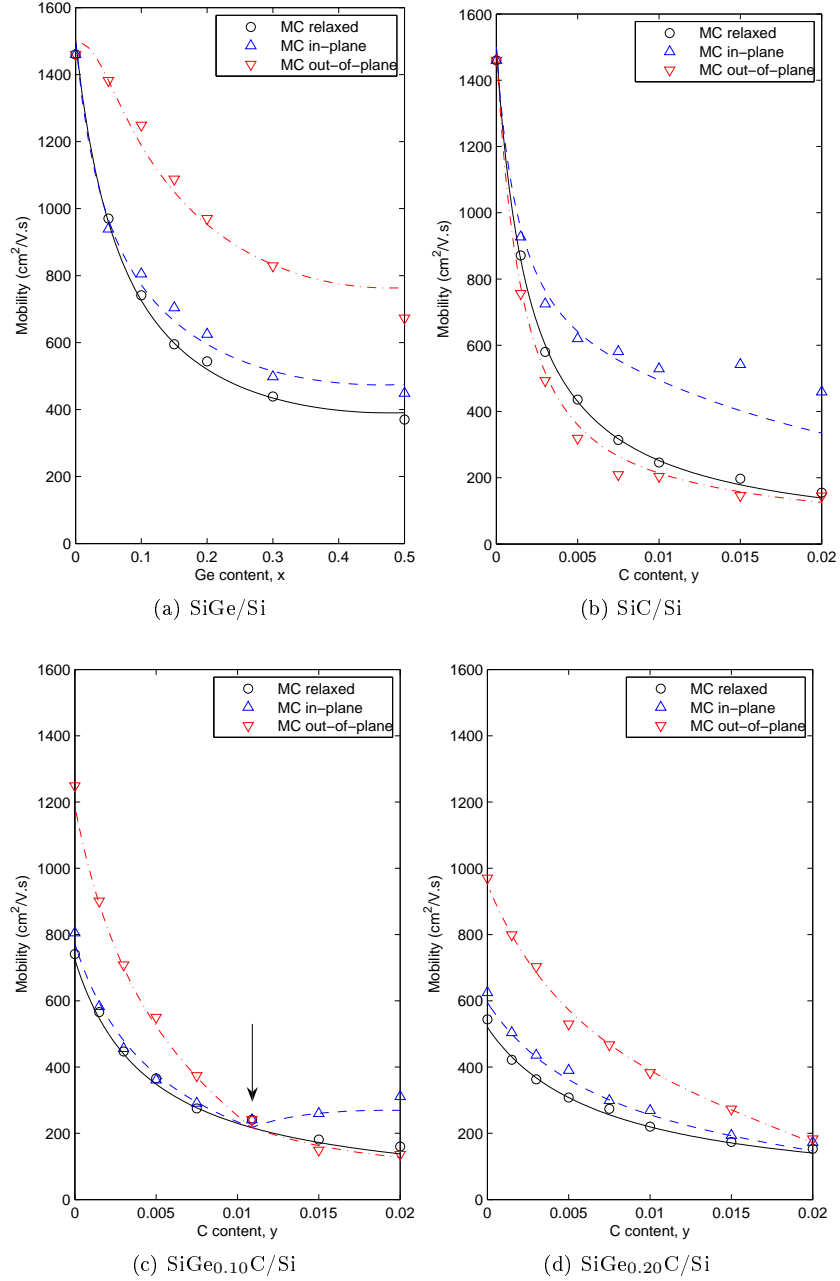


FIG. 6.2: Dépendance en taux de germanium et carbone du modèle analytique de mobilité des électrons dans les alliages binaires SiGe (Fig. 6.2a), SiC (Fig. 6.2b) et ternaires SiGeC (Fig. 6.2c et 6.2d). Lorsque les alliages sont contraints sur Si, la déformation biaxiale induit l'anisotropie du tenseur de mobilité. Le modèle analytique (courbes) est ajusté sur les résultats Monte Carlo (symboles).

Si un seul scalaire suffisait à définir la mobilité isotrope, 2 composantes scalaires sont nécessaires pour caractériser le tenseur biaxial de mobilité (6.5) :

- μ_{\parallel} désigne la composante de mobilité longitudinale³ ;
- μ_{\perp} désigne la composante de mobilité transverse⁴.

La prise en compte des effets de la contrainte au sein d'un modèle analytique de mobilité induit par conséquent la nécessité de distinguer les 2 composantes du tenseur de mobilité.

Afin de modéliser l'amplitude de la déformation biaxiale, un paramètre de compensation de la contrainte noté z est introduit. Ce paramètre doit s'annuler pour les compositions (x, y) particulières où la couche de $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ est mécaniquement compensée. On peut résoudre numériquement l'équation de compensation de la contrainte, définie par :

$$a(x, y) = a_{\text{Si}} = a(0, 0) \quad (6.6)$$

où le paramètre de maille de l'alliage $a(x, y)$ est calculé selon la formule (4.5). L'ensemble des points (x, y) de l'espace des compositions qui sont solutions de l'équation de compensation (6.6) sont alignés selon une courbe de type $y = f(x)$. L'utilisation d'une formule analytique quadratique ajustée sur l'ensemble des points de compensation (x, y) permet d'obtenir une équation qui formule explicitement la condition de compensation de la contrainte :

$$y = 0,1071x + 0,0163x^2 \quad (6.7)$$

Le paramètre de compensation z est alors dérivé de l'équation quadratique de compensation (6.7), selon :

$$z = y - 0,1071x - 0,0163x^2 \quad (6.8)$$

L'indice z défini selon (6.8) sera donc positif (resp. négatif) quand la couche de SiGeC est contrainte en tension (resp. compression) sur Si ; il s'annule lorsque l'alliage est exactement compensé. L'indice z peut être considéré comme la fraction molaire effective en carbone, c'est-à-dire la fraction molaire y non-compensée : dans les alliages binaires $\text{Si}_{1-y}\text{C}_y$, il n'y a pas de compensation possible, et $z = y$.

La modélisation de l'action de la contrainte biaxiale sur le tenseur de mobilité s'articule autour de 2 effets :

1. la dépendance en contrainte de la mobilité limitée par les phonons à 300 K, et
2. la diminution de l'action diffusive du potentiel d'alliage induite par la réduction de la densité d'états $\mathcal{D}(E)$ à basse énergie.

Dans le formalisme (6.4), seule la mobilité du silicium, notée μ^{Si} , intègre une dépendance en contrainte. Une modélisation équivalente du terme de mobilité du germanium μ^{Ge} résulterait dans une augmentation drastique du nombre de paramètres employés dans le modèle (6.4). En outre, la contribution du terme inverse x/μ^{Ge} à la mobilité totale est mineure dans le domaine des compositions considérées ($x \leq 50\%$). Par conséquent, il n'est pas nécessaire de complexifier la description de ce terme, et il est préférable de restreindre l'inclusion de la

³ *in-plane mobility* en Anglais

⁴ *out-of-plane mobility* en Anglais

CHAPITRE 6. PARAMÈTRES MATÉRIAU & MODÈLES ANALYTIQUES

	μ_L cm ² /Vs	γ	μ_a cm ² /Vs	μ_d cm ² /Vs	C_a cm ⁻³	C_d cm ⁻³	α_a	α_d
Si	–	2,4	240	65	9,0e16	8,5e16	0,78	0,75
Ge	3500	1,6	450	100	1,0e17	6,0e16	0,70	0,80
		C_x^0	C_x^1	C_x^2	C_y	C_{xy}		cm ² /Vs
		120	0	0	3,0	3,0		
			μ_{ts} cm ² /Vs	μ_{cs} cm ² /Vs	z_0	β	z_1	χ
μ_{\parallel}	$z > 0$		3000	1400	0,009	300	0,01	2,7
	$z < 0$						0,01	1,3
μ_{\perp}	$z > 0$		700	2300	0,000	400	0,01	1,0
	$z < 0$						0,01	2,2

TAB. 6.1: Paramètres pour le modèle analytique de mobilité des électrons dans les alliages SiGeC contraints sur Si.

dépendance en contrainte aux termes dominants de la somme (6.4).

Pour les électrons, l'effet de la contrainte biaxiale sur la composante transverse de la mobilité limitée par les phonons est décrite par une fonction de z de type :

$$\mu_L^{\perp}(z) = \mu_{ts}^{\perp} + \frac{\mu_{cs}^{\perp} - \mu_{ts}^{\perp}}{1 + \exp[(z - z_0^{\perp})\beta^{\perp}]} \quad (6.9)$$

La mobilité longitudinale μ_{\parallel} est décrite par le même formalisme, mais utilise un jeu de paramètres spécifiques (μ_{ts}^{\parallel} , μ_{cs}^{\parallel} , z_0^{\parallel} et β^{\parallel} – cf. Tab. 6.1). La fonction (6.9) tend asymptotiquement vers μ_{ts} (resp. μ_{cs}) pour les déformations croissantes en tension (resp. compression). Ce formalisme analytique reproduit efficacement l'évolution des composantes du tenseur biaxial de la mobilité limitée par les phonons. Pour extraire les coefficients de la formule (6.9), nous simulons par méthode Monte Carlo les mobilités limitées par les phonons dans SiGeC contraint, en désactivant les interactions sur potentiel d'alliage dans l'algorithme MC. Par cette méthode, la mobilité calculée est seulement limitée par les interactions électron-phonon.

Pour les trous, une simple fonction quadratique de z permet de modéliser l'augmentation des mobilités longitudinale et transverse induite par la levée de dégénérescence des bandes de valence :

$$\mu_L^{\perp}(z) = \mu_{rs} + \left(\frac{z}{z_0^{\perp}}\right)^2 \quad (6.10)$$

et la même formule est employée pour la composante longitudinale μ_{\parallel} , dotée d'un paramètre distinctif (z_0^{\parallel} – cf. Tab. 6.2).

La réduction du mécanisme de diffusion sur potentiel d'alliage, qui résulte de la diminution de la densité d'états à basse énergie induite par la contrainte biaxiale, est modélisée par l'introduction d'un facteur multiplicatif C_{χ} dépendant de z ,

6.1. MOBILITÉ À FAIBLE CHAMP

	μ_L cm ² /Vs	γ	μ_a cm ² /Vs	μ_d cm ² /Vs	C_a cm ⁻³	C_d cm ⁻³	α_a	α_d
Si	–	2,2	42	104	3,0e17	3,0e17	0,70	0,70
Ge	1800	2,3	42	134	9,0e16	9,0e16	0,65	0,60
		C_x^0	C_x^1	C_x^2	C_y	C_{xy}		cm ² /Vs
		60	70	170	3,4	3,0		
				μ_{rs} cm ² /Vs	z_0		z_1	χ
	μ_{\parallel}	$z > 0$			0,0010		0,05	2,1
		$z < 0$					0,05	2,1
			510				0,05	3,2
	μ_{\perp}	$z > 0$			0,0015		0,05	2,1
		$z < 0$					0,05	2,1

TAB. 6.2: Paramètres pour le modèle analytique de mobilité des trous dans les alliages SiGeC contraints sur Si.

selon :

$$C_{\chi}^{\perp}(z) = \chi^{\perp} - (\chi^{\perp} - 1) \times \exp\left(-\frac{|z|}{z_1^{\perp}}\right) \quad (6.11)$$

Lorsque l'indice de contrainte z est nul, la fonction (6.11) vaut 1 et le facteur multiplicatif n'est pas effectif. Lorsque la contrainte augmente en valeur absolue, le facteur (6.11) tend asymptotiquement vers la valeur limite χ . L'application de ce facteur permet d'augmenter les termes quantifiant la mobilité limitée par potentiel d'alliage lors de l'application d'une contrainte biaxiale. La fonction C_{χ} doit donc être introduite au dénominateur de l'expression (6.4). Les paramètres de la fonction C_{χ} (χ , z_1) prennent des valeurs différentes en fonction du type de porteur considéré, de la composante du tenseur de mobilité modélisée, et du signe de l'indice z (cf. Tab. 6.1 et 6.2). Ces paramètres sont calibrés sur les résultats MC pour les mobilités longitudinale et transverse dans les alliages $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ contraints (cf. Fig. 6.2a à 6.2d).

Le formalisme définitif pour les composantes du tenseur biaxial de mobilité dans les alliages ternaires $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ contraints sur Si s'écrit :

$$\frac{1}{\mu_{\perp}} = \frac{1-x}{\mu_{\perp}^{\text{Si}}} + \frac{x}{\mu^{\text{Ge}}} + \left[\frac{x(1-x)}{C_x^0 + xC_x^1 + x^2C_x^2} + \frac{y(1-y)}{C_y} - \frac{xy}{C_{xy}} \right] \frac{1}{C_{\chi}^{\perp}(z)} \quad (6.12)$$

pour le cas de la composante transverse. La description de la composante longitudinale est équivalente, et intègre les termes spécifiques $\mu_{\parallel}^{\text{Si}}$ et C_{χ}^{\parallel} . Le terme de mobilité dans Si μ_{\perp}^{Si} est calculé en utilisant l'expression (6.2), où le paramètre de mobilité intrinsèque à 300 K, noté μ_L , est défini par la fonction $\mu_L^{\perp}(z)$ explicitée dans (6.9) et (6.10). Le terme de mobilité dans Ge μ^{Ge} n'intègre pas de dépendance en z , il est calculé suivant l'expression (6.2) avec un paramètre de mobilité intrinsèque μ_L constant. L'aptitude du modèle analytique (6.12) à reproduire nos résultats Monte Carlo avec un nombre limité de paramètres, est illustré par les figures 6.2a à 6.2d. Le modèle de mobilité calibré décrit de façon

satisfaisante les effets combinés du germanium et du carbone dans l’alliage, à savoir :

1. la dégradation de la mobilité causée par la diffusion sur potentiel d’alliage ;
2. l’anisotropie du tenseur de mobilité induite par la contrainte biaxiale ;
3. la compensation de la contrainte, qui apparait lorsque les concentrations relatives en Ge et C satisfont la condition de compensation (6.7) (voir la flèche verticale dans la Fig. 6.2c).

Dans le but d’illustrer l’évolution de la mobilité dans $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ en fonction des variables x et y de l’espace des compositions, il est utile de calculer le ratio entre la mobilité dans l’alliage contraint, et la mobilité du silicium massif. En fonction de la composante du tenseur de mobilité considérée, 2 ratios peuvent être définis, selon :

$$R_{\perp} = \frac{\mu_{\perp}(x, y)}{\mu^{Si}} \quad (6.13)$$

pour le ratio transverse, et le ratio longitudinal R_{\parallel} peut être exprimé de façon équivalente.

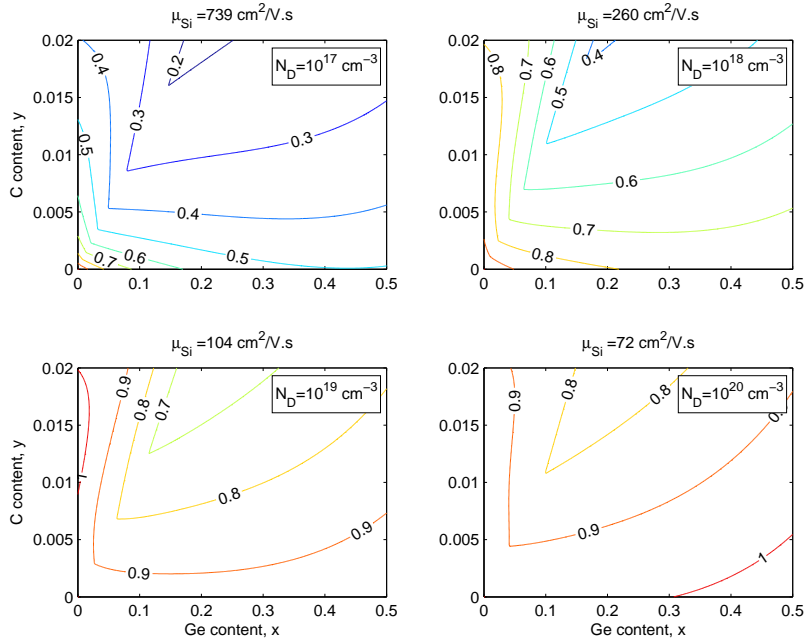
Les ratios de mobilité R_{\parallel} et R_{\perp} peuvent être utilisés pour identifier les régions de l’espace paramétrique (x, y) qui bénéficient d’une mobilité supérieure à celle du silicium. Ces régions, caractérisées par un ratio supérieur à l’unité, correspondent aux compositions particulières pour lesquelles les effets bénéfiques induits par la contrainte biaxiale dominent les effets diffusifs du potentiel d’alliage. Dans les figures 6.3a à 6.4b, nous affichons les ratios de mobilité R_{\parallel} et R_{\perp} calculés par la formule analytique (6.12), pour plusieurs concentrations dopantes. Ces figures illustrent les isolignes des ratios de mobilité dans l’espace des compositions (x, y) . Nous pouvons observer que les mobilités longitudinale et transverse des électrons dans les alliages SiGeC contraints sur Si sont toujours inférieures à la mobilité du silicium massif ($R_{\parallel}, R_{\perp} < 1$). En revanche, dans le cas de la mobilité des trous, les 2 tendances antagonistes de la contrainte biaxiale et du potentiel d’alliage peuvent résulter dans l’établissement d’une amélioration significative de la mobilité ($R_{\parallel}, R_{\perp} > 1$), en particulier quand la couche de SiGeC est soumise à une forte contrainte en compression.

6.2 Temps de relaxation de l’énergie

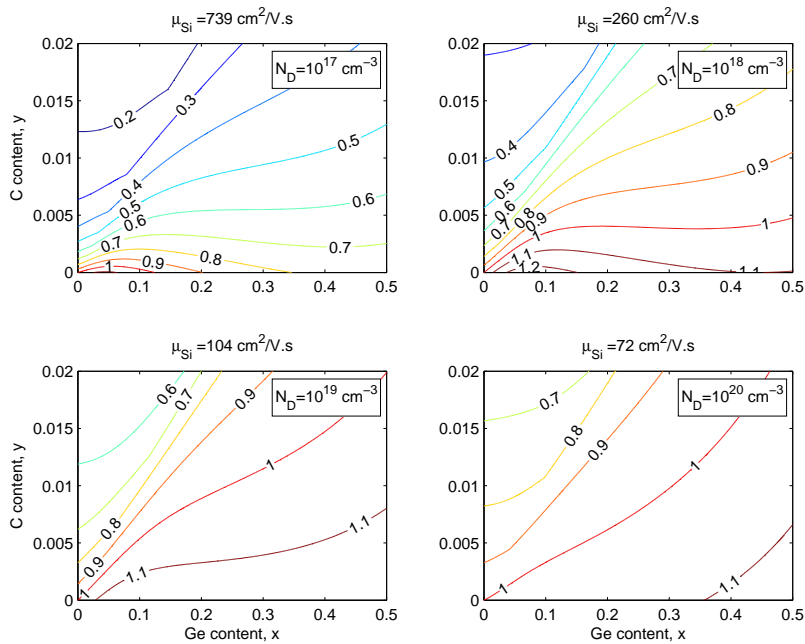
Le temps de relaxation de l’énergie, noté τ_e , est une caractéristique électrique du matériau qui quantifie la durée nécessaire à une population de porteurs excités pour retourner à l’équilibre thermodynamique. Ce temps de relaxation caractérise donc la capacité de la structure interne du matériau à dissiper l’énergie des porteurs de charge excités, via des interactions inélastiques de type porteur-phonon ou ionisation par choc. Ce paramètre constitue donc une propriété du transport des porteurs à hautes énergies.

Ce temps de relaxation peut être calculé par simulation Monte Carlo appliquée à un système homogène et stationnaire représentatif du matériau [133, 134, 135]. Dans l’optique de simuler le transport des charges à hautes énergies, il est nécessaire d’utiliser un algorithme Monte Carlo intégrant une description numérique de la structure de bande. Dans cette étude, le temps de relaxation de l’énergie des porteurs est extrait par l’emploi de la méthode indirecte reportée dans la

6.2. TEMPS DE RELAXATION DE L'ÉNERGIE

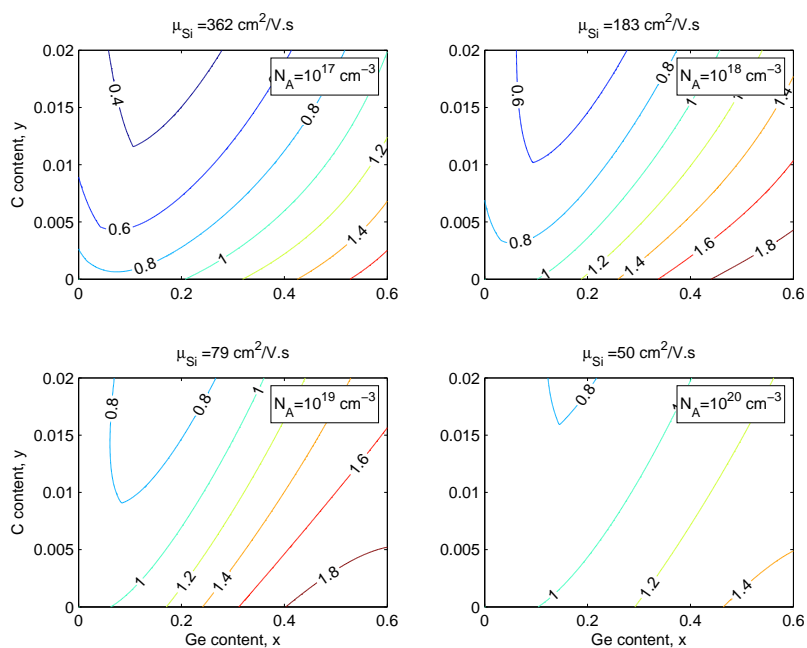


(a) μ_{\parallel}/μ^{Si}

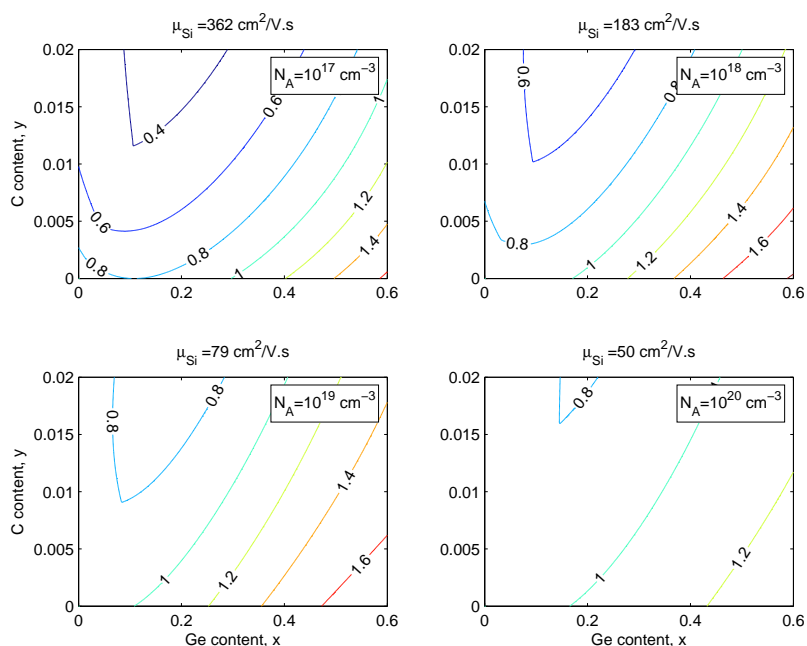


(b) μ_{\perp}/μ^{Si}

FIG. 6.3: Ratio entre la mobilité des électrons dans $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ biaxialement contraint sur Si, et la mobilité des électrons dans le silicium relaxé à 300 K. La mobilité longitudinale (resp. transverse) dans l'alliage contraint est illustrée par la Fig. 6.3a (resp. Fig. 6.3b). Les lignes de niveau du ratio sont tracées dans l'espace (x, y) pour plusieurs concentrations en dopants donneurs.



(a) $\mu_{\parallel} / \mu^{Si}$



(b) μ_{\perp} / μ^{Si}

FIG. 6.4: Ratio entre la mobilité des trous dans $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ biaxialement contraint sur Si, et la mobilité des trous dans le silicium relaxé à 300 K. La mobilité longitudinale (resp. transverse) dans l'alliage contraint est illustrée par la Fig. 6.4a (resp. Fig. 6.4b). Les lignes de niveau du ratio sont tracées dans l'espace (x, y) pour plusieurs concentrations en dopants accepteurs.

6.2. TEMPS DE RELAXATION DE L'ÉNERGIE

Porteur	τ_0 ps	τ_1 ps	C_0
e	0,38	0,04	0,18
h	0,36	0,13	0,10

TAB. 6.3: Paramètres pour le modèle analytique du temps de relaxation de l'énergie des porteurs dans les alliages SiGe.

Ref. [134]. La vitesse de dérive et l'énergie moyenne des porteurs sont calculées au cours de simulations Monte Carlo à champ constant. Dans le cas d'un matériau non-dégénéré, le temps de relaxation de l'énergie est déduit de ces 2 résultats, selon :

$$\tau_e = \frac{3k_B}{2e} \times \frac{T_C - T_L}{v_d F} \quad (6.14)$$

où F est le champ électrique appliqué, v_d est la vitesse de dérive de la distribution, T_L est la température du réseau cristallin et la température moyenne des porteurs T_C est directement corrélée à l'énergie moyenne via $\langle E \rangle = 3/2k_B T_C$.

En se basant sur les résultats Monte Carlo obtenus, nous développons, paramétrons et calibrons un modèle analytique pour le temps de relaxation des porteurs dans les alliages $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ massifs non-dégénérés. Il apparaît que le temps de relaxation τ_e peut être efficacement modélisé comme une fonction du ratio entre la température des porteurs T_C et la température du réseau T_L [134, 135], suivant :

$$\tau_e = (\tau_0 + \tau_1 x) \times \left[1 - \exp\left(-C_0 \frac{T_C}{T_L}\right) + \left(\frac{T_C}{T_L}\right)^{-1} \right] \quad (6.15)$$

Dans la formule (6.15), le paramètre τ_1 contrôle l'influence de la fraction molaire x en germanium. Les effets de la fraction molaire y et des concentrations dopantes sur les temps de relaxation simulés sont négligeables. En effet, ces espèces ne contribuent pas à la relaxation de l'énergie des porteurs, elles n'ont pas d'influence directe sur la constante de temps τ_e :

1. la concentration relative y en carbone contribue seulement à la diffusion des porteurs sur potentiel d'alliage, laquelle est un processus d'interaction strictement élastique ;
2. les centres dopants ionisés altèrent le transport des charges par l'intermédiaire des interactions porteur-impureté, qui sont des diffusions coulombiennes élastiques.

Les valeurs des paramètres du modèle (6.15) spécifiques aux 2 types de porteurs sont exposées dans la table 6.3.

Les figures 6.5a et 6.5b montrent les résultats Monte Carlo pour les temps de relaxation des électrons et des trous, respectivement. Figurent également dans ces graphes les courbes représentatives du modèle analytique (6.15). On peut constater que la modélisation analytique basée sur nos résultats de simulation améliore significativement la paramétrisation constante de τ_e usuellement implémentée dans les simulateurs hydrodynamiques de dispositifs.

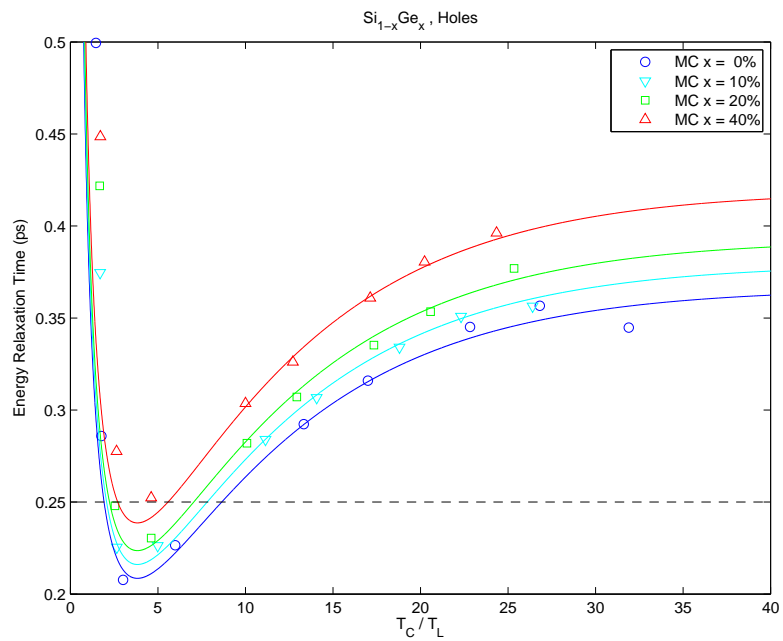
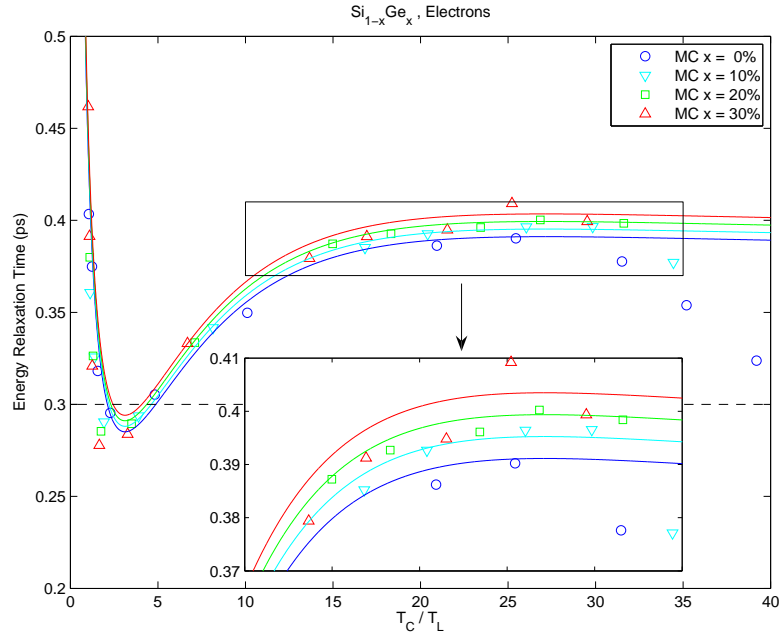


FIG. 6.5: Temps de relaxation de l'énergie des électrons (Fig. 6.5a) et des trous (Fig. 6.5b) dans SiGe, en fonction de la température des porteurs de charge. Les symboles représentent les simulations Monte Carlo, les lignes continues sont les modèles analytiques dérivés. Les lignes pointillées indiquent le paramètre constant utilisé par défaut dans le modèle hydrodynamique de Sentaurus Device [136].

6.3 Simulation d'un transistor bipolaire à hétérojonction

Dans la section précédente, nous avons développé des formules analytiques pour la modélisation des paramètres de transport dans les alliages SiGeC. Les propriétés électriques modélisées incluent notamment la mobilité à faible champ et le temps de relaxation de l'énergie. Les modèles analytiques développés sont ensuite implémentés dans un simulateur hydrodynamique de dispositifs. L'utilisation d'un simulateur hydrodynamique intégrant une description exacte des paramètres électriques, permet de modéliser le transport des charges dans les dispositifs HBT SiGeC en prenant en compte les profils de germanium, de carbone et de dopants.

6.3.1 Équations hydrodynamiques

L'outil de simulation utilisé est le simulateur HD de Sentaurus Device. L'approche hydrodynamique est caractérisée par la considération de la température des porteurs de charge (notée T_n pour les électrons, T_p pour les trous), qui est distincte de la température T du réseau cristallin lorsque l'état des porteurs s'éloigne de l'équilibre thermodynamique. La méthode numérique employée dans Sentaurus Device consiste à résoudre 3 équations couplées pour chaque type de porteur [136]. Pour les électrons, les équations de transport s'écrivent⁵ :

$$\frac{\partial W_n}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{S}_n = \vec{J}_n \cdot \nabla E_C + \left. \frac{dW_n}{dt} \right|_{\text{coll}} \quad (6.16)$$

$$\vec{S}_n = -\frac{5}{2} r_n \left(\frac{k_B T_n}{q} \vec{J}_n + f_n^{\text{hf}} \kappa_n \nabla T_n \right) \quad (6.17)$$

$$\vec{J}_n = q \mu_n \left(n \nabla E_C + k_B T_n \nabla n + f_n^{\text{td}} k_B n \nabla T_n - \frac{3}{2} n k_B T_n \nabla \ln m_n \right) \quad (6.18)$$

et les équations relatives aux trous sont similaires pour les quantités W_p , \vec{S}_p et \vec{J}_p . J_n désigne la densité de courant, S_n est le flux énergétique et W_n représente la densité énergétique. C'est dans ce système d'équations hydrodynamiques que les paramètres de transport sont pris en compte :

1. La mobilité des porteurs, notée μ_n pour les électrons, μ_p pour les trous, intervient dans l'équation (6.18) de la densité de courant, ainsi que dans l'expression (6.17) du flux énergétique via le terme κ_n , défini par :

$$\kappa_n = \frac{k_B^2}{q} n \mu_n T_n$$

2. Le temps de relaxation de l'énergie des porteurs, noté τ_{en} pour les électrons, τ_{ep} pour les trous, décrit la vitesse de relaxation par collision du terme W_n dans l'équation (6.16) :

$$\left. \frac{dW_n}{dt} \right|_{\text{coll}} = -H_n - \xi_n \frac{W_n - W_{n0}}{\tau_{en}}$$

⁵Le détail des notations employées dans (6.16), (6.17) et (6.18) est exhaustivement explicité dans la Ref. [136].

3. La bande interdite du matériau, notée E_g , est prise en compte dans l'équation différentielle de la densité énergétique par l'intermédiaire du potentiel électrostatique, noté E_C dans (6.16).

6.3.2 Résultats de simulation

Les performances électriques d'un transistor bipolaire à hétérojonction SiGeC de type NPN sont calculées par simulation hydrodynamique du transport des porteurs de charge. La structure du dispositif bipolaire NPN est exposée en figure 6.6. La base en SiGeC du transistor est composée par la superposition d'un dopage accepteur et de profils de Ge et C introduits localement entre 10 nm et 45 nm de profondeur (cf. Fig. 6.7). Dans le dispositif HBT étudié, la concentration relative x en Ge dans la base est globalement constante et de l'ordre de 25%, et la concentration relative y en C atteint une valeur maximale de l'ordre de 0,1% dans la même région.

Afin de mettre en évidence les effets induits par l'implémentation de nos modèles analytiques avancés sur les caractéristiques électriques du dispositif HBT modélisé, nous établissons un comparatif entre 2 séries de simulations hydrodynamiques, basées sur 2 modélisations distinctes des paramètres de transport :

1. Les modèles *par défaut* sont couramment utilisés dans la simulation TCAD. Ces modèles sont activés par défaut dans le simulateur hydrodynamique Sentauros Device, et sont spécifiques aux propriétés du silicium massif⁶ :
 - La mobilité à faible champ des porteurs est décrite par le formalisme de Klaassen [126, 128]. Ce modèle décrit la mobilité isotrope des porteurs dans le silicium massif comme une fonction de la température du réseau et du dopage. Les influences respectives des concentrations en donneurs et en accepteurs sont différemment paramétrées pour distinguer le transport des porteurs majoritaires et minoritaires.
 - Le temps de relaxation de l'énergie des porteurs est implémenté comme un paramètre constant caractéristique du silicium. Par défaut, ce temps de relaxation constant est fixé à 0,3 ps pour les électrons et à 0,25 ps pour les trous [136] (cf. Fig. 6.5a et 6.5b).
 - La bande interdite est modélisée par la formule de Bean [137], qui décrit la variation de la bande interdite dans les alliages $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ pseudomorphiquement contraints sur substrat massif de silicium :

$$E_g(x, T) = E_{g,0} - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} + c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3 \quad (6.19)$$

où le terme $E_{g,0}$ correspond à la bande interdite du silicium massif à 0 K. Les paramètres de la formule analytique (6.19) sont reportés dans le tableau 6.4.

2. Les modèles *avancés* sont ceux qui ont été développés dans le cadre de la présente thèse, et qui sont explicités dans les sections § 6.1 et § 6.2. Ces modèles caractérisent les propriétés électriques des alliages ternaires SiGeC biaxialement contraints sur substrat massif de silicium.
 - La mobilité à faible champ des porteurs est calculée par le formalisme anisotrope (6.12), employant les paramètres des tables 6.1 et 6.2.

⁶à l'exception du modèle de bande interdite intégrant une dépendance en fraction molaire x

6.3. SIMULATION D'UN TRANSISTOR BIPOLAIRE À HÉTÉROJONCTION

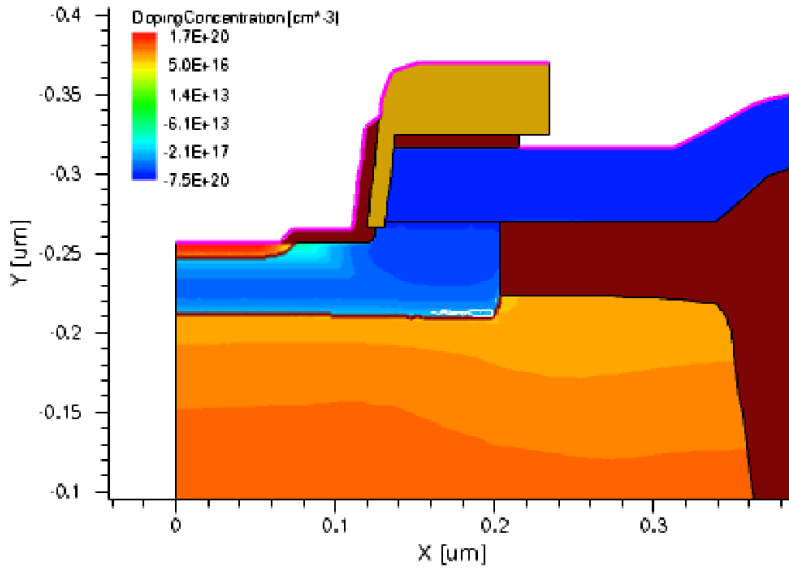


FIG. 6.6: Structure 2D d'un dispositif HBT de type NPN.

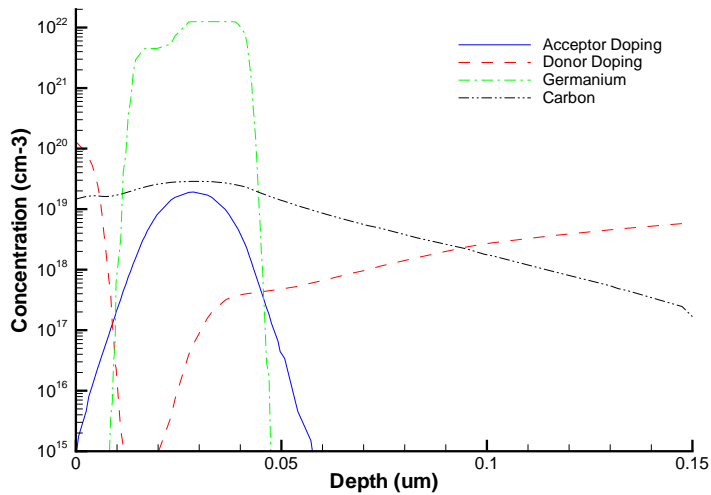


FIG. 6.7: Profils verticaux de germanium, carbone, dopants donneurs et dopants accepteurs dans un dispositif HBT SiGeC de type NPN. Les profils sont issus d'une simulation de diffusion.

Paramètre	Valeur	Unité	Référence
$E_{g,0}$	1,16964	eV	[136]
α	$4,73 \times 10^{-4}$	eV/K	[136]
β	636	K	[136]
c_1	-0,96	eV	[137]
c_2	0,43	eV	[137]
c_3	-0,17	eV	[137]
c_4	3,40	eV	[138]

TAB. 6.4: Paramètres pour le modèle analytique de bande interdite dans les alliages SiGeC contraints en compression sur Si.

- Le temps de relaxation de l'énergie des porteurs est formulé suivant l'expression (6.15), avec les paramètres de la table 6.3.
- La bande interdite est modélisée en étendant la formule (6.19), relative à SiGe contraint sur Si, au cas plus général des alliages SiGeC contraints en compression sur Si. L'effet supplémentaire de la fraction molaire en C sur la bande interdite est traduit par l'addition d'un terme linéaire en y [138] :

$$E_g(x, y, T) = E_{g,0} - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} + c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3 + c_4 y \quad (6.20)$$

Pour les 2 séries de simulation, le phénomène de rétrécissement de la bande interdite⁷ induit par les fortes concentrations dopantes, est pris en compte suivant le modèle empirique de Slotboom [139]. La variation négative ΔE_g de l'amplitude de la bande interdite est exprimée en fonction de la concentration dopante totale N , selon :

$$\Delta E_g(N) = E_{\text{ref}} \left[\ln \left(\frac{N}{N_{\text{ref}}} \right) + \sqrt{\ln^2 \left(\frac{N}{N_{\text{ref}}} \right) + 0,5} \right] \quad (6.21)$$

Dans (6.21), les valeurs assignées aux paramètres E_{ref} et N_{ref} sont tabulées dans la Ref. [136]. La bande interdite effective $E_{g,\text{eff}}$ prise en compte dans les équations hydrodynamiques s'obtient finalement suivant :

$$E_{g,\text{eff}}(x, y, N, T) = E_g(x, y, T) - \Delta E_g(N) \quad (6.22)$$

où la bande interdite intrinsèque E_g a été définie dans (6.19) pour le modèle par défaut, et dans (6.20) pour le modèle avancé.

Les caractéristiques électriques du dispositif HBT SiGeC NPN modélisé sont simulées par méthode hydrodynamique, pour les 2 ensembles de paramètres de transport spécifiés ci-dessus. Les résultats des simulations électriques sont exposés dans les figures 6.8, 6.9a et 6.9b. La figure 6.8 représente le tracé de la fréquence de transition f_T en fonction du courant collecteur I_C , tandis que les caractéristiques statiques du transistor figurent dans les graphes 6.9a et 6.9b. On peut constater que les effets liés à l'implémentation des modèles avancés des paramètres de transport sont multiples et significatifs. On observe notamment une

⁷ *Band Gap Narrowing (BGN)* en Anglais

6.3. SIMULATION D'UN TRANSISTOR BIPOLAIRE À HÉTÉROJONCTION

augmentation de 5% de la fréquence de transition maximale (cf. Fig. 6.8), ainsi qu'un important accroissement du courant de base I_B à fort V_{CE} (cf. Fig. 6.9b).

Nos modèles avancés pour les paramètres de transport nous permettent donc de prendre en compte l'influence des profils de germanium et de carbone sur les caractéristiques électriques des dispositifs HBT SiGeC. Nos résultats de simulation hydrodynamique indiquent que l'utilisation des modèles de transport standard, généralement spécifiques au silicium massif, induit des erreurs significatives sur plusieurs caractéristiques électriques du transistor bipolaire. L'emploi de nos modèles de transport avancés pour la simulation TCAD de dispositifs HBT SiGeC devrait permettre de mieux comprendre le transport des charges dans la structure, et par conséquent aider à l'optimisation de la structure du dispositif, dans l'optique d'en améliorer les performances.

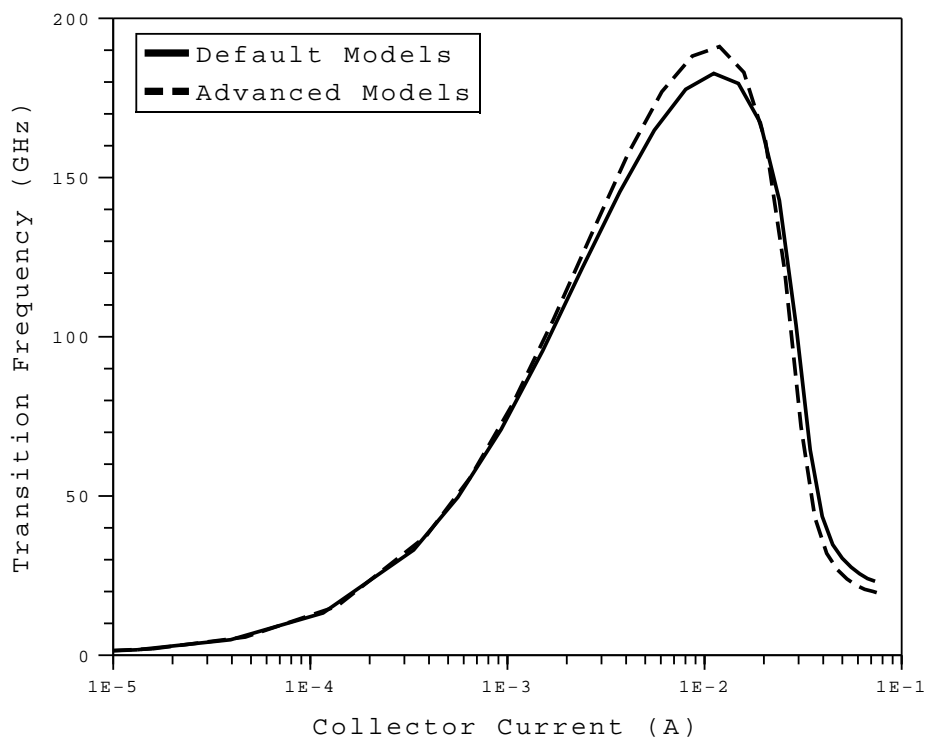
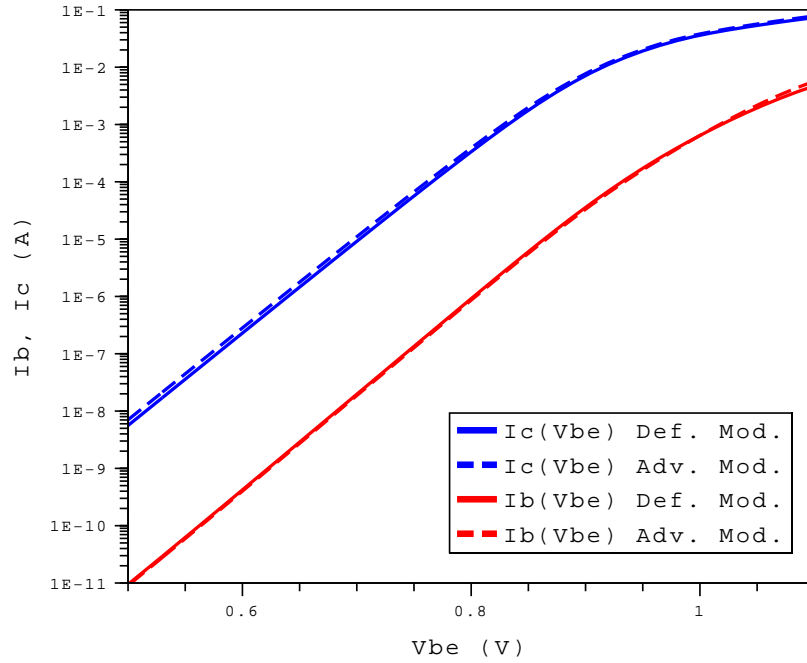
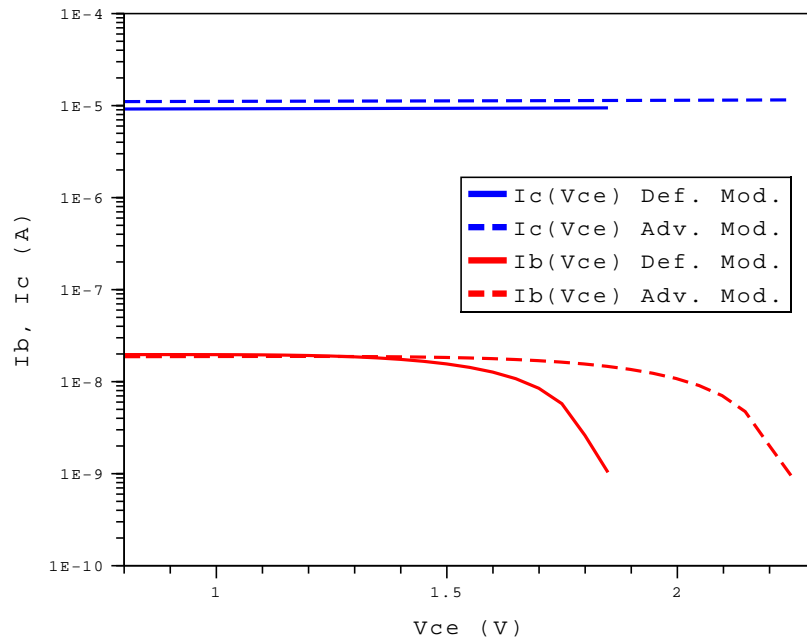


FIG. 6.8: Fréquence de transition en fonction du courant collecteur. La tension collecteur-émetteur est fixée à $V_{CE} = 1V$. Le comportement électrique des modèles standard (ligne continue) est comparé à celui des modèles avancés (ligne pointillée).



(a) I_B, I_C vs. V_{BE}



(b) I_B, I_C vs. V_{CE}

FIG. 6.9: Caractéristiques électriques statiques. Le comportement électrique des modèles standard (lignes continues) est comparé à celui des modèles avancés (lignes pointillées).

Conclusion

Dans cette étude, la méthode Monte Carlo a été appliquée à la simulation des propriétés électroniques des alliages ternaires SiGeC. En partant de la description théorique du transport dans les principaux composants (silicium et germanium) de l'alliage SiGeC, plusieurs modèles additionnels ont été successivement implémentés pour modéliser les effets induits par l'alliage, le dopage et la contrainte sur le transport. Les résultats de simulation ont été comparés à de nombreuses références expérimentales. L'accord obtenu entre nos résultats théoriques et les diverses données expérimentales illustre l'aptitude de nos modèles physiques à reproduire le comportement électronique du matériau. L'algorithme Monte Carlo ainsi développé est capable de simuler de façon prédictive les spécificités du transport des porteurs dans les alliages ternaires SiGeC dopés et contraints sur substrat silicium. Il est donc particulièrement adapté à l'extraction des paramètres électriques requis dans la simulation hydrodynamique des transistors bipolaires à hétérojonction intégrant des bases de SiGeC.

La modélisation par méthode Monte Carlo du transport des charges en milieu homogène, appliquée aux semiconducteurs covalents de la colonne IV, constitue toujours à l'heure actuelle un champ théorique à investiguer. Les travaux exposés dans cette thèse ont mis en évidence plusieurs lacunes dans la compréhension théorique des propriétés de transport de ces matériaux. En particulier, l'absence de modèle standard pour les probabilités totales d'interaction électron- et trou-phonon dans le germanium massif représente un obstacle à la connaissance précise du transport des charges à hautes énergies dans ce matériau. L'établissement d'un modèle standard dans le germanium nécessite notamment une investigation expérimentale spécifiquement menée à hautes énergies, afin de mesurer l'efficacité quantique propre à ce matériau.

Concernant la modélisation des alliages ternaires SiGeC présentée dans cette étude, une description plus exacte de la dispersion doit inclure l'influence intrinsèque du carbone sur la structure de bande de l'alliage. De plus, une modélisation non-approximée des intégrales de recouvrement, cohérente avec la structure de bande numérique, devrait améliorer la description de la dynamique des porteurs de charge, particulièrement à hautes énergies. Enfin, à notre connaissance l'ionisation par choc dans les alliages SiGe et SiGeC n'a pas été mesurée ou caractérisée. Cet état de fait explique que les probabilités d'ionisation par choc des porteurs soient toujours indéterminées dans ces alliages. Une détermination expérimentale indirecte, ou théorique par l'emploi de techniques *ab initio*, des probabilités d'ionisation des électrons et des trous dans ces alliages, devrait permettre l'implémentation de modèles d'ionisation par choc plus physiques que le formalisme approximatif utilisé dans cette étude.

Nos résultats de simulation Monte Carlo ont été utilisés pour dériver les paramètres de transport spécifiques aux alliages SiGeC, requis dans le simulateur hydrodynamique Sentauros Device. L'implémentation de ces paramètres matériau nous ont permis de prendre en compte les profils de germanium, de carbone et de dopants dans les simulations électriques de dispositifs HBT. Cette description rigoureuse de l'interaction des porteurs de charge avec l'alliage ternaire SiGeC au sein d'un dispositif HBT constitue l'état de l'art de la modélisation électrique des transistors bipolaires avancés.

A moyen terme, la réduction progressive des dimensions des transistors bipolaires va s'accompagner de phénomènes physiques complexes, dont l'influence sur le transport des porteurs de charge va devenir de plus en plus prépondérante. On peut notamment mentionner :

- le transport quasi-balistique, qui apparaît lorsque les dimensions du dispositif sont de l'ordre du libre parcours moyen des particules ;
- le transport hors d'équilibre, qui s'établit lorsque les porteurs libres sont soumis à des champs électriques forts ;
- les effets quantiques, induits par la réduction de l'épaisseur des couches actives (celle de la base, dans le cas particulier du HBT).

L'importance de ces effets rend nécessaire leur prise en compte dans les modèles numériques. A ce titre, l'utilisation de modèles de type dérive-diffusion ou hydrodynamique, couplés à des paramètres électriques caractérisant des matériaux massifs, est une méthodologie de simulation probablement non-applicable aux futurs dispositifs HBT. La simulation rigoureuse du transport des charges dans ces structures nécessitera vraisemblablement la mise en place d'une modélisation Monte Carlo appliquée au dispositif. Les algorithmes Monte Carlo employés dans le cadre d'activités d'ingénierie du dispositif devront être spécifiquement optimisés, afin de réduire les délais de convergence affectant ces méthodes de calcul.

Publications de l'auteur

- [1] Marc Michailat, Denis Rideau, Frédéric Aniel, Clément Tavernier, and Hervé Jaouen, *Monte Carlo-Based Analytical Models for Electron and Hole Electrical Parameters in Strained SiGeC Alloys*, Simulation of Semiconductor Processes and Devices 2009, Sep. 2009, pp. 55–58.
- [2] Marc Michailat, Denis Rideau, Frédéric Aniel, Clément Tavernier, and Hervé Jaouen, *Monte Carlo simulation of high-energy transport of electrons and holes in bulk SiGeC alloys*, J. Phys.: Conf. Ser. **193** (Nov. 2009), no. 012037.
- [3] Marc Michailat, Denis Rideau, Frédéric Aniel, Clément Tavernier, and Hervé Jaouen, *Full-Band Monte Carlo investigation of hole mobilities in SiGe, SiC and SiGeC alloys*, Thin Solid Films **518** (Feb. 2010), no. 9, 2437–2441.
- [4] Eloy Ramirez-Garcia, Marc Michailat, Nicolas Zerounian, Paul Crozat, Pascal Chevalier, Alain Chantre, and Frédéric Aniel, *Etude expérimentale et modélisation de TBH SiGe*, 16^{èmes} Journées Nationales Microondes, May 2009.
- [5] Eloy Ramirez-Garcia, Marc Michailat, Frédéric Aniel, Nicolas Zerounian, Mauro Enciso-Aguilar, and Denis Rideau, *Hydrodynamic modeling of SiGe:C HBT based on Full-Band Monte Carlo minority and majority carrier transport parameters*, Solid-State Electron., submitted for publication.
- [6] Denis Rideau, Maxime Feraille, Marc Michailat, Clément Tavernier, and Hervé Jaouen, *Transport masses in strained silicon MOSFETs with different channel orientations*, Simulation of Semiconductor Processes and Devices 2008, Sep. 2008, pp. 105–108.

CHAPITRE 6. PARAMÈTRES MATÉRIAU & MODÈLES ANALYTIQUES

Références bibliographiques

- [1] A. Pawlak, M. Schröter, and J. Krause, *On the feasibility of 500 GHz Silicon-Germanium HBTs*, Simulation of Semiconductor Processes and Devices 2009, Sep. 2009, pp. 27–30.
- [2] C. Jacoboni and L. Reggiani, *The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials*, Rev. Mod. Phys. **55** (July 1983), no. 3, 645–705.
- [3] T. Kunikiyo, M. Takenaka, and Y. Kamakura, *A Monte Carlo simulation of anisotropic electron transport in silicon including full band structure and anisotropic impact-ionization model*, J. Appl. Phys. **75** (Jan. 1994), no. 1, 297–312.
- [4] H. Brooks, *Scattering by Ionized Impurities in Semiconductors*, Phys. Rev. **83** (1951), 879–879.
- [5] H. Shichijo, K. Hess, and G. E. Stillman, *Simulation of high-field transport in GaAs using a Monte Carlo method and pseudopotential band structures*, Appl. Phys. Lett. **38** (Jan. 1981), no. 2, 89–91.
- [6] J. Y. Tang and K. Hess, *Impact ionization of electrons in silicon (steady state)*, J. Appl. Phys. **54** (Sep. 1983), no. 9, 5139–5144.
- [7] J. Y. Tang and K. Hess, *Theory of hot electron emission from silicon into silicon dioxide*, J. Appl. Phys. **54** (Sep. 1983), no. 9, 5145–5151.
- [8] M. V. Fischetti and S. E. Laux, *Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space-charge effects*, Phys. Rev. B **38** (Nov. 1988), no. 14, 9721–9745.
- [9] L. V. Keldysh, *Concerning the Theory of Impact Ionization in Semiconductors*, Sov. Phys. JETP **21** (Dec. 1965), 1135–1144.
- [10] T. Yamada and D. K. Ferry, *Monte Carlo simulation of hole transport in strained $Si_{1-x}Ge_x$* , Solid-State Electron. **38** (Apr. 1995), no. 4, 881–890.
- [11] M. V. Fischetti, *The Golden Age of Hot Electrons : Full-Band Monte Carlo Simulations of Electron Transport in Si and the Density-of-States Ansatz*, Karl Hess Symposium, May 2006. www.ece.illinois.edu/hess-symposium/presentations/Fischetti.pdf.
- [12] E. Cartier, M. V. Fischetti, and E. A. Eklund, *Impact ionization in silicon*, Appl. Phys. Lett. **62** (June 1993), no. 25, 3339–3341.
- [13] N. Sano and A. Yoshii, *Impact-ionization theory consistent with a realistic band structure of silicon*, Phys. Rev. B **45** (Feb. 1992), no. 8, 4171–4180.
- [14] J. D. Bude, K. Hess, and G. J. Iafrate, *Impact ionization : beyond the Golden Rule*, Semicond. Sci. Technol. **7** (Mar. 1992), no. 3B, B506–B508.
- [15] Y. Kamakura, H. Mizuno, and M. Yamaji, *Impact ionization model for full band Monte Carlo simulation*, J. Appl. Phys. **75** (Apr. 1994), no. 7, 3500–3506.
- [16] M. V. Fischetti, *Monte Carlo Simulation of Transport in Technologically Significant Semiconductors of the Diamond and Zinc-Blende Structures — Part I : Homogeneous Transport*, IEEE Trans. Electron Devices **38** (Mar. 1991), no. 3, 634–649.
- [17] S. Jallepalli, M. Rashed, and W.-K. Shih, *A full-band Monte Carlo model for hole transport in silicon*, J. Appl. Phys. **81** (Mar. 1997), no. 5, 2250–2255.
- [18] Y. Kamakura, I. Kawashima, and K. Degushi, *Monte Carlo Simulation of Quantum Yields Exceeding Unity as a Probe of High-Energy Hole Scattering Rates in Si*, International Electron Devices Meeting 1999, Dec. 1999, pp. 727–730.

- [19] M. V. Fischetti, N. Sano, and S. E. Laux, *Full-Band Monte Carlo Simulation of High-Energy Transport and Impact Ionization of Electrons and Holes in Ge, Si, and GaAs*, Simulation of Semiconductor Processes and Devices 1996, Sep. 1996, pp. 43–44.
- [20] T. Kunikiyo, M. Takenaka, and M. Morifuji, *A model of impact ionization due to the primary hole in silicon for a full band Monte Carlo simulation*, J. Appl. Phys. **79** (May 1996), no. 10, 7718–7725.
- [21] N. Sano, M. V. Fischetti, and S. E. Laux, *Hole-Initiated Impact Ionization and Split-off Band in Ge, Si, GaAs, InAs, and InGaAs*, 6th International Workshop on Computational Electronics, Oct. 1998, pp. 198–201.
- [22] P. D. Yoder and K. Hess, *First-principles Monte Carlo simulation of transport in Si*, Semicond. Sci. Technol. **9** (May 1994), no. 5S, 852–854.
- [23] P. H. Nguyen, K. R. Hofmann, and G. Paasch, *Full-band Monte Carlo model with screened pseudopotential based phonon scattering rates for a lattice with basis*, J. Appl. Phys. **92** (Nov. 2002), no. 9, 5359–5370.
- [24] P. H. Nguyen, K. R. Hofmann, and G. Paasch, *Comparative full-band Monte Carlo study of Si and Ge with screened pseudopotential-based phonon scattering rates*, J. Appl. Phys. **94** (July 2003), no. 1, 375–386.
- [25] B. Ghosh, X. Wang, and X.-F. Fan, *Monte Carlo Study of Germanium n- and pMOS-FETs*, IEEE Trans. Electron Devices **52** (2005), no. 4, 547–553.
- [26] L. E. Kay and T.-W. Tang, *Monte Carlo calculation of strained and unstrained electron mobilities in $Si_{1-x}Ge_x$ using an improved ionized-impurity model*, J. Appl. Phys. **70** (Aug. 1991), no. 3, 1483–1488.
- [27] F. M. Bufler, P. Graf, and B. Meinerzhagen, *Low- and High-Field Electron-Transport Parameters for Unstrained and Strained $Si_{1-x}Ge_x$* , IEEE Electron Dev. Lett. **18** (June 1997), no. 6, 264–266.
- [28] S. Smirnov, H. Kosina, and S. Selberherr, *Investigation of the electron mobility in strained $Si_{1-x}Ge_x$ at high Ge composition*, Simulation of Semiconductor Processes and Devices 2002, Sep. 2002, pp. 29–32.
- [29] S. Smirnov and H. Kosina, *Monte Carlo modeling of the electron mobility in strained $Si_{1-x}Ge_x$ layers on arbitrarily oriented $Si_{1-y}Ge_y$ substrates*, Solid-State Electron. **48** (Aug. 2004), no. 8, 1325–1335.
- [30] J. M. Hinckley and J. Singh, *Hole transport theory in pseudomorphic $Si_{1-x}Ge_x$ alloys grown on Si(001) substrates*, Phys. Rev. B **41** (Feb. 1990), no. 5, 2912–2926.
- [31] J. R. Watling, A. Asenov, and J. R. Barker, *Efficient hole transport model in warped bands for use in the simulation of Si/SiGe MOSFETs*, 6th International Workshop on Computational Electronics, Oct. 1998, pp. 96–99.
- [32] F. M. Bufler and B. Meinerzhagen, *Hole transport in strained $Si_{1-x}Ge_x$ alloys on $Si_{1-y}Ge_y$ substrates*, J. Appl. Phys. **84** (Nov. 1998), no. 10, 5597–5602.
- [33] M. Ershov and V. Ryzhii, *Monte Carlo study of electron transport in strained silicon-carbon alloy*, J. Appl. Phys. **76** (Aug. 1994), no. 3, 1924–1926.
- [34] S. T. Chang, C. Y. Lin, and S.-H. Liao, *Theoretical study of electron mobility for silicon-carbon alloys*, Appl. Surf. Sci. **254** (July 2008), no. 19, 6203–6207.
- [35] P. Dollfus, S. Galdin, and P. Hesto, *Band offsets and electron transport calculation for strained $Si_{1-x-y}Ge_xC_y/Si$ heterostructures*, J. Mater. Sci. **12** (June 2001), no. 4, 245–248.
- [36] T. G. Van de Roer and F. P. Widdershoven, *Ionized impurity scattering in Monte Carlo simulations*, J. Appl. Phys. **59** (Feb. 1986), no. 3, 813–815.
- [37] H. Kosina, *A method to reduce small-angle scattering in Monte Carlo device analysis*, IEEE Trans. Electron Devices **46** (June 1999), no. 6, 1196–1200.
- [38] F. M. Bufler, P. D. Yoder, and W. Fichtner, *Simple Phase-Space Trajectory Calculation for Monte Carlo Device Simulation Including Screened Impurity Scattering*, Simulation of Semiconductor Processes and Devices 1999, Sep. 1999, pp. 31–34.
- [39] F. M. Bufler, A. Schenk, and W. Fichtner, *Efficient Monte Carlo Device Modeling*, IEEE Trans. Electron Devices **47** (Oct. 2000), no. 10, 1891–1897.
- [40] B. K. Ridley, *Reconciliation of the Conwell-Weisskopf and Brooks-Herring formulae for charged-impurity scattering in semiconductors : Third-body interference*, J. Phys. C : Solid State Phys. **10** (May 1977), no. 10, 1589–1593.

6.3. SIMULATION D'UN TRANSISTOR BIPOLAIRE À HÉTÉROJONCTION

- [41] H. Kosina, *A new approach to ionized-impurity scattering*, Simulation of Semiconductor Processes and Devices 1997, Sep. 1997, pp. 205–208.
- [42] G. Kaiblinger-Grujin, H. Kosina, and S. Selberherr, *Influence of the doping element on the electron mobility in n-silicon*, J. Appl. Phys. **83** (Mar. 1998), no. 6, 3096–3101.
- [43] G. Masetti, M. Severi, and S. Solmi, *Modeling of Carrier Mobility Against Carrier Concentration in Arsenic-, Phosphorus-, and Boron-Doped Silicon*, IEEE Trans. Electron Devices **30** (July 1983), no. 7, 764–769.
- [44] M. V. Fischetti and S. E. Laux, *Comment on “Influence of the doping element on the electron mobility in n-silicon”*, J. Appl. Phys. **85** (June 1999), no. 11, 7984–7985.
- [45] G. Kaiblinger-Grujin, H. Kosina, and S. Selberherr, *Response to “Comment on ‘Influence of the doping element on the electron mobility in n-silicon’ ”*, J. Appl. Phys. **85** (June 1999), no. 11, 7986.
- [46] P. Lugli and D. K. Ferry, *Degeneracy in the Ensemble Monte Carlo Method for High-Field Electron Transport in Semiconductors*, IEEE Trans. Electron Devices **32** (Nov. 1985), no. 11, 2431–2437.
- [47] L. E. Kay and T.-W. Tang, *An improved ionized-impurity scattering model for Monte Carlo simulations*, J. Appl. Phys. **70** (Aug. 1991), no. 3, 1475–1482.
- [48] P. Borowik and J.-L. Thobel, *Improved Monte Carlo method for the study of electron transport in degenerate semiconductors*, J. Appl. Phys. **84** (Oct. 1998), no. 7, 3706–3709.
- [49] S. Decoutere and A. Sibaja-Hernandez, *SiGeC HBTs : The TCAD Challenge Reduced to Practice*, Mat. Sci. Semicon. Proc. **8** (Feb. 2005), no. 1, 283–288.
- [50] C. Jungemann, S. Keith, and M. Bartels, *Efficient Full-Band Monte Carlo Simulation of Silicon Devices*, IEICE Trans. Electron. **82** (June 1999), no. 6, 870–879.
- [51] S. K. Park and K. W. Miller, *Random number generators : good ones are hard to find*, Commun. ACM **31** (Oct. 1988), no. 10, 1192–1201.
- [52] G. Lehmann and M. Taut, *On the Numerical Calculation of the Density of States and Related Properties*, Phys. Status Solidi B **54** (July 1972), no. 2, 469–477.
- [53] J. D. Bude and R. K. Smith, *Phase-space simplex Monte Carlo for semiconductor transport*, Semicond. Sci. Technol. **9** (May 1994), no. 5S, 840–843.
- [54] D. Rideau, M. Feraille, and L. Ciampolini, *Strained Si, Ge and Si_{1-x}Ge_x alloys modeled with a first-principles-optimized full-zone k.p method*, Phys. Rev. B **74** (Nov. 2006), no. 19, 195208.
- [55] Y. M. Niquet, D. Rideau, and C. Tavernier, *Onsite matrix elements of the tight-binding Hamiltonian of a strained crystal : Application to silicon, germanium, and their alloys*, Phys. Rev. B **79** (June 2009), no. 24, 245201.
- [56] J. Singh, *Electronic and Optoelectronic Properties of Semiconductor Structures*, Cambridge, 2003.
- [57] G. Dolling, *Symposium on Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids*, 1963, pp. 37–48.
- [58] W. Weber, *Adiabatic bond charge model for the phonons in diamond, Si, Ge, and α -Sn*, Phys. Rev. B **15** (May 1977), no. 10, 4789–4803.
- [59] E. Pop, R. W. Dutton, and K. E. Goodson, *Analytic band Monte Carlo model for electron transport in Si including acoustic and optical phonon dispersion*, J. Appl. Phys. **96** (Nov. 2004), no. 9, 4998–5005.
- [60] X. Wang, *Monte Carlo Simulation of Charge Transport in Si-based Heterostructure Transistors*, Ph.D. Thesis, 2002.
- [61] J. D. Wiley, *Polar Mobility of Holes in III-V Compounds*, Phys. Rev. B **4** (Oct. 1971), no. 8, 2485–2493.
- [62] K. Sadra, C. M. Maziar, and B. G. Streetman, *Effects of multiband electron-hole scattering and hole wave-function symmetry on minority-electron transport in GaAs*, J. Appl. Phys. **66** (Nov. 1989), no. 10, 4791–4800.
- [63] K. Sadra, C. M. Maziar, and B. G. Streetman, *The role of the split-off band in electron-hole energy exchange dynamics in selected III-V semiconductors*, J. Appl. Phys. **66** (Sep. 1989), no. 5, 2020–2026.

CHAPITRE 6. PARAMÈTRES MATÉRIAU & MODÈLES ANALYTIQUES

- [64] A. Abramo, L. Baudry, R. Brunetti, R. Castagne, M. Charef, and F. Dessenne, *A Comparison of Numerical Solutions of the Boltzmann Transport Equation for High-Energy Electron Transport Silicon*, IEEE Trans. Electron Devices **41** (Sep. 1994), no. 9, 1646–1654.
- [65] N. Sano, T. Aoki, and M. Tomizawa, *Electron transport and impact ionization in Si*, Phys. Rev. B **41** (June 1990), no. 17, 12122–12128.
- [66] P. A. Childs and D. W. Dyke, *Analytic expressions for impact ionization rates and secondary particle energy distributions in semiconductors*, Appl. Phys. Lett. **74** (May 1999), no. 18, 2646–2648.
- [67] C. Canali, C. Jacoboni, and F. Nava, *Electron drift velocity in silicon*, Phys. Rev. B **12** (Aug. 1975), no. 4, 2265–2284.
- [68] Landolt-Börnstein, *Numerical data and functional relationships in science and technology* (K.-H. Hellwege, ed.), Group III : *Crystal and Solid State Physics*, Volume 17 : *Semiconductors*, Subvolume a : *Physics of Group IV Elements and III-V Compounds*, Springer-Verlag Berlin, 1982.
- [69] J. L. Moll and R. Van Overstraeten, *Charge multiplication in silicon pn junctions*, Solid-State Electron. **6** (1963), 147–157.
- [70] C. A. Lee, R. A. Logan, and R. L. Batdorf, *Ionization Rates of Holes and Electrons in Silicon*, Phys. Rev. **134** (May 1964), no. 3A, A761–A773.
- [71] R. Van Overstraeten and H. De Man, *Measurement of the ionization rates in diffused silicon p-n junctions*, Solid-State Electron. **13** (May 1970), 583–608.
- [72] W. N. Grant, *Electron and hole ionization rates in epitaxial silicon at high electric fields*, Solid-State Electron. **16** (1973), no. 10, 1189–1203.
- [73] J. W. Slotboom, G. Streutker, and G. J. T. Davids, *Surface impact ionization in silicon devices*, International Electron Devices Meeting 1987, 1987, pp. 494–497.
- [74] C. Chang, C. Hu, and R. W. Brodersen, *Quantum yield of electron impact ionization in silicon*, J. Appl. Phys. **57** (Jan. 1985), no. 2, 302–309.
- [75] D. J. DiMaria, T. N. Theis, and J. R. Kirtley, *Electron heating in silicon dioxide and off-stoichiometric silicon dioxide films*, J. Appl. Phys. **57** (Feb. 1985), no. 4, 1214–1238.
- [76] S. Takagi and A. Toriumi, Extended Abstracts of the Japan Society of Applied Physics, Spring Meeting, 1993. in Japanese.
- [77] G. Ottaviani, L. Reggiani, and C. Canali, *Hole drift velocity in silicon*, Phys. Rev. B **12** (Oct. 1975), no. 8, 3318–3329.
- [78] M. H. Woods, W. C. Johnson, and M. A. Lampert, *Use of a Schottky barrier to measure impact ionization coefficients in semiconductors*, Solid-State Electron. **16** (Mar. 1973), no. 3, 381–394.
- [79] J. E. Smith, *Longitudinal Anisotropy of the High-Field Conductivity of n-Type Germanium at Room Temperature*, Phys. Rev. **178** (Feb. 1969), no. 3, 1364–1367.
- [80] T. Mikawa, S. Kagawa, and T. Kaneda, *Crystal orientation dependence of ionization rates in germanium*, Appl. Phys. Lett. **37** (Aug. 1980), no. 4, 387–389.
- [81] A. S. Kyuregyan and S. N. Yurkov, *Room-temperature avalanche breakdown voltages of Si, Ge, SiC, GaAs, GaP and InP*, Sov. Phys. Semicond. **23** (1989), no. 10, 1126–1132.
- [82] C. Jacoboni and L. Reggiani, *Bulk Hot-Electron Properties of Cubic Semiconductors*, Adv. Phys. **28** (July 1979), no. 4, 493–553.
- [83] J. P. Dismukes, L. Ekstrom, and R. J. Paff, *Lattice Parameter and Density in Germanium-Silicon Alloys*, J. Phys. Chem. **68** (Oct. 1964), no. 10, 3021–3027.
- [84] A. Yamada, N. Miyazono, and M. Konagai, *Structural Analysis of SiGe and SiGeC Alloys by Ab Initio Total-Energy Calculations*, Jpn. J. Appl. Phys. **38** (Apr. 1999), no. 4B, 2566–2568.
- [85] J. Hallstedt, *Epitaxy and characterization of SiGeC layers grown by reduced pressure chemical vapor deposition*, Ph.D. Thesis, 2004.
- [86] H. J. Osten, *SiGeC Materials*, Semiconducting and Semi-Insulating Materials Conference 1996, Apr. 1996, pp. 195–200.
- [87] H. J. Osten, *MBE growth and properties of supersaturated, carbon-containing silicon/germanium alloys on Si(001)*, Thin Solid Films **367** (May 2000), no. 1, 101–111.
- [88] G. S. Kar, A. Dhar, and L. K. Bera, *Effect of carbon on lattice strain and hole mobility in Si_{1-x}Ge_x alloys*, J. Mater. Sci. Mater. El. **13** (Jan. 2002), no. 1, 49–55.

6.3. SIMULATION D'UN TRANSISTOR BIPOLAIRE À HÉTÉROJONCTION

- [89] J. Hallstedt, E. Suvar, and P. O. A. Persson, *Growth of high quality epitaxial $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ layers by using chemical vapor deposition*, Appl. Surf. Sci. **224** (Mar. 2004), no. 1, 46–50.
- [90] C.-L. Chang, *Properties and applications of crystalline $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ alloys*, Ph.D. Thesis, 1998.
- [91] B. A. Orner and J. Kolodzey, *$\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ alloy band structures by linear combination of atomic orbitals*, J. Appl. Phys. **81** (May 1997), no. 10, 6773–6780.
- [92] M. Glicksman, *Mobility of Electrons in Germanium-Silicon Alloys*, Phys. Rev. **111** (July 1958), no. 1, 125–128.
- [93] G. Busch and O. Vogt, Helv. Phys. Acta **33** (1960), 437.
- [94] H. M. Manasevit, I. S. Gergis, and A. B. Jones, *Electron mobility enhancement in epitaxial multilayer $\text{Si} - \text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ alloy films on (100) Si*, Appl. Phys. Lett. **41** (Sep. 1982), no. 5, 464–466.
- [95] M. V. Fischetti and S. E. Laux, *Band structure, deformation potentials, and carrier mobility in strained Si, Ge, and SiGe alloys*, J. Appl. Phys. **80** (Aug. 1996), no. 4, 2234–2252.
- [96] P. Gaworzewski, K. Tittelbach-Helmrich, and U. Penner, *Electrical properties of lightly doped p-type silicon-germanium single crystals*, J. Appl. Phys. **83** (May 1998), no. 10, 5258–5263.
- [97] F. Murphy-Armando and S. Fahy, *First-Principles Calculation of Alloy Scattering in $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$* , Phys. Rev. Lett. **97** (Sep. 2006), no. 9, 096606.
- [98] S. Joyce, F. Murphy-Armando, and S. Fahy, *First-principles calculation of p-type alloy scattering in $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$* , Phys. Rev. B **75** (Apr. 2007), no. 15, 155201.
- [99] H. J. Osten and P. Gaworzewski, *Charge transport in strained $\text{Si}_{1-y}\text{C}_y$ and $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ alloys on Si(001)*, J. Appl. Phys. **82** (Nov. 1997), no. 10, 4977–4981.
- [100] R. Duschl, H. Seeberger, and K. Eberl, *Hole mobilities in pseudomorphic $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ alloy layers*, Thin Solid Films **336** (Dec. 1998), no. 1, 336–339.
- [101] E. Conwell and V. F. Weisskopf, *Theory of Impurity Scattering in Semiconductors*, Phys. Rev. **77** (Feb. 1950), no. 3, 388–390.
- [102] A. D. Boardman and D. W. Henry, *A Phase Shift Analysis of the Scattering of Carriers by Ionised Impurities in Non-Degenerate Semiconductors*, Phys. Status Solidi B **60** (1973), 633–639.
- [103] J. R. Meyer and F. J. Bartoli, *Phase-shift calculation of ionized impurity scattering in semiconductors*, Phys. Rev. B **23** (May 1981), no. 10, 5413–5427.
- [104] J. R. Meyer and F. J. Bartoli, *Criterion for multi-ion scattering in free carrier transport*, J. Phys. C **15** (1982), 1987–1999.
- [105] H. S. Bennett and J. R. Lowney, *Calculated majority- and minority-carrier mobilities in heavily doped silicon and comparisons with experiment*, J. Appl. Phys. **71** (Mar. 1992), no. 5, 2285–2296.
- [106] J. R. Lowney and H. S. Bennett, *Majority and minority electron and hole mobilities in heavily doped GaAs*, J. Appl. Phys. **69** (May 1991), no. 10, 7102–7110.
- [107] G. Sookahet, *La Méthode de Numerov*, 2006. <http://gersoo.free.fr/Download/docs/numerov.pdf>.
- [108] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë, *Mécanique Quantique, tome II*, Hermann, 1973.
- [109] N. G. Nilsson, Phys. Status Solidi A **19** (1973), no. K75.
- [110] J. Dziewior and D. Silber, *Minority-carrier diffusion coefficients in highly doped silicon*, Appl. Phys. Lett. **35** (July 1979), no. 2, 170–172.
- [111] A. Neugroschel, *Minority-Carrier Diffusion Coefficients and Mobilities in Silicon*, IEEE Electron Dev. Lett. **6** (Aug. 1985), no. 8, 425–427.
- [112] D. D. Tang, F. F. Fang, and M. Scheuermann, *Minority carrier transport in silicon*, International Electron Devices Meeting 1986, 1986, pp. 20–23.
- [113] S. E. Swirhun, Y.-H. Kwark, and R. M. Swanson, *Measurement of electron lifetime, electron mobility and band-gap narrowing in heavily doped p-type silicon*, International Electron Devices Meeting 1988, 1988, pp. 298–301.
- [114] S. E. Swirhun, D. E. Kane, and R. M. Swanson, *Temperature dependence of minority electron mobility and bandgap narrowing in p+ Si*, International Electron Devices Meeting 1986, 1986, pp. 24–27.

- [115] I.-Y. Leu and A. Neugroschel, *Minority-Carrier Transport Parameters in Heavily Doped p-type Silicon at 296 and 77 K*, IEEE Trans. Electron Devices **40** (Oct. 1993), no. 10, 1872–1875.
- [116] D. E. Burk and V. De La Torre, *An Empirical Fit to Minority Hole Mobilities*, IEEE Electron Dev. Lett. **5** (July 1984), no. 7, 231–233.
- [117] S. E. Swirhun and J. A. Del Alamo and R. M. Swanson, *Measurement of Hole Mobility in Heavily Doped n-Type Silicon*, IEEE Electron Dev. Lett. **7** (Mar. 1986), no. 3, 168–171.
- [118] C. H. Wang, K. Misiakos, and A. Neugroschel, *Minority-Carrier Transport Parameters in n-Type Silicon*, IEEE Trans. Electron Devices **37** (May 1990), no. 5, 1314–1322.
- [119] C. H. Wang and A. Neugroschel, *Minority-Carrier Transport Parameters in Degenerate n-Type Silicon*, IEEE Electron Dev. Lett. **11** (Dec. 1990), no. 12, 576–578.
- [120] A. Matulionis, J. Pozela, and A. Reklaitis, *Monte Carlo treatment of electron-electron collisions*, Solid State Commun. **16** (June 1975), no. 10, 1133–1137.
- [121] P. Lugli and D. K. Ferry, *Effect of Electron-Electron Scattering on Monte Carlo Studies of Transport in Submicron Semiconductor Devices*, Physica **117B** (1983), 251–253.
- [122] K. Sadra, C. M. Maziar, and B. G. Streetman, *Choice of the scattering carrier in Monte Carlo treatments of carrier-carrier scattering*, Communications, Speech and Vision, IEEE Proceedings I, Oct. 1988, pp. 119–124.
- [123] H. M. A. El-Ghanem and B. K. Ridley, *Impurity scattering of electrons in non-degenerate semiconductors*, J. Phys. C : Solid State Phys. **13** (Apr. 1980), no. 10, 2041–2054.
- [124] M. B. Prince, *Drift Mobilities in Semiconductors. I. Germanium*, Phys. Rev. **92** (Nov. 1953), no. 3, 681–687.
- [125] N. D. Arora, J. R. Hauser, and D. J. Roulston, *Electron and Hole Mobilities in Silicon as a Function of Concentration and Temperature*, IEEE Trans. Electron Devices **29** (Feb. 1982), no. 2, 292–295.
- [126] D. B. M. Klaassen, *A unified mobility model for device simulation–II. Temperature dependence of carrier mobility and lifetime*, Solid-State Electron. **35** (July 1992), no. 7, 961–967.
- [127] D. M. Caughey and R. E. Thomas, *Carrier Mobilities in Silicon Empirically Related to Doping and Field*, Proc. IEEE **55** (Dec. 1967), no. 12, 2192–2193.
- [128] D. B. M. Klaassen, *A unified mobility model for device simulation–I. Model equations and concentration dependence*, Solid-State Electron. **35** (July 1992), no. 7, 953–959.
- [129] S. Reggiani, M. Valdinoci, and L. Colalongo, *A Unified Analytical Model for Bulk and Surface Mobility in Si n- and p-Channel MOSFET's*, 29th European Solid-State Device Research Conference, Sep. 1999, pp. 240–243.
- [130] S. Reggiani, M. Valdinoci, and L. Colalongo, *Electron and Hole Mobility in Silicon at Large Operating Temperatures–Part I : Bulk Mobility*, IEEE Trans. Electron Devices **49** (Mar. 2002), no. 3, 490–499.
- [131] V. Palankovski, G. Röhrer, and T. Grasser, *Rigorous modeling approach to numerical simulation of SiGe HBTs*, Appl. Surf. Sci. **224** (Mar. 2004), no. 1, 361–364.
- [132] T. Manku and A. Nathan, *Electron Drift Mobility Model for Devices Based on Unstrained and Coherently Strained Si_{1-x}Ge_x Grown on (001) Silicon Substrate*, IEEE Trans. Electron Devices **39** (Sep. 1992), no. 9, 2082–2089.
- [133] F. M. Bufler and B. Meinerzhagen, *Hydrodynamic transport parameters for holes in strained silicon*, 6th International Workshop on Computational Electronics, Oct. 1998, pp. 242–245.
- [134] V. Palankovski, B. Gonzalez, and H. Kosina, *A New Analytical Energy Relaxation Time Model for Device Simulation*, Modeling and Simulation of Microsystems 1999, Apr. 1999, pp. 395–398.
- [135] G. Sasso, G. Matz, C. Jungemann, and N. Rinaldi, *Accurate Mobility and Energy Relaxation Time Models for SiGe HBTs Numerical Simulation*, Simulation of Semiconductor Processes and Devices 2009, Sep. 2009, pp. 241–244.
- [136] Synopsys Inc., *Sentaurus Device User Guide, Version Z-2007.03*, 2007.
- [137] J. C. Bean, *Silicon-Based Semiconductor Heterostructures : Column IV Bandgap Engineering*, Proc. IEEE **80** (Apr. 1992), no. 4, 571–587.

6.3. SIMULATION D'UN TRANSISTOR BIPOLAIRE À HÉTÉROJONCTION

- [138] A. Pakfar, *Modélisation de la diffusion des dopants dans les alliages SiGe et SiGeC*, Ph.D. Thesis, 2003.
- [139] J. W. Slotboom and H. C. de Graaff, *Bandgap Narrowing in Silicon Bipolar Transistors*, IEEE Trans. Electron Devices **24** (Aug. 1977), no. 8, 1123–1125.
- [140] K. Ismail, S. F. Nelson, and J. O. Chu, *Electron transport properties of Si/SiGe heterostructures : Measurements and device implications*, Appl. Phys. Lett. **63** (Aug. 1993), no. 5, 660–662.
- [141] C. S. Smith, *Piezoresistance Effect in Germanium and Silicon*, Phys. Rev. **94** (Apr. 1954), no. 1, 42–49.
- [142] M. B. Arnoldus, *Determination of the Piezoresistive Properties of Strained Silicon*, Ph.D. Thesis, 2006.
- [143] S. Dhar, H. Kosina, and V. Palankovski, *Electron Mobility Model for Strained-Si Devices*, IEEE Trans. Electron Devices **52** (Apr. 2005), no. 4, 527–533.
- [144] M. Feraille, D. Rideau, and A. Ghetti, *Low-Field Mobility in Strained Silicon with 'Full Band' Monte Carlo Simulation using k.p and EPM Bandstructure*, Simulation of Semiconductor Processes and Devices 2006, Sep. 2006, pp. 264–266.

CHAPITRE 6. PARAMÈTRES MATÉRIAU & MODÈLES ANALYTIQUES

Table des figures

1.1	Désaccord dans les taux d'interaction à la fin des années 1980 . . .	15
1.2	Consensus dans les taux d'interaction dans les années 1990 . . .	16
1.3	Domaine de validité des simulations et des modèles analytiques .	21
2.1	Génération stochastique de nombres distribués	25
2.2	Algorithme d'un programme Monte Carlo mono-particule	28
2.3	Convergence statistique des résultats de simulation	32
2.4	Maillage tétraédrique des bandes de conduction	34
2.5	Maillage tétraédrique des bandes de valence	35
2.6	Randomisation sur les surfaces iso-énergie du silicium	39
3.1	Structures de bande du silicium et du germanium	42
3.2	Densité d'états des électrons et des trous dans Si	43
3.3	Surfaces iso-énergie des bandes de conduction dans Si et Ge . . .	45
3.4	Surfaces iso-énergie des bandes de valence dans Si et Ge	46
3.5	Densité d'états des électrons et des trous dans Ge	48
3.6	Diagrammes de dispersion des phonons dans Si et Ge	49
3.7	Probabilités d'interaction porteur-phonon dans Si	55
3.8	Probabilités d'interaction porteur-phonon dans Ge	56
3.9	Schéma d'une ionisation par choc initiée par un électron	58
3.10	Probabilité d'ionisation par choc des trous dans Si	59
3.11	Probabilité d'ionisation par choc dans Si et Ge	60
3.12	Distribution gaussienne en énergie après ionisation par choc . . .	62
3.13	Distribution des électrons dans la zone de Brillouin du Si	63
3.14	Distribution des trous dans la zone de Brillouin du Si	64
3.15	Transport des électrons à moyenne et haute énergie dans Si . . .	67
3.16	Transport des trous à moyenne et haute énergie dans Si	68
3.17	Fonctions de distribution des électrons et des trous dans Si	72
3.18	Distribution des électrons dans la zone de Brillouin du Ge	73
3.19	Distribution des trous dans la zone de Brillouin du Ge	73
3.20	Transport des électrons à moyenne et haute énergie dans Ge . . .	75
3.21	Transport des trous à moyenne et haute énergie dans Ge	76
3.22	Fonctions de distribution des électrons et des trous dans Ge . . .	78
4.1	Paramètre de maille du SiGeC	81
4.2	Croissance pseudomorphique de SiGeC/Si	82
4.3	Energies des points de haute symétrie dans SiGe	84
4.4	Masses effectives des trous dans SiGeC/Si	85

TABLE DES FIGURES

4.5	Structure de bande LCAO du SiGeC	85
4.6	Probabilité d'ionisation par choc des trous dans SiGe	88
4.7	Potentiel atomique et potentiel virtuel dans un alliage binaire	88
4.8	Mobilité des électrons et des trous dans SiGe relaxé	92
4.9	Mobilité des électrons et des trous dans SiC contraint sur Si	94
5.1	Graphes de $S_0(y, F)$ et $H_0(y, F)$	103
5.2	Longueur d'écrantage en fonction de la densité du dopage	105
5.3	Probabilité angulaire d'interaction électron-impureté	107
5.4	Probabilités d'interaction porteur-impureté ionisée	109
5.5	Probabilité d'occupation des électrons et des trous dans Si	113
5.6	Mobilité en fonction de la concentration des dopants dans Si	115
5.7	Mobilité en fonction de la concentration des dopants dans Ge	118
6.1	Dépendance en dopage du modèle de mobilité	120
6.2	Dépendance en Ge et C du modèle de mobilité	122
6.3	Tenseur de mobilité des électrons dans SiGeC/Si	127
6.4	Tenseur de mobilité des trous dans SiGeC/Si	128
6.5	Temps de relaxation de l'énergie des porteurs dans SiGe	131
6.6	Structure 2D d'un HBT NPN	133
6.7	Profils de Ge, C et dopants dans un HBT SiGeC NPN	133
6.8	Fréquence de transition vs. courant collecteur	136
6.9	Caractéristiques électriques statiques	137
B.1	Effet de la contrainte sur la mobilité des électrons dans Si	161
C.1	Algorithme d'un programme Monte Carlo multi-particule	164
C.2	Dépassement transitoire de vitesse dans Si	166

Liste des tableaux

3.1	Coefficients des dispersions de phonon dans Si et Ge	51
3.2	Paramètres des intégrales de recouvrement des trous	52
3.3	Potentiels de déformation des phonons dans Si et Ge	54
3.4	Paramètres de Keldysh du taux d'ionisation par choc	59
3.5	Paramètres de la distribution après ionisation par choc	61
3.6	Mobilité des électrons et des trous dans Si et Ge	65
4.1	Propriétés de Si, Ge et C à température ambiante	80
4.2	Potentiels effectifs de diffusion sur potentiel d'alliage	91
5.1	Initialisation du double pas	99
6.1	Paramètres pour le modèle de mobilité des électrons	124
6.2	Paramètres pour le modèle de mobilité des trous	125
6.3	Paramètres pour le modèle du temps de relaxation de l'énergie	129
6.4	Paramètres pour le modèle de bande interdite	134

LISTE DES TABLEAUX

Annexes

Annexe A

Extension du modèle de diffusion sur potentiel d'alliage au cas des alliages ternaires

Dans un premier temps, exprimons le potentiel virtuel moyen V_m du cristal, en fonction des potentiels atomiques locaux V_a , V_b et V_c , caractérisant respectivement le niveau du potentiel cristallin au voisinage des atomes de type A, B et C dans l'alliage ternaire $A_{1-x-y}B_xC_y$:

$$V_m = (1 - x - y) \cdot V_a + x \cdot V_b + y \cdot V_c \quad (\text{A.1})$$

Les discontinuités locales de potentiel induites par les atomes A, B et C, par rapport au potentiel virtuel moyen s'écrivent :

$$\Delta V_a = V_m - V_a = -(x + y) \cdot V_a + x \cdot V_b + y \cdot V_c \quad (\text{A.2})$$

$$\Delta V_b = V_m - V_b = (1 - x - y) \cdot V_a + (x - 1) \cdot V_b + y \cdot V_c \quad (\text{A.3})$$

$$\Delta V_c = V_m - V_c = (1 - x - y) \cdot V_a + x \cdot V_b + (y - 1) \cdot V_c \quad (\text{A.4})$$

On peut simplifier les expressions (A.2) à (A.4) en utilisant les potentiels d'alliage U_{A-B} et U_{A-C} , définis selon :

$$U_{A-B} = V_a - V_b \quad ; \quad U_{A-C} = V_a - V_c$$

En intégrant ces notations, on peut réécrire le système selon :

$$\Delta V_a = -x \cdot U_{A-B} - y \cdot U_{A-C} \quad (\text{A.5})$$

$$\Delta V_b = (1 - x) \cdot U_{A-B} - y \cdot U_{A-C} \quad (\text{A.6})$$

$$\Delta V_c = (1 - y) \cdot U_{A-C} - x \cdot U_{A-B} \quad (\text{A.7})$$

Les discontinuités de potentiel vont être à l'origine de la diffusion des porteurs de charge. On peut associer à chaque type d'atome une probabilité d'interaction spécifique, laquelle est proportionnelle au carré de l'amplitude du potentiel

ANNEXE A. DIFFUSION SUR POTENTIEL D'ALLIAGE DANS LES
TERNAIRES

diffuseur :

$$P_A(E) = F(E) \times \Delta V_a^2 = F(E) \times [x \cdot U_{A-B} + y \cdot U_{A-C}]^2 \quad (\text{A.8})$$

$$P_B(E) = F(E) \times \Delta V_b^2 = F(E) \times [(1-x) \cdot U_{A-B} - y \cdot U_{A-C}]^2 \quad (\text{A.9})$$

$$P_C(E) = F(E) \times \Delta V_c^2 = F(E) \times [(1-y) \cdot U_{A-C} - x \cdot U_{A-B}]^2 \quad (\text{A.10})$$

où

$$F(E) = \frac{2\pi}{\hbar} \Omega_c \cdot \mathcal{D}(E)$$

On peut dès lors calculer la probabilité totale d'interaction P_T comme la somme pondérée des probabilités (A.8), (A.9) et (A.10), associées à chaque type de centre diffuseur. Les coefficients de pondération correspondent aux probabilités de présence de chaque type d'atome dans la maille élémentaire du cristal :

$$P_T(E) = (1-x-y) \cdot P_A(E) + x \cdot P_B(E) + y \cdot P_C(E) \quad (\text{A.11})$$

En développant les équations (A.8), (A.9) et (A.10) dans l'expression (A.11), on obtient l'expression finale de la probabilité de diffusion des porteurs de charge dans un alliage aléatoire ternaire $A_{1-x-y}B_xC_y$:

$$P_T(x, y, E) = \frac{2\pi}{\hbar} \Omega_c \cdot \mathcal{D}(E) \cdot W(x, y) \quad (\text{A.12})$$

où

$$W(x, y) = x(1-x) \cdot U_{A-B}^2 + y(1-y) \cdot U_{A-C}^2 - 2xy \cdot U_{A-B} \cdot U_{A-C} \quad (\text{A.13})$$

Annexe B

Mobilité des électrons dans le silicium sous contrainte biaxiale

Lorsque les alliages SiGeC sont contraints sur un substrat massif de silicium, la contrainte biaxiale introduite dans la couche de SiGeC par le désaccord de maille s'accompagne de l'apparition concomitante de la diffusion sur potentiel d'alliage. Afin de pouvoir étudier les effets découplés de la contrainte et du potentiel d'alliage, il est utile de considérer les cas suivants :

- l'étude des alliages relaxés permet de mettre en évidence l'influence du potentiel d'alliage (cf. § 4.6.1 pour SiGe);
- l'étude des matériaux purs contraints (Si, Ge) permet de se focaliser sur les effets liés à la contrainte.

Dans cette optique, on se propose d'étudier l'effet d'une contrainte biaxiale arbitraire sur la mobilité à faible champ des électrons dans le silicium. L'existence de nombreux résultats expérimentaux relatifs à la mobilité des électrons dans le silicium contraint va en outre permettre la validation quantitative de la sensibilité en contrainte de nos modèles Monte Carlo.

Le tenseur biaxial de déformation est défini comme suit :

$$[\epsilon] = \begin{bmatrix} \epsilon_{\parallel} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{\parallel} & 0 \\ 0 & 0 & -2\frac{c_{12}}{c_{11}}\epsilon_{\parallel} \end{bmatrix} \quad (\text{B.1})$$

où les constantes élastiques c_{11} et c_{12} sont celles du silicium massif – cf. Tab. 4.1. Dans la spécification du tenseur (B.1), ϵ_{\parallel} constitue l'amplitude de la déformation longitudinale.

La structure de bande du silicium déformé est calculée en prenant en compte le tenseur biaxial (B.1). La probabilité d'interaction électron-phonon est intégrée numériquement suivant le formalisme (3.6), en cohérence avec la structure de bande déformée $E_{\nu}(\epsilon_{\parallel}, \vec{k})$. Les constantes de couplage Δ_{η} et les modes de dispersion phononiques $\omega_{\eta}(q)$ pris en compte dans l'évaluation de la probabilité $P_{\eta,\nu}(k)$ sont ceux du silicium massif, i.e. leur dépendance en contrainte est négligée.

Les résultats de simulation MC pour les mobilités longitudinale et transverse des électrons dans le silicium sont exposés dans les figures B.1a et B.1b. La figure B.1a compare nos résultats théoriques aux mesures de mobilité de la Ref. [140] et aux coefficients piézorésistifs empiriques de Smith [141]. Les coefficients piézorésistifs caractérisent la réponse linéaire de la mobilité à l'application d'une contrainte mécanique faible. Dans le silicium, la variation relative $\Delta\mu/\mu$ de la mobilité induite par l'application d'une contrainte faible, s'écrit comme le produit du tenseur de piézorésistance par le tenseur de contrainte [142]. Dans le cas particulier d'une contrainte biaxiale, la variation linéaire de la mobilité vérifie :

$$\frac{1}{\mu_0} \begin{bmatrix} \Delta\mu_{\parallel} \\ \Delta\mu_{\parallel} \\ \Delta\mu_{\perp} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \pi_{11} & \pi_{12} & \pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \pi_{12} & \pi_{11} & \pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \pi_{12} & \pi_{12} & \pi_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \sigma_{\parallel} \\ \sigma_{\parallel} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B.2})$$

où μ_0 désigne la mobilité isotrope du silicium relaxé. Par l'intermédiaire du tenseur d'élasticité, on peut exprimer la variation de la mobilité en fonction des composantes du tenseur biaxial de déformation (B.1) :

$$\frac{1}{\mu_0} \begin{bmatrix} \Delta\mu_{\parallel} \\ \Delta\mu_{\parallel} \\ \Delta\mu_{\perp} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \pi_{11} & \pi_{12} & \pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \pi_{12} & \pi_{11} & \pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \pi_{12} & \pi_{12} & \pi_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \left(c_{11} + c_{12} - 2\frac{c_{12}^2}{c_{11}} \right) \epsilon_{\parallel} \\ \left(c_{11} + c_{12} - 2\frac{c_{12}^2}{c_{11}} \right) \epsilon_{\parallel} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B.3})$$

Le comportement linéaire des mobilités longitudinale et transverse peut être directement déduit du produit matriciel (B.3) :

$$\mu_{\parallel} = \mu_0 \times \left[1 - (\pi_{11} + \pi_{12}) \cdot \left(c_{11} + c_{12} - 2\frac{c_{12}^2}{c_{11}} \right) \cdot \epsilon_{\parallel} \right] \quad (\text{B.4})$$

$$\mu_{\perp} = \mu_0 \times \left[1 - 2\pi_{12} \cdot \left(c_{11} + c_{12} - 2\frac{c_{12}^2}{c_{11}} \right) \cdot \epsilon_{\parallel} \right] \quad (\text{B.5})$$

La dépendance linéaire des composantes du tenseur de mobilité (B.4) et (B.5) en fonction de la déformation longitudinale sont tracées dans le graphe B.1a. On peut observer que nos résultats de simulation Monte Carlo sont quantitativement proches des mesures, dans le domaine piézorésistif comme dans le domaine de saturation. Nos modèles MC reproduisent donc de façon satisfaisante les effets de la contrainte biaxiale sur le transport à faible champ des électrons.

La figure B.1b établit un comparatif entre différents résultats de simulation publiés, et nos propres résultats, concernant la mobilité des électrons dans le silicium biaxialement contraint. Si l'ensemble des modèles décrivent l'anisotropie du tenseur de mobilité de façon qualitativement similaire, un désaccord quantitatif significatif existe entre les différentes modélisations, notamment en ce qui concerne la saturation de la mobilité pour les contraintes biaxiales très élevées.

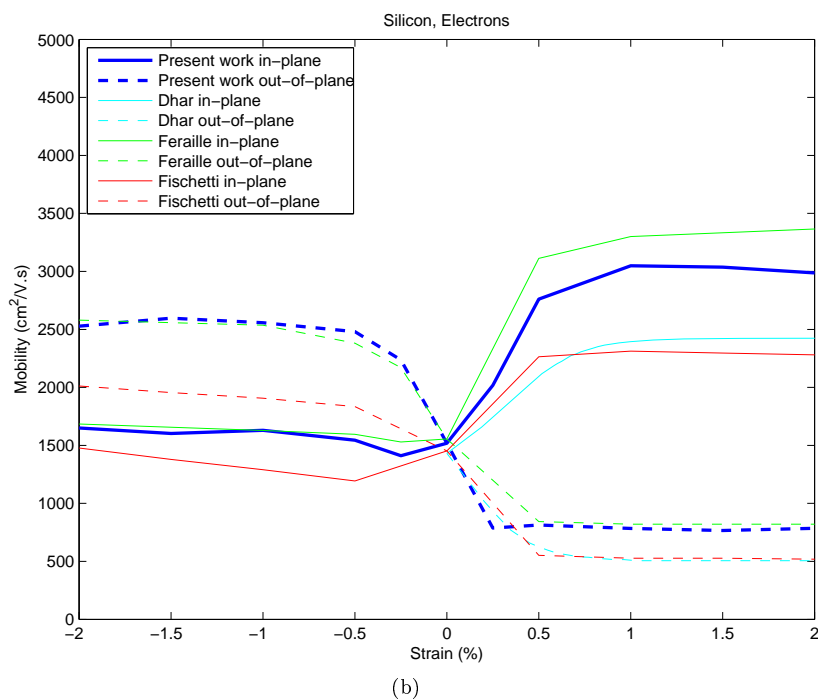
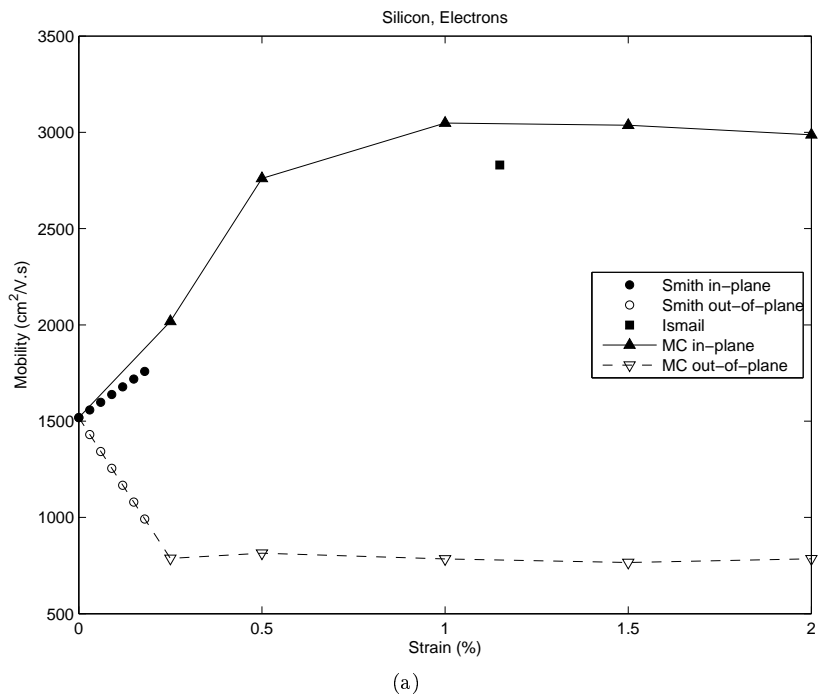


FIG. B.1: Effet de la contrainte biaxiale sur la mobilité à faible champ des électrons dans le silicium à 300 K. Les résultats de nos simulations sont comparés aux mesures de piézorésistance [141] et de mobilité [140] (Fig. B.1a), ainsi qu'aux résultats de simulation reportés dans la littérature [95, 143, 144] (Fig. B.1b).

ANNEXE B. MOBILITÉ DES ÉLECTRONS DANS SI CONTRAINT

Annexe C

Simulation du transport électronique transitoire par méthode multi-particule

Dans le but d'étudier les effets transitoires affectant le transport des porteurs de charge, un algorithme Monte Carlo multi-particule est spécifiquement développé. Cette méthode numérique consiste à simuler de façon simultanée la propagation de plusieurs particules individuelles. La valeur moyenne $\langle A \rangle$ de la propriété A caractérisant le gaz de particules est calculée comme une moyenne d'ensemble, selon [2] :

$$\langle A(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A_i(t) \quad (\text{C.1})$$

où N désigne l'effectif de l'ensemble des particules modélisé.

La simulation simultanée de plusieurs particules permet donc d'intégrer chaque propriété moyenne $\langle A(t) \rangle$ du gaz à l'instant t comme la somme pondérée des contributions $A_i(t)$ de chaque particule i . La technique multi-particule remplace donc l'intégration temporelle (2.9) de la valeur moyenne, spécifique au schéma mono-particule, par une intégration sur l'ensemble. L'avantage de la simulation multi-particule réside donc dans la possibilité de capturer les phénomènes transitoires, alors que la convergence des résultats statistiques produits par un algorithme mono-particule est conditionnée par l'établissement d'un régime stationnaire. La structure de notre algorithme multi-particule à champ constant est explicitée dans le graphe C.1. Le calcul des moyennes d'ensemble $\langle A(t) \rangle$ à l'instant t nécessite la spécification d'un pas temporel, noté t_{step} dans la Fig. C.1. Le pas t_{step} correspond à l'intervalle de temps au terme duquel les statistiques d'ensemble sont cumulées par moyennage selon (C.1) ; t_{step} définit donc la résolution temporelle de notre algorithme.

Le phénomène de *dépassement transitoire de vitesse*¹ est causé par l'application à $t = 0$ d'un fort champ électrique sur une population de porteurs de charge initialement à l'équilibre thermodynamique. Dans l'optique de modéliser ce phénomène dans le silicium massif, on simule le transport transitoire d'une

¹ *transient drift velocity overshoot* en Anglais

ANNEXE C. SIMULATION MULTI-PARTICULE DU TRANSPORT TRANSITOIRE

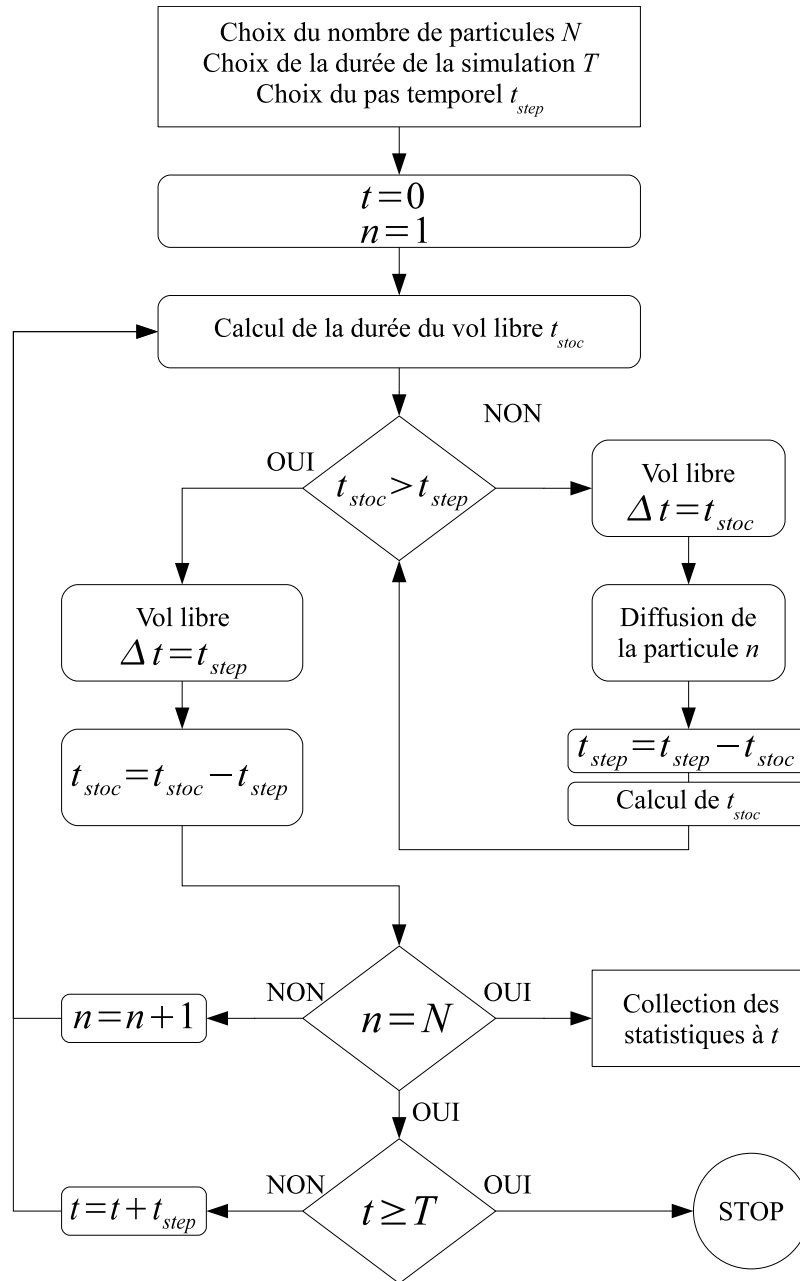
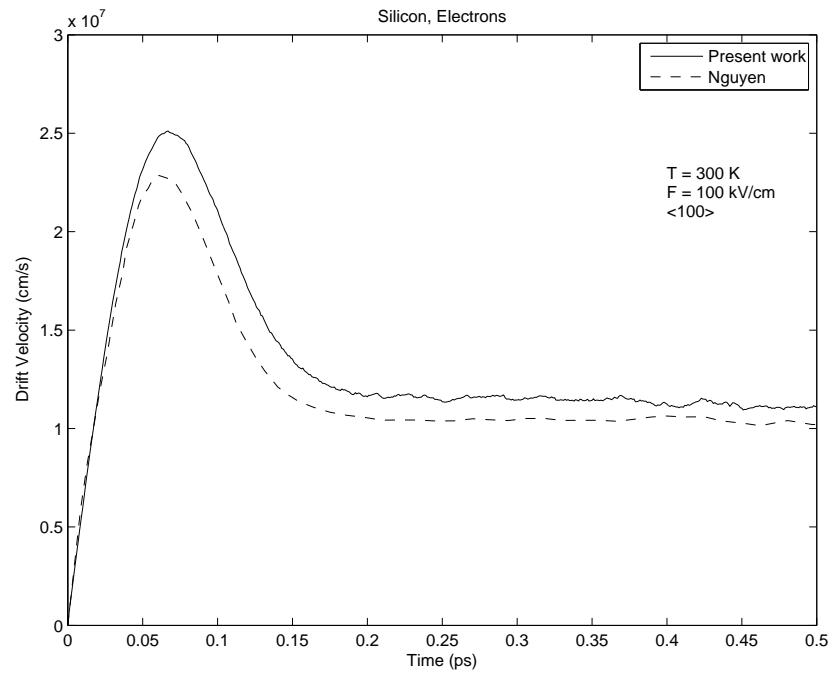


FIG. C.1: Algorithme de notre programme de simulation Monte Carlo multi-particule à champ constant.

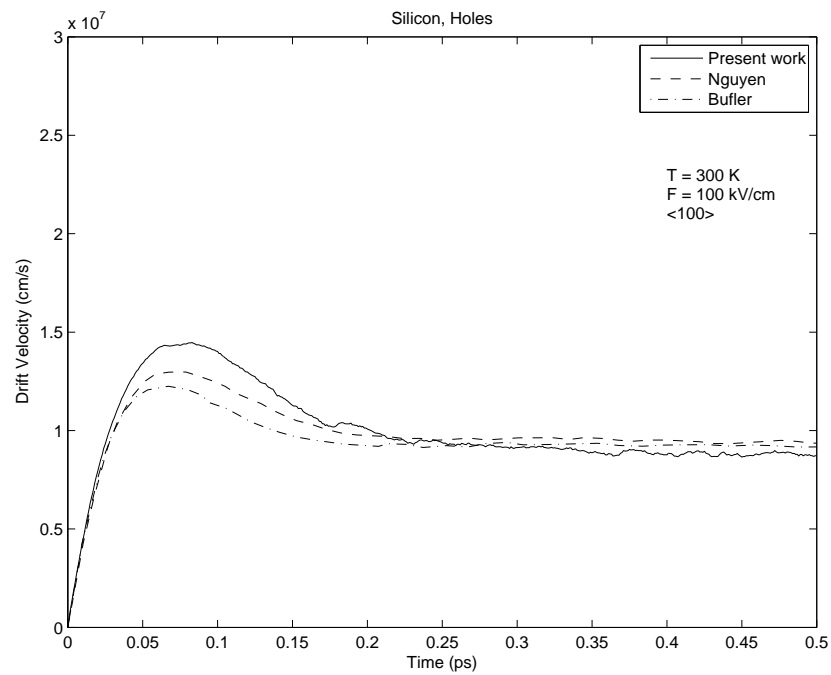
population de porteurs de charge initialement à l'équilibre dans le silicium, provoqué par l'application d'un champ électrique de 100 kV/cm. Notre algorithme multi-particule modélise en parallèle la propagation d'un ensemble statistique de 50000 particules, et collecte les statistiques transitoires de l'ensemble avec une résolution temporelle égale à 1 fs. L'évolution transitoire de la vitesse de dérive moyenne des porteurs calculée par notre algorithme Monte Carlo d'ensemble est illustrée par les figures C.2a et C.2b. Nos simulations sont en outre comparées aux résultats MC reportés dans plusieurs autres publications [24, 32], obtenus dans des conditions strictement identiques.

Le phénomène de dépassement transitoire de vitesse affecte plus significativement le transport des électrons (cf. Fig. C.2a) que le transport des trous (cf. Fig. C.2b). Cependant, pour les 2 types de porteurs de charge, la vitesse transitoire maximale est atteinte dans un délai de 70 fs après l'application du champ électrique. Au-delà de 0,25 ps, le régime stationnaire est atteint et le dépassement transitoire de vitesse disparaît. De plus, on peut constater que notre modélisation du transport transitoire des porteurs dans le silicium est quantitativement proche des résultats de simulation présentés dans la littérature.

ANNEXE C. SIMULATION MULTI-PARTICULE DU TRANSPORT TRANSITOIRE



(a)



(b)

FIG. C.2: Dépassement transitoire de vitesse de dérive des électrons (Fig. C.2a) et des trous (Fig. C.2b) dans le silicium massif. Notre algorithme EMC utilise un ensemble de 50000 particules. Nos résultats sont comparés aux simulations MC des Ref. [24, 32].

Annexe D

Publications en actes de conférence

ANNEXE D. PUBLICATIONS EN CONFÉRENCE

Monte Carlo-Based Analytical Models for Electron and Hole Electrical Parameters in Strained SiGeC Alloys

Marc Michailat*[†], Denis Rideau*, Frédéric Aniel[†], Clément Tavernier*, Hervé Jaouen*

*STMicroelectronics, 850, rue Jean Monnet, 38926 Crolles FRANCE

[†]IEF - CNRS UMR 8622, Bât. 220, Université Paris-Sud, 91405 Orsay FRANCE

Abstract—Bipolar transistors in advanced BiCMOS technology rely on highly-doped SiGeC bases strained on Si. Modeling the electrical properties of such devices by TCAD means requires an accurate description of SiGeC transport parameters, including low-field mobility, saturation velocity and energy relaxation time. Since bipolar transistor operation involves electron and hole transport, both types of carriers must be addressed. A distinction between majority and minority carriers must also be physically accounted for. In this paper, transport properties of doped and strained $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ alloys are investigated by Full-Band Monte Carlo (MC) method with a view of deriving analytical models suitable for implementation in hydrodynamic-based TCAD simulators.

I. INTRODUCTION

Performance optimization of advanced heterojunction bipolar transistors (HBTs) has led to the introduction of germanium and carbon in the device base, yielding $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ base layers biaxially strained on Si [1]. TCAD simulation of charge carrier transport in such SiGeC/Si HBTs should include models for transport parameters relevant to strained ternary $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ alloys. The aim of this work is to develop analytical models for carrier transport parameters, namely low-field mobility and energy relaxation time, based on Monte Carlo simulations of homogeneous transport in SiGeC alloys.

II. MONTE CARLO METHOD

Our Full-Band Monte Carlo simulations rely on strain-dependent SiGe Tight-Binding band structures. Phonon scattering rates are wave-vector dependent [2] and include 4 Si-Si modes and 4 Ge-Ge modes (i.e. 8 phonon modes in SiGeC alloys) [3]. Phonon rates are calibrated to reproduce a large number of experimental data in bulk Si and Ge, namely low-field mobility, drift velocity and impact ionization coefficient measurements [4], [5]. Doping effects are accounted for using doping-dependent scattering mechanisms, including ionized impurity scattering, electron-electron scattering and electron-hole scattering. Coulombian scattering rates are derived from partial-wave theory [6], [7] and can thereby establish a physical distinction between attractive and repulsive potentials, i.e. between majority and minority carriers (Fig.1). The Pauli Exclusion Principle (PEP) has to be accounted for

TABLE I
EFFECTIVE ALLOY POTENTIALS EXPRESSED IN eV
^a FROM [9], ^b FROM [10], ^c FROM [3], ^d FROM [11], ^e FROM [12]

REF	$U_{\text{Si-Ge}}$		$U_{\text{Si-C}}$	
	e	h	e	h
Present work	0.4	0.5	2.8	2.2
Litterature	$0.7^a, 0.54^b$	$0.9^a, 0.7^c, 0.55^d$	1.75^e	–

in simulating highly doped materials. Here PEP is included using the actual distribution function discretized with a cubic mesh of the reciprocal space [8]. Eventually our model for alloy scattering extends the commonly used alloy scattering rate model specific to binary random alloys (see e.g. [3], [9]) to the more general case of ternary random alloys:

$$P_{\text{alloy}}(x, y, E) = \frac{2\pi}{\hbar} \Omega_c \cdot \mathcal{D}(E) \cdot \left[x(1-x) \cdot U_{\text{Si-Ge}}^2 + y(1-y) \cdot U_{\text{Si-C}}^2 - 2xy \cdot U_{\text{Si-Ge}} \cdot U_{\text{Si-C}} \right] \quad (1)$$

In (1), $U_{\text{Si-Ge}}$ and $U_{\text{Si-C}}$ are effective alloy potentials. As such they are independently calibrated on several experimental mobility measurements:

- $U_{\text{Si-Ge}}$ is adjusted to reproduce the x dependence of mobility in relaxed $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ alloys, as depicted in Fig.2;
- $U_{\text{Si-C}}$ is tuned to reproduce the y dependence of in-plane mobility in $\text{Si}_{1-y}\text{C}_y$ strained on Si, as shown in Fig.3.

Table I compares the calibrated values of our SiGeC model with equivalent effective alloy potentials available in the literature, relevant to binary SiGe and SiC alloys. It ought to be noted that using (1), our model provides a unified formalism for electrons and holes in strained and relaxed ternary SiGeC.

III. MOBILITY MODEL

A large set of MC simulations have been performed in highly-doped $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ alloys strained on Si. First, we have derived a new anisotropic analytical mobility model based on low-field MC simulations. The model should be valid for materials with up to 2% carbon content and 50% germanium content. It should also be able to distinguish between the isotropic relaxed mobility, and the in-plane and

out-of-plane components of the anisotropic mobility tensor relevant to SiGeC alloys strained on bulk Si.

In order to account for strain-related effects, we introduce a strain-compensation parameter z , defined as:

$$z = y - 0.1071x - 0.0163x^2 \quad (2)$$

z is positive (negative) when the SiGeC alloy is tensile (compressively) strained on Si and $z = 0$ when the alloy is exactly strain-compensated. The alloy composite mobility is modeled through the introduction of bowing parameters, as described in Ref.[13]:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1-x}{\mu^{Si}} + \frac{x}{\mu^{Ge}} + \left[\frac{x(1-x)}{C_x^0 + xC_x^1 + x^2C_x^2} + \frac{y(1-y)}{C_y} - \frac{xy}{C_{xy}} \right] \frac{1}{C_\beta(z)} \quad (3)$$

where the bowing terms C_x^i , C_y and C_{xy} quantify the degradation of mobility due to alloy scattering. In (3), both μ^{Si} and μ^{Ge} mobility terms are described using doping-dependent Caughey-Thomas expressions [14]. All model parameters are adjusted to obtain an optimal agreement between formula (3) and MC simulations results.

Figure 4a (4b) shows the behavior of the resulting majority (minority) electron mobility in SiGe alloys as the doping concentration is increased. Figures 5a to 5d show the dependence of electron mobility upon C content in intrinsic biaxially strained SiGeC alloys. This mobility model is seen to satisfactorily reproduce all effects due to substitutional C, namely alloy scattering, anisotropy due to biaxial strain, and strain compensation when Ge is also introduced (arrow in Fig.5c).

In order to underline the effects of Ge and C contents on the alloy mobility, it is useful to plot the ratio between SiGeC mobility and Si mobility:

$$R_\mu = \frac{\mu(x,y)}{\mu^{Si}} \quad (4)$$

The mobility ratio R_μ can be conveniently used to identify domains of the (x,y) composition spectrum where mobility enhancements could be expected as compared to Si. In figures 6 and 7, we plot the ratio R_μ for several doping concentrations, as given by the analytical law (3). The figures show the isolines of the ratio in the $x - y$ alloy composition space. Fig.6 relates to electron in-plane mobility, while Fig.7 depicts hole in-plane mobility. As it can be seen, electron mobility in strained $Si_{1-x-y}Ge_xC_y$ alloys is always lower than mobility in Si ($R_\mu < 1$), since the beneficial strain effects induced by lattice mismatch cannot overcome the strong alloy scattering. However in the case of hole mobility, both those competing trends, namely alloying and strain, can result in a very significant mobility enhancement ($R_\mu > 1$), especially when the SiGeC layer is submitted to a highly compressive biaxial stress.

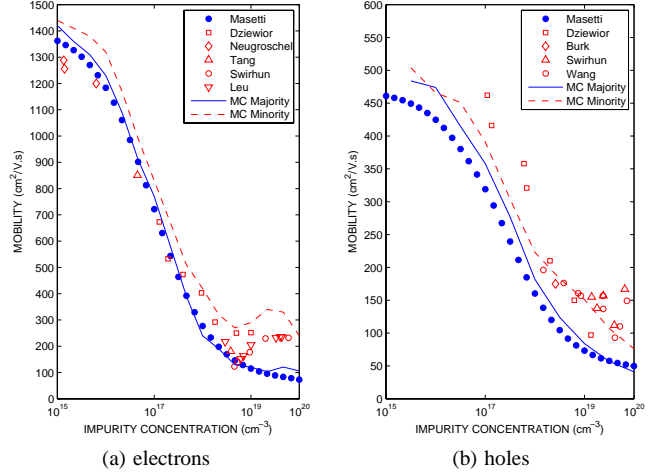


Fig. 1. Mobility as a function of impurity concentration in silicon. MC simulation results are compared to measurements. Full (open) symbols and solid (dashed) lines refer to majority (minority) carrier mobility. Experimental data are taken from Ref.[15], [16], [17], [18], [19], [20], [21], [22], [23], [24], [25].

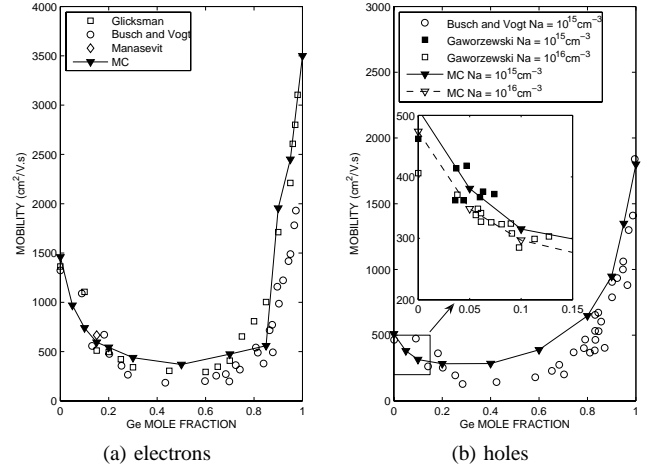


Fig. 2. Mobility as a function of Ge content in relaxed SiGe alloys. MC simulation results are compared to measurements. Experimental data are taken from Ref.[26], [27], [28], [11].

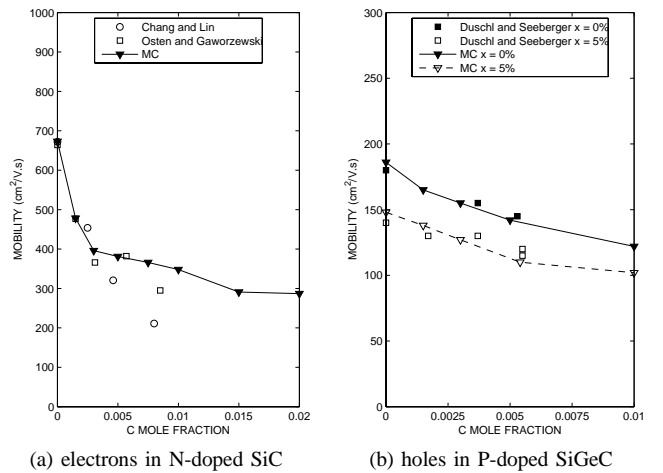


Fig. 3. In-plane mobility as a function of C content in SiGeC alloys strained on Si. MC simulation results are compared to measurements. Experimental data are taken from Ref.[12], [29], [30].

TABLE II
PARAMETER VALUES FOR THE ENERGY RELAXATION TIME MODEL

CARRIER	τ_0 ps	τ_1 ps	C_0
e	0.38	0.04	0.18
h	0.36	0.13	0.10

IV. ENERGY RELAXATION TIME MODEL

In a second set of Full-Band MC simulations, high-field transport properties such as saturation velocities and energy relaxation times are investigated. The energy relaxation time is extracted using the indirect method reported in Ref.[31]. During constant-field MC simulations, charge carrier drift velocity v_c and average energy E_c are calculated. The carrier energy relaxation time is deduced from the 2 aforementioned pieces of data, according to:

$$\tau = \frac{3k_B}{2e} \times \frac{T_C - T_L}{v_c F} \quad (5)$$

where F is the electric field, T_L is the lattice temperature, and the carrier temperature T_C is related to the carrier energy E_c through $E_c = 3/2k_B T_C$.

Starting from the MC results, we develop and calibrate an analytical formula for the carrier energy relaxation time in $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ alloys. It is found that the relaxation time τ can be efficiently modeled as a function of the ratio between carrier temperature T_C and lattice temperature T_L [31]:

$$\tau = (\tau_0 + \tau_1 x) \times \left[1 - \exp\left(-C_0 \frac{T_C}{T_L}\right) + \left(\frac{T_C}{T_L}\right)^{-1} \right] \quad (6)$$

In (6), the τ_1 parameter controls the alloying effect due to Ge mole fraction x . The dependencies of τ upon C mole fraction and doping concentration were found to be negligible. Model parameter values specific to electron and hole transport are reported in table II.

Figures 8a and 8b show MC results for the electron and hole energy relaxation time in SiGe alloys, respectively. Also shown is the analytical model behavior, as expressed in (6). As it can be seen, the MC-based model significantly improves the default constant model commonly used in device simulations.

V. CONCLUSION

We have employed a homogeneous Monte Carlo simulation technique to calculate charge carrier transport properties in ternary $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ alloys. All the relevant scattering mechanisms have been included, and their respective scattering rates have been modeled consistently with a large number of experimental measurements. Analytical models for electron and hole low-field mobility and energy relaxation time have been derived from a systematic fitting procedure applied to Monte Carlo results. Based on the presented analytical TCAD models, strategy for performance optimization in advanced bipolar devices with respect to strain and alloying effects in SiGeC, can be adequately addressed in the early phase of technology development.

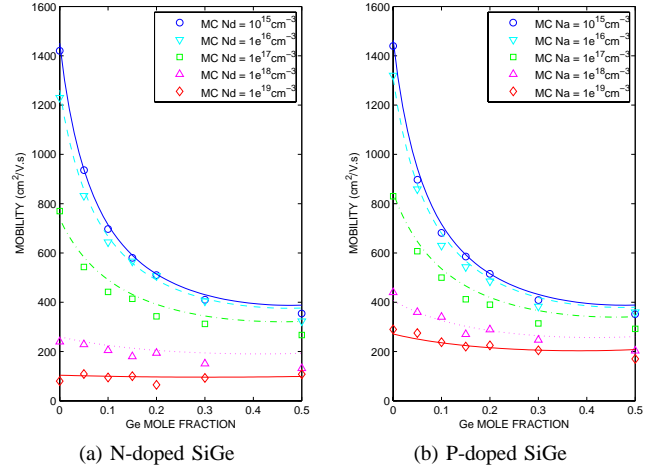


Fig. 4. Combined effects of alloying and doping on electron mobility in relaxed SiGe alloys. Minority electron mobilities are consistently higher than majority electron mobilities. Symbols refer to MC simulations, lines represent our analytical mobility model.

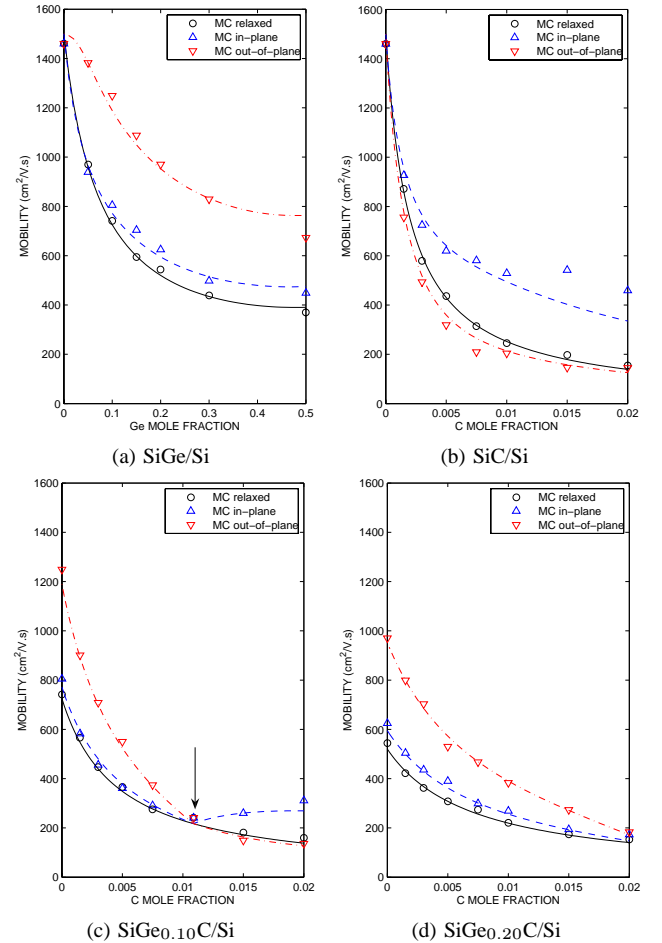


Fig. 5. Combined effects of alloying and strain on electron mobility in undoped SiGeC alloys. Biaxial strain due to lattice mismatch induces the mobility anisotropy. When strain compensation occurs, the anisotropy vanishes (arrow). Symbols refer to MC simulations, lines represent our analytical mobility model.

REFERENCES

- [1] S. Decoutere and A. Sibaja-Hernandez *Mat. Sci. Semicon. Proc.*, vol. 8, p. 283, 2005.
- [2] M. V. Fischetti and S. E. Laux *Phys. Rev. B*, vol. 38, p. 9721, 1988.
- [3] F. M. Buffer and B. Meinerzhagen *J. Appl. Phys.*, vol. 84, p. 5597, 1998.
- [4] C. Canali, C. Jacoboni, and F. Nava *Phys. Rev. B*, vol. 12, p. 2265, 1975.
- [5] M. V. Fischetti, N. Sano, and S. E. Laux in *Simulation of Semiconductor Processes and Devices 1996*, p. 43, 1996.
- [6] J. R. Meyer and F. J. Bartoli *Phys. Rev. B*, vol. 23, p. 5413, 1981.
- [7] L. E. Kay and T.-W. Tang *J. Appl. Phys.*, vol. 70, p. 1475, 1991.
- [8] P. Lugli and D. K. Ferry *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 32, p. 2431, 1985.
- [9] M. V. Fischetti and S. E. Laux *J. Appl. Phys.*, vol. 80, p. 2234, 1996.
- [10] F. Murphy-Armando and S. Fahy *Phys. Rev. Lett.*, vol. 97, p. 096606, 2006.
- [11] P. Gaworzewski, K. Tittelbach-Helmrich, and U. Penner *J. Appl. Phys.*, vol. 83, p. 5258, 1998.
- [12] S. T. Chang, C. Y. Lin, and S.-H. Liao *Appl. Surf. Sci.*, vol. 254, p. 6203, 2008.
- [13] V. Palankovski, G. Röhrer, and T. Grasser *Appl. Surf. Sci.*, vol. 224, p. 361, 2004.
- [14] D. M. Caughey and R. E. Thomas *Proc. IEEE*, vol. 55, p. 2192, 1967.
- [15] G. Masetti, M. Severi, and S. Solmi *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 30, p. 764, 1983.
- [16] J. Dziejwior and D. Silber *Appl. Phys. Lett.*, vol. 35, p. 170, 1979.
- [17] A. Neugroschel *IEEE Electron Dev. Lett.*, vol. 6, p. 425, 1985.
- [18] D. D. Tang, F. F. Fang, and M. Scheuermann in *International Electron Devices Meeting 1986*, p. 20, 1986.
- [19] S. E. Swirhun, Y.-H. Kwark, and R. M. Swanson in *International Electron Devices Meeting 1988*, p. 298, 1988.
- [20] S. E. Swirhun, D. E. Kane, and R. M. Swanson in *International Electron Devices Meeting 1986*, p. 24, 1986.
- [21] I.-Y. Leu and A. Neugroschel *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 40, p. 1872, 1993.
- [22] D. E. Burk and V. D. L. Torre *IEEE Electron Dev. Lett.*, vol. 5, p. 231, 1984.
- [23] S. E. Swirhun, J. A. D. Alamo, and R. M. Swanson *IEEE Electron Dev. Lett.*, vol. 7, p. 168, 1986.
- [24] C. H. Wang, K. Misiakos, and A. Neugroschel *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 37, p. 1314, 1990.
- [25] C. H. Wang and A. Neugroschel *IEEE Electron Dev. Lett.*, vol. 11, p. 576, 1990.
- [26] M. Glicksman *Phys. Rev.*, vol. 111, p. 125, 1958.
- [27] G. Busch and O. Vogt *Helv. Phys. Acta*, vol. 33, p. 437, 1960.
- [28] H. M. Manasevit, I. S. Gergis, and A. B. Jones *Appl. Phys. Lett.*, vol. 41, p. 464, 1982.
- [29] H. J. Osten and P. Gaworzewski *J. Appl. Phys.*, vol. 82, p. 4977, 1997.
- [30] R. Duschl, H. Seeberger, and K. Eberl *Thin Solid Films*, vol. 336, p. 336, 1998.
- [31] V. Palankovski, B. Gonzalez, and H. Kosina in *Modeling and Simulation of Microsystems 1999*, p. 395, 1999.

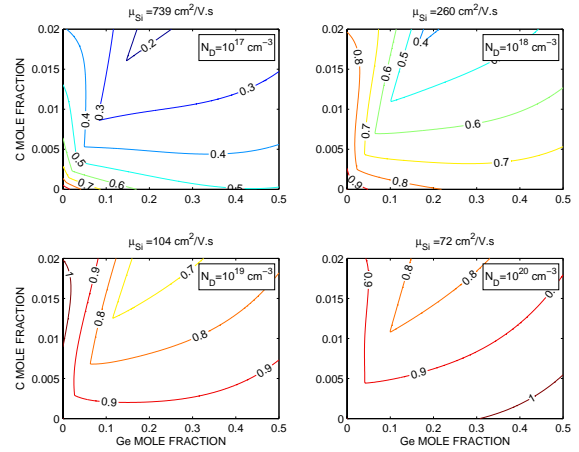


Fig. 6. Ratio between the electron in-plane mobility in strained SiGeC and the electron mobility in bulk Si, plotted as a function of Ge and C contents for 4 different donor concentrations. Isolines discontinuities are located at points of the (x, y) space where strain compensation occurs. The strain compensation points are aligned along a boundary line which separates the compressive strain domain from the tensile strain domain.

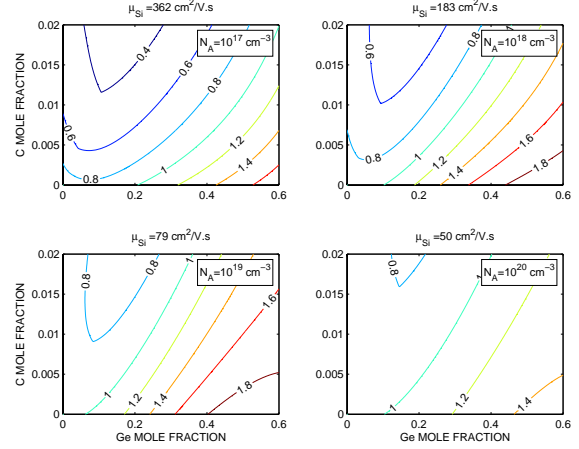


Fig. 7. Same as Fig.6 for hole mobility in acceptor-doped SiGeC and Si.

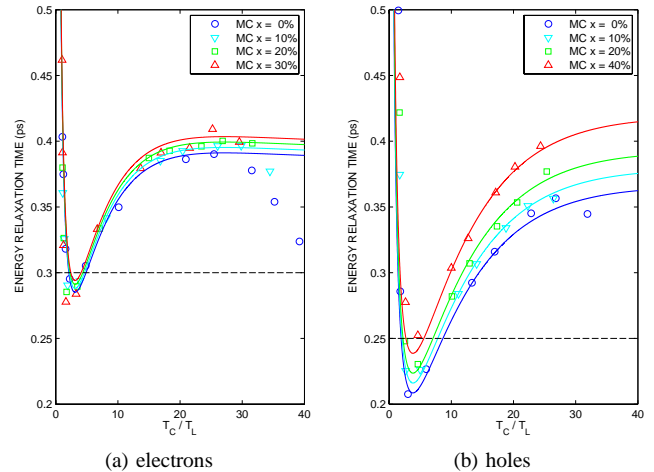


Fig. 8. Energy relaxation time as a function of carrier temperature in relaxed SiGe alloys. Symbols refer to MC simulations, solid lines represent our analytical relaxation time model. Dashed lines indicate the default relaxation time parameter values used in *Sentaurus Device* hydrodynamic model.

Monte Carlo simulation of high-energy transport of electrons and holes in bulk SiGeC alloys

M Michailat¹, D Rideau¹, F Aniel², C Tavernier¹ and H Jaouen¹

¹ STMicroelectronics, 850, rue Jean Monnet, 38926 Crolles, France

² IEF - CNRS UMR 8622, Bât. 220, Université Paris-Sud, 91045 Orsay, France

E-mail: marc.michailat@st.com

Abstract. High-energy transport properties of charge carriers in ternary random $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ alloys are investigated using Full-Band Monte Carlo simulations. Models for scattering mechanisms include phonon scattering, impact ionization and alloy scattering. Phonon scattering rates are wave-vector dependent and calculated consistently with the Full-Band structure. Impact ionization rates are modeled using analytical Keldysh formulas fitted to previously reported *ab initio* results. We derive a model for alloy scattering rate specific to ternary random alloys. It involves 2 effective alloy potentials which are independently calibrated on experimental mobility measurements. Presented Monte Carlo simulation results are shown to be in very good agreement with a variety of high-energy transport measurements, including drift velocities, impact ionization coefficients and quantum yields. Effects of alloy composition on the electrical characteristics of $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ alloys are investigated.

1. Introduction

Performance optimization of advanced heterojunction bipolar transistors has led to the introduction of germanium and carbon in the device base, yielding SiGeC base layers biaxially strained on Si. TCAD simulation of the electrical operation of such SiGeC/Si HBTs should include transport parameter models relevant to ternary SiGeC alloys. The aim of this work is to investigate high-energy carrier transport in $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ materials within the alloy composition domain defined by $0 < x < 100\%$ and $0 < y < 2\%$, by means of Full-Band Monte Carlo (MC) method. The physical models for scattering mechanisms are described and compared with literature in section 2. In section 3, simulation results for high-field transport properties in $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ materials are reported.

2. Scattering models

Our MC simulations rely on SiGe band structures calculated with Tight-Binding method [1]. In order to simulate high-energy transport phenomena, it is necessary to accurately describe the dispersion relation up to 5 eV above the band minima, consequently 5 conduction bands and 3 valence bands are accounted for.

Phonon scattering rates are wave-vector dependent and are calculated consistently with the Full-Band structure [2]. Phonon modes in SiGeC alloys are modeled by 4 Si-Si modes and 4 Ge-Ge modes. Alloy modes such as C-C modes or mixed Si-Ge modes are neglected. The probability for a carrier of wave-vector k in band ν to interact with a phonon mode η is given

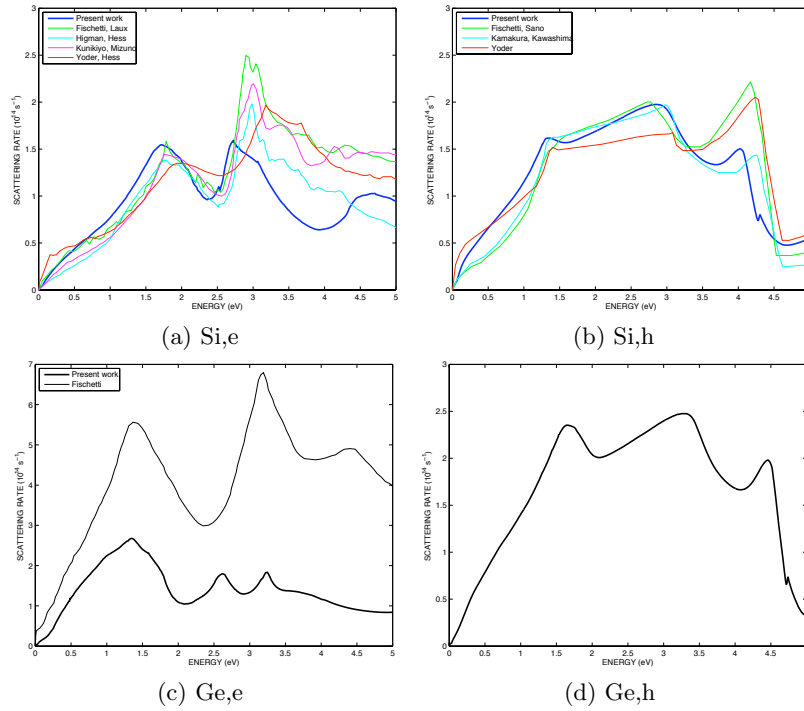


Figure 1: Electron- and hole-phonon scattering rates as a function of carrier energy in bulk Si and Ge at 300 K. Our results are compared with Full-Band results exposed in Refs.[12, 6] and [7] for Si and Ge, respectively.

by:

$$P_{\eta,\nu}(k) = \sum_{\nu',k'} \frac{\pi}{\rho\omega_{\eta}(q)} \Delta_{\eta}^2 \times \mathcal{I}(k,k')^2 \times \delta(E_{\nu} - E_{\nu'} \mp \hbar\omega_{\eta}(q)) (n_{\eta}(q) + 1/2 \pm 1/2) \quad (1)$$

where upper and lower signs respectively refer to phonon emission and absorption. In (1), phonon dispersions $\omega_{\eta}(q)$ are approximated by isotropic quadratic expressions, as in Ref.[3]. Electron overlap integrals $\mathcal{I}(k,k')$ are modeled within the Nordheim approximation [4]. Hole overlap integrals are described by Wiley's angular expressions [5]. Deformation potentials Δ_{η} are treated as empirical parameters. As such they are assumed to depend on the square root of the initial carrier energy, in a similar way as in Ref.[6]. The total carrier-phonon scattering rates in bulk Si and Ge are plotted in Fig.1. In the case of Si, it can be seen that our calibrated rates are in excellent agreement with the consensus established by the modeling community. However in the case of Ge, although several studies have applied Full-Band techniques to the simulation of charge carrier transport [7, 8, 9, 4, 10], only the early work of Fischetti was found to have reported the total electron-phonon scattering rate magnitude. It appears that our results are in strong disagreement with Fischetti's, however it must be stressed that our scattering rate was calibrated together with a realistic impact ionization rate derived from *ab initio* calculations, whereas the early work of [7] relied on an arbitrary Keldysh formula. In SiGeC alloys, the total phonon rate is expressed as a weighted sum of the scattering rates due to Si-Si and Ge-Ge modes [11]:

$$P_{\eta,\nu}(x, y, k) = (1 - x) \cdot P_{\eta,\nu}^{Si}(k) + x \cdot P_{\eta,\nu}^{Ge}(k) \quad (2)$$

Impact ionization rates in bulk Si and Ge are modeled with analytical energy-dependent Keldysh formulas:

$$P_{II}(E) = P_0 \times (E - E_0)^{\alpha_0} \quad (3)$$

Table 1: Keldysh formula parameters for the impact ionization rate in bulk Si and Ge.

Material	Carrier	P_0 ($\text{eV}^{-\alpha_0} \text{s}^{-1}$)	α_0	E_0 (eV)	Ref.
Si	e	1.0×10^{11}	4.6	1.1	[13]
	h	1.14×10^{12}	3.4	1.49	[14]
Ge	e	4.0×10^{11}	4.8	0.8	[8]
	h	1.2×10^{12}	3.8	1.0	[15]

The parameters P_0 , E_0 and α_0 are adjusted so that the empirical rate in (3) fits *ab initio* calculated ionization rates. Parameter values together with references of the *ab initio* studies from which they were determined are indicated in table 1. In SiGe alloys, Keldysh parameters are linearly interpolated between their respective values in Si and Ge. Since no information was found concerning impact ionization in bulk carbon or in carbon alloys, C mole fraction y is assumed to have no influence on impact ionization rates.

Once models for phonon scattering and impact ionization have been specified, simulations of carrier transport in pure Si and Ge materials can be carried out. MC results are compared to a variety of experimental data, including drift velocity characteristics (cf. Fig.2a), impact ionization coefficients (cf. Fig.2b), and quantum yield measurements.

Simulation of charge carrier transport in random alloys requires the inclusion of an additional scattering mechanism, namely alloy scattering. Our model for alloy scattering extends the commonly used model specific to binary random alloys (see e.g. Refs.[11, 16]) to the more general case of ternary random alloys. Alloy scattering rate in ternary $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ is expressed as:

$$P_{\text{alloy}}(x, y, E) = \frac{2\pi}{\hbar} \Omega_c \cdot \mathcal{D}(E) \cdot \left[x(1-x) \cdot U_{\text{Si-Ge}}^2 + y(1-y) \cdot U_{\text{Si-C}}^2 - 2xy \cdot U_{\text{Si-Ge}} \cdot U_{\text{Si-C}} \right] \quad (4)$$

where $\mathcal{D}(E)$ is the density of states per spin. In (4), $U_{\text{Si-Ge}}$ and $U_{\text{Si-C}}$ are effective alloy potential parameters, which are independently calibrated to reproduce low-field mobility measurements in binary $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ [17] and $\text{Si}_{1-y}\text{C}_y$ [18] alloys. When the particle undergoes an alloy scattering event, the MC particle post-scattering state (k', ν') is randomized on the energy-conserving surface.

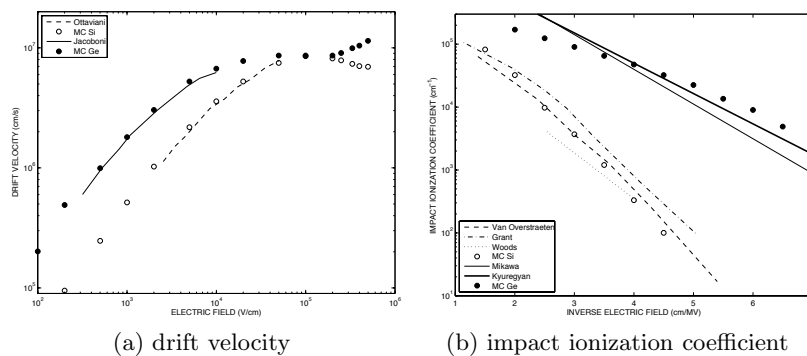


Figure 2: Comparison between MC simulations and measurements for the drift velocity and impact ionization coefficient of holes in bulk Si and Ge.

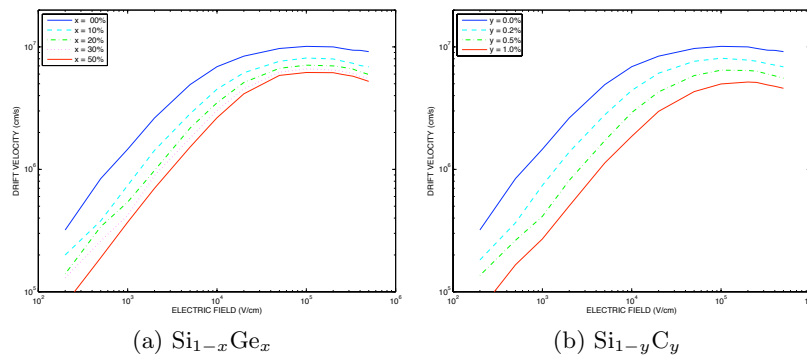


Figure 3: Electron drift velocity as a function of electric field in bulk binary SiGe and SiC alloys. MC simulation results are shown for several alloy compositions.

3. Simulation results

Based on the bandstructure and scattering models exposed in section 2, high-field properties of $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ alloys can be investigated by constant-field single-particle MC simulation. In order to study how the substitutional Ge and C concentrations affect SiGeC electrical properties, we plot in figures 3a and 3b the electron velocity-field characteristics as obtained from MC simulations of binary SiGe and SiC alloys, respectively. It can be seen that both Ge- and C-alloying result in a strong degradation of the electron mobility and saturation velocity. However equivalent results are obtained with 10% Ge and 0.2% C, emphasizing the higher scattering strength of substitutional C atoms as compared to Ge atoms.

4. Conclusion

In this paper, the Monte Carlo technique has been applied to the simulation of high-field properties of ternary SiGeC materials. All the relevant scattering mechanisms have been physically accounted for, and specifically addressed to both electrons and holes. Results for high-energy transport in bulk Si and Ge have been extensively compared to measurements. The models should yield a robust basis for the study of charge carrier transport in SiGeC alloys.

References

- [1] Rideau D, Feraille M and Ciampolini L 2006 *Phys. Rev. B* **74** 195208
- [2] Fischetti M V and Laux S E 1988 *Phys. Rev. B* **38** 9721–45
- [3] Pop E, Dutton R W and Goodson K E 2004 *J. Appl. Phys.* **96** 4998–5005
- [4] Nguyen P H, Hofmann K R and Paasch G 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 375–86
- [5] Wiley J D 1971 *Phys. Rev. B* **4** 2485–93
- [6] Kamakura Y, Kawashima I and Degushi K 1999 *Proc. IEDM (Washington)* pp 727–30
- [7] Fischetti M V 1991 *IEEE Trans. Electron Devices* **38** 634–49
- [8] Fischetti M V, Sano N and Laux S E 1996 *Proc. SISPAD (Tokyo)* pp 43–4
- [9] Nguyen P H, Hofmann K R and Paasch G 2002 *J. Appl. Phys.* **92** 5359–70
- [10] Ghosh B, Wang X and Fan X F 2005 *IEEE Trans. Electron Devices* **52** 547–53
- [11] Buffer F M and Meinerzhagen B 1998 *J. Appl. Phys.* **84** 5597–602
- [12] Abramo A *et al.* 1994 *IEEE Trans. Electron Devices* **41** 1646–54
- [13] Kamakura Y, Mizuno H and Yamaji M 1994 *J. Appl. Phys.* **75** 3500–6
- [14] Kunikiyo T, Takenaka M and Morifuji M 1996 *J. Appl. Phys.* **79** 7718–25
- [15] Sano N, Fischetti M V and Laux S E 1998 *Proc. 6th IWCE (Osaka)* pp 198–201
- [16] Fischetti M V and Laux S E 1996 *J. Appl. Phys.* **80** 2234–52
- [17] Gaworzewski P, Tittelbach-Helmrich K and Penner U 1998 *J. Appl. Phys.* **83** 5258–63
- [18] Osten H J and Gaworzewski P 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 4977–81



Full-Band Monte Carlo investigation of hole mobilities in SiGe, SiC and SiGeC alloys

M. Michailat^{a,b,*}, D. Rideau^a, F. Aniel^b, C. Tavernier^a, H. Jaouen^a

^a STMicroelectronics, 850, rue Jean Monnet, 38926 Crolles, France

^b IEF-CNRS UMR 8622, Bât. 220, Université Paris-Sud, 91405 Orsay, France

ARTICLE INFO

Available online 31 October 2009

Keywords:

SiGe
SiGeC
Monte Carlo
Mobility
Hole

ABSTRACT

Hole transport properties in relaxed and biaxially strained $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, $\text{Si}_{1-y}\text{C}_y$ and $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ alloys are investigated using a Full-Band Monte Carlo simulator. Our results allow the extraction of bulk, in-plane and out-of-plane hole drift mobilities. Doping effects in SiGeC alloys are taken into account through an efficient ionized-impurity scattering model. This model is based on inverse momentum relaxation times derived from phase-shift theory.¹ A new alloy scattering model relevant to the case of random ternary alloys is presented. It involves two effective alloy potential parameters, which account for the respective scattering strengths of Ge and C in the crystal lattice. From our mobility results we have derived an analytical hole mobility model which includes dependencies upon doping concentration, doping type, Ge content and C content.

© 2009 Published by Elsevier B.V.

1. Introduction

Bipolar transistors in advanced BiCMOS technology rely on highly-doped SiGeC bases strained on Si [1]. Modeling the electrical properties of such devices by TCAD means requires an accurate description of SiGeC transport parameters. As such charge carrier mobility models must include physical dependencies upon Ge, C and doping concentrations. In this paper, hole mobilities in doped and strained SiGeC alloys are investigated by Full-Band Monte Carlo (MC) method with a view of deriving an analytical mobility model suitable for implementation in hydrodynamic TCAD simulators.

2. Monte Carlo method

Our Full-Band Monte Carlo simulations rely on strain-dependent SiGe Tight-Binding band structures [2], which include the 3 lowest valence bands (HH, LH and SO). Phonon scattering rates are wave-vector dependent [3] and include 4 Si–Si modes and 4 Ge–Ge modes (i.e. 8 modes in SiGeC alloys) [4].

Our model for the alloy scattering rate in random ternary $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ is derived from the commonly used model specific to binary alloys [4,5]:

$$P_{\text{alloy}}(x, y, E) = \frac{2\pi}{\hbar} \Omega_c \cdot \mathcal{D}(E) \cdot [x(1-x) \cdot U_{\text{Si-Ge}}^2 + y(1-y) \cdot U_{\text{Si-C}}^2 - 2xy \cdot U_{\text{Si-Ge}} \cdot U_{\text{Si-C}}] \quad (1)$$

In Eq. (1), $\mathcal{D}(E)$ is the density of states per spin and $U_{\text{Si-Ge}}$, $U_{\text{Si-C}}$ are effective alloy potential parameters. Both these alloy potentials are independently calibrated on several hole mobility measurements:

- $U_{\text{Si-Ge}}$ is adjusted to reproduce the x dependence of mobility in relaxed $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ alloys, as depicted in Fig. 1. The bowing behavior of mobility in SiGe is accurately reproduced for $U_{\text{Si-Ge}} = 0.5$ eV.
- $U_{\text{Si-C}}$ is tuned to reproduce the y dependence of in-plane mobility in P-doped $\text{Si}_{1-y}\text{C}_y$ strained on Si, as shown in Fig. 2a. The lowering of mobility with increasing C content is due to alloy scattering. Simulation results match the experimental trend for $U_{\text{Si-C}} = 2.2$ eV.

Ionized-impurity scattering is accounted for through a phenomenological scattering model. In a similar way as in Ref. [9,10], we replace the scattering rate by the inverse momentum relaxation time. Since the momentum relaxation rate is significantly lower than the corresponding scattering rate, the scattering process occurs much less frequently during the MC simulation. However, each time impurity scattering is selected, the hole post-scattering state is randomized on the energy-conserving surface. Doing so, we essentially replace frequently occurring scatterings with little modification of the particle state per scattering, by rare scattering events which strongly alter the particle's wave-vector. This approach provides a large gain in computer efficiency, but cannot by itself reproduce experimental mobility measurements. In Ref. [9,10], the momentum relaxation rate is derived from the Brooks–Herring (BH) scattering rate, and must be corrected with doping-dependent prefactors. Since we are willing to make a physical distinction between majority holes and minority holes, which respectively scatter on acceptor and donor impurities, we do not use the BH theory, which is not sensitive to the sign of the scattering potential. Instead, we calculate the momentum relaxation

* Corresponding author. STMicroelectronics, 850, rue Jean Monnet, 38926 Crolles, France.
E-mail address: marc.michailat@st.com (M. Michailat).

¹ Also known as *partial-wave* theory.

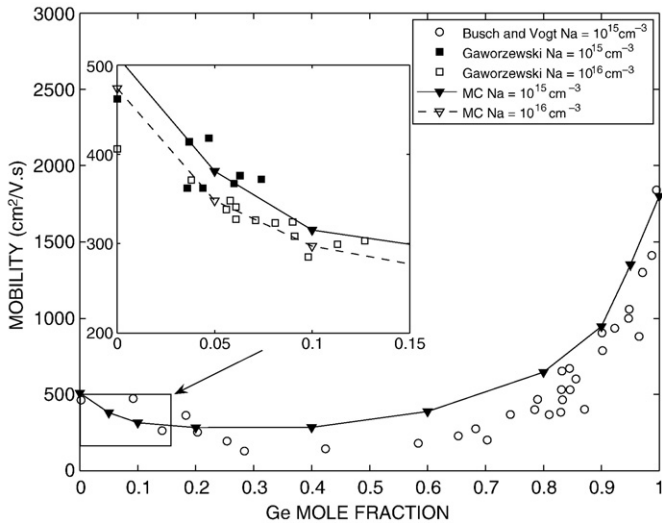


Fig. 1. Mobility as a function of Ge content in relaxed lightly-doped SiGe alloys. MC simulation results are compared to measurements taken from Ref. [6,7].

rate within the phase-shift (PS) theoretical frame [11,12]. Starting with the impurity concentration N_I and type, the scattering potential $V(r)$ can be defined as an attractive or repulsive screened coulomb potential:

$$V(r) = \mp \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 r} e^{-r/\lambda_s} \quad (2)$$

In Eq. (2), the impurity type defines the sign of the potential, while the impurity concentration determines the screening length λ_s . Given

the phase-shifts δ_l calculated consistently with V defined in Eq. (2), the resulting momentum relaxation cross-section can be written as:

$$\sigma_M = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \sin^2(\delta_l - \delta_{l+1}) \quad (3)$$

and the corresponding momentum relaxation rate is expressed as:

$$P_{imp} = N_I \cdot v(k) \cdot \sigma_M \quad (4)$$

Since the PS theory relies on the parabolic band assumption where $E = \hbar^2 k^2 / 2m^*$, P_{imp} can be conveniently expressed as a function of the carrier energy. Furthermore, the specification of an attractive or repulsive potential in Eq. (2) yields 2 different series of phase-shifts δ_l , and eventually leads to doping type sensitive scattering rates. Finally, a single constant prefactor has to be applied to the impurity scattering rate in Eq. (4). Setting the prefactor value to 5.0 results in a good agreement between our MC simulations and experimental doping-dependent mobility measurements (cf. Fig. 2b). Ionized-impurity scattering rates as obtained from Eq. (4) are exposed in Fig. 3. For low doping levels, scattering rates are insensitive to the impurity type, yielding equal minority and majority hole mobilities. However at high doping levels, hole-acceptor scattering rates are seen to be stronger than hole-donor rates, which results in the lower mobility of majority holes as compared to minority ones.

To account for degeneracy effects at very high carrier concentrations, the Pauli Exclusion Principle is included using the actual hole distribution function discretized with a cubic mesh of the reciprocal space [13].

3. Hole mobility model

A large set of SiGeC MC simulations have been performed for several alloy compositions, doping concentrations and strain configurations. We take these simulation results as a reference basis to derive an analytical hole mobility model for P-doped and N-doped

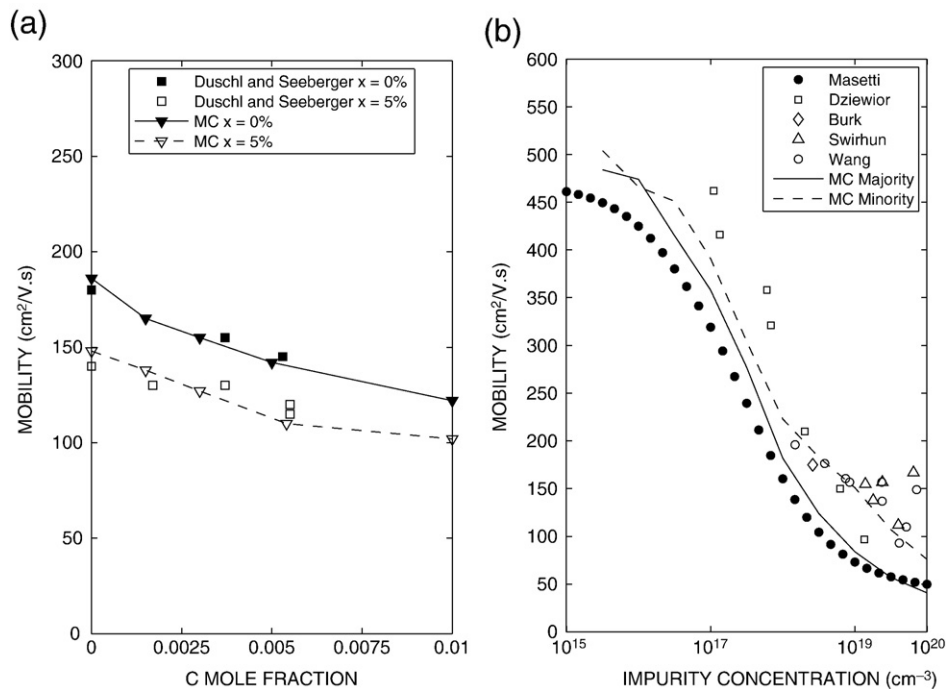


Fig. 2. Mobility as a function of C content (Fig. 2a) and impurity concentration (Fig. 2b). MC simulation results are compared to measurements. Experimental data in Fig. 2a are taken from Ref. [8].

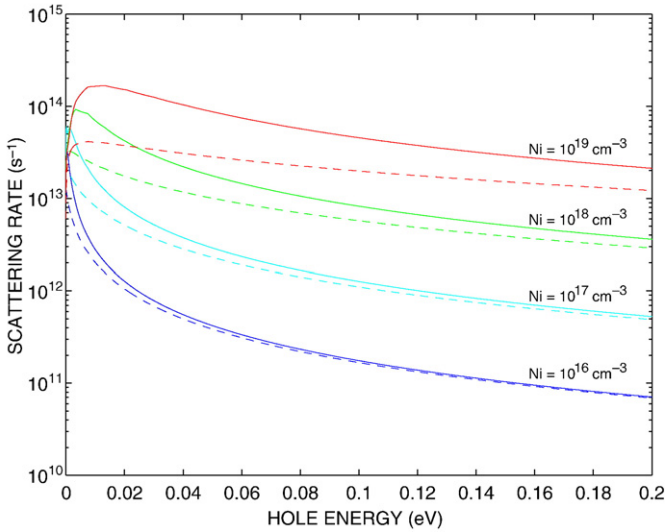


Fig. 3. Ionized-impurity scattering rate plotted as a function of hole energy for increasing doping concentrations. Solid and dashed lines respectively represent scattering rates due to acceptor and donor impurities.

$\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ alloys. The model should be valid for materials with up to 2% carbon content and 60% germanium content. It should also be able to distinguish between the isotropic relaxed mobility μ_0 , and the in-plane μ_{\parallel} and out-of-plane μ_{\perp} components of the anisotropic mobility tensor relevant to SiGeC alloys strained on bulk Si. It is however rather difficult to capture all the effects due to alloying, doping and strain in a single analytical formulation, therefore many parameters had to be introduced to get a satisfactory match between the model and MC results. All the parameter values of the mobility model are reported in Table 1.

In order to account for strain-related effects, we introduce a strain compensation parameter z , defined as:

$$z = y - 0.1071x - 0.0163x^2 \quad (5)$$

z is positive (negative) when the SiGeC alloy is tensile (compressively) strained on Si and $z=0$ when the alloy is exactly strain-compensated.

Table 1

Parameters for the analytical hole mobility model.

		μ_{LD} cm ² /Vs	μ_{HD} cm ² /Vs	N_{ref} cm ⁻³	α
Si	maj	510	42	3.0e17	0.70
	min		104	3.0e17	0.70
Ge	maj	1800	42	9.0e16	0.65
	min		134	9.0e16	0.60
			z_{ref}^1	z_{ref}^2	β
μ_{\parallel}	$z > 0$		0.0010	0.05	2.1
	$z < 0$		0.0010	0.05	2.1
μ_{\perp}	$z > 0$		0.0015	0.05	3.2
	$z < 0$		0.0015	0.05	2.1
C_x^0	C_x^1	C_x^2	C_y	C_{xy}	cm ² /Vs
60	70	170	3.4	3.0	

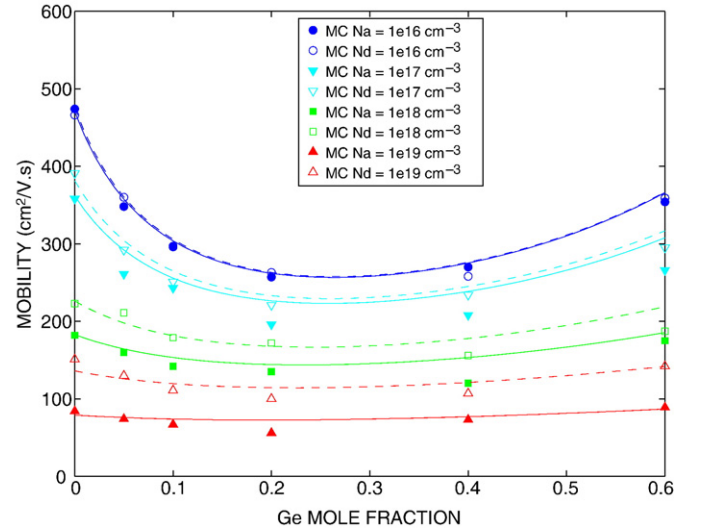


Fig. 4. Combined effects of alloying and doping on hole mobility in relaxed SiGe alloys. Majority hole mobilities (full symbols, solid lines) are consistently lower than minority hole mobilities (empty symbols, dashed lines). Symbols refer to MC simulations, lines represent our analytical mobility model.

The doping-dependent mobility in Si is described by a Caughey–Thomas expression [14]:

$$\mu^{Si} = \mu_{HD} + \frac{\mu_{LD} + (z/z_{ref}^1)^2 - \mu_{HD}}{1 + (N_i/N_{ref})^\alpha} \quad (6)$$

where N_i is the doping concentration. In Eq. (6), each doping type is assigned a different set of parameter values. The z -dependent term in Eq. (6) describes the stress enhancement of the phonon-limited hole mobility. The doping-dependent germanium mobility μ^{Ge} is also modeled according to Eq. (6), but with its own set of parameters, and with no z -dependent term.

The alloy composite mobility is modeled through the introduction of bowing parameters, as described in Ref. [15]:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1-x}{\mu^{Si}} + \frac{x}{\mu^{Ge}} + \left[\frac{x(1-x)}{C_x^0 + xC_x^1 + x^2C_x^2} + \frac{y(1-y)}{C_y} - \frac{xy}{C_{xy}} \right] \frac{1}{C_\beta(z)} \quad (7)$$

where the parameters C_x^i , C_y and C_{xy} quantify the degradation of mobility due to alloy scattering. In Eq. (7), the z -dependent C_β term reproduces the alloy scattering rate reduction due to stress-induced valence band splitting. It can be accurately modeled according to:

$$C_\beta(z) = \beta - (\beta - 1) \times e^{-|z|/z_{ref}^2} \quad (8)$$

It should be noted that the parameters of the z -dependent functions in Eq. (6) and Eq. (8), which are related to stress effects, take different values depending on the sign of z . Furthermore each component of the mobility tensor (μ_{\parallel} and μ_{\perp}) is assigned a specific set of parameters. If the SiGeC mobility to be calculated is relevant to a relaxed bulk alloy, formula (7) is used with $z=0$.

An exhaustive comparison between our MC simulation results and the derived analytical model is shown in Figs. 4 and 5. The hole mobility model is shown to behave very consistently with the MC results. Eventually, we plot in Figs. 6 and 7 the ratio between SiGeC mobility and Si mobility for several acceptor concentrations, as given by the analytical law (7). The figures show the isolines of the ratio in the x - y alloy composition space. In Fig. 6 the ratio is μ_0/μ^{Si} i.e. the alloy mobility is relaxed, while in Fig. 7 the ratio is μ_{\parallel}/μ^{Si} i.e. it involves the in-plane SiGeC mobility. It can be seen that, in case the SiGeC alloy

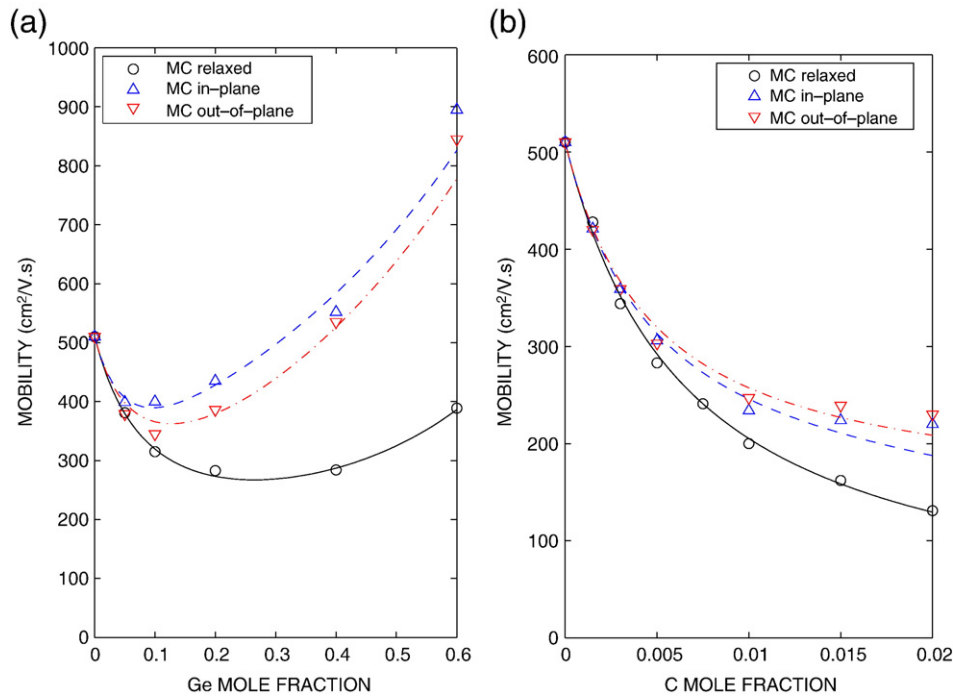


Fig. 5. Combined effects of alloying and strain on hole mobility in undoped binary SiGe (Fig. 5a) and SiC (Fig. 5b) alloys. Symbols refer to MC simulations, lines represent our analytical mobility model.

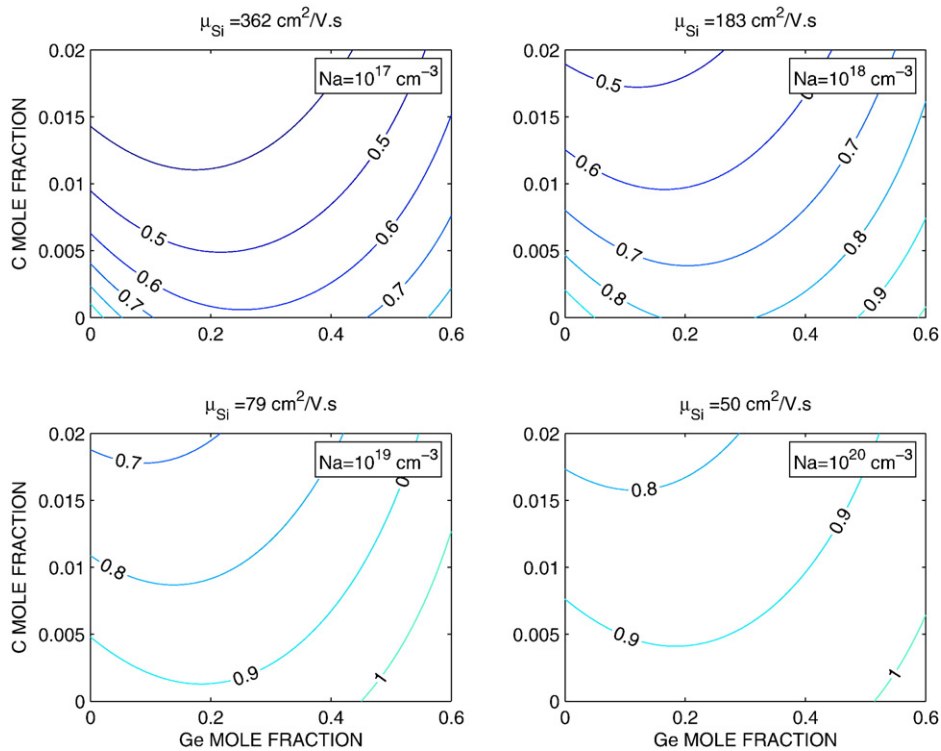


Fig. 6. Ratio between mobility in relaxed SiGeC and mobility in bulk Si, plotted as a function of Ge and C contents for 4 different acceptor concentrations.

is unstrained, the mobility is strongly reduced by alloy scattering so that the mobility ratio is smaller than 1. However when the SiGeC layer is coherently strained on Si, the mobility also benefits from strain effects induced by the lattice mismatch. Both those competing trends, namely alloying and strain, can result in a very significant enhancement of hole low-field mobility, especially when the SiGeC layer is submitted to a highly compressive biaxial stress.

4. Conclusion

In this paper, hole transport in P-doped and N-doped SiGeC alloys has been simulated by MC method. All the relevant scattering mechanisms have been physically and efficiently modeled. An exhaustive hole mobility model has been derived from low-field MC simulations. It is fully implementable in hydrodynamic-based device

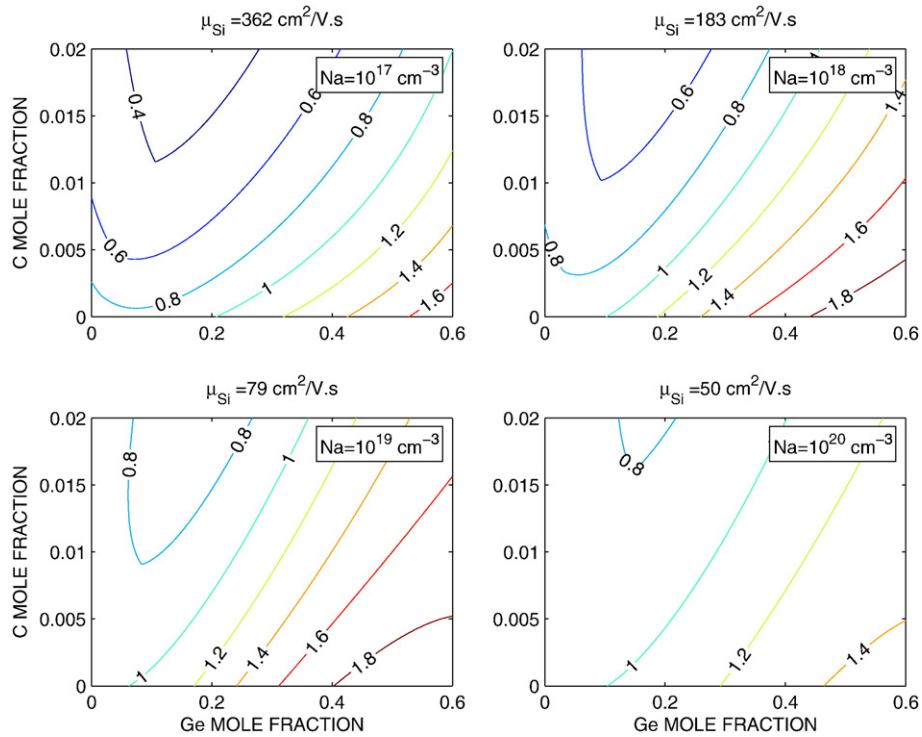


Fig. 7. Same as Fig. 6 but with the in-plane mobility of SiGeC biaxially strained on Si.

simulators, and should provide a reliable basis for TCAD simulation of advanced SiGeC bipolar transistors.

References

- [1] S. Decoutere, A. Sibaja-Hernandez, *Mat. Sci. Semicon. Proc.* 8 (2005) 283.
- [2] D. Rideau, M. Feraille, L. Ciampolini, M. Minondo, C. Tavernier, H. Jaouen, *Phys. Rev. B* 74 (2006) 195208.
- [3] M.V. Fischetti, S.E. Laux, *Phys. Rev. B* 38 (1988) 9721.
- [4] F.M. Bufler, B. Meinerzhagen, *J. Appl. Phys.* 84 (1998) 5597.
- [5] M.V. Fischetti, S.E. Laux, *J. Appl. Phys.* 80 (1996) 2234.
- [6] G. Busch, O. Vogt, *Helv. Phys. Acta* 33 (1960) 437.
- [7] P. Gaworzewski, K. Tittelbach-Helmrich, U. Penner, *J. Appl. Phys.* 83 (1998) 5258.
- [8] R. Duschl, H. Seeberger, K. Eberl, *Thin Solid Films* 336 (1998) 336.
- [9] F.M. Bufler, A. Schenk, W. Fichtner, *IEEE Trans. Electron Devices* 47 (2000) 1891.
- [10] F.M. Bufler, P.D. Yoder, W. Fichtner, *Proc. SISPAD*, 1999, p. 31.
- [11] J.R. Meyer, F.J. Bartoli, *Phys. Rev. B* 23 (1981) 5413.
- [12] L.E. Kay, T.-W. Tang, *J. Appl. Phys.* 70 (1991) 1475.
- [13] P. Lugli, D. Ferry, *IEEE Trans. Electron. Devices* 32 (1985) 2431.
- [14] D.M. Caughey, R.E. Thomas, *Proc. IEEE* 55 (1967) 2192.
- [15] V. Palankovski, G. Röhrer, T. Grasser, S. Smirnov, H. Kosina, S. Selberherr, *Appl. Surf. Sci.* 224 (2004) 361.

Résumé

Dans cette thèse, un algorithme de simulation Monte Carlo est spécifiquement développé pour modéliser le transport homogène et stationnaire des porteurs de charge dans les alliages aléatoires ternaires massifs de type $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$. Le simulateur Monte Carlo intègre une description numérique Full-Band de la structure de bande, et il est adapté à la simulation du transport des électrons et des trous. Les mécanismes d'interaction modélisés incluent l'interaction porteur-phonon, l'ionisation par choc, la diffusion sur potentiel d'alliage, l'interaction porteur-impureté ionisée, et le principe d'exclusion de Pauli. Les modèles théoriques sont calibrés sur un ensemble complet de résultats expérimentaux, et un accord quantitatif est atteint entre la simulation et la mesure sur de nombreuses propriétés électriques, qui incluent la mobilité à faible champ, la vitesse de dérive, le coefficient d'ionisation et le ratio d'efficacité quantique. L'algorithme de simulation Monte Carlo final est capable de modéliser le transport des porteurs de charge majoritaires et minoritaires dans les alliages ternaires $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ dopés, relaxés ou biaxialement contraints sur substrat de silicium.

Le modèle Monte Carlo développé peut être utilisé pour extraire les paramètres matériau requis dans les simulateurs hydrodynamiques de dispositifs, notamment dans le cadre de la simulation de transistors bipolaires à hétérojonction intégrant des bases de SiGeC fortement dopées et épitaxiées sur silicium. L'implémentation de paramètres électriques spécifiques aux alliages SiGeC nous ont permis de prendre en compte les profils de germanium, de carbone et de dopants dans les simulations hydrodynamiques de dispositifs HBT. Cette description rigoureuse des propriétés électroniques du matériau SiGeC au sein d'un dispositif HBT constitue l'état de l'art de la modélisation électrique des transistors bipolaires avancés.

Abstract

In this thesis, a Monte Carlo simulation algorithm has been specifically developed to simulate the homogeneous and stationary transport of charge carriers in bulk ternary random $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ alloys. The Monte Carlo simulator employs a numerical Full-Band description of the band structure, and it is suitable for the simulation of both electron and hole transport. Included scattering mechanisms account for carrier-phonon scattering, impact ionization, alloy scattering, ionized impurity scattering, and the Pauli exclusion principle. Theoretical models are calibrated on a complete set of experimental results, and a quantitative agreement is reached between simulation and experiment for many electrical properties, which include low-field mobility, drift velocity, impact ionization coefficient and quantum yield ratios. The final Monte Carlo simulation algorithm is able to simulate majority and minority charge carrier transport in doped ternary $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ alloys, relaxed or biaxially strained on a silicon substrate.

The Monte Carlo model can be used to extract material parameters required by hydrodynamic device simulators, notably for the simulation of heterojunction bipolar transistors integrating highly-doped SiGeC base layers epitaxially grown on silicon. The implementation of electrical parameters specific to SiGeC alloys enabled us to take into account the germanium, carbon and doping profiles in hydrodynamic simulations of HBT devices. This rigorous description of the electronic properties of SiGeC materials within HBT devices constitutes the current state-of-the-art for the electrical simulation of advanced bipolar transistors.