



HAL
open science

Résolution de l'équation de transport de boltzmann par une approche Monte Carlo (full-band), application aux cellules solaires à porteurs chauds et aux composants ultra-rapides

Eric Tea

► **To cite this version:**

Eric Tea. Résolution de l'équation de transport de boltzmann par une approche Monte Carlo (full-band), application aux cellules solaires à porteurs chauds et aux composants ultra-rapides. Autre [cond-mat.other]. Université Paris Sud - Paris XI, 2011. Français. NNT: 2011PA112356. tel-00670433

HAL Id: tel-00670433

<https://theses.hal.science/tel-00670433>

Submitted on 15 Feb 2012

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.

UNIVERSITE PARIS-SUD 11

ÉCOLE DOCTORALE : STITS (ED n°422)
Laboratoire : Institut d'Electronique Fondamentale – UMR 8622

DISCIPLINE : PHYSIQUE

THÈSE DE DOCTORAT

soutenue le 16/12/2011

par

Eric TEA

Résolution de l'Equation de Transport de Boltzmann par
une approche Monte Carlo (Full-Band), application aux
Cellules Solaires à Porteurs Chauds et aux composants
ultra-rapides

Directeur de thèse : Frédéric ANIEL

Composition du jury :

Président du jury : Philippe DOLLFUS
Rapporteurs : Jean-Louis FARVACQUE
Jean-Luc THOBEL
Examineurs : Soline BOYER-RICHARD
Jean-François GUILLEMOLES

A ma mère,

« So I left him, saying to myself, as I went away: Well, although I do not suppose that either of us knows anything really beautiful and good, I am better off than he is - for he knows nothing, and thinks that he knows. I neither know nor think that I know. »

Plato, « *Apology* », section 21d (traduction de Benjamin Jowett)

Remerciements

Cette liste de remerciements ne peut commencer que par mon directeur de thèse, Frédéric Aniel, qui m'a chaleureusement accueilli dans son équipe et avec qui j'ai travaillé avec plaisir. Nos échanges tant scientifiques que non scientifiques ont été très intéressants, et son humour qui égaille la salle café après le déjeuner un plus. Le rapport hiérarchique a toujours été clair mais j'ai grandement apprécié la confiance qu'il m'a accordée, la liberté qu'il m'a laissée, et le fait que l'on ait travaillé « ensemble » sur cette thèse durant ces années.

Je remercie Jean-François Guillemoles, à l'enthousiasme contagieux, qui a été mon co-tuteur de stage durant mon année de Master. Ce stage et mes années d'université durant lesquelles mes enseignants m'ont communiqué leur passion, ont marqué le début de cette histoire que je ne regrette pas.

Je remercie également, les membres du jury non encore cités (Jean-Louis Farvacque, Jean-Luc Thobel, Soline Boyer-Richard et Philippe Dollfus) pour m'avoir autorisé à soutenir ma thèse, et avoir apprécié mon travail.

Cette thèse a été nourrie par les travaux menés avec mes collègues (Hani Hamzeh, Bouchra Tissafi, Marc Michailat et Eloy Ramirez Garcia de l'équipe, Ahmad Driss de l'équipe QD, et Arthur Le Bris de l'IRDEP). Les interactions avec ces (ex-)doctorants furent largement fructueuses et je les en remercie. Anne-Sophie Grimault-Jacquin et Nicolas Zerounian, de mon équipe d'accueil, méritent également leur remerciements. Marie Flé et Patrice Fromy de la Direction Informatique ont également été d'une aide précieuse dans le débogage d'IDA, le cluster de calcul de l'Université.

D'autres collègues méritent également leur place ici. Il s'agit entre autre des chercheurs que je côtoyais tous les jours avec plaisir autour d'un café ou non, dont Philippe Boucaud et Sébastien Sauvage de l'équipe QD qui m'ont donné du temps et l'accès à leur banc d'expérience pompe-sonde. Je n'oublie pas le personnel de différents services administratifs qui se souviendra sûrement de moi pour mon inefficacité administrative.

Je ne peux ne pas inclure dans ces remerciements mes amis, qui m'ont soutenu et dont une liste non exhaustive est : Chou, Christophe, les UPMCiens, les architectes & co, Tristan & co, et les autre doctorants de l'institut avec qui je « dégustais » souvent mon café. Je suis également reconnaissant envers ma famille, pour les hauts et les bas, sans quoi je ne serais pas là. Merci à Doktor Sandrine Tea (qui m'écoute parler les rares fois où je le fais) pour tout.

Merci à Feriel pour sa compréhension et sa patience qui valent de l'or. Pour des raisons diverses et variées, Malo de Kersauson figure dans cette partie.

Je conclus cette liste de remerciements avec ceux qui ont contribué de façon non négligeable à faire de moi ce que je suis aujourd'hui. Merci Evan, Liwen.

SOMMAIRE

<u>INTRODUCTION</u>	1
<u>CHAPITRE I : STRUCTURE ELECTRONIQUE</u>	5
1) Principe de l'EPM	5
2) Mise en œuvre du modèle NLEPM	9
3) Alliages ternaires	14
4) Facteur de recouvrement intra et inter-bande	19
5) Facteur de recouvrement « optique »	26
6) Conclusion	27
Références Bibliographiques	28
<u>CHAPITRE II : ENSEMBLE MONTE CARLO</u>	31
1) Principes de l'EMC	31
2) Configuration de base	34
<i>a) modélisation de la structure de bande</i>	35
<i>b) processus de diffusion : set de base</i>	37
3) Configuration étendue	41
<i>a) modélisation de la structure de bande</i>	41
<i>b) fonction diélectrique et écrantage</i>	43
<i>c) collisions porteur-porteur et porteur-impureté ionisée</i>	47
<i>d) principe d'exclusion de Pauli</i>	51
4) Détermination des paramètres	53
<i>a) propriétés de transport</i>	55
<i>b) impact du facteur de recouvrement dans le transport des trous</i>	57
5) Conclusion	59
Références Bibliographiques	60

<u>CHAPITRE III : PROCESSUS DE GENERATION/RECOMBINAISON</u>	63
1) Photo-génération / recombinaison radiative	64
2) Ionisation par choc	69
3) Recombinaisons non radiatives : processus Auger	81
4) Conclusion	88
Références Bibliographiques	89
<u>CHAPITRE IV : ELECTRONS MINORITAIRES</u>	93
1) Fonction diélectrique totale et couplage phonon-plasmon	94
2) Taux d'interaction et états finals après diffusion	97
3) Résultats	98
<i>a) méthode numérique</i>	98
<i>b) fonction spectrale $\text{Im}(-1/\epsilon_T)$</i>	100
<i>c) taux d'interaction et états finals</i>	103
<i>d) mobilités des électrons minoritaires</i>	105
4) Conclusion	107
Références Bibliographiques	108
<u>CHAPITRE V : PHONONS CHAUDS ET RELAXATION DES PORTEURS</u>	109
1) Phonons Chauds	109
2) Couplage EMC porteurs/phonons	111
<i>a) EMC porteurs</i>	111
<i>b) EMC phonons</i>	115
<i>c) Couplage de l'EMC phonons à l'EMC porteurs</i>	116
<i>d) Pompe-sonde : principes</i>	117
3) Résultats	117
<i>a) densités de paires électron-trou faibles</i>	118
<i>b) densités de paires électron-trou grandes</i>	122
4) Conclusion	126
Références Bibliographiques	127

<u>CHAPITRE VI : CELLULES SOLAIRES A PORTEURS CHAUDS</u>	129
1) Cellule Solaire à Porteurs Chauds	130
2) Modélisation des Contacts Sélectifs en Energie	138
3) Résultats : position énergétique des CSE et éclairage	140
4) Impact des phonons chauds sur la distribution électronique	147
5) Conclusion	150
Références Bibliographiques	151

<u>CHAPITRE VII : PHOTO-COMMUTATEUR</u>	153
1) Le photo-commutateur : dispositif	153
2) Le photo-commutateur : modélisation	158
3) Calculs des temps de relaxation du moment et de l'énergie pour $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$	162
a) $n = 1.06 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et $3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3} \leq p \leq 1.06 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	162
b) $n = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et $3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3} \leq p \leq 1.06 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	164
c) $p = 1.06 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et $3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3} \leq n \leq 1.06 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	165
d) $p = 3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et $3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3} \leq n \leq 1.06 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	166
e) zones dopées: $n = p = 3,5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	167
4) Résultats de modélisations du PCS avec MAXTRA3D	168
5) Conclusion	178
Références Bibliographiques	179

<u>CONCLUSION</u>	181
--------------------------------	------------

<i>Liste d'acronymes</i>	187
---------------------------------------	------------

INTRODUCTION

La connaissance des propriétés électroniques des matériaux semi-conducteurs est vitale pour le développement de futurs dispositifs électroniques et opto-électroniques. La dynamique des porteurs de charge, qui se traduit par les propriétés électroniques, est un facteur déterminant pour certaines applications requérant des conditions particulières (dopage, excitation optique, champ électrique, etc.). La caractérisation expérimentale des semi-conducteurs n'est cependant pas toujours une tâche facile, notamment lorsque de nombreux processus affectant la dynamique des porteurs de charge sont en compétition. Dans ce cas, les mesures ne peuvent parfois pas discriminer différents processus et ne peuvent donc qu'extraire des informations globales. La modélisation vient alors compléter les études expérimentales, et c'est dans ce contexte que se place cette thèse : pouvoir déterminer des paramètres clés à d'autres modélisations permettant notamment l'optimisation de dispositifs.

L'équipe Ephyscas de l'Institut d'Electronique Fondamentale (IEF) au sein de laquelle s'est déroulée cette thèse, possède une expertise très large des composants ultra-rapides à semi-conducteurs, tant d'un point de vue expérimental que théorique. Parmi les applications visées, figurent les Transistors Bipolaires à Hétéro-jonction pour l'électronique ultra-rapide, et les Photo-Commutateurs pour génération d'ondes THz. Des thèses ont déjà été consacrées à l'étude de ces dispositifs. Dans ces travaux, le transport des porteurs de charge était traité de façon macroscopique en considérant des lois dépendantes de données macroscopiques telles que les mobilités ou les temps de relaxation. Cette thèse est donc focalisée sur le calcul de telles données en traitant le transport et la relaxation des porteurs de charge d'un point de vue microscopique. De cette façon, un large panel de configurations (dopage, excitation optique, champ électrique, etc.) peut être exploré, et les différentes données d'intérêt peuvent être obtenues sans avoir à lever les verrous expérimentaux. Pour mener de tels calculs, il est vital de posséder un outil capable de modéliser de façon pertinente la dynamique des porteurs de charge. Dans ce but, une modélisation de type Monte Carlo a été retenue pour la résolution de l'Equation de Transport de Boltzmann. Sa capacité à modéliser finement des distributions de porteurs de charge hors équilibre est un de ses nombreux atouts qui sera exploité.

Les semi-conducteurs considérés pour les applications visées par l'équipe Ephyscas font, en outre, partie de la famille III-V. Ces semi-conducteurs sont également considérés pour constituer le cœur de Cellules Solaires à Porteurs Chauds, concept proposé pour améliorer la conversion de l'énergie solaire en énergie électrique, et qui est actuellement étudié à l'Institut

de Recherche et Développement sur l'Energie Photovoltaïque (IRDEP). Outre les matériaux, ces différentes applications ont en commun des concentrations de porteurs de charge pouvant être élevées. Les grandes concentrations de porteurs dans les semi-conducteurs III-V considérés (GaAs, $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$, et par extension InAs et GaSb) constituent la ligne directrice de cette thèse.

Un matériau en particulier, $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$, attire l'attention de la communauté électronique pour ses avantages technologiques dans des applications de type Transistors Bipolaires à Hétéro-jonction. Malheureusement, ce matériau a été très peu caractérisé, ce qui rend nécessaire le calcul de sa structure électronique. Un code de calcul $k.p$ à 30 bandes pour différents semi-conducteurs III-V et IV-IV a déjà été développé par l'équipe avant mon arrivée. Ce code, qui tient compte du couplage spin-orbite et d'éventuelles contraintes, permet le calcul de la structure électronique dans la totalité de la zone de Brillouin. Cependant, la méthode $k.p$ ne permet pas de traiter les alliages ternaires de façon aisée. Une partie de cette thèse est donc consacrée au développement d'un code de calcul de structure électronique par la Méthode des Pseudo-potentiels Empiriques (EPM), où la prise en compte des alliages est plus naturelle. Outre le fait de fournir les structures électroniques, l'EPM fournit également d'autres paramètres nécessaires au modèle Monte Carlo. Il s'agit des facteurs de recouvrement intervenant, entre autre, dans le calcul de probabilités de transitions inter-bandes radiatives (absorption/émission de photon) et non radiatives (ionisation par choc, processus Auger).

L'ionisation par choc est connue pour son effet délétère sur les propriétés de transport électronique dans les composants soumis à de forts champs électriques. Les processus Auger, réciproques de l'ionisation par choc, sont quant à eux connus pour limiter le temps de vie des porteurs de charges sous forte concentration. Ces processus, impliquant quatre particules, se distinguent des autres processus plus courants dans un modèle Monte Carlo par la complexité de l'évaluation de leur probabilité, possible raison pour laquelle ils n'ont jamais été implémentés dans une modélisation Monte Carlo auparavant à ma connaissance. Une autre partie de ce travail est donc dédiée au développement de modèles pour l'ionisation par choc et les processus Auger permettant leur prise en compte dans une modélisation de type Monte Carlo, et ce, de façon tractable informatiquement et cohérente avec les distributions de porteurs qui peuvent être hors équilibre. La prise en compte de l'ionisation par choc et des processus Auger utilisant un même niveau d'approche microscopique (et non des coefficients reflétant des propriétés macroscopiques) est d'un intérêt particulier pour l'étude de Cellules

Solaires à Porteurs Chauds, dispositif dans lequel ces processus peuvent être en compétition et où les distributions de porteurs de charge peuvent être hors équilibre. L'efficacité de ces processus dépend fortement de la structure électronique du matériau considéré. Une modélisation Monte Carlo dite « Full-Band » est donc nécessaire car elle capture les subtilités des structures électroniques. Contrairement aux modèles Monte Carlo « traditionnels » où la structure électronique est reconstruite à partir de formules analytiques, la version Full-Band utilise la structure électronique « réelle ». Dans un Monte Carlo traditionnel, la manipulation de formules analytiques permet d'accélérer les étapes de calculs des différents engrenages composant le code, atout qui a contribué à son succès à l'époque où les moyens informatiques étaient plus modestes. Dans un Monte Carlo Full-Band, la mécanique du code est bien plus lourde. Bien que les capacités de calcul et les quantités de mémoire nécessaires sont désormais disponibles, comme pour toute modélisation le compromis entre fidélité du modèle physique implémenté et ressources informatiques subsiste. Ce compromis, qui n'apparaîtra pas forcément de façon explicite dans toutes les étapes de développement des différents codes de calcul, traversera le manuscrit comme un fil rouge.

Un autre volet de cette thèse est la relaxation de porteurs de charge photo-excités, centrale à l'étude appliquée des Cellules Solaires à Porteurs Chauds. Cette partie comprend un travail effectué en collaboration avec un doctorant de l'équipe, Hani Hamzeh, qui travaille sur la dynamique des phonons. Cette dynamique est souvent négligée ou traitée à moindre coût car les « conditions expérimentales » dans lesquelles sont menées la plupart des calculs Monte Carlo, axés sur les propriétés électroniques, le permettent. Le couplage entre les codes développés dans cette thèse et dans celle de Hani Hamzeh est inédit, et permet de lever l'Approximation de Temps de Relaxation pour la dynamique des phonons qui est peu discutée dans la littérature. Cette dynamique est pourtant essentielle lorsque l'on s'intéresse à la relaxation de grandes concentrations de porteurs photo-excités qui peut porter une population de phonons hors de son équilibre.

L'étude des grandes concentrations de porteurs a également été l'occasion de travailler avec un (ex-)doctorant, Marc Michailat, qui a étudié l'effet de la diffusion des porteurs de charge sur les atomes dopant dans Si/SiGe et Si/SiGeC avec l'approche « Phase-Shift ». Cette collaboration étend son travail sur les semi-conducteurs IV-IV aux semi-conducteurs III-V étudiés ici pour les applications de type Transistors Bipolaires à Hétéro-jonction. Enfin, une collaboration avec une (ex-)doctorante de l'équipe, Bouchra Tissafi, fait le pont entre une modélisation microscopique du transport par la méthode Monte Carlo et une modélisation macroscopique avec un modèle Hydro-Dynamique modifié. Dans cette étude, les données

calculées en Monte Carlo sont injectées dans le modèle Hydro-Dynamique pour la modélisation fine d'un Photo-Commutateur en $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$.

Dans sa configuration la plus complète, le code de calcul développé totalise plus de 25000 lignes et requiert 15GB de mémoire lorsqu'il est parallélisé sur 8CPUs. Dans la suite de ce manuscrit, je vais en présenter les différentes composantes. La présentation des aspects « théoriques » est consignée dans les chapitres I et II (calcul de structures électroniques et méthode Monte Carlo respectivement). Le chapitre III regroupe les modèles développés pour la prise en compte des processus (radiatifs et non radiatifs) de génération/recombinaison de paires électron-trou pour leur prise en compte dans une modélisation de type Monte Carlo. Ce chapitre étend donc la portée de la modélisation Monte Carlo dans le domaine optique, ce qui est nécessaire à la modélisation d'expérience de spectroscopie (notamment pompe-sonde) et à l'étude de Cellules Solaires à Porteurs Chauds. Le chapitre IV couvre le transport des électrons minoritaires pour les applications de type Transistors Bipolaires à Hétéro-jonction (notamment dans $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$). Le chapitre V traite de la relaxation de grandes concentrations de porteurs photo-excitées, notamment lorsque la population de phonon n'est pas fixée à l'équilibre. L'étude de Cellules Solaires à Porteurs Chauds, rendue possible par les travaux des chapitres I à V, constitue le chapitre VI. Enfin, la modélisation d'un Photo-Commutateur en $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ présenté dans le chapitre VII. Dans les chapitres I à V, les différents modèles développés seront accompagnés de résultats propres aux problématiques traitées dans chaque partie.

CHAPITRE I : STRUCTURE ELECTRONIQUE

La structure électronique est la pierre angulaire de la modélisation des dispositifs à semi-conducteurs. Comme elle explicite les états énergétiques des porteurs de charge, toutes les propriétés électroniques en dépendent directement. Plusieurs méthodes existent pour le calcul de structures électroniques. On distinguera les approches *ab initio* (DFT, ...) et les approches semi empiriques telles que la méthode k.p, la méthode des pseudopotentiels empiriques (EPM), la méthode de combinaison linéaire d'orbitales atomiques (LCAO). Chaque approche présente ses avantages et ses inconvénients. La méthode sélectionnée pour ce travail de thèse est l'EPM car elle permet de traiter les alliages "facilement". Ce point fera l'objet d'une prochaine section. L'EPM a connu plusieurs développements depuis sa naissance dans les années 60 et offre donc plusieurs degrés de raffinement. Ces degrés seront présentés pour les semiconducteurs III-V binaires à structure zinc-blende. Une fois les concepts abordés, la méthode de calcul sera étendue aux alliages ternaires.

1) Principe de l'EPM

Les structures électroniques des matériaux sont calculées à partir des propriétés des atomes qui les constituent. On distinguera trois composantes atomiques : le noyau, les électrons de cœur, et les électrons de valence. Dans l'EPM, le noyau et ses électrons de cœur sont, plus ou moins, considérés comme une boîte noire (en fonction du degré de raffinement du modèle), ce qui constitue la partie empirique de l'approche. Pour obtenir la structure électronique d'un semi-conducteur on va donc s'intéresser aux électrons de valence dans le cas d'un cristal massif. En effet, dans un semi-conducteur III-V à 0K, tous les électrons participant aux liaisons atomiques peuplent des états liants, d'où la dénomination. En négligeant les interactions de type électron-électron, il ne reste dans l'Hamiltonien décrivant un électron dans le cristal que deux termes : l'énergie cinétique de l'électron et l'énergie potentielle d'interaction coulombienne de cet électron avec les noyaux du réseau cristallin $H = T + V$. C'est dans le terme d'énergie potentielle qu'entre en jeu le concept de pseudopotentiel. A ce stade là, on peut redéfinir ce pseudopotentiel (de forme inconnue pour le moment) comme un pseudopotentiel « moyen », contenant le potentiel d'interaction électron-électron (des atomes voisins, ramenant le problème à N corps à un problème à 1 électron). En effet, pour obtenir la structure électronique, il faut résoudre l'équation de

Schrödinger associée au Hamiltonien décrit précédemment. Cela donnera l'énergie et la « vraie » fonction d'onde de l'électron. Cependant, cette fonction d'onde est très difficile à décrire car près d'un noyau elle devra osciller très rapidement. Bien que les interactions de type électron-électron aient été incluses dans le pseudopotentiel effectif, le principe d'exclusion de Pauli ne peut être occulté à l'échelle de l'atome. Plus particulièrement, la « vraie » fonction d'onde doit être orthogonale à celle des électrons peuplant les états de cœur. Ces rapides oscillations rendent le terme d'énergie cinétique grand, creusant un trou dans la densité de charge près du noyau. Ce « orthogonality hole » agit sur l'électron comme un potentiel répulsif qui annule presque entièrement le potentiel attractif du noyau, la somme des deux donnant le pseudopotentiel [Phillips59] [Kleinman60] [Cohen61]. En introduisant les conditions d'orthogonalité sur la « vraie » fonction d'onde dans l'équation de Schrödinger, on obtient une nouvelle équation de Schrödinger pour la « pseudo » fonction d'onde où le potentiel coulombien du noyau est remplacé par le pseudopotentiel.

$$H_{ps} = T + \sum_i V_{ps}(r - r_i) \quad (\text{I.1.1})$$

où la somme court sur tous les atomes du cristal. La « pseudo » fonction d'onde se comporte comme la « vraie » fonction d'onde partout, sauf près des noyaux où elle n'oscille pas autant. Cela permet de la décrire par une onde de Bloch décomposée sur une base de taille raisonnable. Il suffit alors de résoudre la nouvelle équation de Schrödinger pour obtenir la structure électronique. Considérer que les atomes sont ponctuels, et que $V(r - r_i)$ est un simple pseudopotentiel coulombien ne dépendant que de la distance $(r - r_i)$ entre l'électron et l'atome i , constitue l'approximation dite locale [Cohen66].

Dans une structure zinc-blende (deux réseaux cubiques à faces centrées séparés de $(1/4, 1/4, 1/4)a_0$, a_0 étant le paramètre de maille), il est judicieux de prendre pour origine le point au milieu entre les deux atomes A et B du motif. Les deux atomes du motif sont donc repérés par les vecteurs $\vec{\tau} = (1/8, 1/8, 1/8)$ et $-\vec{\tau} = -(1/8, 1/8, 1/8)$. Pour résoudre l'équation de Schrödinger, la partie périodique de la pseudo fonction d'onde (onde de Bloch : onde plane multipliée par un terme ayant la périodicité du réseau : $\Psi_{k,r} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{k,r}$) est décomposée en ondes planes caractérisées par les vecteurs du réseau réciproque \vec{G} . On trouve l'Hamiltonien (I.1.1) évalué entre deux ondes planes

$$H_{\vec{G},\vec{G}}^L = \frac{\hbar^2(\vec{k} + \vec{G})^2}{2m_0} \delta_{\vec{G},\vec{G}} + V^L(|\vec{G} - \vec{G}'|) \quad (\text{I.1.2})$$

où la partie ‘pseudopotentiel’ est donnée par

$$\begin{aligned} V^L(|\vec{G}-\vec{G}'|) &= V^S(|\vec{G}-\vec{G}'|)\cos((\vec{G}-\vec{G}')\cdot\vec{\tau}) + iV^A(|\vec{G}-\vec{G}'|)\sin((\vec{G}-\vec{G}')\cdot\vec{\tau}) \\ V^{S/A}(|\vec{G}-\vec{G}'|) &= \frac{1}{2}(V_A(|\vec{G}-\vec{G}'|) \pm V_B(|\vec{G}-\vec{G}'|)) \end{aligned} \quad (\text{I.1.3})$$

Notons que les pseudopotentiels symétriques et antisymétriques V^S et V^A (facteurs de forme) n’ont besoin d’être évalués que pour des vecteurs du réseau réciproque $\vec{G}-\vec{G}'$ pour lesquels le facteur de structure (exprimé via les fonctions cosinus et sinus dans l’éq. (I.1.3)) ne s’annule pas. Pour la structure zinc-blende, on obtient alors une série de normes $|\vec{G}-\vec{G}'|^2 = 0, 3, 4, 8, 11, 12, \dots$ (en unité de $(2\pi/a_0)^2$). Dans la pratique, une coupure est souvent fixée à $|\vec{G}-\vec{G}'|^2 = 11(2\pi/a_0)^2$ au-delà de laquelle les facteurs de forme sont considérés nuls. Cela permet de calculer la structure électronique d’un semi-conducteur III-V hétéropolaire en n’ayant à ajuster que six facteurs de forme (seulement trois pour un semi-conducteur homopolaire car le terme antisymétrique est nul).

L’approximation locale présente cependant ses limites : les énergies de bande interdite directe et indirecte connues ne peuvent parfois pas être toutes reproduites avec le même jeu de facteurs de forme, les largeurs de bandes sont approximatives, et les masses effectives ne s’approchent que grossièrement des valeurs mesurées. Pour remédier à cela, la non localité des pseudopotentiels a été introduite [Brust71] [Chelikowsky76]. Dans la version non locale de l’EPM (NLEPM), le potentiel au voisinage de l’atome créé par les électrons de cœur est explicitement pris en compte en fonction de l’extension spatiale des orbitales de la dernière couche électronique de cœur. Cela a permis d’améliorer notablement la validité des structures électroniques calculées pour des semi-conducteurs contenant des orbitales de cœur de type d (qui présentent de grandes extensions spatiales). Si on considère que les orbitales de cœur peuvent être décrites par des harmoniques sphériques (atomes indépendants), le potentiel non local est donné par

$$V_{\vec{k}, \vec{k}'}^{NL} = \frac{4\pi}{\Omega_a} \sum_{l,i} (2l+1) A_l^i(E) P_l(\cos \theta_{\vec{k}, \vec{k}'}) F_l^i(\vec{K}', \vec{K}) S^i(\vec{K}', \vec{K}) \quad (\text{I.1.4})$$

où $\vec{K} = \vec{G} + \vec{k}$, $\vec{K}' = \vec{G}' + \vec{k}$, Ω_a est le volume atomique dans la maille, $S^i(\vec{K}', \vec{K})$ est le facteur de structure pour l’atome i , et où la somme court sur les atomes i du motif et le type l d’orbitales (s, p, d...). La profondeur du puits de potentiel est donnée par le paramètre α de $A_l^i(E)$ et la dépendance en énergie des puits de type s est guidée par le paramètre β (le vecteur d’onde de Fermi est donné par $K_F^i = (3\pi^2 z_i / \Omega_a)^{1/3}$ où z_i est la valence de l’atome)

$$\begin{cases} A_l^i(E) = \alpha_l^i + \beta_l^i \left(\sqrt{E(K)E(K')} - E(K_F^i) \right) \\ E(K) = \hbar^2 K^2 / 2m_0 \end{cases} \quad (\text{I.1.5})$$

La forme du puits est donnée par le produit $P_l(\cos \theta_{\vec{K}', \vec{K}}) F_l^i(\vec{K}', \vec{K})$, où $P_l(\cos \theta_{\vec{K}', \vec{K}})$ est un polynôme de Legendre d'ordre l ($\theta_{\vec{K}', \vec{K}}$ est l'angle entre \vec{K} et \vec{K}') et $F_l^i(\vec{K}', \vec{K})$ est donné par

$$F_l^i(\vec{K}', \vec{K}) = \begin{cases} \left((r_l^i)^3 / 2 \right) \left(j_l(Kr_l^i)^2 - j_{l-1}(Kr_l^i) j_{l+1}(Kr_l^i) \right), & K = K' \\ \left((r_l^i)^2 / (K^2 - K'^2) \right) \left(K j_{l+1}(Kr_l^i) j_l(K'r_l^i) - K' j_{l+1}(K'r_l^i) j_l(Kr_l^i) \right), & K \neq K' \end{cases} \quad (\text{I.1.6})$$

où j_l est une fonction de Bessel sphérique d'ordre l , et r_l^i le rayon de l'orbitale. L'Hamiltonien évalué entre deux ondes planes à considérer devient alors

$$H_{\vec{G}, \vec{G}}^{NL} = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m_0} \delta_{\vec{G}, \vec{G}} + V^L(|\vec{G} - \vec{G}'|) + V_{\vec{K}, \vec{K}}^{NL} \quad (\text{I.1.7})$$

Les énergies et pseudo fonctions d'onde sont obtenues en résolvant $\det \left[H_{\vec{G}, \vec{G}}^{NL} - E(\vec{k}) \delta_{\vec{G}, \vec{G}} \right] = 0$.

Pour les éléments lourds, ou plus généralement afin d'améliorer la précision de la structure électronique et avoir accès à bon nombre de phénomènes, le couplage spin-orbite doit être pris en compte. Il induit notamment la levée de dégénérescence des bandes de valence en centre de zone et agit sur les masses effectives de façon non négligeable. Il s'agit d'un effet également non local. Cependant, seule l'orbitale de type p ($l=1$) de la couche électronique de cœur la plus externe est prise en compte car elle apporte une contribution largement dominante par rapport aux autres [Weisz66] [Saravia68] [Bloom70]. Toujours pour la structure zinc-blende, l'Hamiltonien de couplage spin-orbite évalué entre deux ondes planes est donné par

$$H_{\vec{G}, \vec{G}}^{SO} = \left[-i\lambda^S \cos((\vec{G} - \vec{G}') \cdot \vec{\tau}) + \lambda^A \sin((\vec{G} - \vec{G}') \cdot \vec{\tau}) \right] (\vec{e}_{\vec{K}} \times \vec{e}_{\vec{K}'}) \cdot \sigma_{s,s} \quad (\text{I.1.8})$$

où les $\vec{e}_{\vec{K}}$ sont les vecteurs unitaires, $\sigma_{s,s}$ les matrices de spin de Pauli et $\lambda^{S/A}$ les paramètres de couplage symétrique et antisymétrique (en analogie avec les facteurs de forme).

$$\begin{cases} \lambda^{S/A} = (\lambda_A \pm \lambda_B) / 2 \\ \lambda_A = \mu B_{nl}^A(K) B_{nl}^A(K') \\ \lambda_B = \alpha \mu B_{nl}^B(K) B_{nl}^B(K') \\ B_{nl}^i(K) = C \int j_{nl}(Kr) R_{nl}^i(r) r^2 dr \end{cases} \quad (\text{I.1.9})$$

Le couplage spin-orbite est ajusté via le paramètre μ . α est le ratio des splitting spin-orbit atomique des constituants A et B . $R_{nl}^i(r)$ est la partie radiale de l'orbitale de cœur de type l de la couche n et C est un facteur de normalisation. L'Hamiltonien de couplage spin-orbite évalué entre deux bandes m et n de spin s et s' est donné par

$$H_{mn}^{ss'} = \sum_{\vec{G}, \vec{G}'} a_{\vec{G}}^{m*} a_{\vec{G}'}^n H_{\vec{G}, \vec{G}'}^{SO} + E_m \delta_{m,n} \delta_{s,s'} \quad (\text{I.1.10})$$

où E_m est l'énergie de la bande m et les $a_{\vec{G}}$ les coefficients de l'expansion en ondes planes issus du calcul de structure électronique sans spin. On obtient les énergies et pseudo fonctions d'onde en cherchant également les valeurs propres et vecteurs propres de (I.1.10).

2) Mise en œuvre du modèle NLEPM

La base sur laquelle sont décomposées les ondes de Bloch contient $N=113$ ondes planes afin d'obtenir le meilleur compromis entre la convergence des énergies calculées en fonction de la taille de la base et le temps de calcul (pour l'Hamiltonien local et non local). Pour le couplage spin-orbite, 30 bandes ($NSO=15$ de chaque spin) ont été retenues. Les $B_{nl}(K)$ sont des intégrales qui seraient lourdes à évaluer de façon récurrente. Des relations analytiques, approximant bien ces fonctions sont donc utilisées [Potz81]

$$\begin{cases} B_{3,1}(K) = \frac{K}{2\pi/a_0} \frac{(5-\kappa^2)}{5(1+\kappa^2)^4} \\ B_{4,1}(K) = \frac{K}{2\pi/a_0} \frac{(5-3\kappa^2)}{5(1+\kappa^2)^5} \end{cases} \quad (\text{I.2.1})$$

avec $\kappa = K/\zeta$, et où les ζ sont des paramètres permettant d'ajuster les fonctions $B_{nl}(K)$. La coupure sur la norme de $\vec{q} = \vec{G} - \vec{G}'$ et l'utilisation de facteurs de forme ponctuels évoqués dans la section précédente ne sont pas appliqués ici pour deux raisons. Les facteurs de forme sont, en général, non nuls au delà de la coupure couramment utilisée. De plus, l'utilisation de facteurs de forme ponctuels (valeurs de pseudopotentiels évalués à des $|\vec{G} - \vec{G}'|$ bien précis) poserait des problèmes pour le traitement des alliages ternaires (section suivante). Le pseudopotentiel d'un atome α lié à un atome β est donc décrit via une relation analytique [Williamson00] [Kim02]

$$v_{\alpha-\beta}(q) \propto a_0 \frac{(q^2 - a_1)}{(a_2 e^{a_3 q^2} - 1)} \quad (\text{I.2.2})$$

Le pseudopotentiel d'un atome dépend des atomes voisins. En effet, les rayons des orbitales de cœur étant de l'ordre des mi-distances interatomiques, le nuage électronique de cœur (d'un atome donné) est susceptible de se coupler aux nuages de ses voisins, modifiant alors le pseudopotentiel.

Les paramètres d'ajustement du modèle sont donc ceux caractérisant les pseudopotentiels, les paramètres contrôlant les profondeurs des puits dans les termes non locaux, et le paramètre spin-orbite μ . Ces paramètres ont été ajustés via un algorithme de minimisation de fonction basé sur la méthode des gradients conjugués pour GaAs, InAs et GaSb, afin de reproduire les caractéristiques des structures électroniques expérimentales ($T \rightarrow 0\text{ K}$). La fonction F à minimiser donne l'écart entre les résultats calculés et les résultats expérimentaux disponibles pondérés par l'écart à l'itération précédente.

$$F_t = \sum^{data\ exp.} |Y_{t-1}^{calc.} - Y_{t-1}^{exp.}| \times |Y_t^{calc.} - Y_t^{exp.}| \quad (\text{I.2.3})$$

Sans cela, l'algorithme tombe facilement dans un minimum local de F . Cette procédure d'ajustement est longue et requiert de ne pas être trop éloigné du minimum de F .

Les méthodes EPM/NLEPM permettent d'obtenir les structures électroniques dans l'espace réciproque. Cet espace, l'espace des états, est la première Zone de Brillouin (BZ), réciproque de la maille élémentaire de la structure cristalline (FIG. I.2.1). Grâce aux symétries de la structure zinc-blende, seul 1/48 de la BZ est nécessaire pour décrire tous les états. Dans la suite de ce travail, 1/8 de la BZ sera utilisé. Ne pas faire usage de toutes les symétries permettra éventuellement de prendre en compte certains types de contraintes dans de futurs travaux.

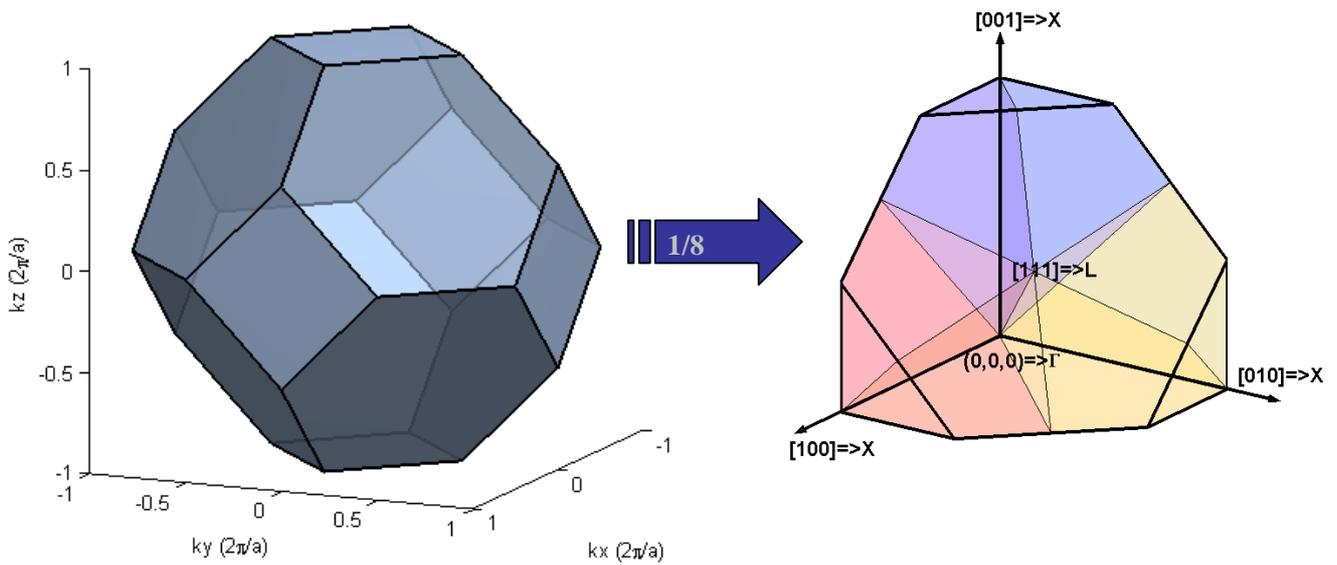


FIG. I.2.1 : A gauche 1^{ère} zone de Brillouin pour les cristaux à structure diamant/zinc-blende. A droite, 1/8 de la zone de Brillouin où chacune des 6 sections représente 1/48.

Une des caractéristiques des structures électroniques est l'énergie évaluée à des points de haute symétrie. Pour les semiconducteurs III-V à structure zinc-blende, ces points sont Γ , L et X, car les minima/maxima d'énergie des bandes de conduction/valence s'y trouvent. On considère alors que la structure électronique peut être représentée par des vallées d'énergie centrées sur ces points. Le point Γ est au centre de la zone à $(0,0,0)$. Les 8 points L se trouvent le long des directions de type $[111]$ à $(\pi/a_0, \pi/a_0, \pi/a_0)$ et points équivalents. Les 6 points X se trouvent le long des directions de type $[100]$ à $(2\pi/a_0, 0, 0)$ et points équivalents. Les points équivalents se retrouvent par application des symétries du réseau cristallin. Certains de ces points sont notés sur la FIG. I.2.1. Comme les points L et X se trouvent à l'interface entre la BZ considérée et une BZ adjacente, une BZ contient 1 vallée Γ , 4 vallées L et 3 vallées X. Une autre caractéristique importante est la forme des surfaces iso-énergie. En effet, plus la forme de ces surfaces est « simple » et plus la recherche d'états post diffusion (CHAPITRE II) est facile. La FIG. I.2.2 montre des surfaces iso-énergie pour la première bande de conduction (CB) et les 3 premières bandes de valence (bandes HH, LH et SO), évaluées à des énergies qui révèlent la forme typique de ces surfaces.

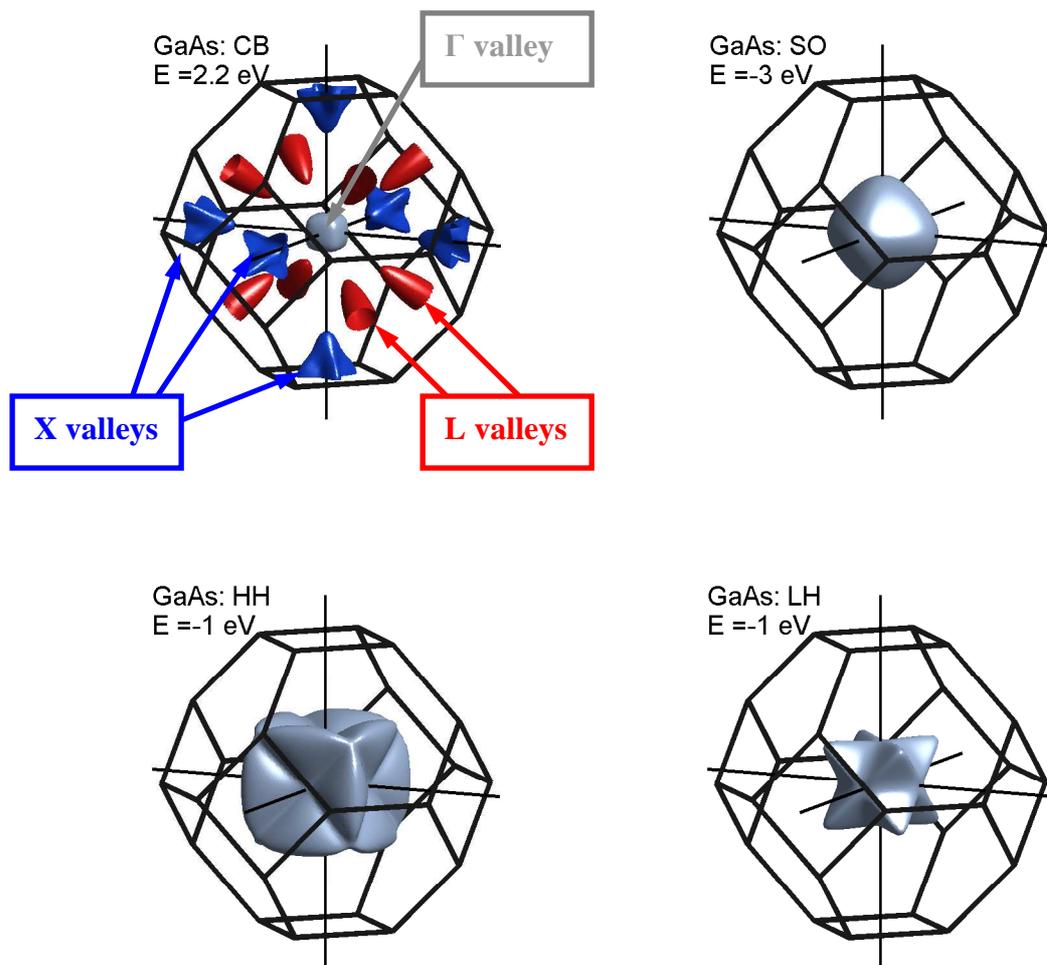


FIG. I.2.2 : Surfaces iso-énergie dans la 1^{ère} zone de Brillouin de la première bande de conduction (CB) et des 3 premières bandes de valence (bandes HH, LH et SO) de GaAs.

Les structures électroniques obtenues de GaAs, InAs et GaSb et leurs caractéristiques sont présentées en TABLE I.2.1 et FIG. I.2.2. L'accord global entre les valeurs calculées et les données expérimentales [Landolt-Börnstein] [Vurgaftman01] est assez bon, compte tenu des nombreuses caractéristiques prises en compte contraignant l'ajustement des pseudopotentiels. Ces caractéristiques entrant dans l'évaluation de (I.2.3) sont celles listées en TABLE I.2.1.

Energie (eV) masse (m_0)	GaAs : NLEPM (exp.)	InAs : NLEPM (exp.)	GaSb : NLEPM (exp.)
E_0	1.481 (1.519)	0.412 (0.417)	0.811 (0.812)
Δ_0	0.341 (0.341)	0.390 (0.390)	0.763 (0.760)
$\Gamma 7c (E_0')$	4.553 (4.546)	4.373 (4.390)	2.041 (3.139)
$\Gamma 8c (E_0' + \Delta_0')$	4.649 (4.716)	4.565 (4.580)	2.518 (3.391)
$\Gamma 6v$	-12.817 (-13.0)	-12.279 (-12.3)	-11.07 (-11.64)
L6c	1.815 (1.815)	1.771 (1.710)	0.908 (0.875)
L6c-L45v (E_1)	2.971 (3.038)	2.638 (2.610)	2.083 (2.184)
L6c-L6v ($E_1 + \Delta_1$)	3.165 (3.262)	2.874 (2.880)	2.545 (2.618)
X6c	1.937 (1.981)	2.330 (2.340)	1.141 (1.141)
X6c-X6v (E_2)	4.831 (4.974)	4.554 (4.740)	3.788 (4.419)
X6c-X7v (E_2)	4.713 (4.898)	4.435 (4.740)	4.000 (4.286)
X7c	2.132 (2.326)	3.006 (2.903)	1.246 (1.820)
m_Γ	0.065 (0.067)	0.026 (0.026)	0.046 (0.041)
$m_{HH}[100]$	0.354 (0.350)	0.449 (0.333)	0.227 (0.250)
$m_{HH}[110]$	0.649 (0.643)	0.792 (0.513)	0.453 (0.488)
$m_{HH}[111]$	0.850 (0.893)	1.044 (0.625)	0.680 (0.714)

TABLE 1.2.1 : Caractéristiques (énergies interbandes et masses effectives) des structures électroniques utilisées pour l'ajustement des pseudopotentiels de GaAs, InAs et GaSb. Les valeurs cibles entre parenthèses sont tirées de [Landolt-Börnstein] et [Vurgaftman01].

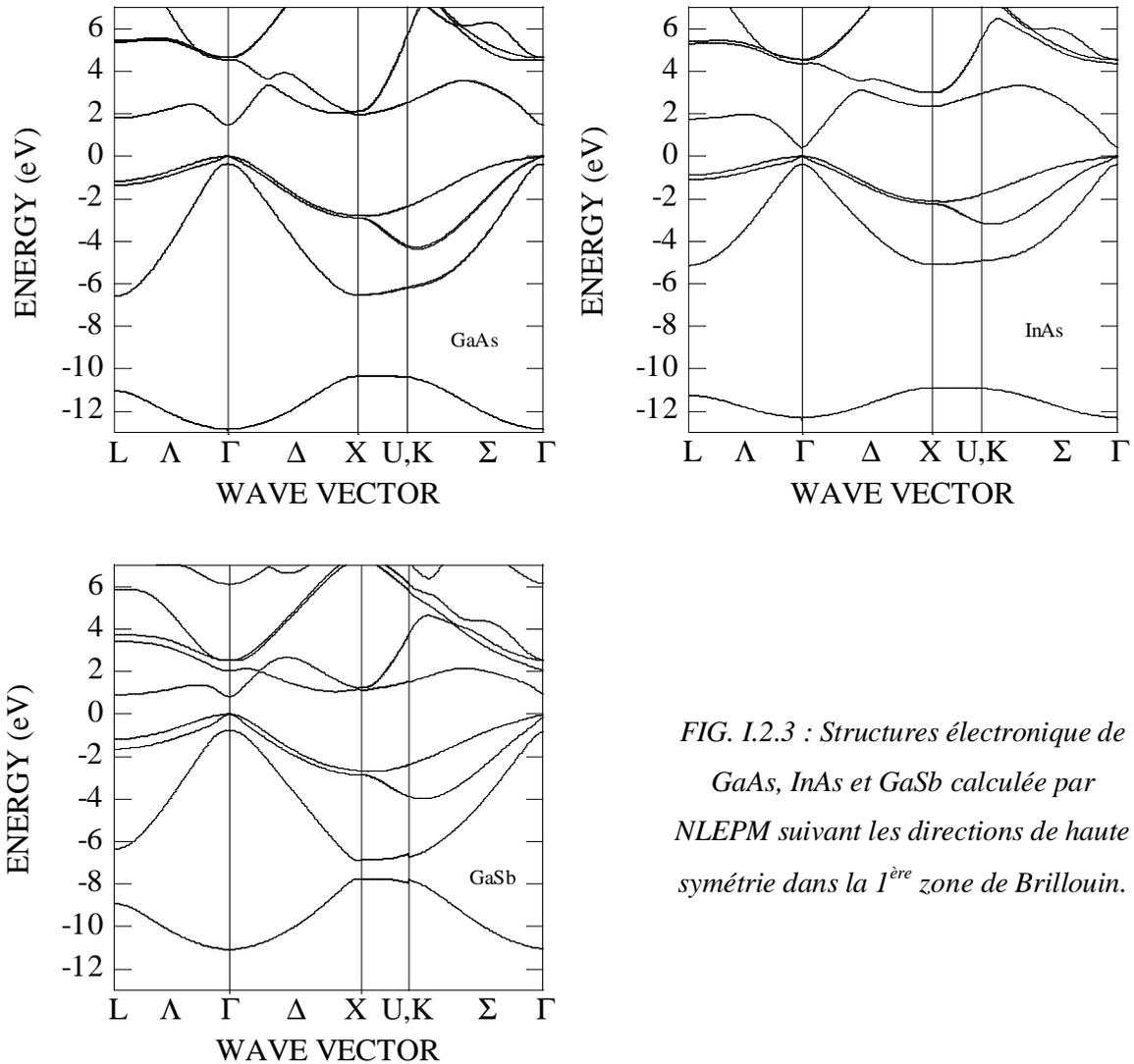


FIG. I.2.3 : Structures électronique de GaAs, InAs et GaSb calculée par NLEPM suivant les directions de haute symétrie dans la 1^{ère} zone de Brillouin.

3) Alliages ternaires

Les semi-conducteurs ternaires III-V d'intérêt pour ce travail de thèse sont $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ et $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$ (tous deux sont en accord de maille sur InP). La bibliographie de $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ livre beaucoup moins d'études expérimentales que celles de GaAs. C'est encore bien pire pour $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$ qui a vraiment été très peu caractérisé. Les seules données expérimentales disponibles pour $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$ sont l'énergie de bande interdite et le splitting spin-orbite. Comme son nom l'indique, l'EPM est une méthode empirique, dans laquelle des paramètres doivent être ajustés. Cependant $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$ n'a pas été

suffisamment expérimentalement caractérisé pour assurer un ajustement ‘fiable’ des différents paramètres. Les composants binaires GaAs, InAs et GaSb sont, en revanche, respectivement très bien, bien et assez bien connus. Ils vont donc servir de base pour le traitement des ternaires.

La structure électronique d’un semi-conducteur ternaire $A_xB_{1-x}C$ est ici calculée dans le cadre de la « Virtual Crystal Approximation » (VCA). La VCA suppose que si deux espèces A et B partagent le même site atomique, seul un potentiel moyen (moyenne pondérée par la composition) émanera du dit site considéré, produisant alors un potentiel périodique dans un cristal parfait dont le paramètre de maille est supposé être le paramètre de maille moyen observé (loi de Végard). Cette approximation a le mérite d’être très intuitive et est facile à mettre en œuvre. Cependant, la VCA seule ne réussit pas reproduire la structure électronique d’un alliage ternaire. En effet, le désordre et les distorsions locales dans les alliages influent sur les structures électroniques observées [Zunger83]. Les distorsions locales de structure sortent du cadre de la VCA et sont donc négligées. Le désordre peut être introduit avec l’ajout d’un paramètre.

Le pseudopotentiel moyen du site partagé entre les espèces A et B est alors donné par

$$V_{A_xB_{1-x}}(q) = xV_{A-C}(q) + (1-x)V_{B-C}(q) - p\sqrt{x(1-x)}(V_{A-C}(q) - V_{B-C}(q)) \quad (\text{I.3.1})$$

De même, comme le pseudopotentiel d’un atome dépend des atomes voisins

$$V_C(q) = xV_{C-A}(q) + (1-x)V_{C-B}(q) - p\sqrt{x(1-x)}(V_{C-A}(q) - V_{C-B}(q)) \quad (\text{I.3.2})$$

Le paramètre p quantifie le degré de désordre mais est avant tout considéré comme un paramètre d’ajustement. L’équation (I.3.1) où l’on voit explicitement la dépendance en « atome du voisinage » est utilisée pour le mélange des pseudopotentiels locaux. Il en va de même avec les potentiels non locaux et pour le couplage spin-orbite. Cependant, p étant un paramètre d’ajustement, deux paramètres différents p_L et p_{NL} sont utilisés pour mélanger les quantités locales et non locales afin de reproduire les structures électroniques des ternaires plus facilement. Pour les alliages, seuls p_L et p_{NL} sont ajustés, avec pour seules données expérimentales cible, l’énergie de bande interdite et le splitting spin-orbit. La TABLE I.3.1 et la FIG. I.3.1 contiennent les résultats obtenus pour $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ et $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$.

La structure électronique de $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$ a déjà été étudiée dans le cadre de l’EPM local (sans termes non locaux, sans couplage spin-orbite) où sont directement mélangés dans la VCA les facteurs de forme évalués aux vecteurs de réseau réciproque des composés binaires. Contrairement aux résultats de [Mezrag06], la structure électronique calculée ici

montre que $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$ est un semi-conducteur à gap direct. Les niveaux d'approche utilisés étant très différents, le désaccord entre les résultats n'est pas surprenant. En effet, l'approche retenue dans [Mezrag06] revient simplement à moyenner les facteurs de forme des composés binaires, moyenne pondérée par la composition. Ces facteurs de forme sont les pseudopotentiels des composés binaires évalués dans leur espace réciproque respectif, pseudopotentiels étant issus de la transformée de Fourier à partir de l'espace réel. Cependant, les composés binaires et l'alliage résultant ont des paramètres de maille différents, ce qui invalide l'utilisation des facteurs de forme des composés binaire dans l'espace réciproque de l'alliage. De plus, l'utilisation de seulement 6 facteurs de forme impose une coupure au delà de laquelle les pseudopotentiels ne sont pas négligeables. Pour illustrer, la FIG. I.3.2 montre l'évolution des principales énergies interbandes avec la composition de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ et $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ calculées avec le modèle retenu dans le cadre de ce travail.

Energie (eV) masse (m_0)	$\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$: NLEPM (exp.)	$\text{GaAs}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}$: NLEPM (exp.) {Mezrag06}
E_0	0.815 (0.815)	0.865 (0.808) {0.750}
Δ_0	0.364 (0.345)	0.391 (0.400) {0.000}
$\Gamma 7c (E_0')$	4.474	3.049
$\Gamma 8c (E_0' + \Delta_0')$	4.628	3.237
$\Gamma 6v$	-12.486	-11.865
L6c	1.791	0.986 (-) {0.730}
L6c-L45v (E_1)	2.783	2.216
L6c-L6v ($E_1 + \Delta_1$)	2.999	2.443
X6c	2.157	1.098 (-) {0.810}
X6c-X6v (E_2)	4.555	3.896
X6c-X7v (E_2)	4.670	4.006
X7c	2.658	1.546
m_Γ	0.041 (0.041)	0.040
$m_{\text{HH}}[100]$	0.397	0.238
$m_{\text{HH}}[110]$	0.718	0.460
$m_{\text{HH}}[111]$	0.936	0.606

TABLE I.3.1 : Caractéristiques (énergies interbandes et masses effectives) des structures électroniques de $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ et $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$ calculées avec NLEPM. Les valeurs expérimentales sont tirées de [Landolt-Börnstein] et [Vurgaftman01].

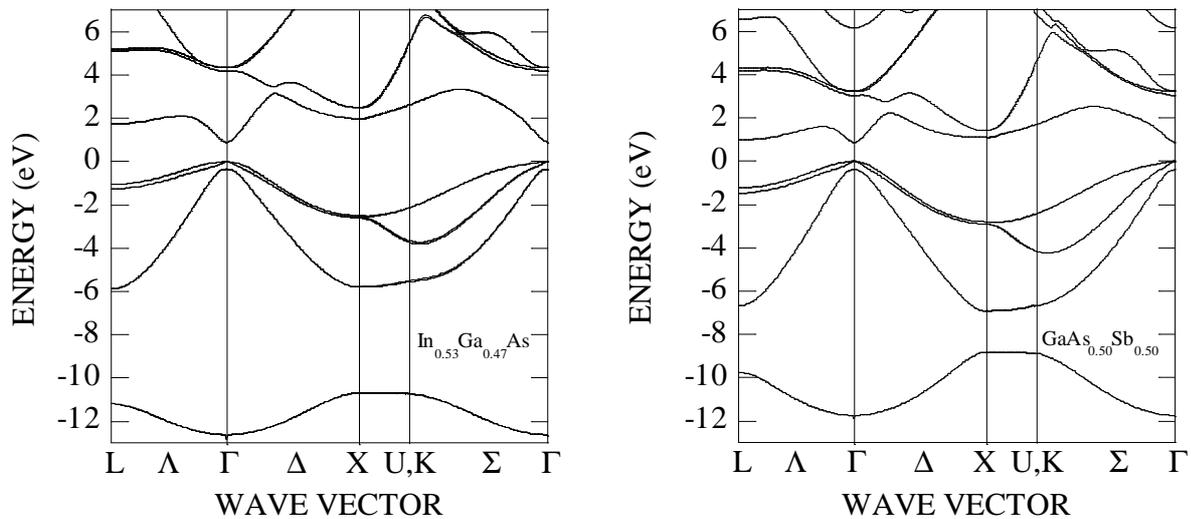


FIG. I.3.1 : Structure électronique de $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ et $GaAs_{0.50}Sb_{0.50}$ calculée par NLEPM suivant les directions de haute symétrie dans la 1ère zone de Brillouin

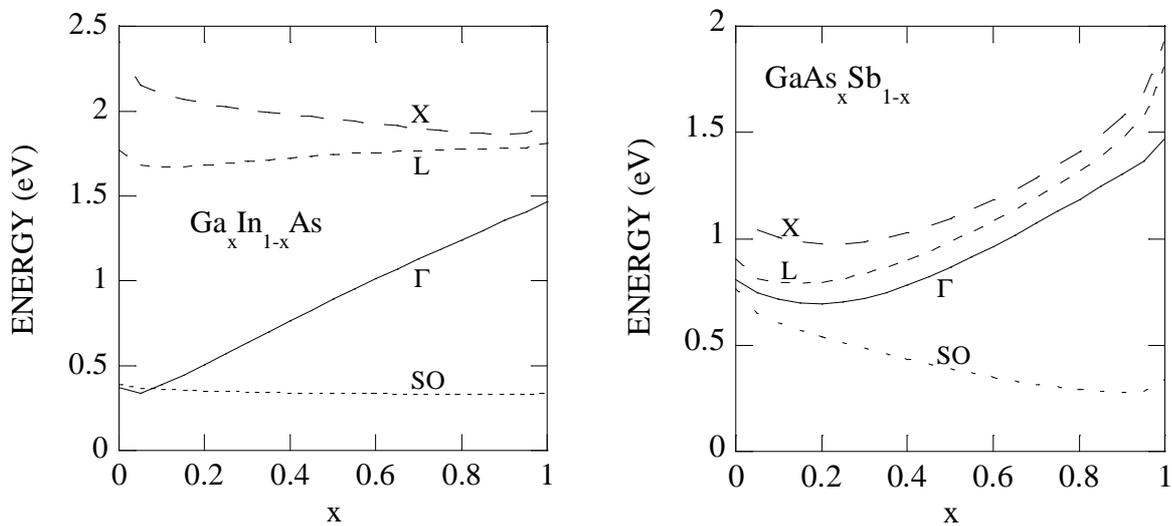


FIG. I.3.2 : Variation de la bande interdite directe Γ (trait plein), des bandes interdites indirectes L et X (tirets court et long respectivement) et du splitting spin-orbit (pointillés), avec la composition x des alliages $In_{1-x}Ga_xAs$ et $GaAs_xSb_{1-x}$ calculées avec NLEPM.

Les alliages $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ et $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$ ont des énergies de bande interdite assez similaires. Cependant, leurs structures de bande sont très différentes à cause des composés partenaires de GaAs : InAs et GaSb (FIG. I.3.2, $x=0$). Leurs caractéristiques (différences d'énergie entre les minima des vallées des bandes de conduction) sont encore très présentes dans les alliages. Cela se voit particulièrement bien sur les densités d'états de la première bande de conduction où les contributions de chaque vallée ont été isolées (FIG. I.3.3). Les calculs numériques de densités d'états ont été menés avec la méthode de Gilat et Raubenheimer [Gilat66] [Lehmann72]. La méthode pour utilisée pour séparer les vallées sera présentée dans le CHAPITRE II. Les vallées L et X de $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$ sont beaucoup plus basses (en énergie) que celles de $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, ce qui aura certainement un effet délétère sur les propriétés de transport de $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$ au vu des densités d'états considérables à faible énergie

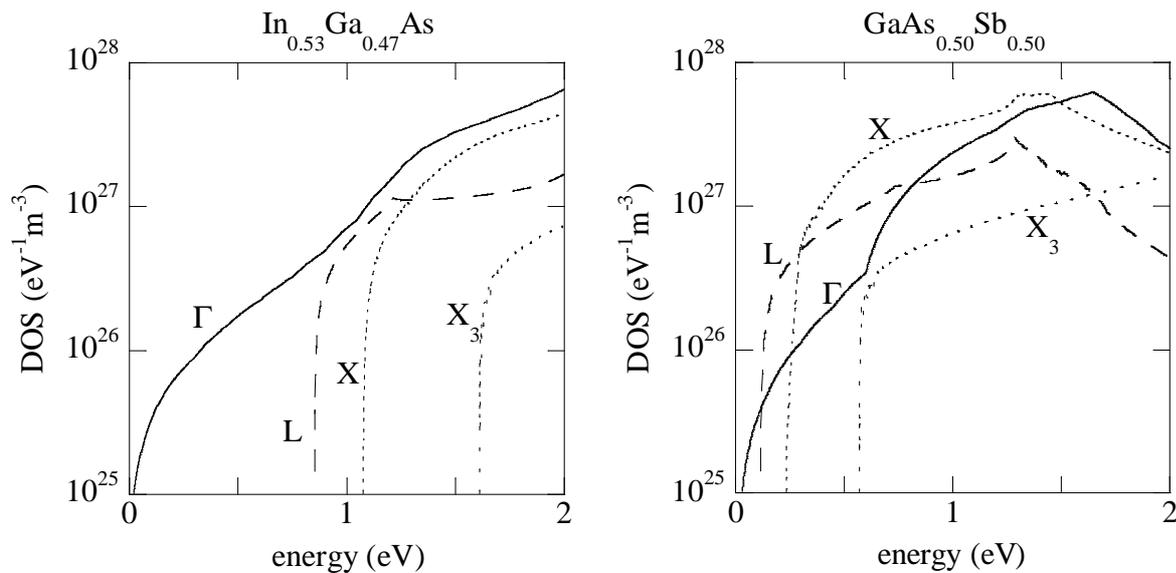


FIG. I.3.3 : Densités d'états par vallée de la première et seconde bande de conduction calculées à partir des structures électroniques obtenues par NLEPM pour les alliages $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ et $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$.

4) Facteur de recouvrement intra et inter-bande

Dans le CHAPITRE II, les probabilités par unité de temps de transition entre un état k et un état k' seront abordées. Ces probabilités sont calculées à l'aide de la règle d'or de Fermi

$$S(k, k') = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \Psi_{k'} | M | \Psi_k \rangle \right|^2 \delta(E) \quad (\text{I.4.1})$$

où $|\Psi_k\rangle$ et $|\Psi_{k'}\rangle$ sont les fonctions d'onde de état initial et de l'état final k et k' , M est l'Hamiltonien de l'interaction responsable de la transition, et $\delta(E)$ impose la conservation de l'énergie totale. Les vraies fonctions d'onde dans un solide sont difficilement représentables à cause du « orthogonality hole » (voir section 1). Cependant les approches de type EPM, qui utilisent des pseudo fonctions d'onde $|\psi_k\rangle$, ont justement été développées pour apporter une solution à ce problème. Les erreurs introduites par l'utilisation de pseudo fonction d'onde sont négligeables (sauf lorsque le facteur de recouvrement tend vers des valeurs négligeables, ce qui ne pose donc pas de problème) [Burt84]. Il est très pratique de modéliser les pseudo fonctions d'onde par des ondes de Bloch, composées d'une partie de type onde plane et un partie périodique qui possède les symétries du réseau cristallin

$$|\psi_{n,k}\rangle = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} |u_{n,k}\rangle \quad (\text{I.4.2})$$

où n est un indice de bande. C'est l'utilisation de ce type de pseudo fonction d'onde qui permet d'exprimer l'Hamiltonien pseudo potentiel sous la forme (I.1.2). De façon générale, on peut considérer que la partie périodique varie beaucoup plus vite que la partie onde plane (dans l'espace réel), sauf si k est un état de bord de zone (dans l'espace réciproque). Cela permet cependant de simplifier énormément les calculs numériques de probabilités de transition en isolant le facteur de recouvrement $I_{k,k'}^2 = \left| \langle u_{n',k'} | u_{n,k} \rangle \right|^2$ dans (I.4.1) :

$$\left| \langle \psi_{k'} | M | \psi_k \rangle \right|^2 = \left| \langle e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}} | M | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \rangle \right|^2 I_{k,k'}^2 \quad (\text{I.4.3})$$

Le détail des calculs de probabilités de transition sera traité dans le CHAPITRE II, il s'agit ici de discuter uniquement du facteur de recouvrement.

L'évaluation du facteur de recouvrement requiert la connaissance des parties périodiques $|u_{n,k}\rangle$. Dans l'EPM, elles sont décomposées en ondes planes caractérisées par les vecteurs du réseau réciproque

$$|u_{n,k}\rangle = \sum_{i=1}^N a_i^{n,k} |G_i\rangle \quad (\text{I.4.4})$$

où $|G_i\rangle = e^{i\vec{G}_i \cdot \vec{r}}$ et avec la propriété $\langle G_j | G_i \rangle = \int e^{i(\vec{G}_i - \vec{G}_j) \cdot \vec{r}} d^3r = \delta_{ij}$. Résoudre l'équation de Schrödinger associée à (I.1.1) permet alors d'obtenir les énergies et les pseudo fonctions d'ondes via les coefficients $a_i^{n,k}$. Le facteur de recouvrement est alors donné par (à ce stade, sans la prise en compte de l'interaction spin-orbite) :

$$I_{k,k'}^2 = \left| \sum_{i=1}^N a_i^{n',k'} a_i^{n,k} \right|^2 \quad (\text{I.4.5})$$

Les matériaux considérés présentent cependant un couplage spin-orbite non négligeable. Les parties périodiques des pseudo fonctions d'onde d'intérêt $|\varphi_{n,k,s}\rangle$ sont donc celles issues de (I.1.10). Elles sont construites à partir de la base des parties périodiques des pseudo fonctions d'onde sans spin $|u_{i,k}\rangle$ solution de (I.1.7) qui est doublée pour inclure un indice de spin (indice utilisé uniquement pour repérer les états/bandes, pas pour quantifier le spin)

$$|u_{n,k,s}\rangle = \sum_{i=1}^N a_i^{n,k} |G_i, s\rangle \quad (\text{I.4.6})$$

Il faut noter que l'ajout de l'indice de spin est artificiel et que donc les coefficients $a_i^{n,k}$ sont identiques pour $|u_{n,k,\uparrow}\rangle$ et $|u_{n,k,\downarrow}\rangle$. Ces deux états sont par définition orthogonaux, donc $\langle G_i, s | G_i, s' \rangle = \delta_{s,s'}$. La partie périodique de la pseudo fonction d'onde $|\varphi_{n,k,s}\rangle$ pour la bande n et de spin s est alors donné par

$$|\varphi_{n,k,s}\rangle = \sum_{i=1}^{NSO} b_i^{n,k,\uparrow} |u_{i,k,\uparrow}\rangle + \sum_{j=1}^{NSO} b_j^{n,k,\downarrow} |u_{j,k,\downarrow}\rangle \quad (\text{I.4.7})$$

où les coefficient $b_i^{n,k,s}$ sont issus de la diagonalisation de (I.1.10). Après quelques lignes de calcul, on obtient pour le recouvrement entre deux états k et k' des bandes n et m de spin s et s'

$$\langle \varphi_{m,k',s'} | \varphi_{n,k,s} \rangle = \left(\sum_{i,i'=1}^{NSO} b_i^{m,k',\uparrow} b_i^{n,k,\uparrow} \langle u_{i,k',\uparrow} | u_{i,k,\uparrow} \rangle \right) + \left(\sum_{j,j'=1}^{NSO} b_j^{m,k',\downarrow} b_j^{n,k,\downarrow} \langle u_{j,k',\downarrow} | u_{j,k,\downarrow} \rangle \right) \quad (\text{I.4.8})$$

Comme ce travail ne porte pas sur des processus sélectifs en spin, il est plus judicieux de considérer un facteur de recouvrement moyenné sur le spin initial et sommé sur le spin final. Cela permet d'obtenir des probabilités de transition qui prennent en compte le spin sans l'ajout artificiel d'un facteur 2 [Ehrenreich57]

$$I_{k,k'}^2 = \frac{1}{2} \sum_{s,s'} \left| \langle \varphi_{m,k',s'}' | \varphi_{n,k,s} \rangle \right|^2 \quad (\text{I.4.9})$$

Le calcul répété de facteurs de recouvrement est assez coûteux en temps de calcul. En effet, afin d'avoir une bonne précision avec NLEPM, les bases sur lesquelles sont évaluées les Hamiltonien local, non local et spin-orbite ne doivent pas être trop petites (bases de taille N et NSO). Des approches analytiques ont été développées à partir de la théorie $k.p$ pour le calcul de facteurs de recouvrement entre états des deux premières bandes de valences, et entre états de la première bande de conduction. Ces approches sont valables lorsque les états k et k' sont proches du centre de zone ($k \rightarrow 0$). Le facteur de recouvrement dépend des symétries contenues dans les fonctions d'onde. La vallée Γ_{6c} (première bande de conduction) a une étendue très limitée dans l'espace réciproque (donc $k \rightarrow 0$ est plus ou moins vérifié) et est quasi isotrope. Pour les transitions intra Γ_{6c} l'approche analytique est suffisante et est donnée par [Fawcett70]

$$I_{k,k'}^2 = \frac{\left(\sqrt{1 + \alpha E_k} \sqrt{1 + \alpha E_{k'}} + \alpha \sqrt{E_k E_{k'}} \cos \theta_{k,k'} \right)^2}{(1 + 2\alpha E_k)(1 + 2\alpha E_{k'})} \quad (\text{I.4.10})$$

où α est le coefficient de non parabolicité de la vallée, E l'énergie mesurée par rapport au bas de la vallée et $\theta_{kk'}$ l'angle entre les vecteur d'onde \vec{k} et \vec{k}' . Les fonctions d'onde dans Γ_{6c} ayant un caractère sphérique, le facteur de recouvrement y est quasi maximal (pour $k \rightarrow 0$) et est souvent approximé par 1. Le facteur de recouvrement pour la première bande de conduction dans GaAs est représenté en fonction de $\theta_{kk'}$, et en fonction de leur norme ($\|\vec{k}\| = \|\vec{k}'\|$) sur la FIG. I.4.1. Les fonctions d'onde des bandes de valence présentent des symétries plus basses [Fishman10]. De plus, leur courbure de bande est faible. Même pour des états de faible énergie cinétique, $k \rightarrow 0$ n'est pas vérifié. Le comportement général du facteur de recouvrement en fonction de k et k' pour les bandes de valence est difficilement reproduit avec les modèles analytiques car ceux-ci ne prennent pas en compte la dépendance avec $\|\vec{k}\|$. Ils ne sont valables que pour les bandes HH et LH [Vassell70] [Wiley71]:

$$\begin{aligned} I_{k,k'}^2 (\text{intra-bande}) &= \frac{1 + 3 \cos^2 \theta_{k,k'}}{4} \\ I_{k,k'}^2 (\text{inter-bande}) &= \frac{3 - 3 \cos^2 \theta_{k,k'}}{4} \end{aligned} \quad (\text{I.4.11})$$

Ces modèles sont cependant très pratiques et sont souvent utilisés. On le nommera modèle de Wiley. Les facteurs de recouvrement calculés sont représentés sur la FIG. 1.4.2 pour les différentes transitions intra/inter bandes de valence dans GaAs. Lorsque $k \rightarrow 0$, les facteurs de recouvrement calculés par NLEPM reproduisent fidèlement les modèles analytiques. Cependant, dès que k s'éloigne du centre de zone, les différences sont notables. De plus, les modèles analytiques ne donnent aucune information quant aux transitions impliquant la bande SO. On note que le comportement du facteur de recouvrement pour les transitions intra-bande SO est similaire à celui des transitions intra-bande de conduction.

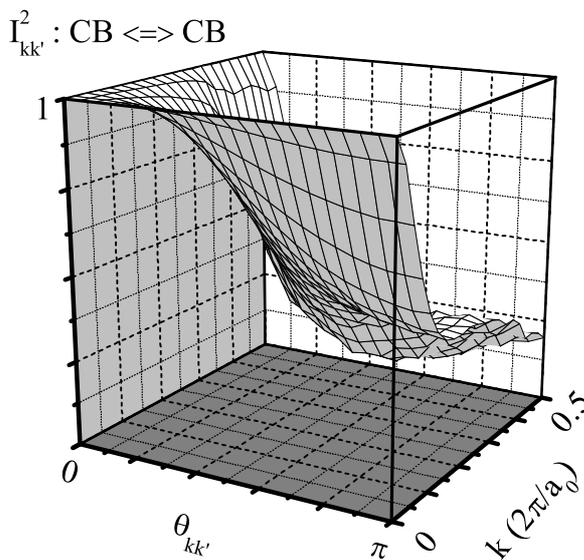
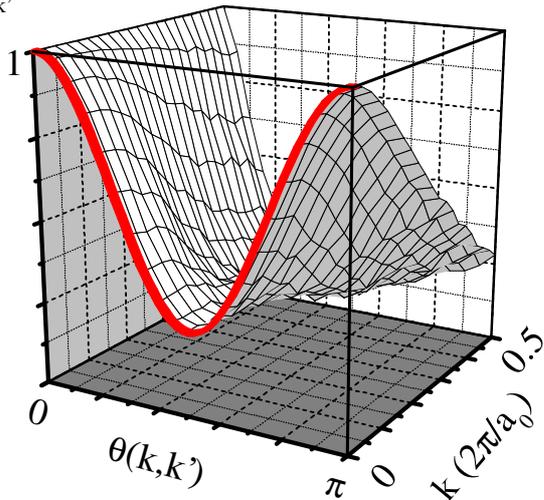


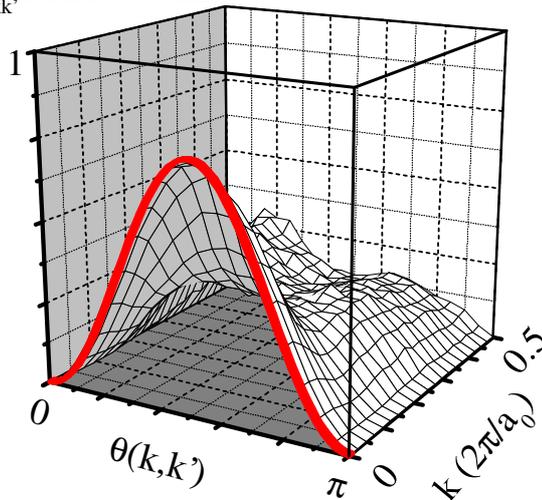
FIG. I.4.1 : Facteur de recouvrement des parties périodiques des ondes de Bloch entre états de la première bande de conduction de GaAs en fonction de l'angle $\theta_{kk'}$, et de la norme $\|\vec{k}\| = \|\vec{k}'\|$.

Les FIG. I.4.1 et I.4.2 ont été obtenues en moyennant les facteurs de recouvrement calculés pour des centaines de couples (k, k') tirés aléatoirement dont seul l'angle $\theta_{kk'}$ est fixé. De façon générale le facteur de recouvrement décroît avec la différence d'énergie entre les états considérés, différence qui croît avec la norme des vecteurs d'onde considérés à cause de l'anisotropie des bandes. D'après les résultats présentés il est clair que simplifier les facteurs de recouvrement par 1 constitue une lourde approximation, et ce, même pour la bande de conduction sauf si les électrons restent en bas de la vallée Γ . Cependant, la prise en compte précise des facteurs de recouvrement dans le CHAPITRE II suivant s'avère très « demandeuse » en temps de calcul. De plus, à la vue des surfaces présentées en FIG. I.4.1 et I.4.2, la dérivation de formules analytiques pour les trous semble assez complexe et pourrait demander un paramétrage fin.

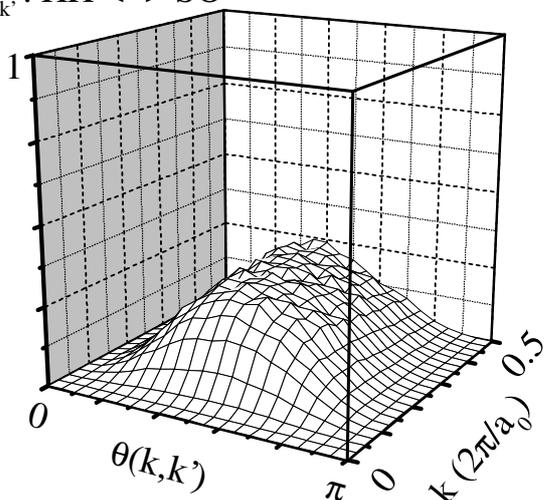
$\Gamma_{kk'}^2 : \text{HH} \Leftrightarrow \text{HH}$



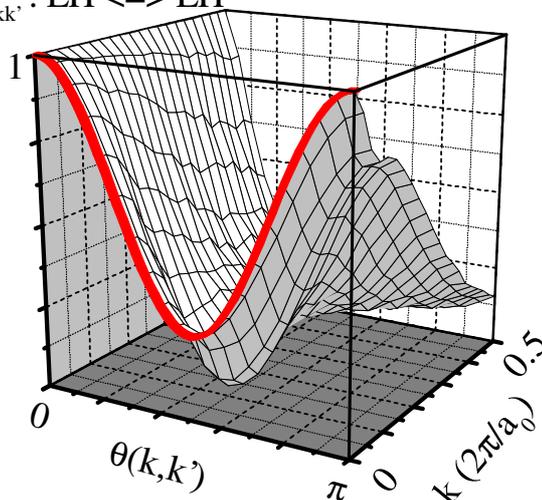
$\Gamma_{kk'}^2 : \text{HH} \Leftrightarrow \text{LH}$



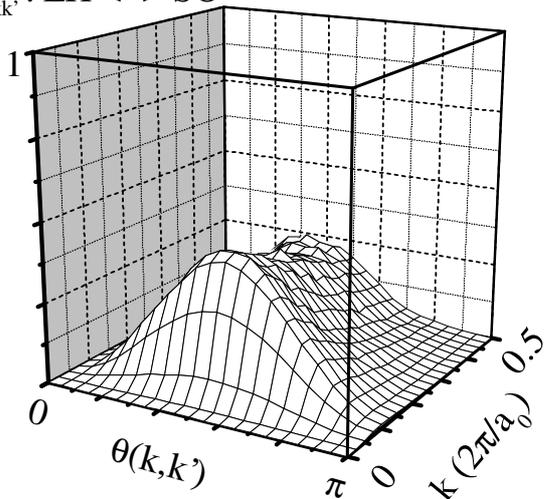
$\Gamma_{kk'}^2 : \text{HH} \Leftrightarrow \text{SO}$



$\Gamma_{kk'}^2 : \text{LH} \Leftrightarrow \text{LH}$



$\Gamma_{kk'}^2 : \text{LH} \Leftrightarrow \text{SO}$



$\Gamma_{kk'}^2 : \text{SO} \Leftrightarrow \text{SO}$

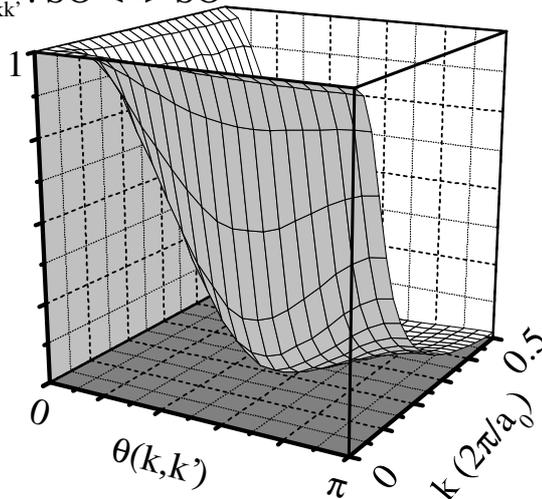


FIG. I.4.2 : Facteur de recouvrement des parties périodiques des ondes de Bloch entre états des bandes de valence de GaAs en fonction de l'angle $\theta(k, k')$ et de la norme $\|\vec{k}\| = \|\vec{k}'\|$. Le modèle de Wiley apparaît en rouge.

Certains processus nécessitent l'évaluation du facteur de recouvrement entre des états de bandes différentes, et/ou séparés par une énergie supérieure à l'énergie de bande interdite E_G . Ces processus sont la recombinaison radiative, l'ionisation par choc et les processus Auger qui seront vus en détails dans le CHAPITRE III. Des facteurs de recouvrement inter-bande conduction-valence sont représentés en FIG. I.4.3. Tout comme pour les facteurs intra-bande, le développement d'un modèle analytique semble très compliqué. On note que ces facteurs inter-bande sont plus petits, et qu'ils varient sur plusieurs ordres de grandeur à cause de l'orthogonalité entre états de différentes bandes.

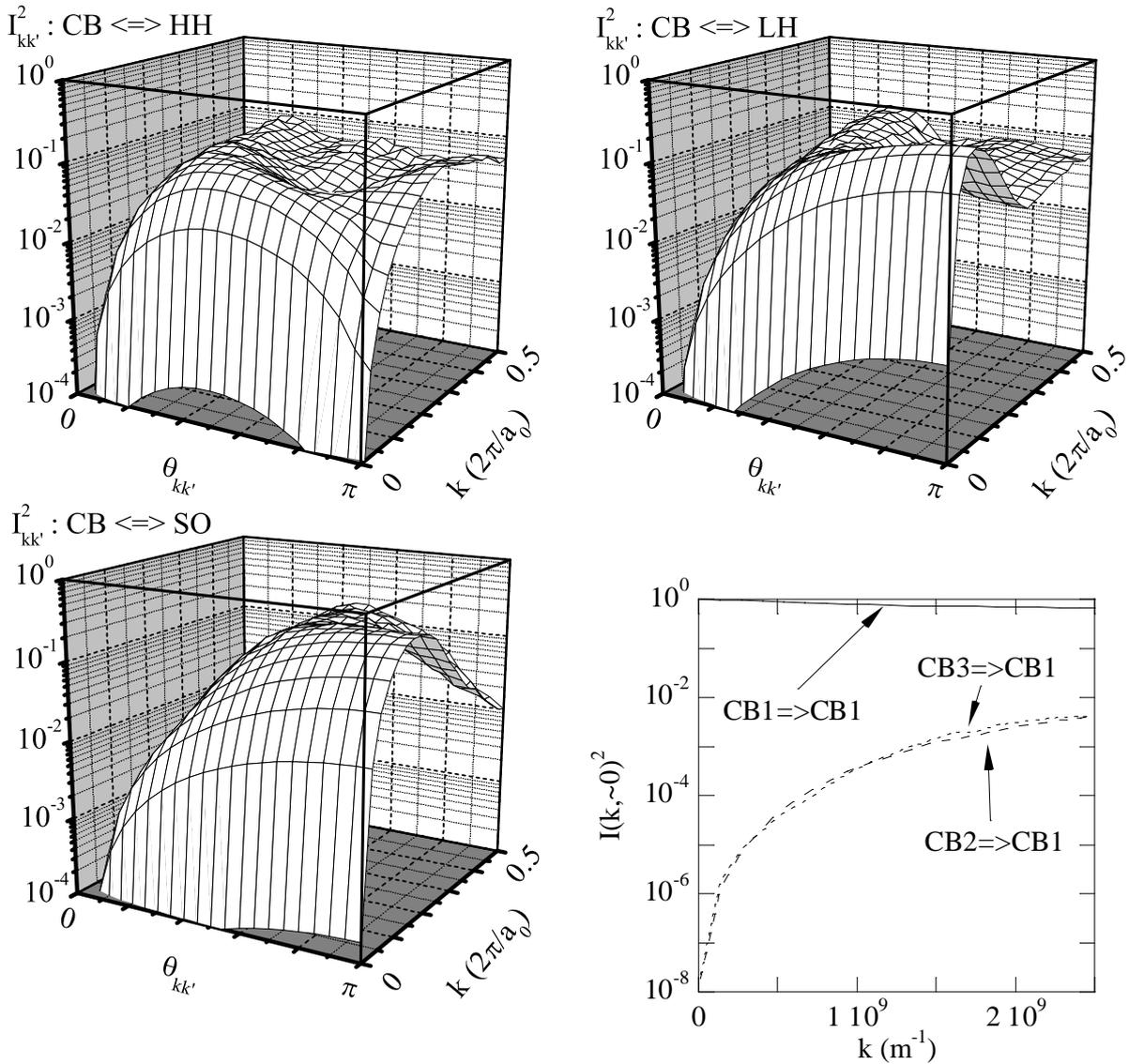


FIG. I.4.3 : Facteur de recouvrement des parties périodiques des ondes de Bloch entre états des bandes de conduction et de valence de GaAs en fonction de l'angle $\theta_{kk'}$ et de la norme $\|\vec{k}\| = \|\vec{k}'\|$.
En bas à droite : $k \rightarrow 0$.

La FIG. I.4.3 (en bas à droite) représente le facteur de recouvrement moyen en fonction de la norme $\|\vec{k}\|$ pour 200 couples tirés aléatoirement (k, k') où $k' \rightarrow 0$ et appartient à la 1^{ère} bande de conduction. On observe un trou (comme le « orthogonality hole ») dans le facteur de recouvrement inter-bande lorsque les états k et k' sont proches et pas forcément égaux. Cela a de grandes répercussions sur l'évaluation de taux d'interaction impliquant des transitions inter-bande. La TABLE I.5.1 contient des valeurs moyennes $\langle I_{k,k'}^2 \rangle$ des facteurs de recouvrement intrabande et interbande dans GaAs. Pour les facteurs de recouvrement intrabande (conduction-conduction ou valence-valence), une moyenne est calculée à partir des recouvrements d'états dont les énergies dans la bande sont $E_k = 40 \text{ meV}$ et $E_{k'} = 1.1 \times E_G$ mesurées par rapport au minimum de la bande concernée. Ces énergies correspondent à l'énergie moyenne d'une population de porteurs à l'équilibre thermodynamique et au seuil d'ionisation calculé d'après un modèle à bandes paraboliques [Ridley99]. Ce choix permet de calculer une limite supérieure pour le facteur de recouvrement entre états séparés d'une énergie supérieure à E_G impliqués dans un processus de génération/recombinaison non radiatif. En effet, plus l'énergie séparant les états initial et final est grande, plus l'intégrale de recouvrement est petite. Pour les facteurs de recouvrement interbande (entre la bande de conduction et les bandes de valence), la moyenne est calculée à partir des recouvrements entre états dont les énergies dans les bandes correspondantes sont $E_k = 40 \text{ meV}$ et $E_{k'} = 40 \text{ meV}$ et apparaissent dans la TABLE I.5.1 en italique. Un modèle analytique existe pour ce facteur de recouvrement dans le cas où $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$ est négligeable : $I_{k,k'}^2 \approx \frac{\hbar^2 q^2}{2E_G} \left(\frac{m_C + m_V}{m_C m_V} \right)$. Cependant, dans les processus d'ionisation par choc q est en général assez grand et le modèle analytique donne alors des valeurs supérieures à 1, qui est le recouvrement maximum.

$\langle I_{k,k'}^2 \rangle$	$k \in CB$	$k \in HH$	$k \in LH$	$k \in SO$
$k' \in CB$	0.474	<i>0.00763</i>	<i>0.02174</i>	<i>0.01618</i>
$k' \in HH$	<i>0.00763</i>	0.185	0.183	0.141
$k' \in LH$	<i>0.02174</i>	0.153	0.152	0.251
$k' \in SO$	<i>0.01618</i>	0.160	0.162	0.244

TABLE I.5.1 : Facteurs de recouvrement intra et inter bande moyens dans GaAs. description dans le texte.

5) Facteur de recouvrement « optique »

Lorsque l'interaction considérée dans (I.4.1) est une émission/absorption de photon, le facteur de recouvrement est modifié à cause de l'opérateur impulsion $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ dans l'Hamiltonien de l'interaction électron-photon $H = -e\vec{p}\cdot\vec{A}/m_0$. Le facteur de recouvrement « optique » est alors donné par

$$\langle \varphi'_{m,k',s'} | \vec{\nabla} | \varphi_{n,k,s} \rangle = \left(\sum_{i,i'=1}^{NSO} b_i'^{m,k',s'} b_i^{n,k,s} \langle u_{i',k',s'} | \vec{\nabla} | u_{i,k,s} \rangle \right) + \left(\sum_{j,j'=1}^{NSO} b_j'^{m,k',s'} b_j^{n,k,s} \langle u_{j',k',s'} | \vec{\nabla} | u_{j,k,s} \rangle \right) \quad (\text{I.5.1})$$

où les indices n et m pointent vers des bandes différentes. L'action de l'opérateur gradient sur un ket de la base sans spin (avant doublement) est assez simple

$$\nabla_{c=x,y,z} | u_{n,k,s} \rangle = \sum_{j=1}^N iG_{j,c} a_j^{n,k} | G_j, s \rangle \quad (\text{I.5.2})$$

ce qui mène à

$$\langle u_{m,k',s'} | \nabla_{c=x,y,z} | u_{n,k,s} \rangle = \sum_{j=1}^N iG_{j,c} a_j^{m,k'} a_j^{n,k} \quad (\text{I.5.3})$$

Les valeurs utiles à la suite (coefficient d'absorption, recombinaison radiative) seront des valeurs moyennes $\langle \varphi'_{m,k',s'} | \vec{\nabla} | \varphi_{n,k,s} \rangle^2 / 3$ valables dans le cas où l'excitation optique ne présente pas de polarisation particulière. Ces valeurs sont listées dans la TABLE I.5.1 pour les transitions entre la bande HH et la première bande de conduction.

	GaAs	InAs	GaSb	In _{0.53} Ga _{0.47} As	GaAs _{0.50} Sb _{0.50}
$\langle \varphi'_{m,k',s'} \vec{\nabla} \varphi_{n,k,s} \rangle^2 / 3$	3.794×10^{19}	2.988×10^{19}	3.109×10^{19}	3.427×10^{19}	3.415×10^{19}

TABLE I.5.1 : Valeurs moyennes du facteur de recouvrement optique (en m^2) calculé par NLEPM entre la bande HH et la vallée Γ_{6c} pour des transitions en centre de zone.

6) Conclusion

Dans ce chapitre, le calcul de structures électroniques par la méthode des pseudo-potentiels empiriques (EPM) a été abordé. L'équipe au sein de laquelle s'est déroulée cette thèse, possédait déjà un code et les paramètres pour le calcul de structures électronique par la méthode $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 30 bandes. L'utilisation de l'EPM a été motivée par la possibilité de traiter le cas des alliages ternaires à partir des paramètres obtenus pour les composés binaires de façon relativement simple comparée à la difficulté présentée par les alliages en $\vec{k} \cdot \vec{p}$. Les structures électroniques de GaAs, InAs, GaSb, puis de $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ et $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$ ont été ainsi toutes calculées en tenant compte des termes non locaux et l'interaction spin-orbite. Ces structures électroniques, outre le fait qu'elles fournissent les relations de dispersion des états électroniques, ont aussi été utilisées afin de d'obtenir des informations sur les transitions intra et inter bande via le facteur de recouvrement. Toutes ces informations sont primordiales pour le travail qui sera présenté dans les chapitres suivants.

Référence Bibliographiques :

- [Bloom70] S. Bloom and T. K. Bergstresser,
Solid State Commun. 6, 465 (1970)
- [Brust71] D. Brust,
Phys. Rev. B 4, 3497 (1971)
- [Burt84] M. G. Burt, S. Brand, C. Smith and R. A. Abram,
J. Phys. C 17, 6385 (1984)
- [Chelikowsky76] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen,
Phys. Rev. B 14, 556 (1976)
- [Cohen61] M. H. Cohen and V. Heine,
Phys. Rev. 122, 1821 (1961)
- [Cohen66] M. L. Cohen and T. K. Bergstresser,
Phys. Rev. 141, 789 (1966)
- [Ehrenreich57] H. Ehrenreich,
J. Phys. Chem. Solids, 2 131 (1957)
- [Fawcett70] W. Fawcett, D. A. Boardman and S. Swain,
J. Phys. Chem. Solids 31, 1963 (1970)
- [Fishman10] G. Fishman,
« Semi-conducteurs: les bases de la théorie k.p »,
Editions de l'Ecole Polytechnique 2010
- [Gilat66] G. Gilat and L. J. Raubenheimer,
Phys. Rev. 144, 390 (1966)
- [Kim02] K. Kim, P. R. C. Kent, A. Zunger and C. B. Geller,
Phys. Rev. B 66, 045208 (2002)
- [Kleinman60] L. Kleinman and J. C. Phillips,
Phys. Rev. 118, 1153 (1960)
- [Landolt-Börnstein] [http://www.springer.com/librarians/
e-content/springermaterials?SGWID=0-171102-0-0-0](http://www.springer.com/librarians/e-content/springermaterials?SGWID=0-171102-0-0-0)
- [Lehmann72] G. Lehmann and M. Taut,
Phys. Stat. Sol. (b) 54, 469 (1972)
- [Mezrag06] F. Mezrag, N. Y. Aouina, and N. Bouarissa,
J. Mater. Sci. 41, 5323 (2006)
- [Phillips59] J. C. Phillips and L. Kleinman,
Phys. Rev. 116, 287 (1959)

- [Pötz81] W. Pötz and P. Vogl,
Phys. Rev. B 24, 2025 (1981)
- [Ridley99] B. K. Ridley,
« Quantum Processes in Semiconductors »,
4th edition (Oxford University Press, 1999)
- [Saravia68] L. R. Saravia and D. Brust,
Phys. Rev. 176, 915 (1968)
- [Vassell70] M. O. Vassell, A. K. Ganguly and E. M. Conwell,
Phys. Rev. B 2, 948 (1970)
- [Vurgaftman01] I. Vurgaftman, J. R. Meyer and L. R. Ram-Mohan,
J. Appl. Phys. 89, 5815 (2001)
- [Weisz66] G. Weisz,
Phys. Rev. 149, 504 (1966)
- [Wiley71] J. D. Wiley,
Phys. Rev. B 4, 2485 (1971)
- [Williamson00] A. J. Williamson, L. W. Wang and A. Zunger,
Phys. Rev. B 62, 12963 (2000)
- [Zunger83] A. Zunger and J. E. Jaffe,
Phys. Rev. Lett. 51, 662 (1983)

CHAPITRE II : ENSEMBLE MONTE CARLO

Pour décrire les propriétés de transport électronique des semi-conducteurs, la méthode « Ensemble Monte Carlo » (EMC) a été retenue. Cette méthode a connu beaucoup de succès depuis l'avènement des semi-conducteurs en électronique. En effet, elle est particulièrement bien adaptée à un calcul intuitif des propriétés de transport grâce à la résolution de « Boltzmann Transport Equation » (BTE). La BTE permet de suivre la variation de la fonction de distribution des porteurs de charge en fonction du temps en présence d'une excitation (optique ou électrique) dans un cadre semi-classique. Pour ce faire, elle établit le bilan entre le peuplement et le dépeuplement d'états électroniques en fonction des événements pris en compte dans le modèle tels que l'accélération due à un champ électrique et les phénomènes de diffusion des porteurs. La structure électronique a été présentée et une technique pour la calculer a été explicitée au CHAPITRE I. Le bilan nécessite la résolution d'intégrales assez complexes. C'est pour éviter une résolution directe de ces intégrales que la méthode Monte Carlo a été utilisée. La méthode Monte Carlo peut également être appliquée dans un cadre quantique avec l'Equation de Transport de Wigner [Nguyen11].

Le pouvoir prédictif d'un outil de modélisation dépend des approximations nécessaires à sa mise en oeuvre. Nous nous sommes focalisés dans ce travail sur les semi-conducteurs III-V (GaAs, InAs, et GaSb exclusivement) et leurs alliages (InGaAs et GaAsSb). Ils constituent le cadre général du travail. Les structures électroniques et les processus de diffusion pertinents pour les semiconducteurs III-V seront donc les ingrédients principaux du modèle développé. Nous qualifierons de « configuration de base » le code qui permet de réaliser ces modélisations. Les problématiques abordées dans les prochains chapitres sont cependant hors de portée de ce modèle. La « configuration de base » servira de socle pour la construction d'une « configuration étendue » qui se focalisera, entre autre, sur certaines interactions porteur-porteur. D'autres interactions porteur-porteur feront l'objet du CHAPITRE III.

1) Principes de l'EMC

Le terme « Monte Carlo » désigne une méthode stochastique utilisée pour la résolution d'intégrales développée par Nicholas Metropolis en 1947. En physique, elle fut centrale dans les calculs du projet *Manhattan*. En mathématiques, on peut voir apparaître une méthode Monte Carlo pour calculer π en prenant le problème du Comte de Buffon (XVIIIe siècle) à

l'envers. Dans une méthode Monte Carlo, une intégrale est calculée en échantillonnant de façon aléatoire les variables du problème dans leur espace. Plus l'échantillon est grand et plus l'évaluation sera précise mais la taille optimale de l'échantillon ne dépend pas de la taille des espaces (loi des grands nombres). Ceci s'avère extrêmement pratique pour la résolution d'intégrales multi dimensionnelles notamment. La méthode Monte Carlo n'autorise cependant pas la résolution directe de la BTE. Elle entre plutôt en jeu à différents niveaux dans la description du transport des porteurs de charge dans un matériau massif dans le cadre de la BTE. Pour un champ électrique constant, la BTE dans l'espace réciproque est donnée par

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} = \frac{q\vec{E}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_k f_k + \left(\frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int P_{k',k} f_{k'} (1-f_k) d^3k' \right) - \left(\frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int P_{k,k'} f_k (1-f_{k'}) d^3k' \right) \quad (\text{II.1.1})$$

où f est la fonction de distribution (par spin), \vec{E} le champ électrique et $P_{k,k'}$ la probabilité de diffusion de l'état k vers l'état k' par unité de temps. La traduction littérale de cette équation pourrait être : la variation temporelle de la fonction de distribution de l'état k est égale à la variation due à l'accélération des porteurs par le champ électrique, à laquelle s'ajoute la variation due à l'entrée (dans l'état k à partir de n'importe quel état k' , « taux d'entrée »), et à laquelle on retranche la variation due à la sortie (de l'état k vers n'importe quel état k' , « taux de sortie »). Les termes d'entrée et de sortie sont dépendants des phénomènes de diffusion des porteurs. C'est cette interprétation de la BTE que l'EMC prend en charge.

Les interactions donnant lieu aux phénomènes de diffusion sont traitées dans le cadre de la Règle d'Or de Fermi (Fermi's Golden Rule, FGR) qui donne la probabilité de diffusion d'un état initial k vers un état final k' par unité de temps

$$S_{k,k'}^i = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{k,k'}^i|^2 \delta(E) \quad (\text{II.1.2})$$

où $M_{k,k'}$ est l'Hamiltonien de l'interaction considérée i évalué entre les états k et k' , et où $\delta(E)$ assure la conservation de l'énergie totale en jeu. La FGR relève de la théorie des perturbations dépendantes du temps entre états stationnaires (états non perturbés par les interactions i), qui sont les états d'énergie donnés par les calculs de structure électronique. En sommant (II.1.2) sur tous les états finaux k' possibles (considérés non occupés) on obtient le taux d'interaction pour le processus de diffusion considéré

$$w_k^i = \sum_{k'} S_{k,k'}^i \quad (\text{II.1.3})$$

En sommant (II.1.3) sur toutes les interactions prises en compte dans le modèle, on obtient la probabilité totale d'interaction par unité de temps (règle de Matthiessen)

$$W_k = \sum_i w_k^i \quad (\text{II.1.4})$$

qui est la probabilité par unité de temps qu'un porteur soit diffusé hors de l'état k .

En pratique, la population de n (densité) porteurs de charge est numériquement échantillonnée par un nombre N de super-particules, chacune portant donc un poids n/N . Indépendamment de n , N est typiquement de l'ordre de 10000 pour les calculs de propriétés de transport. On considère que le transport de ces super-particules est balistique entre deux interactions traitées par des modèles quantiques (processus de diffusion). C'est pour cela que la résolution de la BTE par l'EMC est qualifiée de méthode semi-classique. Dans l'EMC, le temps est discrétisé en pas de temps dt . L'évolution temporelle des populations de porteurs est alors obtenue en itérant sur les pas de temps. Au début d'un pas de temps, un temps de vol libre δt d'une super-particule est aléatoirement choisi en accord avec la probabilité totale d'interaction de la super-particule considérée. La super-particule se déplace alors balistiquement, éventuellement accélérée par un champ électrique pendant δt . Une interaction est ensuite aléatoirement choisie parmi celles entrant en jeu dans la probabilité totale d'interaction. Le tirage au sort de l'interaction qui met fin au vol libre n'est pas totalement aléatoire mais respecte une distribution de probabilité qui dépend du poids relatif de chaque interaction dans la probabilité totale d'interaction. De cette façon, les interactions les plus probables sont choisies plus souvent. Le même type de procédé est utilisé pour le choix de l'état final après l'interaction. Un nouveau temps de vol libre est alors tiré au sort et ainsi de suite. Arrivé au bout du temps dt , on passe à une autre super-particule. Lorsque les N super-particules ont atteint dt , le pas de temps suivant est traité. Dans la limite où le pas de temps dt (typiquement 10 fs) est assez petit (par rapport à W) et l'échantillonnage de la population de porteurs assez fin, l'EMC traduit très bien la dynamique des porteurs. Ce mécanisme est illustré en FIG. II.1.1.

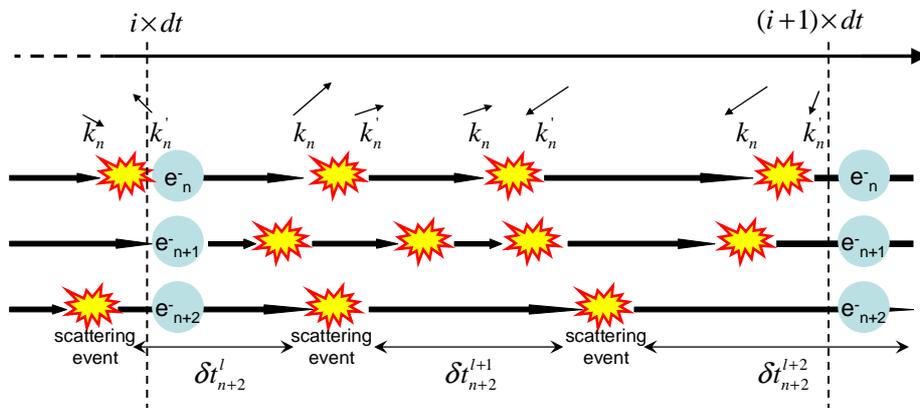


FIG. II.1.1 : Illustration de la dynamique de 3 super-particules dans l'EMC durant un pas de temps dt . Des processus de diffusions séparés de δt_n^l dévient leur trajectoire \vec{k}_n vers \vec{k}'_n .

Comme l'EMC ne résout pas littéralement la BTE, les calculs ne se font pas directement sur la fonction de distribution (donnée « macroscopique ») mais sur l'échantillon de super-particules dont l'état (vecteur d'onde), la vitesse etc. (données « microscopiques ») sont connus au cours du temps. Cela présente plusieurs avantages. Si l'échantillonnage est assez fin, la fonction de distribution peut aisément être reconstruite à partir de la population de porteurs échantillonnée. Le « terme d'entrée » dans (II.1.1) n'est pas explicitement traité car il est implicitement « reconstruit » lorsque qu'un état final après une interaction est choisi. En effet, lorsqu'une super-particule sort d'un état k et entre dans un autre état k' , elle contribue au terme d'entrée de l'état k' . La balance entre « entrées » et « sorties » pour un état donné, se fait alors automatiquement, sans avoir à calculer précisément (II.1.1), ce qui est très lourd, e.g. dans l'approche matricielle pour la résolution de la BTE [Richard04]. De plus, l'approche de type EMC permet d'étudier les phénomènes transitoires, et pas seulement les régimes stationnaires [Cavassilas02], contrairement à l'approche Monte Carlo monoparticulaire. Le Monte Carlo monoparticulaire fonctionne comme l'EMC à la différence près qu'une seule et unique particule est simulée pendant un temps (en général très long). Comme le transport est ergodique, le régime stationnaire (d'un ensemble de particules) peut être obtenu à partir de moyennes temporelles sur une particule.

Le raffinement d'un modèle EMC dépend de la structure électronique utilisée et du jeu d'interactions considéré. La structure électronique constitue la charpente d'un modèle EMC car elle donne les relations énergie-vecteur d'onde ($E(\vec{k})$) et les fonctions d'onde sur lesquelles sont calculées les équations (II.1.2) et (II.1.3). Le jeu d'interactions considéré, d'autre part, agit sur (II.1.4). Plus le jeu est complet et plus le modèle peut prétendre être fidèle, ou conforme à la « réalité ». Un jeu complet permet d'éviter la compensation d'un effet par un autre, que ce soit volontaire ou non. Ces deux points (structure électronique et jeu d'interactions) sont aussi importants l'un que l'autre car ils traduisent la « réalité physique » du modèle. Mais, ils influent énormément sur les temps de calculs ce qui dans la pratique est un point non négligeable.

2) Configuration de base

La méthode EMC est assez intuitive et modulable. Cette modularité a permis le développement de différents modèles EMC pour les semi-conducteurs dans le passé, chacun

étant finement réglé pour l'étude de propriétés électroniques spécifiques (mobilité, vitesse de saturation, relaxation des porteurs etc.) [Bailey90] [Brennan84] [Choo04] [Osman87] [Rota93]. Bien que ces modèles soient assez différents, leurs jeux d'interactions considérées ont cependant en commun un certain nombre de processus de diffusion que l'on appellera « set de base ». Ce set de base contient principalement les interactions porteur-phonon traités le plus simplement possible, et est décrit dans un excellent article de revue avec le fonctionnement basique d'un EMC [Jacoboni83]. Outre les différences dans le jeu d'interactions considéré, les différents modèles EMC sont classés en deux catégories définissant la prise en compte de la structure électronique, que l'on nommera : EMC Analytique (EMCA) et Full-Band EMC (FBEMC). Dans les EMCA, la structure électronique du semi-conducteur est décrite par des vallées caractérisées par des masses effectives et éventuellement des coefficients de non parabolicité. L'anisotropie des vallées peut être paramétrée (pour les bandes de conduction et de valence). Cependant, ces modèles analytiques plus ou moins complexes de structure électronique ne sont fidèles aux structures électroniques « réelles » qu'au voisinage des extrema des bandes. Les EMCA ne sont donc valides que lorsque les porteurs ne s'aventurent pas à trop haute énergie dans les bandes. Les FBEMC, où la structure électronique est numérique (calculée en k.p ou EPM/NLEPM ou autre), ont été développés pour pouvoir modéliser le transport de façon plus réaliste sous fort champ électrique, ce qui nécessite une bonne description des états de haute énergie dans les bandes.

a) modélisation de la structure électronique

Au « repos », les électrons ont tendance à peupler les états de plus basse énergie afin de minimiser leur énergie totale. Il est donc pratique de repérer les minima de la bande de conduction qui se trouvent, de manière générale, aux points Γ , L et X dans l'espace réciproque. La première bande de conduction est alors assimilée à un ensemble de 8 vallées : 1 vallée centrale Γ , 6 demi vallées X et 8 demi vallées L. Les trous, qui représentent des absences d'électrons en bandes de valence, ont tendance à peupler les états de haute énergie, comme des bulles remontant à la surface d'une boisson gazeuse. Il est donc pratique de repérer les maxima des bandes de valence qui se trouvent en Γ . Chaque bande de valence est alors assimilée à une vallée centrale Γ . Plusieurs degrés de raffinements existent pour la modélisation de ces différentes vallées. Ils dépendent des propriétés des surfaces iso énergie (dans l'espace réciproque) des vallées et du caractère parabolique de la relation énergie-vecteur d'onde qui peut être donnée de façon générale par

$$E_i(1 + \alpha_i E_i) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_l^2}{m_{i,l}^*} + \frac{k_{t1}^2}{m_{i,t1}^*} + \frac{k_{t2}^2}{m_{i,t2}^*} \right) \quad (\text{II.2.1})$$

où E est l'énergie (échelle d'énergie positives, mesurées par rapport au minimum/maximum de la vallée), α le coefficient de non parabolicité, et $\{m_l^*; m_{t1}^*; m_{t2}^*\}$ les masses effectives directionnelles caractérisant l'anisotropie des surfaces iso-énergie.

En bande de conduction et dans les matériaux considérés ici, la vallée Γ est bien modélisée par une vallée non-parabolique ($\alpha \neq 0$) et des surfaces iso-énergie isotropes sphériques ($m_l^* = m_{t1}^* = m_{t2}^*$). Les vallées de type L et X quant à elles peuvent être modélisées par des vallées non-paraboliques ($\alpha \neq 0$) et des surfaces iso-énergie anisotropes ellipsoïdales ($m_l^* \neq m_{t1}^*; m_{t1}^* = m_{t2}^*$). Les directions longitudinales et transverses sont choisies en fonction du type de vallée et sont définies en changeant la base du repère dans l'espace réciproque ($\vec{u}; \vec{v}; \vec{w}$). A titre d'exemple, pour une vallée L et une vallée X on a:

$$\left(\vec{u}_l = \frac{\vec{u} + \vec{v} + \vec{w}}{\sqrt{3}}; \vec{u}_{t1} = \frac{-\vec{u} + \vec{v}}{\sqrt{2}}; \vec{u}_{t2} = \frac{-\vec{u} - \vec{v} + 2\vec{w}}{\sqrt{6}} \right) \text{ pour L en } \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) \frac{2\pi}{a_0} \quad (\text{II.2.2})$$

$$(\vec{u}_l = \vec{u}; \vec{u}_{t1} = \vec{v}; \vec{u}_{t2} = \vec{w}) \text{ pour X en } (1, 0, 0) \frac{2\pi}{a_0}$$

Les repères pour les vallées équivalentes sont retrouvés en appliquant les symétries de la zone de Brillouin. Ces modèles sont assez pratiques car ils permettent des calculs rapides des énergies et des états post-diffusion. Bien que reflétant les caractéristiques majeures de la première bande de conduction, ces modèles ont tout de même une validité limitée. En effet, « loin » des minima d'énergie, les vallées ne se prêtent plus à une modélisation de type (II.2.1). Ces états « éloignés » peuvent être assez facilement atteints sous l'application d'un fort champ électrique (0.1eV au dessus du minimum en L avec quelques centaines de kV/cm) ou sous excitation optique. Les bandes de valence sont, quant à elles, le plus souvent modélisées par des vallées non-paraboliques ($\alpha \neq 0$) et des surfaces iso-énergie isotropes ($m_l^* = m_{t1}^* = m_{t2}^*$) car il s'agit du moyen le plus simple et rapide d'opérer. Les surfaces iso-énergie en bandes de valence sont pourtant très anisotropes, même près des maxima (pour les bandes HH et LH). Un modèle anisotrope pour la forme particulière des surfaces iso-énergie des bandes HH et LH existe mais il n'est valide que très près des maxima [Kane56] [Jacoboni83]. Les modèles analytiques des vallées sont représentés sur la FIG. II.2.1, et sont comparés au NLEPM. Le choix d'un modèle analytique avec son domaine de validité pour la

structure électronique dépend évidemment des conditions de simulation pour le calcul EMC (champ électrique, excitation optique etc.).

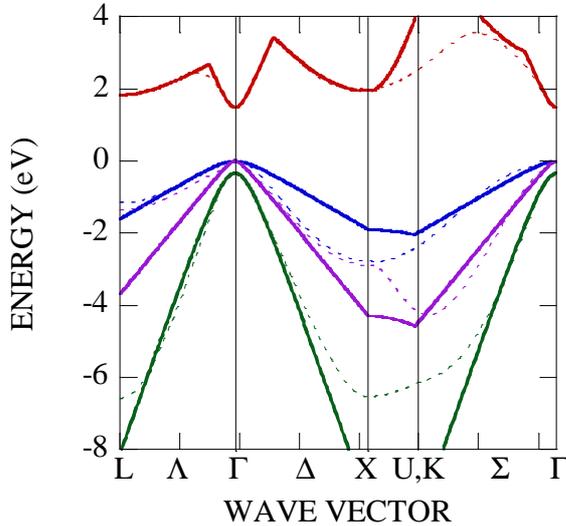


FIG. II.2.1 : Structure électronique de GaAs le long de L- Γ -X-U,K- Γ dans la 1^{ère} zone de Brillouin. Les modèles de vallées analytiques utilisés dans les EMCA apparaissent en trait plein. La structure calculée par NLEPM apparaît en pointillés.

Pour les vallées centrales (en Γ), les masses effectives isotropes et les coefficients de non parabolicité sont extraits à partir des densités d'état calculées sur la structure électronique donnée par NLEPM. Pour les vallées L et X, les masses effectives et les coefficients de non parabolicité sont calculés en ajustant (II.2.1) sur la structure électronique donnée par NLEPM le long des directions longitudinales et transverses. L'accord entre les modèles analytiques et NLEPM est assez bon pour la vallée Γ de la bande de conduction et la vallée SO dans des gammes d'énergie raisonnable. Cependant, pour les autres vallées, un flagrant désaccord, dû à la complexité de la structure électronique réelle, apparaît.

b) processus de diffusion : set de base

Dans l'EMC, les vols libres des porteurs sont interrompus par des interactions donnant lieu à des processus de diffusion. Dans le cas le plus simple, on considère un électron dans un cristal. Les interactions mettant fin aux vols libres sont donc les interactions entre l'électron et les atomes du réseau cristallin. Les interactions coulombiennes dues aux charges que portent l'électron et les atomes à température nulle ont déjà été prises en compte et donnent la structure électronique modélisée dans la section précédente. A température non nulle, l'énergie thermique fait vibrer les atomes autour de leur position d'équilibre. Ces vibrations engendrent des variations dans le potentiel périodique vu par l'électron et donnent lieu aux processus de diffusion : il s'agit des interactions électron-phonon qui décrivent les

interactions entre l'électron et les vibrations du réseau cristallin. Les modes de vibration possibles sont représentés en FIG. II.2.2 pour GaAs. Il s'agit des états accessibles aux phonons dans l'espace réciproque, équivalent de la structure électronique pour les électrons. Les semiconducteurs III-V de structure cubique face centrée possèdent 6 branches phononiques : 3 branches « optiques » (O) et 3 branches « acoustiques » (A) correspondant à des vibrations atomiques en opposition de phase et en phase respectivement. Au sein de ces 2 familles on distingue les branches « longitudinales » (L) et les branches « transverses » (T), correspondant à des directions de polarisation de la vibration parallèles et transverses aux directions de propagation des ondes vibratoires. Les 6 branches sont : LO, TO, TO, LA, TA, TA.

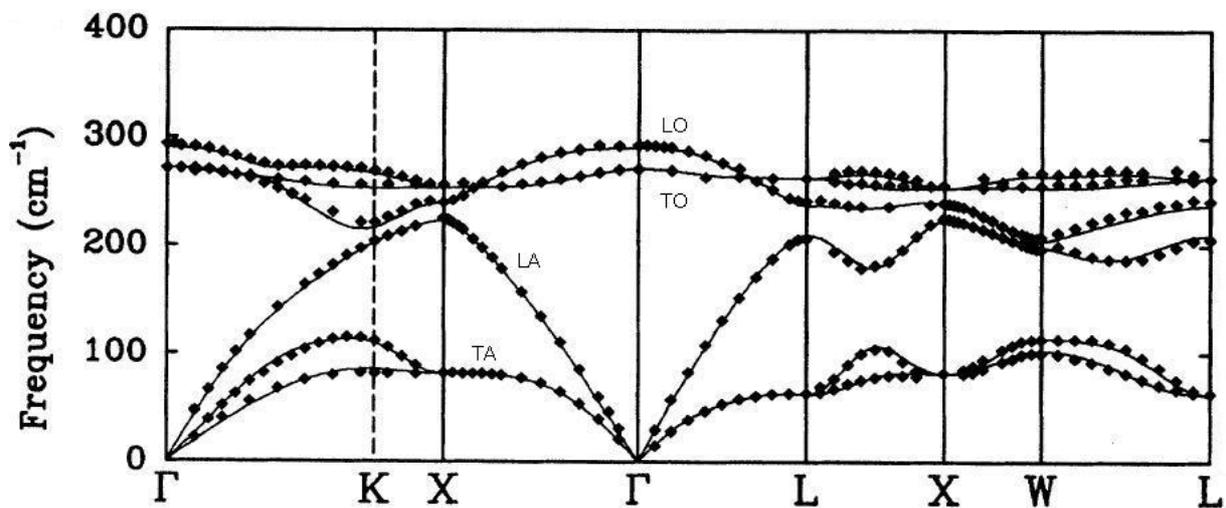


FIG. II.2.2 : Structure phononique de GaAs le long de directions de haute symétrie dans la 1^{ère} zone de Brillouin. Les mesures [Strauch90] et calculs [Giannozzi91] sont représentés par des points et des lignes respectivement (reproduit à partir de [Giannozzi91]).

Les variations dans le potentiel causées par les vibrations du réseau cristallin mentionnées précédemment sont caractérisées par des potentiels de déformation. Elles sont traitées en perturbation par la Règle d'Or de Fermi (FGR) sur les états non perturbés (structure électronique) calculés à partir de la structure cristalline à température nulle. Dans les semiconducteurs III-V, l'interaction électron-phonon la plus connue est sans doute celle avec les phonons LO, responsable des transferts d'énergie entre les électrons et le réseau. Elle limite notamment l'énergie que peut gagner un électron sous l'application d'un champ électrique et n'est pas traitée dans le cadre d'un potentiel de déformation mais via le couplage de Frölich (CHAPITRE IV). De façon plus générale, d'autres interactions porteur-phonon inélastiques existent, impliquant les autres branches de phonons et donnant lieu à des

diffusions intra et/ou inter vallée pour les électrons et les trous. Le premier niveau de modélisation de la structure phononique est de considérer les branches optique plates (énergie constante : modèle d'Einstein) et la dispersion des branches acoustiques linéaire (modèle de Debye). Cela permet d'obtenir des relations analytiques reliant les taux d'interactions (II.1.3) porteur-phonon et les potentiels de déformation correspondants. Pour les interactions donnant lieu à des diffusions d'électrons intervallées équivalente/non-équivalente, il est coutume de choisir un potentiel de déformation et une énergie de phonon, indépendamment des différentes branches de phonons pouvant « réellement » entrer en jeu dans l'interaction. Dans les EMCA, les potentiels de déformation sont généralement ajustés pour reproduire les mobilités électroniques par exemple. Dans le but de pouvoir traiter les alliages (en particulier GaAs_{0.50}Sb_{0.50} pour lequel aucune caractéristique vitesse moyenne des porteurs - champ électrique expérimentale n'est disponible) pour chaque interaction porteur-phonon, un potentiel de déformation par branche de phonon impliquée est utilisé. Cela permet de séparer la contribution de chaque branche dans chaque interaction (voir section 4 de ce chapitre).

Portons désormais notre attention sur les probabilités de transition. Comme mentionné dans le CHAPITRE I, elles peuvent se décomposer sous la forme (voir (II.1.2)):

$$S_{k,k'}^{n,n'} = \frac{2\pi}{\hbar} |m_{k,k'}^{n,n'}|^2 |I_{k,k'}^{n,n'}|^2 \delta(E) \quad (\text{II.2.3})$$

où $|I_{k,k'}^{n,n'}|^2$ et $|m_{k,k'}^{n,n'}|^2$ sont respectivement le facteur de recouvrement, et l'élément de matrice d'interaction (évalué entre 2 ondes planes), pour un processus diffusant un porteur en k dans la bande n vers un état k' dans la bande n' . Pour les électrons, le facteur de recouvrement est souvent approximé par 1 (valeur maximale) ou peut être modélisée par (I.4.10) pour les transitions intra vallée. Pour les transitions inter vallée, il est approximé par 1. En ce qui concerne les bandes de valence, le modèle de Wiley donnant les coefficients a_i de $I_{k,k'}^2 = a_0 + a_1 \cos \theta_{k,k'} + a_2 \cos^2 \theta_{k,k'}$ ne couvre que les transitions intra/inter bande HH/LH. Le modèle a donc été étendu pour tenir compte de la bande SO à l'aide des coefficients calculés dans [Scholz95] (structure électronique k.p) pour des états proches du bord de bande

$$\begin{aligned} SO \Leftrightarrow SO : \{a_0 = 1; a_1 = 0; a_2 = 0\} \\ SO \Leftrightarrow HH / LH : \{a_0 = 0.075; a_1 = 0; a_2 = 0.25\} \end{aligned} \quad (\text{II.2.4})$$

On nommera ce modèle étendu, modèle de Wiley/Scholz. Les potentiels de déformation et autres constantes mentionnés plus haut interviennent dans $|m_{k,k'}^{n,n'}|^2$. En abandonnant les indices

de bande dans (II.2.3), pour les interactions porteur-phonon on a (où les signes supérieurs et inférieurs correspondent aux processus d'émission et d'absorption de phonon):

$$\begin{aligned}
S_{POP}(k, k') &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\rho e^2 \omega_{LO}^2}{\epsilon_0} \frac{I_{k,k'}^2}{q^2} \left(\frac{1}{\kappa_\infty} - \frac{1}{\kappa_S} \right) \frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_{LO}} \left(N_{\omega_{LO}} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta(E) \\
S_{ODP}(k, k') &= \frac{2\pi}{\hbar} d_0^2 \frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_{TO}} I_{k,k'}^2 \left(N_{\omega_{TO}} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta(E) \\
S_{ADP}(k, k') &= \frac{2\pi}{\hbar} q^2 d_A^2 \frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega} I_{k,k'}^2 \left(N_\omega + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta(E) \\
S_{PIEZO}(k, k') &= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{e e_{PZ}}{\epsilon} \right)^2 \frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega} I_{k,k'}^2 \left(N_\omega + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta(E) \\
S_{ALLOY}(k, k') &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{3\pi^2 \Omega_c x(1-x)(\Delta E)^2}{16^2 \Omega} I_{k,k'}^2 \delta(E)
\end{aligned} \tag{II.2.5}$$

où POP, ODP, ADP, PIEZO et ALLOY font référence aux phonons optiques polaires (LO), potentiel de déformation optique (phonons TO), potentiel de déformation acoustique, phonon piézoélectrique (phonon acoustique avec charge effective), et potentiel d'alliage pour les ternaires. Dans ces expressions, ω_{LO}/ω_{TO} représente la pulsation des phonons optiques LO/TO (modèle d'Einstein : pulsation constante sur la zone de Brillouin), $\omega = qv$ est la pulsation des phonons acoustiques que l'on peut exprimer en fonction de leur vecteur d'onde q et la vitesse moyenne du son v (modèle de Debye, pulsation linéaire avec q), et N_ω renvoie au facteur d'occupation de Bose Einstein des états phononique d'énergie $\hbar\omega$. D'autres constantes caractéristiques du matériau apparaissent également, telles que la masse volumique ρ , les constantes diélectrique relatives dites infinie/statique κ_∞/κ_S , la constante piezoélectrique e_{PZ} (e_{14} pour les III-V à structure zinc blende), les potentiels de déformation optique/acoustique $d_{0/A}$, le volume de la maille cristalline Ω_c , et le potentiel d'alliage ΔE . Ces expressions doivent être sommées sur les états finaux pour obtenir les taux d'interactions correspondants (II.1.3). Cette tâche peut se révéler assez difficile, voire impossible (de façon analytique) dans certains cas ce qui rend le calcul numérique d'intégrale nécessaire. Les calculs numériques d'intégrales requièrent un temps de calcul important ; cette solution aura été évitée le plus souvent possible. Dans les interactions avec les phonons acoustiques, le calcul peut être grandement simplifié en invoquant l'approximation d'équipartition pour le facteur d'occupation phononique combinée avec le modèle de Debye pour la relation de dispersion des phonons acoustiques $N_\omega \approx N_\omega + 1 \approx \frac{k_B T}{\hbar\omega} \approx \frac{k_B T}{\hbar qv}$. Cette approximation s'avère

raisonnable tant que la température T est assez grande devant les énergies de phonons en jeu, ce qui est le cas à 300K en centre de zone pour les branches acoustiques. Une autre approximation permet de simplifier encore le problème : l'approximation isotrope. En effet, en considérant les vallées/bandes isotropes et donc caractérisées par des masses effectives de densité d'états, on se retrouve avec

$$w_i(E_k) = w_i(k) = \sum_{k'} S_i(k, k') \quad \text{et} \quad (II.2.6)$$

$$\sum_{k'} S_i(k, k') = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int S_i(k, k') d^3k' = 2\pi \int m(q, \theta) \sin \theta d\theta \int \delta(E) k'^2 dk'$$

où $m(q, \theta)$ est une fonction de l'angle polaire entre k et k' et donc de q . La norme de k' étant fixée par la conservation de l'énergie et l'approximation isotrope, $\int \delta(E) k'^2 dk'$ est à un facteur près la densité d'états à l'énergie finale dans la bande finale. $\int m(q, \theta) \sin \theta d\theta$ est intégré analytiquement, ce qui donne très rapidement les taux d'interaction pour toutes les super particules, car les taux sont fonction de leur énergie. Les transitions inter vallée équivalente/non-équivalente en bande de conduction sont traitées de la même façon que $S_{ODP}(k, k')$, mais avec leur potentiels de déformation et énergies de phonon propres. Les hamiltoniens d'interaction entrant en jeu dans les probabilités/taux d'interaction porteur-phonon peuvent être retrouvés dans des ouvrages traitant du transport dans les semiconducteurs [Ridley99] [Lundstrom00]. L'expression pour la diffusion sur le potentiel d'alliage a été adaptée de [Harrison76]. Une expression similaire mais différant d'un facteur proche de 1 peut être trouvée dans [Joyce07], différence venant de la description du désordre. Plusieurs approches ont été proposées pour la description du potentiel d'alliage ΔE et mènent à des valeurs pouvant différer d'une décade [Harrison76] [Littlejohn78] [Ferry78] [Fedders84]. Dans la pratique, il est commun d'ajuster ΔE dans l'EMC afin de reproduire les propriétés de transport des ternaires.

3) Configuration étendue

a) modélisation de la structure électronique

L'avantage d'utiliser un modèle « Full-Band » est que le domaine de validité de la structure électronique couvre entièrement la première zone de Brillouin (si la méthode utilisée pour le calcul est valide dans toute la zone de Brillouin). Le calcul de l'énergie et la recherche d'états post-diffusion sont cependant plus longs, car les raccourcis fournis par les expressions

analytiques n'existent plus. La structure électronique NLEPM est tabulée et stockée suivant un maillage cubique linéaire. L'énergie $E_{\vec{k}}^n$ dans la bande n pour \vec{k} est interpolée par

$$\begin{aligned}
E_{\vec{k}}^n &= \sum_{c=1}^8 W_c \times E_{c,\vec{k}}^n \\
E_{c,\vec{k}}^n &= E_c^n(\vec{k}) + \sum_{i=x,y,z} \frac{\partial E_c^n(\vec{k})}{\partial k_i} (k_i - k_i^c) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=x,y,z} \frac{\partial^2 E_c^n(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j} (k_i - k_i^c)(k_j - k_j^c) \quad (\text{II.3.1}) \\
W_c &= \left(1 - \frac{k_x - k_x^c}{dk}\right) \left(1 - \frac{k_y - k_y^c}{dk}\right) \left(1 - \frac{k_z - k_z^c}{dk}\right)
\end{aligned}$$

où $E_c^n(\vec{k})$, $\frac{\partial E_c^n(\vec{k})}{\partial k_i}$ et $\frac{\partial^2 E_c^n(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j}$ sont les énergie, dérivée, et dérivée seconde de l'énergie

évaluées en $k_{x,y,z}^c$, coin du cube de largeur dk contenant \vec{k} [Fischetti88]. Une telle tabulation, requiert une certaine quantité de mémoire ($\sim 1\text{GB}$ avec $dk = (2\pi/a_0)/100$, pour les énergies, dérivées simples, dérivées doubles et différents tableaux permettant de retrouver des mailles en fonction de leur énergie ou position etc.) mais constitue le moyen le plus simple et efficace de prendre en compte l'anisotropie des différentes bandes. Un maillage tétraédrique peut être utilisé pour plus de précision. Des informations approfondies sur ce type de maillage et sur la méthode Monte Carlo Full-Band peuvent être trouvées dans [Huet08].

Pour des raisons pratiques, en bande de conduction il est nécessaire de connaître l'appartenance des différentes régions de la zone de Brillouin aux différents types de vallées. En effet, rappelons que la bande de conduction possède plusieurs minima d'énergie (aux points Γ , L et $\sim X$), auxquels sont associés des vallées pouvant retenir des électrons alors que le NLEPM livre la structure électronique en un seul bloc. La méthode utilisée pour découper la structure électronique en vallée est la suivante. Tout d'abord, les minima sont repérés. Pour les III-V considérés, ils se trouvent aux points Γ , L et près de X. Chacun des cubes du maillage contenant un minimum se voit affecter au type de vallée correspondant. A partir de ces cubes initiaux, les affectations se propagent aux cubes voisins si le gradient d'énergie est positif. Chaque cube nouvellement affecté testant ses voisins, on remonte donc en haut de chaque vallée en partant du bas. La propagation s'arrête naturellement entre 2 vallées car le gradient devient négatif. Cela permet de distinguer toutes les vallées, équivalentes et non équivalentes (FIG. II.3.a.1).

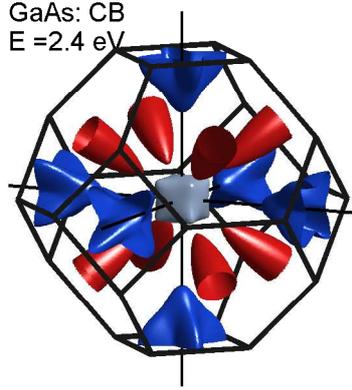


FIG. II.3.a.1 : Surface iso énergie dans la 1^{ère} zone de Brillouin de GaAs calculée par NLEPM. Les éléments de la surface appartenant à différents types de vallée ont été colorés : vallée Γ en gris, vallées L en rouge, et vallées X en bleu.

b) fonction diélectrique et écrantage

Il n'a pas encore été question d'interactions coulombiennes autres que celles prises en compte pour la structure électronique. Dans un semi-conducteur, même non dopé, les porteurs de charge (électrons et trous) donnent naissance à certains effets collectifs. L'on se focalisera ici sur l'écrantage des potentiels coulombiens pour les collisions porteur-porteur et porteur-impureté ionisée qui feront l'objet de la prochaine section. Tout les porteurs de charge étant sensibles aux interactions coulombiennes, lorsque l'on s'intéresse à ce qui se passe pour un porteur, il faut prendre en compte l'action/réaction de tous les autres. L'outil le mieux adapté pour cette mission dans notre EMC est la susceptibilité des porteurs. En effet, elle quantifie la réponse de l'ensemble des porteurs à une perturbation coulombienne. En se focalisant une population de porteur dans une bande/vallée, elle est donnée dans la Random Phase Approximation (RPA) par

$$\chi(q, \omega) = \frac{e^2}{\Omega \epsilon_0 q^2} \sum_{\vec{k}} I_{k, k+q}^2 \frac{f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}+q}}{E_{\vec{k}+q} - E_{\vec{k}} - \hbar(\omega + i\delta)} \quad (\text{II.3.2})$$

où q et ω sont les caractéristiques de la perturbation, f les fonctions d'occupation des états électroniques et δ une constante qui sera détaillée dans le CHAPITRE IV. Afin de d'obtenir des équations faciles à manipuler pour la section suivante, on considère les populations de porteurs à l'équilibre, donc respectant des distributions de Maxwell-Boltzmann (population de porteurs non dégénérée ou à haute température : écrantage type Debye-Hückel) ou Fermi-Dirac (population de porteurs dégénérée : écrantage type Thomas-Fermi (TF)). De plus,

considérer une vallée isotrope et parabolique avec un recouvrement des états parfait ($I_{k,k+q}^2 = 1$) dans la limite statique ($\omega + i\delta \rightarrow 0$) permet d'obtenir

$$\chi(q,0) = \frac{q_{\chi}^2}{q^2} \text{ avec } q_{\chi}^2 = \begin{cases} \frac{ne^2}{\epsilon_0} \frac{1}{k_B T} & (\text{Debye-Hückel}) \\ \frac{ne^2}{\epsilon_0} \frac{3}{2E_F} & (\text{Thomas-Fermi}) \end{cases} \quad (\text{II.3.3})$$

où $1/q$ est appelée longueur d'écrantage. Ces 2 cas sont les modèles les plus souvent utilisés pour la description de l'écrantage statique des potentiels coulombiens et dépendent de la densité de porteurs n , de la température T et de l'énergie de Fermi E_F repérée par rapport au minimum de la bande. Ils représentent les limites dégénérée et non dégénérée de la population de porteurs. Le lien entre ces 2 limites peut être réalisé à l'aide des intégrales de Fermi-Dirac $F_j(\eta)$ [Chattopadhyay81] et est représenté en FIG. II.3.b.1

$$q_{\chi}^2 = \frac{ne^2}{\epsilon_0 k_B T} \frac{F_{-1/2}(\eta)}{F_{1/2}(\eta)} \text{ avec } \eta = \frac{E_F}{k_B T} \text{ et } F_j(\eta) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^{\infty} \frac{x^j dx}{1 + \exp(x - \eta)} \quad (\text{II.3.4})$$

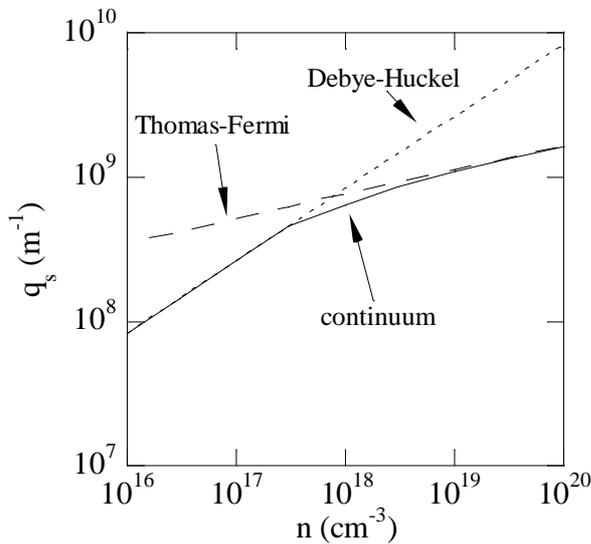


FIG. II.3.b.1 : Inverse de la longueur d'écrantage calculée en fonction de la densité d'électron avec mes modèles Debye-Hückel, Thomas-Fermi et « continuum » (II.3.4).

Les susceptibilités s'additionnant, l'inverse de la longueur caractéristique d'écrantage d'une population d'électrons et de trous est déduite facilement

$$\chi_{e+h}(q,0) = \frac{q_{\chi e}^2}{q^2} + \frac{q_{\chi h}^2}{q^2} = \frac{q_{\chi e}^2 + q_{\chi h}^2}{q^2} \text{ et donc } q_s^2 = q_{\chi e}^2 + q_{\chi h}^2 \quad (\text{II.3.5})$$

Un autre cas limite (grande longueur d'onde $q \rightarrow 0$) est décrit par le modèle de Drude

$$\chi(0, \omega) = -\frac{\omega_D^2}{\omega^2} \text{ avec } \omega_D^2 = \frac{ne^2}{\epsilon_0 m^*} \quad (\text{II.3.6})$$

où m^* est la masse effective caractérisant la vallée contenant les porteurs. Ces limites sont très restrictives car elles contraignent la description de la susceptibilité soit suivant l'axe q , soit suivant l'axe ω . Or, la susceptibilité est un tenseur dans le plan (\vec{q}, ω) qui est souvent simplifié sous la forme (q, ω) pour des distributions de porteurs isotropes. D'autres approches plus sophistiquées ont été publiées pour calculer (II.3.2) dans le plan (q, ω) avec un coût numérique relativement faible, comme celle, notamment, de Meyer et Bartoli (MB) [Meyer83]. Cependant, le modèle MB, bien que proposant un moyen de prendre en compte le paramètre δ s'appuie sur l'hypothèse d'une unique vallée isotrope et parabolique. De plus la prise en compte des trous n'est pas possible car leur modèle pour la somme dans (II.3.2) ignore les transitions interbandes. En effet, les bandes HH et LH étant dégénérées la somme (II.3.2) pour les trous doit couvrir toutes les bandes contenant les trous k et $k+q$. Pour ces raisons, le calcul de la susceptibilité RPA des porteurs a été implémenté directement dans l'EMC. En FIG. II.3.b.2, sont comparées les limites statiques $\omega \rightarrow 0$, décrites par les modèles TF, MB et RPA dans GaAs avec $n=1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ et $\delta \rightarrow 0$ pour le calcul de la fonction diélectrique des porteurs $\epsilon = 1 + \chi$. Pour les calculs RPA, la vallée contenant les porteurs a été considérée parabolique pour permettre la comparaison des différents modèles. Bien que l'échantillonnage de la population de porteurs fut grossière ($N=1000$), on note que l'accord entre les calculs RPA et les approches analytique (TF) et quasi analytique (MB) est excellent. Les limites de grandes longueurs d'onde $q \rightarrow 0$, décrites par les modèles de Drude, MB et RPA sont représentés en FIG. II.3.b.3. L'accord est encore excellent.

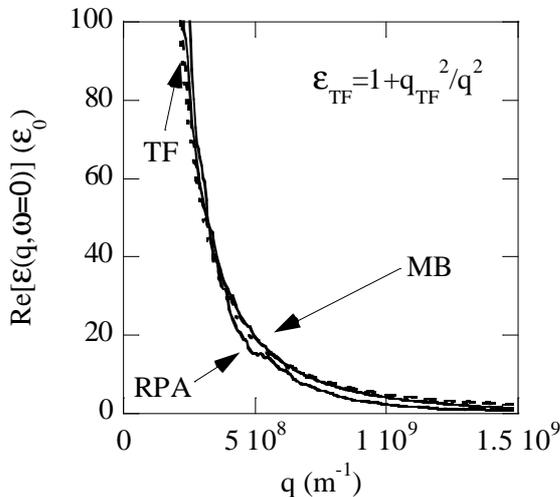


FIG. II.3.b.2 : Partie réelle de la fonction diélectrique dans le limite statique, calculée avec les modèles TF (tirets), MB (trait plein) et RPA (trait plein) avec $\delta \rightarrow 0$. Calcul RPA avec un échantillonnage de la population réduit.

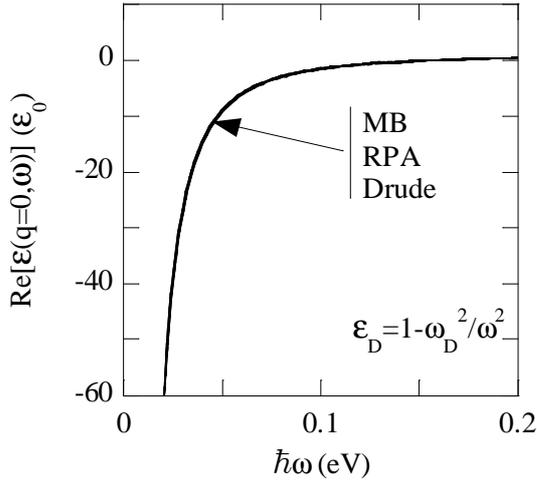


FIG. II.3.b.3 : Partie réelle de la fonction diélectrique dans la limite des grandes longueurs d'onde, calculée avec les modèles de Drude (tirets), MB (trait plein) et RPA (trait plein) avec $\delta \rightarrow 0$. Calcul RPA avec un échantillonnage de la population réduit.

Les calculs RPA permettant de lever les approximations faites dans d'autres modèles sont détaillés dans le CHAPITRE IV. Ces approximations consistent en des vallées supposées paraboliques, et en une bande unique pour les trous. On peut voir en FIG. II.3.b.4 que ces approximations modifient grandement les résultats obtenus pour le calcul de la fonction diélectrique (illustrée pour les trous) dans le plan (q, ω) (illustrations pour GaAs avec $p = 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$). Les relations de dispersion des plasmons (oscillations libre de l'ensemble des porteurs repérées par $\text{Re}(\varepsilon) = 0$) et la SPE (Single Particle Excitation : zone du plan (q, ω) où l'écrantage est effectif) sont sensibles au caractère non parabolique des bandes. De plus, les relations de dispersion des plasmons sont également très sensibles au nombre de bandes. Ces points seront revus au CHAPITRE IV où ils prendront toute leur importance.

Pour les perturbations coulombiennes stationnaires (collisions élastiques), la réponse de l'ensemble de la population porteurs peut être caractérisée par l'inverse de la longueur d'écrantage q_s . Dans un cristal, les atomes du réseau cristallin répondent aussi à une perturbation coulombienne. Afin de prendre en compte la réponse du cristal, il suffit d'ajouter les susceptibilités

$$\varepsilon = 1 + \chi_{latt} + \chi_{e+h} = \varepsilon_{latt} + \chi_{e+h} \quad (\text{II.3.7})$$

où χ_{latt} est la susceptibilité du cristal, et ε_{latt} est connu sous le nom de constante diélectrique statique ε_s . Si l'on s'intéresse à un potentiel coulombien écranté statiquement, on obtient

$$\frac{e^2}{\Omega \varepsilon} \frac{1}{q^2} = \frac{e^2}{\Omega (\varepsilon_s + q_s^2 / q^2)} \frac{1}{q^2} \equiv \frac{e^2}{\Omega \varepsilon_s (q^2 + q_s^2)} \quad (\text{II.3.8})$$

où le paramètre d'écrantage a été redéfini tel que $q_s^2 \Leftarrow q_s^2 / \varepsilon_s$.

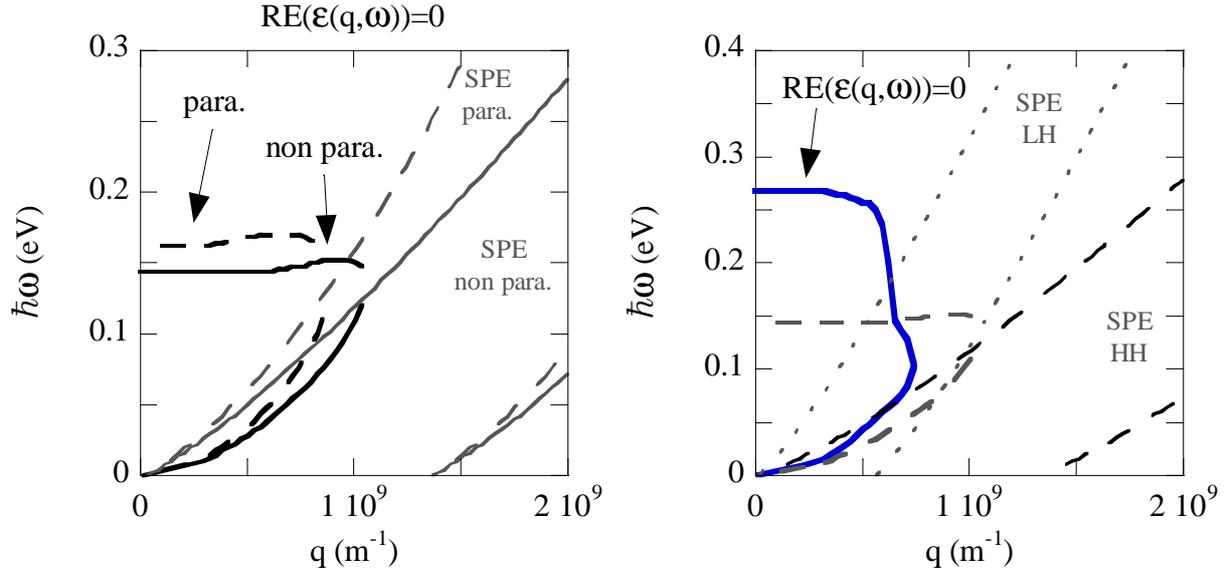


FIG. II.3.b.4 : A gauche, modèle à une bande (HH) où le caractère non parabolique de la vallée est mis en évidence pour la même valeur de la masse effective : vallée parabolique en tirets, vallée non parabolique en traits pleins. A droite, modèle à deux bandes non paraboliques (HH+LH) où la relation de dispersion des plasmons (en bleu) apparaît très différente de celle du modèle à une bande (tirets). Les calculs sont menés pour GaAs avec $p = 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$.

c) collisions porteur-porteur et porteur-impureté ionisée

Lorsque l'on s'intéresse aux interactions porteur-porteur (PP) et porteur-impuretés (PI) ionisées (impuretés, atomes de dopage) on considère une interaction coulombienne écrantée par le réseau et éventuellement écrantée par l'ensemble des porteurs (W). Le moyen le plus couramment utilisé pour décrire ce type d'interaction est de considérer un potentiel de Yukawa $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_s} \frac{\exp(-q_s r)}{r}$ (ici, avec des charges simple $Z_1 = Z_2 = 1$) qui donne l'élément de matrice d'interaction (II.3.8) dans l'espace réciproque une fois évalué entre deux ondes planes. $1/q_s$ correspond alors à la longueur caractéristique d'écrantage, telle que définie dans la section précédente (il est vital de prendre en compte l'écrantage car avec un potentiel coulombien nu (II.3.10) diverge). Cet élément est inséré dans la FGR afin d'obtenir la probabilité d'interaction par unité de temps

$$S_w(K, K') = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{e^2}{\Omega\epsilon_s(q^2 + q_s^2)} \right|^2 I_{K,K'}^2 \delta(E) \quad (\text{II.3.9})$$

où $\vec{q} = \vec{K} - \vec{K}' = \vec{k} - \vec{k}'$ pour les collisions PI et $\vec{q} = \vec{K} - \vec{K}' = \vec{k}_1' - \vec{k}_1 = \vec{k}_2 - \vec{k}_2'$ pour les collisions PP (centre de masse [Ridley99], où \vec{k}_1 et \vec{k}_2 repèrent les états des deux porteurs rentrant en collision). Afin d'obtenir les taux d'interaction, il faut sommer tous les états finaux possibles

$$w_w(K) = \sum_K S_w(K, K') \quad (\text{II.3.10})$$

Cette somme est assez complexe à évaluer analytiquement. Cependant avec l'approximation de vallées isotropes et le facteur de recouvrement donné dans le modèle de Wiley/Scholz, des solutions analytiques sont, tout de même, accessibles. On obtient alors le taux d'interaction PI ou PP mais entre un porteur et un seul centre diffusant (autre porteur ou impureté). En considérant que la concentration de centres diffusants est faible, on peut les considérer indépendants. Le taux d'interaction total est alors obtenu en sommant (II.3.10) sur tous les centres diffusants

$$W_w(K) = \sum_{N_w} w_w(K) = \begin{cases} N_I \times w_{PI}(K) \\ \sum_{k_2} w_{PP}(K) f_{k_2} = \frac{N_P}{N} \sum_{k_2^{MC}} w_{PP}(K) \end{cases} \quad (\text{II.3.11})$$

où N_w est le nombre de centres diffusants (N_I pour les impuretés, et N_P pour les porteurs : électrons ou trous). Pour l'interaction PI, considérer les centres diffusants indépendants et écrantés statiquement mène au taux d'interaction PI de Brooks-Herring. Pour l'interaction PP, comme les populations d'électrons et de trous sont échantillonnées dans l'EMC, la somme porte sur les N super particules de l'EMC k_2^{MC} représentant N_P porteurs (de densité correspondante $n, p = N_p / \Omega$).

Bien évidemment, plusieurs approches existent pour traiter les collisions PI et PP. Cependant, celles présentées réalisent un bon compromis réalité physique / temps de calcul et seront retenues pour la suite. Les approches plus sophistiquées prennent en compte de façon plus précise un des aspects du modèle : l'écrantage, diffusion sur centres multiples, etc. On distingue notamment l'approche « phase-shift » qui est très bien détaillée dans [Meyer81] [Chattopadhyay81] [Kay91] pour les collisions PI. Cette approche tient compte de la nature attractive ou répulsive du potentiel créé par le centre diffusant. Cet aspect est absent dans le modèle Brooks-Herring. Le modèle phase-shift a été implémenté dans l'EMC (à l'aide d'un code phase-shift développé par Marc Michailat [Michailat10]) pour l'étude des électrons minoritaires qui sera traité dans le CHAPITRE IV.

Le principe du phase-shift pour les collisions PI va être présenté dans ce paragraphe. On considère que la concentration d'impuretés est faible et donc que les processus de diffusion porteur-impureté sont indépendants. On suppose que le porteur est une particule libre caractérisée par une masse effective m^* (bande parabolique et isotrope). L'équation de Schrödinger pour le porteur dans le potentiel (écranté) de l'impureté est

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(r) \right) \phi = E\phi \quad (\text{II.3.12})$$

Si le potentiel est isotrope, on peut décomposer la fonction d'onde ϕ du porteur en harmoniques sphériques. En ne gardant que la partie radiale de (II.3.12), on obtient

$$-\frac{\partial^2 R_l}{\partial x^2} + \left(\frac{l(l+1)}{x^2} + U(x) - 1 \right) R_l = 0 \quad (\text{II.3.13})$$

avec $x = kr$, $R_l = xS_l$, $U(x) = V(r)/E(k)$

où S_l est la partie radiale de l'harmonique sphérique d'ordre l . Dans le cas particulier où le potentiel est nul ($V = 0$), la solution R_l^0 de (II.3.13) a une forme asymptotique donnée par

$$\lim_{x \rightarrow \infty} R_l^0(x) = \sin \left(x - \frac{l\pi}{2} \right) \quad (\text{II.3.14})$$

Dans le cas général ($V \neq 0$), la solution R_l de (II.3.13) a également une forme asymptotique, où l'on voit apparaître le décalage de phase δ_l (« phase-shift ») par rapport à R_l^0

$$\lim_{x \rightarrow \infty} R_l(x) = \sin \left(x - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right) \quad (\text{II.3.15})$$

Les phase-shifts δ_l contiennent donc les informations concernant l'effet qu'a le potentiel sur le porteur. On peut exprimer le taux d'interaction $W_{PI}(k)$ et la probabilité différentielle angulaire $P_{PI}(\theta)$ qui va servir au choix de l'état post-diffusion

$$W_{PI}(k) = N_l v_{\vec{k}} \sigma_C$$

$$P_{PI}(\theta) = \frac{\pi}{2} \frac{\sigma(\theta) \sin \theta}{\sigma_C} \quad (\text{II.3.16})$$

où $v_{\vec{k}}$ est la vitesse du porteur, la section différentielle de collision $\sigma(\theta)$ et la section totale de collision σ_C . Ces sections sont données par

$$\sigma_c = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\delta_l) \quad (\text{II.3.17})$$

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

où P_l est un polynôme de Legendre de degré l . On peut également extraire des phase-shifts des informations relatives à l'écrantage du potentiel diffusant. En effet, considérer que le potentiel doit être totalement écranté à grande distance par une population de porteurs permet d'écrire la Loi de Somme de Friedel

$$1 = \frac{2\nu}{\pi} \int_0^{\infty} f(1-f) \left(\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \delta_l \right) dz \quad (\text{II.3.18})$$

où ν est la dégénérescence de la vallée contenant la population de porteurs caractérisée par la fonction de distribution f , et avec $z = E/k_B T$. Comme les phase-shifts δ_l dépendent du potentiel écranté V , on obtient un système d'équations auto-cohérent. De plus, comme dans (II.3.13) le caractère attractif ou répulsif du potentiel est préservé, les δ_l et l'écrantage vont en dépendre. Ce caractère disparaît dans le modèle de Brooks-Herring où le potentiel est élevé au carré. L'approche phase-shift présente bien des atouts. Cependant, le calcul des δ_l n'est pas une chose aisée car ils apparaissent dans les formes asymptotiques de R_l (II.3.15). Une évaluation directe de l'argument du sinus dans (II.3.15) est le moyen le plus intuitif mais est limité par la vitesse de convergence lente de R_l . Un moyen beaucoup plus rapide est de comparer la convergence de R_l^0 et R_l . La différence entre la $n^{\text{ième}}$ racine de R_l^0 et la $n^{\text{ième}}$ racine de R_l tend rapidement vers δ_l avec n . Des informations approfondies peuvent être trouvées dans [Michaillat10].

La FIG. II.3.c.1 illustre les taux d'interaction et longueurs d'écrantage calculés avec l'approche phase-shift. On note que les taux d'interactions calculés en phase-shift diffèrent en fonction de la nature (attractive ou répulsive) du potentiel pour une concentration de dopants de $1 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$. La longueur d'écrantage extraite des phase-shifts ne diffère du modèle Thomas-Fermi que pour des concentrations de dopants très élevées.

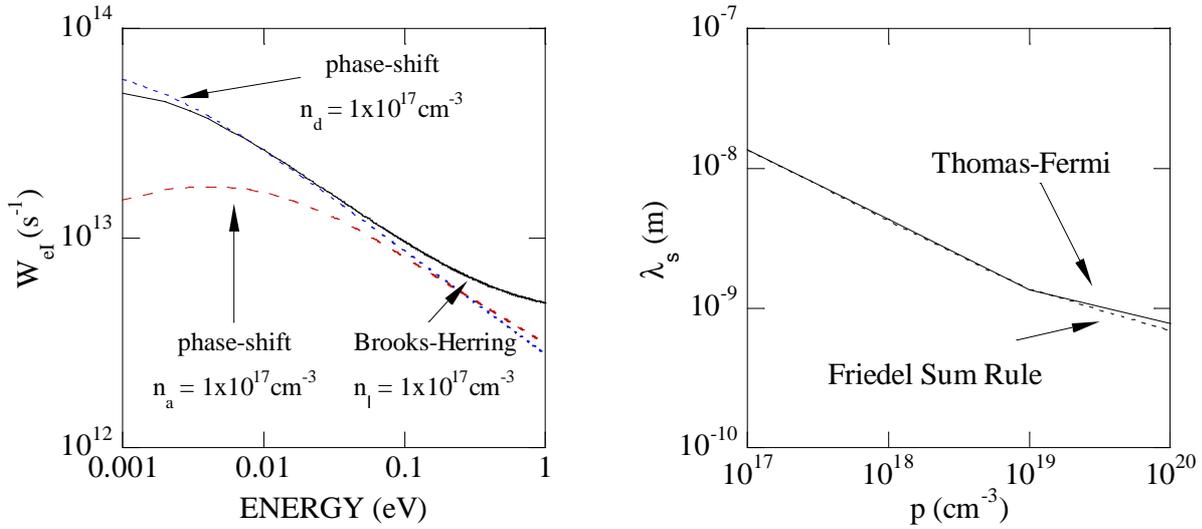


FIG. II.3.c.1 : A gauche : Taux d'interaction électron-impureté ionisée dans GaAs calculés pour des concentrations d'accepteurs n_a et de donneurs n_d de $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ avec les approches phase-shift et Brooks-Herring. A droite : Longueur d'écrantage calculée dans GaAs en fonction de la concentration de trou avec la Loi de Somme de Friedel et Thomas-Fermi.

d) principe d'exclusion de Pauli

Il est bien connu que 2 électrons ne peuvent occuper le même état. Cependant, pour un cristal périodique et considéré infini l'espace des états (espace réciproque) peut être assimilé à un continuum dense. Le principe d'exclusion de Pauli n'aura donc d'effet significatif que lorsque les densités de porteurs sont « grandes ». La définition de « grande » dépend de la bande à laquelle on s'intéresse. En effet, pour une température non nulle T , l'énergie moyenne d'une population de porteur peut être bornée inférieurement par $(3/2) \times k_B T$. Un raisonnement grossier consisterait donc à considérer une densité « grande » si elle est au moins de l'ordre de la densité d'état totale entre 0 et $(3/2) \times k_B T$. C'est pour cette raison que dans les semiconducteurs III-V étudiés ici, à densité équivalente, les électrons sont beaucoup plus sensibles au principe d'exclusion de Pauli que les trous car les densités d'états en bandes de valence (HH, LH, SO) sont beaucoup plus grandes que celle de la bande de conduction (vallée Γ).

La prise en compte du principe d'exclusion de Pauli est basée sur le travail de [Lugli85]. Si l'on considère un élément de volume cubique de l'espace réciproque caractérisé par un coté dk , la densité d'électron (spin confondu) maximale que peut contenir cet élément est $2dk^3 / (2\pi)^3$. La zone de Brillouin est alors pavée d'éléments de volume à l'intérieur

desquels la densité d'électron ne peut pas dépasser la valeur maximale. Il est pratique de recourir à la technique de rejection. Cette technique permet de ne pas avoir à recalculer sans cesse les taux d'interaction intégrant directement le principe d'exclusion de Pauli dans (II.1.2), ce qui nécessiterait le calcul d'intégrales assez lourdes. A la place, les états finaux dans (II.1.2) sont toujours considérés libres dans le calcul des taux d'interaction. L'éventuel « rejet » a lieu lors du choix d'un état après une interaction pendant lequel un nombre aléatoire (entre 0 et 1) est comparé à f_{dk} / f_{dk}^0 , f_{dk} et f_{dk}^0 étant les densités actuelles et maximales dans l'élément de volume dk^3 respectivement. Si le nombre aléatoire est inférieur à f_{dk} / f_{dk}^0 , l'état final est rejeté rendant le processus de diffusion impossible. L'électron continue alors son vol libre sans avoir été altéré: c'est le « self-scattering ». Cela ne modifie pas la dynamique temporelle globale des électrons. En effet, comme les taux d'interactions sont calculés en considérant les états finaux libres, les probabilités totales d'interaction (II.1.4) sont surestimées par rapport aux réelles probabilités. Les temps de vol libre sont donc sous estimés. Le vol libre suivant un self-scattering prend donc la suite de celui qui a été interrompu par le processus de diffusion qui n'a pas abouti. Le temps de vol libre total entre 2 interactions ayant aboutis a donc été rallongé. A posteriori, cela a eu pour effet de diminuer la probabilité totale d'interaction, restaurant la dynamique temporelle globale.

Il faut désormais discrétiser la zone de Brillouin. Dans [Lugli85], les éléments de volume étaient des cubes. Il s'agit du maillage le plus pratique mais le moins efficace. En effet, la distribution spatiale (dans l'espace réciproque) d'une population thermique de porteurs peut assez mal être reproduite à partir de cubes, à moins que ceux-ci soient très petits. De trop petits cubes mène à un maillage très fin et donc à une quantité d'éléments gigantesque. Il est donc tentant d'utiliser une discrétisation sphérique. Cependant, à moins de recourir à un maillage non linéaire ce qui complique la recherche des index des éléments de volume, la discrétisation sphérique sur-échantillonne le centre de zone, ou sous-échantillonne le reste. Plusieurs tests ont donné des résultats peu concluants qui se traduisaient par des sauts dans les fonctions de distributions calculées.

La discrétisation retenue pour la suite du travail est un maillage cubique, où chaque cube est découpé en 5 tétraèdres (FIG. II.3.d.1). Ce type de maillage combine la simplicité de la maille cubique avec la précision de petits éléments de volumes sans pour autant recourir à un nombre de mailles excessivement grand. De plus, ce maillage permet de paver la zone de Brillouin entièrement en respectant ses limites (FIG. II.3.d.1). Chaque tétraèdre peut contenir un maximum de $2(dk^3/6)/(2\pi)^3$ électrons sauf le tétraèdre central qui est limité à

$2(2dk^3/6)/(2\pi)^3$. Comme dans l'EMC, la densité n d'électrons est échantillonnée par N super-électrons, ils portent tous un poids de n/N . Comparer $2(dk^3/6)/(2\pi)^3$ et n/N permet d'ajuster automatiquement le maillage et assurer que chaque tétraèdre peut accueillir au moins 1 super-électron. La zone de Brillouin est alors pavée avec le motif présenté en FIG. II.3.d.1, sauf pour certains cubes interceptant le plan $k_x + k_y + k_z = 1.5 \times (2\pi/a_0)$ dans lesquels le motif est retourné. Ce type de maillage permet de modéliser les fonctions de distribution en énergie $f(E)$ avec beaucoup plus de précision qu'un simple maillage cubique. De plus, en interdisant l'entrée de super-particules dans les tétraèdres pleins, les fonctions de distribution dans l'espace réciproque f_{dk} ne peuvent pas dépasser 1, défaut de la méthode de base de [Lugli85] souligné dans [Borowik98].

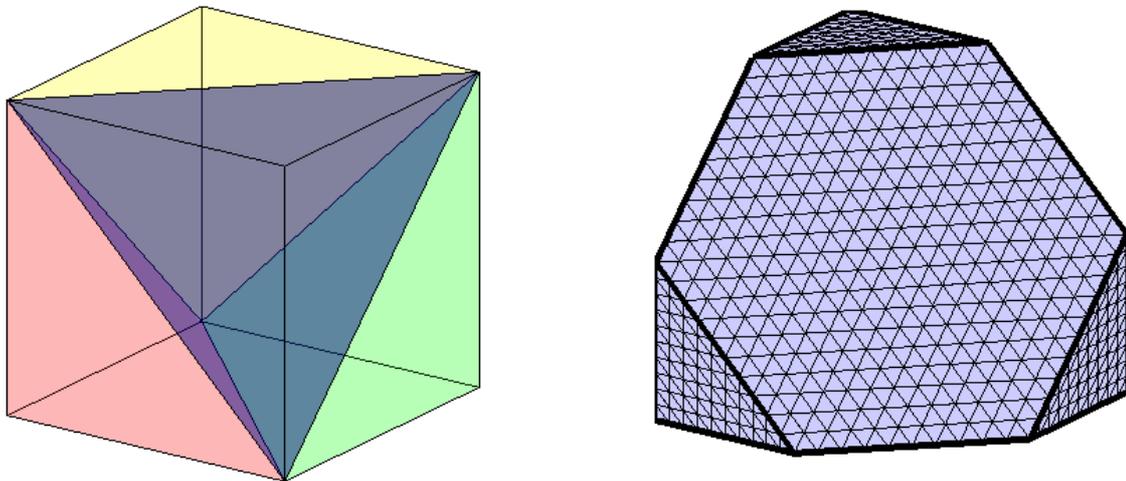


FIG. II.3.d.1 : A gauche, élément de volume cubique découpé en 5 tétraèdres : bleu, rouge, jaune, vert, et gris (tétraèdre double central). A droite, illustration du maillage par tétraèdres d'un octant de la zone de Brillouin où $dk = (2\pi/a_0)/it$ avec $it = 20$. $it = 100$ avant ajustement. En général, N est choisi de façon que it ne soit pas beaucoup plus petit que 100 afin garantir un maillage assez fin.

4) Détermination des paramètres

La prise en compte des différentes interactions porteur-phonon présentées dans la section 2 nécessite la détermination des potentiels de déformation, et des énergies des phonons pour les interactions inélastiques. Dans les EMC « traditionnels », en bande de conduction chaque type d'interaction électron-phonon intervallée (durant laquelle l'électron

change de vallée) est traité avec un potentiel de déformation. Pour traiter les transitions $\Gamma \Leftrightarrow L$, $\Gamma \Leftrightarrow X$, $L \Leftrightarrow X$, $L \Leftrightarrow L$ et $X \Leftrightarrow X$, seuls cinq potentiels de déformation étaient requis. Ils étaient ajustés afin de pouvoir reproduire des propriétés de transport telle que la vitesse moyenne des électrons en fonction d'un champ électrique. Dans cette thèse, ces potentiels de déformation ont été subdivisés pour la raison suivante. On souhaite calculer les propriétés de transport de $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$, matériau pour lequel aucune caractéristique de vitesse en fonction du champ n'est disponible. On se retrouve donc sans données expérimentales sur lesquelles on pourrait ajuster les potentiels de déformation. La stratégie adoptée est la détermination des paramètres pour les alliages ternaires à partir de ceux établis pour leurs composés binaires par interpolation.

Avant de procéder à l'interpolation, il faut noter que pour une transition entre deux vallées causée par une interaction électron-phonon intervallée donné ($\Gamma \Leftrightarrow L$ par exemple), plusieurs branches de phonons peuvent entrer en jeu. En effet, l'étude des groupes de symétrie des états électroniques et phononiques permet d'établir des règles de sélection pour les types de phonons impliqués dans des interactions électron-phonon intervallée [Birman66]. Ces règles de sélection, qui dépendent des masses des éléments III et V composant le semi-conducteur sont listées dans la TABLE II.4.1 pour les transitions intervallée équivalentes et non équivalentes. On se retrouve alors non plus avec cinq, mais dix potentiels de déformation à ajuster pour chaque composé binaire.

	$\Gamma \Leftrightarrow L$	$\Gamma \Leftrightarrow X$	$L \Leftrightarrow X$	$L \Leftrightarrow L$	$X \Leftrightarrow X$
$m_{III} < m_V$	LO LA	LO	LO LA TO TA	LO LA	LO
$m_{III} > m_V$	LO LA	LA	LO LA TO TA	LO LA	LA

TABLE II.4.1 : Règles de sélection pour les branches de phonons impliquées dans les interactions électron-phonon intervallée en fonction de la masse relative des éléments III et V. [Birman66]

L'espace des paramètres étant désormais plus grand, il n'est pas aisé d'ajuster chaque potentiel de déformation de façon non arbitraire. Pour palier à ce problème, des résultats de calculs de potentiels de déformation ont été utilisés [Zollner89] [Zollner90] [Wang92] [Nikitina09]. Dans ces calculs, menés à partir de structures électroniques (EPM, ab initio) et phononiques (Valence Shell Model, Linear Response), l'état initial et l'état final de l'électron sont considérés au centre des vallées correspondantes. Cependant, des calculs plus approfondis ont montré que les potentiels de déformation pouvaient varier (mais restant tout

de même dans le même ordre de grandeur) lorsque les états initial et final de l'électron s'éloignaient du centre des vallées [Zollner90]. Les potentiels de déformation collectés de [Zollner89] [Zollner90] [Wang92] [Nikitina09] ont donc servi de valeurs initiales à un ajustement, car, les structures électroniques utilisées dans cette thèse et celles utilisés au cours des calculs de potentiels de déformation sont différentes.

Parmi les paramètres d'un modèle EMC, figurent également d'autres potentiels de déformation : potentiel de déformation acoustique (interaction porteur-phonon intravallée) et potentiel de déformation optique (interaction porteur-phonon optique non polaire pouvant donner lieu à des transitions intravallée en bande de conduction et intra/intervallée en bande de valence). Pour la bande de conduction, ces potentiels sont également ajustés. Pour les bandes de valence, ces potentiels de déformation acoustique [Costato73] et optique [Wiley70] peuvent être évalués à partir de constantes mécaniques du matériau considéré en centre de zone. Ces potentiels de déformation (au carré) sont donnés par

$$\begin{aligned} \text{acoustique} : E_1^2 &= \left[\frac{1}{3} + \frac{2}{3} (S_t / S_l)^2 \right] \left[a^2 + (C_l / C_t) \left(b^2 + \frac{1}{2} d^2 \right) \right] \\ \text{optique} : (DK)^2 &= 4 \left(\frac{\omega_{TO}}{S_l} \right)^2 E_1^2 \end{aligned} \quad (\text{II.3.19})$$

où (S_l, S_t) sont les vitesses longitudinale et transverse du son, (a, b, d) les constantes de potentiel de déformation, ω_{TO} la pulsation du phonon optique non polaire, et (C_l, C_t) les constantes élastiques moyennes longitudinale et transverse exprimées à partir des constantes élastiques d'une structure cubique ($C_l = (3C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})/5$ et $C_t = (C_{11} - C_{12} + 3C_{44})/5$). Les valeurs des différents paramètres matériau ont été extraites de différentes bases de données [Vurgaftman01] [NSM] [Landolt-Börnstein].

a) propriétés de transport

Sur la FIG. II.4.a.1 sont tracées les vitesses moyennes des électrons et des trous à 300K dans GaAs, InAs, GaSb, $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ et $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$ telles que calculées avec l'EMC. Pour ces calculs, les interactions porteur-porteur et porteur-impuretés ont été négligées (sauf pour GaSb). Cela permet l'ajustement des potentiels de déformation sur des caractéristiques vitesse-champ électrique expérimentales où les concentrations de porteurs et d'impuretés sont faibles. On obtient ainsi des valeurs maximales pour les mobilités (à 300K).

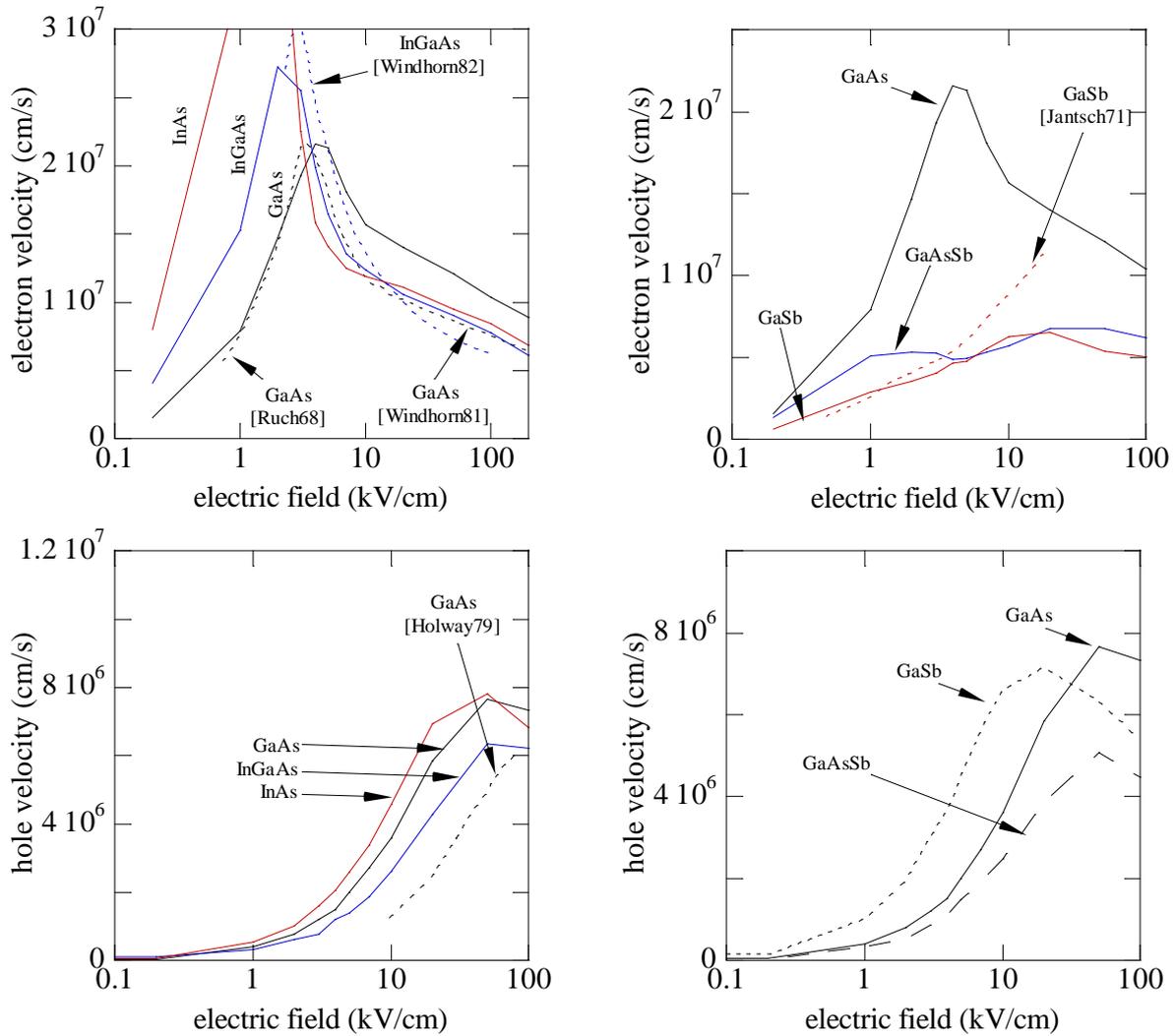


FIG. II.4.a.1 : Vitesse moyenne des électrons (en haut) et des trous (en bas) dans GaAs, InAs, GaSb, $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ et $GaAs_{0.50}Sb_{0.50}$ calculés sans les interactions porteur-porteur et porteur-impureté, comparée à des résultats de mesures disponibles.

L'accord entre les calculs pour GaAs (électron) et les mesures ([Ruch68] à faible champ autour du pic de survitesse, et [Windhorn81] au delà) est excellent pour les faibles champs électriques ($<5\text{kV/cm}$). Pour des champs plus grands, les calculs EMC surestiment la vitesse des électrons. Pour $In_{0.53}Ga_{0.47}As$, l'accord est relativement bon sur la plage de champs mesurée [Windhorn82]. Pour GaSb, l'accord est satisfaisant avec les mesures ([Jantsch71], $n=n_I=6.8 \times 10^{16}\text{cm}^{-3}$). Pour InAs et $GaAs_{0.50}Sb_{0.50}$, aucune caractéristique vitesse-champ électrique expérimentales n'a été trouvée. En ce qui concerne les trous, seules les mesures des trous dans GaAs ont été trouvées ([Holway79], on ne connaît cependant pas les détails concernant les concentrations). A propos des composés binaires, les résultats présentés

constituent les meilleurs ajustements des potentiels de déformation pour les interactions électron-phonon à partir des valeurs calculées dans [Zollner89] [Zollner90] [Wang92] [Nikitina09]. Ces potentiels de déformation sont les seuls paramètres d'ajustement car les différents paramètres matériau (masse volumique, vitesse du son, etc.) et les structures électroniques sont « contraints » par les valeurs expérimentales et les calculs NLEPM du CHAPITRE I respectivement. Pour les alliages ternaires, ces potentiels de déformation sont interpolés. Les potentiels de déformation pour les bandes de valence sont calculés à partir de (II.3.19) et ne sont donc pas ajustables. Les mobilités maximales déduites des calculs sont consignées dans la TABLE II.4.a.1.

	GaAs	InAs	GaSb	In _{0.53} Ga _{0.47} As	GaAs _{0.50} Sb _{0.50}
μ_e max.	8500	33000	6400	15000	6700
μ_h max.	400	500	1000	350	340

TABLE II.4.a.1 : Valeurs maximales des mobilité des électrons et des trous ($cm^2V^{-1}s^{-1}$) calculées (en négligeant les interaction porteur-porteur et porteur-impureté).

b) impact des facteurs de recouvrement dans le transport des trous

Dans le CHAPITRE I, les facteurs de recouvrement entre des états k et k' des bandes de valence ont été calculés. Ceux-ci se sont révélés être petits et très dépendants des normes et de l'angle entre k et k' . Afin d'évaluer l'effet de ces dépendances complexes, deux modèles pour les facteurs de recouvrement ont été comparés : le modèle de Wiley/Scholz et le modèle NLEPM, tous deux vus dans le CHAPITRE I.

L'inclusion directe des facteurs de recouvrement NLEPM dans les taux d'interaction (II.1.3) est une opération très lourde. En effet, le calcul numérique de taux d'interaction pour des états initiaux/finaux près du centre de zone est très sensible à la discrétisation de la zone de Brillouin. Un maillage fin, impliquant des temps de calculs extrêmement longs, cette approche n'a pas été retenue. En effet, une tabulation des taux d'interaction pour les trous (incluant les transitions intra et inter bande, élastique, inélastique LO, inélastique TO) utilisant un maillage grossier prend plusieurs jours et n'est pas modulable (pour des énergies de phonon optique polaire et non polaire préalablement fixées). Les facteurs de recouvrement NLEPM ont donc été traités par la technique de rejection tout comme cela a été entrepris pour le principe d'exclusion de Pauli. Les résultats sont consignés dans la FIG. II.4.b.1 qui montre

les vitesses et énergies moyennes des trous dans GaAs. On note sans surprise que la prise en compte des facteurs de recouvrement NLEPM mène à des énergies moyennes plus élevées qu'avec l'approche de Wiley/Scholz. En effet, l'approche de Wiley/Scholz n'est valide qu'au voisinage du centre de zone. Au delà, cette approche tend à surestimer les facteurs de recouvrement. NLEPM ne surestimant pas les facteurs de recouvrements, donne des taux d'interactions plus petits, et donc des temps de relaxations plus long. Les trous ont alors plus de facilité à grimper dans leur bande pour une valeur de champ électrique donnée.

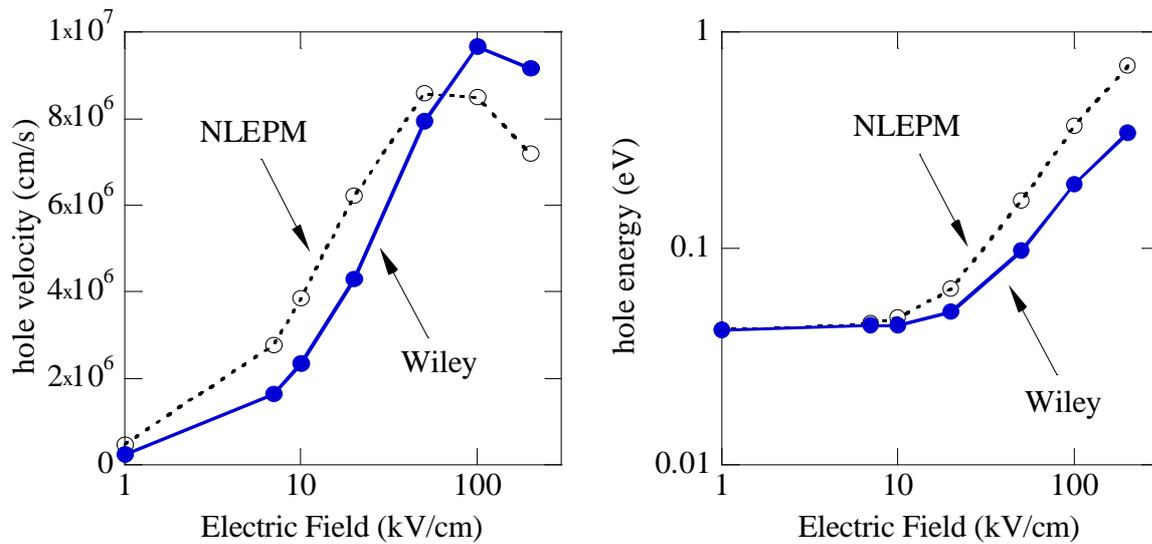


FIG. II.4.b.1 : Vitesse (à gauche) et énergie (à droite) moyenne des trous dans GaAs en fonction du champ électrique appliqué : comparaison entre calculs avec facteurs de recouvrement NLEPM (pointillés) et facteurs de recouvrement Wiley/Scholz (lignes).

Les deux approches donnent des résultats différents. L'énergie moyenne sous 200kV/cm passe du simple au double entre les calculs impliquant le modèle de Wiley/Scholz et celui avec NLEPM tout en gardant tout les paramètres fixes. Une simulation EMC avec NLEPM pour une prise en compte très précise des facteurs de recouvrement dure cependant 400 fois plus longtemps. Les temps de calculs devenant prohibitifs, l'approche de Wiley/Scholz a été retenue pour la suite.

5) Conclusion

La méthode « Ensemble Monte Carlo » pour la résolution de l'équation de transport de Boltzmann, et ses composantes « de base », ont été introduites dans ce chapitre. Elle permet de décrire les propriétés de transport usuelles dans des semi-conducteurs intrinsèques de façon très économique d'un point de vue numérique avec les moyens informatiques actuels. En prenant soin de ne pas déterminer de façon totalement arbitraire les paramètres matériau pour les composés binaires du modèle EMC, les alliages ternaires ont été traités, et ce, de façon satisfaisante, par interpolation. De plus, l'inclusion dans ce modèle d'une longueur d'écrantage évolutive, des interactions porteur-porteur et porteur-impureté, et du principe d'exclusion de Pauli permet d'entreprendre l'étude de configurations où les concentrations de porteurs peuvent varier, et où les distributions de porteurs peuvent être dégénérées.

Les travaux présentés dans les chapitres suivants ont cependant nécessité de nombreux développements supplémentaires, donnant naissance à notre « configuration étendue » qui, dans sa forme complète, permettra d'aborder des conditions de fortes concentrations de porteurs de charge (par dopage, ou excitation optique). D'autres développements venant compléter la configuration présentée dans ce chapitre seront également présentés dans les prochains chapitres. Toutes ces améliorations de la « configuration de base » nécessaires aux études des CHAPITRES III, IV, V, VI et VII ont cependant un coût numérique i.e. capacité de calcul et quantité de mémoire nécessaire. Lors des développements, de nombreuses optimisations ont été mises en œuvre afin de pouvoir faire le moins d'approximations possibles dans les modèles utilisés et de faire usage des moyens informatiques à disposition de façon optimale. Plusieurs composantes de l'EMC développé ont été parallélisées (sous OpenMP) (ainsi qu'une partie des bibliothèques LAPACK et BLAS qui ne sont pas « thread-safe », autrement dit, qui ne permettent pas une exécution simultanée par plusieurs processus), fournissant un gain de temps quasi linéaire avec le nombre de processeurs utilisés.

Référence Bibliographiques :

- [Bailey90] D. W. Bailey, C. J. Stanton and K. Hess,
Phys. Rev. B 42, 3423 (1990)
- [Birman66] J. L. Birman, M. Lax and R. Loudon,
Phys. Rev. 145, 620 (1966)
- [Borowik98] P. Borowik and J. L. Thobel,
J. Appl. Phys. 84, 3706 (1998)
- [Bulman85] G. E. Bulman, V. M. Robbins and G. E. Stillman,
IEEE Trans. Electron. Devices 32, 2454 (1985)
- [Brennan84] K. Brennan and K. Hess, Phys.
Rev. B 29, 5581 (1984)
- [Cavassilas02] N. Cavassilas, F. Aniel, G. Fishman and R. Adde,
Solid-State Electronics 46, 559 (2002)
- [Chattopadhyay81] D. Chattopadhyay and H. J. Queisser,
Rev. Mod. Phys. 53, 745 (1981)
- [Choo04] K. Y. Choo and D. S. Ong,
J. Appl. Phys. 96, 5649 (2004)
- [Costato73] M. Costato and L. Reggiani,
Phys. Status Solidi B 58, 471 (1973)
- [Ferry78] D. K. Ferry,
Phys. Rev. B 17, 912 (1978)
- [Fedders84] P. A. Fedders and C. W. Myles,
Phys. Rev. B 29, 802 (1984)
- [Fischetti88] M. V. Fischetti and S. E. Laux,
Phys. Rev. B 38, 9721 (1988)
- [Giannozzi91] P. Giannozzi, S. de Gironcoli, P. Pavone, S. Baroni,
Phys. Rev. B 43, 7231 (1991)
- [Harrison76] J. W. Harrison and J. R. Hauser,
Phys. Rev. B 13, 5347 (1976)
- [Huet08] K. Huet,
« Modélisation du transport sous contrainte mécanique dans les
transistors sub-65 nm pour la microélectronique CMOS »,
Thèse Université Paris-Sud XI (2008)
- [Holway79] L. H. Holway, S. R. Steele and M. G. Alderstein,

« Proceedings of the Seventh Biennial Cornell Electrical Engineering Conference », (Cornell University Press, Ithaca, N.Y., 1979)

- [Jacoboni83] C. Jacoboni and L. Reggiani,
Reviews of Modern Physics 55, 645 (1983)
- [Jantsch71] W. Jantsch and H. Heinrich,
Phys. Rev. B 3, 420 (1971)
- [Joyce07] S. Joyce, F. Murphy-Armando, and S. Fahy,
Phys. Rev. B 75, 155201 (2007)
- [Kane56] E. O. Kane,
J. Phys. Chem. 1, 82 (1956)
- [Kay91] L. E. Kay and T. W. Tang,
J. Appl. Phys. 70, 1475 (1991)
- [Landolt-Börnstein] <http://www.springer.com/librarians/e-content/springermaterials?SGWID=0-171102-0-0-0>
- [Littlejohn78] M. A. Littlejohn et al.,
Solid-State Electron. 21, 107 (1978)
- [Lundstrom00] M. Lundstrom,
« Fundamentals of Carrier Transport »,
2nd edition (Cambridge University Press, 2000)
- [Lugli85] P. Lugli and D. K. Ferry,
IEEE Transactions on Electron Devices 32, 2431 (1985)
- [Meyer81] J. R. Meyer and F. J. Bartoli,
Phys. Rev. B 23, 5413 (1981)
- [Meyer83] J. R. Meyer and F. J. Bartoli,
Phys. Rev. B 28, 915 (1983)
- [Michaillat10] M. Michaillat,
« Paramètres matériau pour la simulation de transistors bipolaires à hétérojonctions Si/SiGe et Si/SiGeC »,
Thèse Université Paris-Sud XI (2010)
- [Nguyen11] H.-N. Nguyen, D. Querlioz, S. Galdin-Retailleau and P. Dollfus,
IEEE Transaction on Electron Devices 58, 798 (2011)
- [Nikitina09] L. N. Nikitina, S. V. Obukhov, and V. G. Tyuterev,
Russ. Phys. J. 52, 742 (2009)
- [NSM] <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/index.html>

- [Osman87] M. A. Osman and D. K. Ferry,
Phys. Rev. B 36, 6018 (1987)
- [Richard04] S. Richard,
« Modélisation physique de la structure électronique, du transport et de l'ionisation par choc dans les matériaux IV-IV massifs, contraints et dans les puits quantiques »,
Thèse Université Paris-Sud XI (2004)
- [Ridley99] B. K. Ridley,
« Quantum Processes in Semiconductors »,
4th edition (Oxford University Press, 1999)
- [Rota93] L. Rota, P. Lugli, T. Elsaesser and J. Shah,
Phys. Rev. B 47, 4226 (1993)
- [Ruch68] J. G. Ruch and G. S. Kino,
Phys. Rev 174, 921 (1968)
- [Scholz95] R. Scholz,
J. Appl. Phys. 77, 3219 (1995)
- [Strauch90] D. Strauch and B. Dorner,
J. Phys. Condens. Matter 2, 1457 (1990)
- [Vurgaftman01] I. Vurgaftman, J. R. Meyer and L. R. Ram-Mohan,
J. Appl. Phys. 89, 5815 (2001)
- [Wang92] J.-Q. Wang, Z.-Q. Gu, M.-F. Li, and W.-Y. Lai,
Phys. Rev. B 46, 12358 (1992)
- [Wiley70] J. D. Wiley,
Solid State Commun. 8, 1865 (1970)
- [Windhorn81] T. H. Windhorn et al.,
Appl. Phys. Lett. 40, 513 (1981)
- [Windhorn82] T. H. Windhorn, L. W. Cook and G. E. Stillman,
IEEE Electron Device Letters 3, 18 (1982)
- [Zollner89] S. Zollner, S. Gopalan, and M. Cardona,
Appl. Phys. Lett. 54, 614 (1989)
- [Zollner90] S. Zollner, S. Gopalan, and M. Cardona,
J. Appl. Phys. 68, 1682 (1990)

CHAPITRE III : PROCESSUS DE GENERATION/RECOMBINAISON

La plupart des modèles EMC sont spécifiquement développés pour calculer des propriétés de transport et ne tiennent pas compte des processus qui seront présentés dans ce chapitre qui est focalisé sur les processus génération et recombinaison de porteurs de charge. Les processus de photo-génération de paires électron-trou sont souvent absents dans les modèles EMC. Ceux développés dans le but de modéliser une expérience de spectroscopie optique fournissent évidemment un moyen de photo-générer des paires électron-trou, cependant, ce moyen a toujours été pré-paramétré par la densité de porteurs finale désirée. Ce n'est en soi pas un problème sauf si l'on souhaite calculer avec précision le taux de photo-génération en fonction d'un éclairement donné et de la limite imposée par le principe d'exclusion de Pauli, ce qui sera le cas dans travail consigné dans les CHAPITRES V et VI. Le processus inverse, la recombinaison radiative, est également un grand absent des modèles EMC. D'autres processus de génération/recombinaison traités dans ce chapitre (ceux à 4 particules i.e. l'ionisation par choc et les processus Auger) sont également inédits dans un modèle EMC. En effet, l'ionisation par choc (IPC) a été extensivement étudiée au niveau de son impact sur le transport des électrons dans les semi-conducteurs mais pas en tant que processus de génération de paires électron-trou. Quant aux processus de recombinaison non radiatifs Auger, à ma connaissance, ils n'ont jamais été considérés dans un modèle EMC. Ces quatre volets sont essentiels à l'étude menée dans le CHAPITRE VI où ces processus sont en compétition et déterminent le nombre de particules.

La prise en compte de ces processus entraîne la résolution d'intégrales non triviales, qui n'ont pas de solutions analytiques même pour des distributions de porteurs à l'équilibre (IPC et Auger). Ces difficultés peuvent cependant être dépassées grâce aux atouts de l'EMC qui sont la structure électronique et les populations de porteurs échantillonnées. Cela permet une évaluation non arbitraire des paires électron-trou à photo-générer ou à recombinaison radiativement, et permet également d'identifier les états finaux des porteurs après un processus d'IPC ou un processus Auger. Les équations sur lesquelles est basée la description de ces processus ainsi que leur intégration dans l'EMC vont être présentées avec une comparaison entre les résultats de calculs et des données mesurables expérimentalement.

1) Photo-génération / recombinaison radiative

La photo-génération de paires électron-trou par excitation optique est à la base du fonctionnement des cellules solaires. Tout photon dont l'énergie est supérieure à l'énergie de bande interdite peut potentiellement être absorbé par un électron d'une bande de valence, qui se retrouvera alors excité vers la bande de conduction, créant alors un trou dans la bande de valence (absence d'électron). Le processus inverse est la recombinaison radiative. Ces deux processus sont schématisés sur la FIG. III.1.1 où les états représentant des électrons sont symbolisés par des cercles pleins et les états représentant des trous (absence d'électron) sont symbolisés par des cercles vides. Dans les deux cas, il s'agit d'une interaction électron-photon dont l'Hamiltonien d'interaction est

$$H = \frac{-e \vec{A} \cdot \vec{p}}{m_0} \quad (\text{III.1.1})$$

où \vec{p} est l'opérateur impulsion et \vec{A} est le potentiel vecteur relié au champ électromagnétique. Dans la jauge de Lorentz, le potentiel vecteur pour les processus d'absorption et d'émission d'un photon est donné par [Ridley99]

$$\begin{cases} \vec{A}_{abs} = \sqrt{\frac{\hbar n_{ph}}{2\Omega\epsilon\omega}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \vec{a} \\ \vec{A}_{emi} = \sqrt{\frac{\hbar(n_{ph}+1)}{2\Omega\epsilon\omega}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \vec{a} \end{cases} \quad (\text{III.1.2})$$

où n_{ph} est le nombre de photons par mode caractérisé par le vecteur d'onde q et la pulsation ω , ϵ et Ω la permittivité et le volume du cristal, et \vec{a} un vecteur unitaire. Dans le cas où il n'y a pas de polarisation préférentielle (lumière du soleil, émission spontanée « classique », etc.), on peut considérer un produit scalaire moyen $|\vec{a}\cdot\vec{p}|^2 = p^2/3$. Après quelques lignes de calcul, on obtient la probabilité par unité de temps de transition interbande par absorption/émission d'un photon à l'aide de la règle d'or de Fermi

$$S_{abs/emi}(k_n, k'_n) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{-e}{\Omega_C m_0} \vec{A}_{abs/emi} \right| \left| \frac{P_{k_n, k'_n}}{\sqrt{3}} \delta(\vec{k}_n - \vec{k}'_n \pm \vec{q}) \right|^2 \delta(E_{k_n} - E_{k'_n} \pm \hbar\omega) \quad (\text{III.1.3})$$

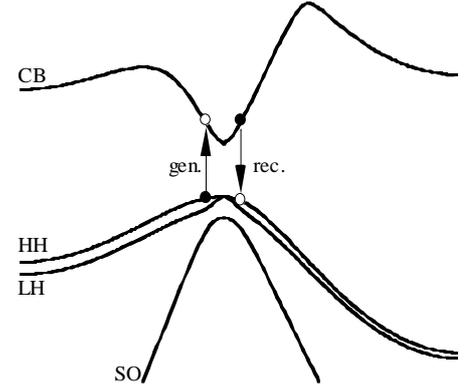


FIG. III.1.1 : Schéma d'un processus de photo-génération et de recombinaison radiative.

Cette expression sera évaluée de nombreuses fois afin de déterminer les taux nets d'absorption et d'émission. Il est donc utile d'introduire à ce niveau quelques approximations afin de gagner beaucoup de temps de calcul. L'intégrale de recouvrement des parties périodiques des ondes de Bloch sous l'action de l'opérateur impulsion $P_{k_n, k_{n'}}$ est sans doute ce qui alourdira le plus les calculs. On substitue donc à $P_{k_n, k_{n'}}$ une valeur moyenne $\langle P_{n, n'} \rangle$ calculée à partir du NLEPM (CHAPITRE I) pour les transitions entre les bandes n et n' en centre de zone. Pour un photon « visible » ou « infra rouge », $q \rightarrow 0$ est une approximation couramment utilisée. L'équation (III.1.3) devient

$$S(k_n, k_{n'}) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{\Omega_C^2 m_0^2} A_{abs/emi}^2 \frac{\langle P_{n, n'}^2 \rangle}{3} \delta(\vec{k}_n - \vec{k}_{n'}) \delta(E_{k_n} - E_{k_{n'}} \pm \hbar\omega) \quad (\text{III.1.4})$$

Traitons désormais les processus d'absorption et d'émission séparément.

Expérimentalement, une excitation optique est souvent caractérisée par sa puissance plutôt que par la population de photons associée. On peut introduire dans l'expression du potentiel vecteur pour l'absorption la puissance par unité de surface $I(\omega)$ de l'excitation optique [Kuzmany98]

$$A_{abs}^2(\omega) = \frac{\hbar n_{ph}}{2\Omega \varepsilon \omega} = \frac{1}{2\varepsilon_0 c_0 \omega^2 \sqrt{\varepsilon_r}} \times \frac{\hbar \omega \times n_{ph}}{\Omega / (c_0 / \sqrt{\varepsilon_r})} = \frac{I(\omega)}{2\varepsilon_0 c_0 \omega^2 \sqrt{\varepsilon_r}} \quad (\text{III.1.5})$$

Le taux d'absorption est alors donné par

$$W = \frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \int \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{\Omega_C^2 m_0^2} A_{abs}^2(\omega) \frac{\langle P_{n, n'}^2 \rangle}{3} \delta(\vec{k}_n - \vec{k}_{n'}) \delta(E_{k_n} - E_{k_{n'}} + \hbar\omega) d^3k \quad (\text{III.1.6})$$

Afin de calculer l'intégrale, la zone de Brillouin est discrétisée en éléments de volume de l'espace réciproque Δk^3

$$W = \frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \sum_{\vec{k}_{nbox}} \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{\Omega_C^2 m_0^2} A_{abs}^2(\omega) \frac{\langle P_{n, n'}^2 \rangle}{3} \delta(\vec{k}_n - \vec{k}_{n'}) \delta(E_{k_n} - E_{k_{n'}} + \hbar\omega) \Delta k^3 \quad (\text{III.1.7})$$

Pour introduire le principe d'exclusion de Pauli, il faut bien comprendre la signification de

(III.1.7). En effet, $\frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \Delta k^3$ est le nombre d'états dans l'élément de volume de l'espace

réciproque. $\delta(\vec{k}_n - \vec{k}_{n'})$ indique que les transitions sont « verticales » : l'électron de la bande de valence passe en bande de conduction en absorbant un photon mais ne change pas (change très peu) de vecteur d'onde. Le « nombre » d'états joints valence-conduction disponibles dans

Δk^3 est donc $\frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \Delta k^3 (f_{k_n}^{e,V})(1-f_{k_n}^{e,C})$. $f_{k_n}^{e,V}$ et $f_{k_n}^{e,C}$ sont les valeurs des fonctions de distribution pour l'état k par les électrons de valence (bande n) et de conduction (bande n') respectivement. Le taux d'absorption devient alors

$$W = \frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \sum_{\vec{k}_{n,box}} \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{\Omega_C^2 m_0^2} A_{abs}^2(\omega) \frac{\langle P_{n,n'}^2 \rangle}{3} (f_{k_n}^{e,V})(1-f_{k_n}^{e,C}) \delta(E_{k_n} - E_{k_n'} + \hbar\omega) \Delta k^3 \quad (\text{III.1.8})$$

L'absorption d'un matériau est généralement décrite via le coefficient d'absorption

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{\hbar\omega W(\hbar\omega)}{I(\omega) \Omega} \quad (\text{III.1.9})$$

Les coefficients d'absorption ainsi calculés (avec l'approche incluant les intégrales de recouvrement des parties périodiques des ondes de Bloch sous l'action de l'opérateur impulsion $P_{k_n, k_n'}$ calculées « proprement » et l'approche qui utilise des valeurs moyennes $\langle P_{n,n'} \rangle$ calculées en centre de zone) sont montrés en FIG. III.1.2 où ils sont comparés à des résultats de mesures [Casey75] [Adachi92]. Plus l'énergie du photon augmente et plus l'approche avec $\langle P_{n,n'} \rangle$ surestime le coefficient d'absorption, suggérant que $P_{k_n, k_n'}$ décroît lorsque l'on s'éloigne du centre de zone. L'accord pour GaAs entre calculs et mesures est bon sauf à haute énergie. Ceci est dû à l'utilisation d'un indice de réfraction $\sqrt{\epsilon_r}$ constant dans (III.1.5), qui devrait en toute rigueur dépendre de l'énergie du photon. L'accord entre calculs et mesures est moins bon pour InGaAs, et aucune mesure n'a été trouvée pour GaAsSb.

Abordons désormais un point pratique. Il est connu que lors du passage d'un faisceau de puissance P dans un matériau d'épaisseur L_z , la puissance absorbée est $P(1-e^{-\alpha L_z})$ (loi de Beer-Lambert). Autrement dit, la puissance transmise est $P e^{-\alpha L_z}$. Afin de prendre en compte la décroissance de la puissance du faisceau, l'absorbteur est découpé en N_z tranches d'épaisseur d_z . Ainsi d'après (III.1.9), la puissance par unité de surface absorbée dans une tranche i est $P_i^{abs} = \frac{\hbar\omega W_i}{\Omega} d_z = d_z \alpha I_i$. La puissance entrante dans la tranche $i+1$ est la puissance entrante dans la tranche i moins la puissance absorbée dans cette même tranche : $I_{i+1} = I_i (1 - d_z \alpha)$. Cette relation donnant la puissance entrante dans les tranches est une suite géométrique. On en déduit la puissance dans n'importe quelle tranche à partir de la puissance incidente I_0 : $I_i = I_0 (1 - d_z \alpha)^i$. Le taux de génération total est donc

$$\frac{W_{tot}(\hbar\omega)}{\Omega} = \frac{1}{L_z} \sum_{i=0}^{N_z-1} \frac{d_z \alpha(\hbar\omega) I_0(\omega) (1 - d_z \alpha(\hbar\omega))^i}{\hbar\omega} \quad (\text{III.1.10})$$

Cette expression doit être évaluée pour toutes les bandes (transitions à partir des bandes HH, LH et SO) et pour chaque énergie $\hbar\omega$, afin de déterminer les densités de porteurs à photo créer en fonction de la bande de valence de départ et de l'énergie de la transition. Comme l'espace réciproque est discrétisé, en gardant une trace de chaque élément de la somme de (III.1.8), on peut photo générer la densité de porteurs calculée en respectant la distribution de probabilité dans l'espace réciproque. De plus, comme le principe d'exclusion de Pauli est pris en compte dans (III.1.8), les dépendances en temps et/ou en densités d'électrons et de trous du coefficient d'absorption sont respectées.

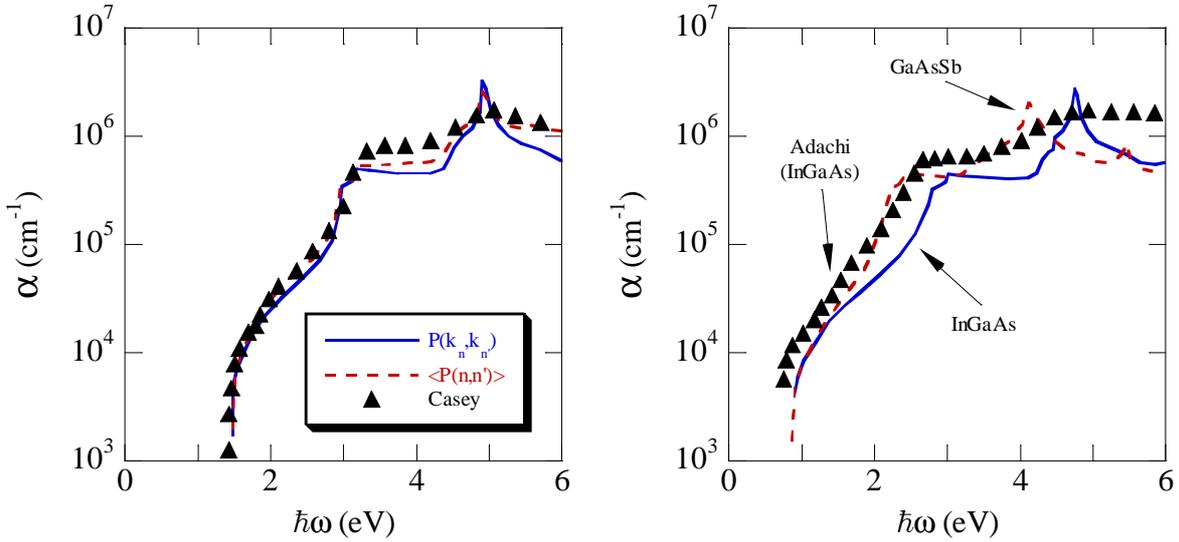


FIG. III.1.2 : Coefficient d'absorption pour GaAs (à gauche) en fonction de l'énergie du photon, calculé avec P_{k_n, k_n} (trait plein), calculé avec $\langle P_{n, n'} \rangle$ (tirets), et mesuré [Casey75]. Coefficient d'absorption pour InGaAs (à droite, trait plein) et GaAsSb (à droite, tirets) en fonction de l'énergie du photon, calculé avec P_{k_n, k_n} , et fit sur valeurs mesurées pour InGaAs [Adachi92].

Par analogie avec (III.1.6) le taux d'émission spontanée est donné par

$$W = \frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \int \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{\Omega_C^2 m_0^2} A_{emi}^2(\omega) \frac{\langle P_{n, n'}^2 \rangle}{3} \delta(\vec{k}_n - \vec{k}_{n'}) \delta(E_{k_n} - E_{k_{n'}} - \hbar\omega) d^3k \quad (\text{III.1.11})$$

Le Principe d'exclusion de Pauli suggère que le taux doit être proportionnel à la population d'électrons de conduction et à la population de trous $(f_{k_n}^{e,C})(1 - f_{k_{n'}}^{e,V})$. On obtient

$$W = \left(\frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \right)^2 \int \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{\Omega_C^2 m_0^2} A_{emi}^2(\omega) \frac{\langle P_{n,n'}^2 \rangle}{3} \times (f_{k_n}^{e,C})(1-f_{k_n'}^{e,V}) \delta(\vec{k}_n - \vec{k}_n') \delta(E_{k_n} - E_{k_n'} - \hbar\omega) d^3k_n d^3k_n' \quad (\text{III.1.12})$$

Comme les populations d'électrons de conduction et de trous de bande de valence sont déjà échantillonnées dans l'EMC, on peut discrétiser l'intégrale de (III.1.12) en la transformant en somme sur une population de porteur de l'EMC. De plus, comme on s'intéresse aux transitions verticales, un terme de la somme sera non nul que si il y a au moins un électron en face d'un trou dans le même élément de volume de l'espace réciproque Δk^3 . La somme peut courir de façon équivalente sur la population d'électrons ou de trous. Choisissons les électrons

$$W = \frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \frac{N}{N_{MC}} \sum_{k_{nMC}}^{MC} \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{\Omega_C^2 m_0^2} A_{emi}^2(\omega) \frac{\langle P_{n,n'}^2 \rangle}{3} f_{k_n'}^{h,V} \delta(E_{k_n} - E_{k_n'} - \hbar\omega) \Delta k^3 \quad (\text{III.1.13})$$

Le taux d'émission est donc proportionnel à $\frac{2\Omega}{(2\pi)^3} f_{k_n'}^{h,V} \Delta k^3$ qui est le nombre de trous de la

bande n' dans l'élément Δk^3 , et à $\frac{N}{N_{MC}}$ qui est le nombre d'électrons représenté par un

pseudoélectron. La somme dans (III.1.13) doit courir sur tous les pseudoélectrons k_{nMC} et doit couvrir toutes les bandes de valence. Comme l'émission stimulée ne joue pas de rôle dans notre étude, la population de photon peut être négligée dans l'expression de $A_{emi}^2(\omega)$ qui devient alors $\frac{\hbar}{2\Omega\varepsilon\omega}$. La recombinaison radiative est souvent caractérisée par un coefficient

B qui permet de facilement remonter au temps de vie radiatif

$$\begin{cases} B = (W / \Omega) / (n \times p) \\ \tau = (B \times x)^{-1} \end{cases} \quad (\text{III.1.14})$$

où x est la concentration de porteurs majoritaires. Les coefficients calculés sont regroupés dans la TABLE III.1.1

	B (cm ³ /s) calc.	B (cm ³ /s) exp.
GaAs ^{a,b,c,d,e}	0.7 10 ⁻¹⁰	0.5-3.7 10 ⁻¹⁰
InGaAs	2.0 10 ⁻¹⁰	1.4 10 ⁻¹⁰ ^f
GaAsSb	2.2 10 ⁻¹⁰	2.5 10 ⁻⁹ ^g

TABLE III.1.1 : Coefficients de recombinaison radiative calculés pour GaAs, InGaAs et GaAsSb, comparés à des mesures : ^a [Ahrenkiel92]

^b [Ahrenkiel01] ^c [Lush92] ^d [Nelson78]

^e [Puhlmann91] ^f [Ahrenkiel98]

^g [Bolognesi05]

2) Ionisation par choc

L'ionisation par choc (IPC) est un effet connu pour détériorer les performances de composants électroniques. Elle peut être initiée par un électron ou par un trou. Cependant, comme il est beaucoup plus facile d'avoir un électron énergétique plutôt qu'un trou à cause de la structure de bandes (par excitation optique ou l'application d'un fort champ électrique), seuls les processus d'IPC initiés par des électrons seront considérés ici. En effet, lorsqu'un porteur k_1 possède une énergie cinétique excédant l'énergie de bande interdite (E_G), il peut céder cette énergie en créant une paire électron-trou (FIG. III.2.1). On se retrouve alors avec davantage de porteurs mais chacun possédant une énergie faible. On peut imaginer que si un champ électrique accélère constamment et très rapidement les porteurs, les densités croissantes de porteurs par IPC mèneront à des taux nets d'interactions porteur-porteur et porteur-phonon très élevés, ce qui dégrade les propriétés de transport. Dans le contexte de la cellule solaire, l'IPC ne constitue pas forcément une mauvaise chose car elle peut donner naissance à des courants plus importants.

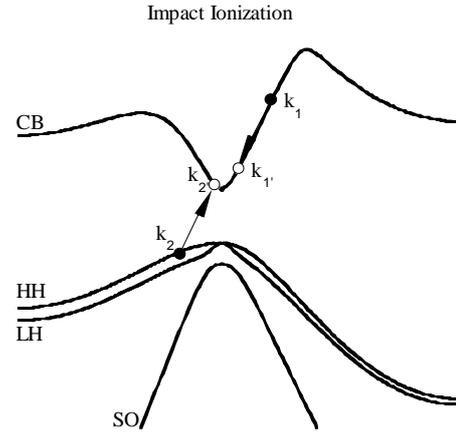


FIG. III.2.1 : Schéma d'un processus d'ionisation par choc initié par un électron.

Le processus d'IPC met en jeu 2 particules initiales qui entrent en collision (k_1, k_2), puis qui diffusent vers 2 états finaux (k_1', k_2'). La probabilité d'IPC par unité de temps pour les couples est donnée par la règle d'or de Fermi avec l'interaction coulombienne

$$S(k_1, k_1', k_2, k_2') = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{e^2}{\epsilon\Omega} \frac{I_{k_1, k_1'} I_{k_2, k_2'}}{q^2} \right|^2 \delta(E) \quad (\text{III.2.1})$$

où $I_{k_1, k_1'}$ et $I_{k_2, k_2'}$ sont les facteurs de recouvrement (entre état initial et état final) des parties périodiques des ondes de Bloch des particules 1 et 2. Les 4 états doivent respecter la conservation de l'énergie et de l'impulsion. L'énergie et le vecteur d'onde échangés entre k_1 et k_2 sont

$$\begin{cases} E_x = E_{k_1} - E_{k_1'} = E_{k_2'} - E_{k_2} \\ \vec{q} = \vec{k}_1 - \vec{k}_1' = \vec{k}_2' - \vec{k}_2 \end{cases} \quad (\text{III.2.2})$$

Le taux d'interaction par IPC pour l'électron initiateur (k_1) est

$$w(k_1) = \sum_{k_1, k_2, k_2'} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{e^2}{\epsilon\Omega} \frac{I_{k_1, k_1'} I_{k_2, k_2'}}{q^2} \right|^2 \delta(E) \quad (\text{III.2.3})$$

Ce taux d'interaction, malgré son aspect simpliste, est assez difficile à évaluer car la triple somme est extrêmement lourde. La documentation sur le sujet propose différentes approximations pour (III.2.3) qui permettent de traiter l'IPC avec un coût calculatoire plus faible. Citons, notamment, l'approche « random-k » [Kane67] et le modèle de Keldysh [Keldysh60]. Le modèle de Keldysh (et ses variantes) sont des équations qui reconstruisent le taux d'interaction par IPC en fonction de l'énergie du porteur initiateur à partir de paramètres d'ajustement P_i et de l'énergie de seuil d'ionisation E_0 en dessous de laquelle, l'électron k_1 ne peut pas initier un processus d'IPC (E_0 est aussi un paramètre d'ajustement, il n'a pas forcément pour valeur E_G)

$$\begin{cases} \text{Keldysh} & \begin{cases} w(E) = P \left(\frac{E - E_0}{E_0} \right)^2, & E \geq E_0 \\ w(E) = 0 & , E < E_0 \end{cases} \\ \text{variante} & \begin{cases} w(E) = P_1 (E - E_0)^{P_2}, & E \geq E_G \\ w(E) = 0 & , E < E_G \end{cases} \end{cases} \quad (\text{III.2.4})$$

Ces modèles, offrant des évaluations numériques extrêmement rapides, requièrent cependant l'ajustement des différents paramètres sur la base de mesures expérimentales ou à partir de calculs moins empiriques. L'approche « random-k », quant à elle, calcule réellement (III.2.3) à l'aide de deux simplifications : l'élément de matrice d'interaction est considéré constant et la conservation de l'impulsion est négligée. Le taux d'interaction par IPC pour le porteur initiateur k_1 ne dépend alors que des densités d'états accessibles aux trois autres particules. En faisant usage de la conservation de l'énergie, on obtient

$$\begin{cases} M_{CME}^2 = \left| \frac{e^2}{\epsilon\Omega} \frac{I_{k_1, k_1'} I_{k_2, k_2'}}{q^2} \right|^2 = \text{constant} \\ w(E_{k_1}) \propto M_{CME}^2 \int D(E_{k_1'}) D(E_{k_2}) D(E_{k_2'}) dE_{k_1'} dE_{k_2} \end{cases} \quad (\text{III.2.5})$$

Pour utiliser ce modèle, il faut évidemment évaluer M_{CME}^2 . Cette constante peut être ajustée, mais elle peut également être calculée, faisant de « random-k » un modèle beaucoup moins empirique que celui de Keldysh. Si ces densités d'états sont calculées sur une structure électronique issue de calculs pertinents alors l'approche « random-k » fournit des résultats

satisfaisants Il a été montré que cette approche fonctionne parfaitement bien pour les semi-conducteurs à bande interdite indirecte tels que Si, Ge et SiGe [Kane67] [Harrison99]. Dans ces matériaux, les vecteurs d'onde échangés \vec{q} lors des processus d'IPC sont relativement grands (par rapport aux dimensions de la 1^{ère} zone de Brillouin), ce qui tend à favoriser les processus Umklapp [Anderson72]. Un processus est qualifié « Umklapp » lorsque l'addition au vecteur d'onde échangé d'un vecteur du réseau réciproque, qui transforme tout point de l'espace réciproque en un point équivalent, est nécessaire pour garantir la présence de $(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}'_1, \vec{k}'_2)$ dans la 1^{ère} zone de Brillouin. La possible addition dans le modèle d'un tel vecteur du réseau réciproque a pour effet de rendre le vecteur d'onde échangé plus grand et d'autoriser un plus grand nombre de configurations $(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}'_1, \vec{k}'_2)$ à participer à la somme de (III.2.3). Le vecteur d'onde échangé moyen étant alors de l'ordre d'un vecteur du réseau réciproque, il varie très peu avec l'énergie du porteur initiateur. Les approximations « élément de matrice constant » et « non conservation de l'impulsion » pour le calcul du taux d'interaction sont donc pleinement justifiées. Cependant, ces deux approximations sont plus discutables pour les semi-conducteurs à bande interdite directe [Harrison99]. La seule similarité entre les approches de Keldysh et « random-k » est qu'elles donnent un taux d'interaction par IPC moyen, fonction de l'énergie du porteur initiateur et non de sa position repérée par \vec{k}_1 dans la zone de Brillouin. Cela pose un problème car l'anisotropie du taux d'interaction en fonction de \vec{k}_1 peut être très forte. De plus, pour l'intégration de l'IPC dans l'EMC, on souhaite agir directement sur les populations de porteurs ce qui nécessite l'identification des états initiaux et finaux des particules sur la structure électronique Full-Band (anisotrope).

Des calculs ab initio qui prennent en compte la nature anisotrope de la structure de bandes montrent, entre autre, que le taux d'interaction par IPC est fortement anisotrope [Kuligk05] [Sano92] [Stobbe91] [Stobbe94]. Outre le fait que dans ces calculs l'interaction spin-orbit est absente (pour la structure électronique qui est le squelette sur lequel le taux d'interaction est calculé), il s'agit de calculs lourds. Pour une intégration dans l'EMC, une méthode de calcul « rapide » mais qui permet toutefois d'obtenir le taux par IPC avec précision a été développée.

Dans l'équation (III.2.3) la somme triple peut être réduite à une somme double car avec la connaissance de 3 des protagonistes, le 4^e peut être déduit de la conservation de l'impulsion. Les processus Umklapp sont pris en compte.

$$w(k_1) = \sum_{k_1, k_2} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{e^2}{\epsilon\Omega} \frac{I_{k_1, k_1'} I_{k_2, k_2'}}{q^2} \right|^2 \delta(E) \quad (\text{III.2.6})$$

La double somme court sur toute la zone de Brillouin et bandes concernées, les termes ne satisfaisant pas la conservation de l'énergie étant éliminés. L'évaluation numérique de cette somme requiert la discrétisation de la zone de Brillouin. Une somme sur chaque état k de la zone de Brillouin est alors transformée en une somme sur les éléments de volume de l'espace réciproque dk_{box}^3 contenant $\frac{2\Omega dk_{box}^3}{(2\pi)^3}$ états (facteur 2 pour le spin). La connaissance des

« conditions énergétiques de l'ionisation par choc »

$$E_{k_1'} \leq E_{k_1} - E_G \quad \text{et} \quad |E_{k_2}| \leq E_x - E_G \quad (\text{III.2.7})$$

avec $E_x = E_{k_1} - E_{k_1'}$ l'énergie échangée,

permet de réduire le nombre de termes dans la double somme.

$$w(k_1) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^4}{\epsilon^2} \left(\frac{2}{(2\pi)^3} \right)^2 \sum_{k_{1box}, k_{2box}} \left| \frac{I_{k_1, k_1'} I_{k_2, k_2'}}{q^2} \right|^2 (dk_{box}^3)^2 \delta(E) \quad (\text{III.2.8})$$

Rappelons que k_1 est une donnée du MC : chaque super électron satisfaisant $E_{k_1} \geq E_G$ avec le zéro au minimum de la bande de conduction. Donc, pour chaque k_{1box}' il faut compter le nombre de k_{2box} (en réalité le nombre de couples (k_2, k_2')) qui satisferont la conservation de l'énergie connaissant le vecteur d'onde échangé \vec{q} . Il est important de rendre cette tâche aussi rapide que possible car (III.2.8) doit être évaluée pour chaque k_1 tout au long de la simulation. Une tabulation est alors utilisée. En parcourant (doublement) la zone de Brillouin, le nombre de couples (k_2, k_2') par vecteur d'onde \vec{q} et par tranche d'énergie dE_x échangés est stocké. La somme sur k_{2box} est alors réduite à un terme qui est le nombre de couple $nbk_{2box}(\vec{q}, E_x)$ faisant passer le temps de calcul d'un taux d'IPC en N^2 à une variation en N .

$$w(k_1) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^4}{\epsilon^2} \left(\frac{2}{(2\pi)^3} \right)^2 \sum_{k_{1box}} \left| \frac{I_{k_1, k_1'} I_{k_2, k_2'}}{q^2} \right|^2 nbk_{2box}(\vec{q}, E_x) (dk_{box}^3)^2 \delta(E) \quad (\text{III.2.9})$$

Il faut noter qu'une tabulation du nombre de couple $nbk_{2box}(\vec{q}, E_x)$ ne permet pas de remonter aux informations relatives à (k_2, k_2') . Ces informations doivent être reconstruites une fois le couple (k_1, k_1') choisi. Pour accélérer encore plus les calculs (et comme les informations sur

(k_2, k_2') ont été perdues) les intégrales de recouvrement des parties périodiques des ondes de Bloch sont remplacées par des valeurs moyennes $\langle I_{k_1, k_1'}^2 \rangle \langle I_{k_2, k_2'}^2 \rangle$ calculées avec le NLEPM (CHAPITRE I). En effet, une mauvaise évaluation des facteurs de recouvrement via certaines approximations peut mener à des résultats différents, de plusieurs ordres de grandeur, de résultats rigoureusement calculés. L'expression finale du taux d'interaction par IPC est

$$w(k_1) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^4 \langle I_{k_1, k_1'}^2 \rangle \langle I_{k_2, k_2'}^2 \rangle}{\varepsilon^2} \left(\frac{2}{(2\pi)^3} \right)^2 dk_{box}^3 \sum_{k_{1box}} \frac{nbk_{2box}(\vec{q}, E_x)}{q^4} dk_{1box}^3 \delta(E) \quad (\text{III.2.10})$$

où le Principe d'Exclusion de Pauli pour k_{1box}' est pris en compte dans l'évaluation de dk_{1box}^3 . La tabulation de $nbk_{2box}(\vec{q}, E_x)$ pour une discrétisation $dq = 2\% (2\pi/a_0)$, nécessite 2 jours de calcul pour une architecture présentant 8 processeurs en parallèle. Il s'agit toutefois d'un investissement rentable car l'évaluation de (III.2.10) ne dure que quelques secondes. De plus, cette discrétisation est plus fine que celles utilisées dans d'autres calculs d'IPC.

Les taux d'interaction par IPC que l'on peut trouver dans la littérature peuvent varier sur plusieurs décades car ils dépendent fortement de la structure de bande utilisée. En effet, le taux d'interaction dépend uniquement de la structure électronique du matériau (facteurs de recouvrements $I_{k_1, k_1'}^2, I_{k_2, k_2'}^2$ calculés sur la structure électronique et permittivité ε connue). Il n'y a ici aucun paramètre d'ajustement (contrairement aux potentiels de déformation pour les interactions porteur-phonon par exemple).

La FIG. III.2.2 illustre les taux d'interaction par IPC en fonction de la norme du vecteur d'onde de l'électron initiateur suivant les directions [001] et [111] dans la 2^{nde} bande de conduction de GaAs. Différentes méthodes ont été utilisées pour obtenir la structure électronique (EXX LDA (ab initio) et EPM [Kuligk05] ; SXLDA (ab initio) [Picozzi02] ; trait plein (notre NLEPM)). A des fins comparatives, seules les contributions d'états de la 2^{nde} bande de conduction sont montrées en FIG. III.2.2 car celles de la 1^{ère} bande de GaAs sont nulles suivant [100] et [111]. Comme il faudrait appliquer des champs électriques extrêmement intenses ou avoir une quantité significative de photons très énergétiques pour peupler (durablement) les bandes supérieures, il n'a pas été jugé nécessaire de les traiter. L'anisotropie du taux d'interaction IPC est manifeste. On note que les taux d'interactions calculés suivent les mêmes tendances que ceux des références, sauf lorsque \vec{k} est en centre de zone où les taux d'interaction calculés pour ce travail sont plus élevés. Ceci est dû à l'utilisation de facteurs de recouvrement moyens. En effet, un électron de la 2^{nde} bande de

conduction peut descendre vers la 1^{ère} bande en cédant une énergie supérieure à E_G (autorisant alors un processus d'IPC) via une transition verticale ou quasi verticale. Pour de telles transitions, le facteur de recouvrement est nul ou quasi nul à cause de l'orthogonalité des pseudo fonctions d'onde, ce qui n'est pas pris en compte par un facteur de recouvrement moyen. Cependant, un électron une probabilité quasi nulle de se trouver en centre de zone dans la 2^{nde} bande de conduction pour des raisons évoquées précédemment.

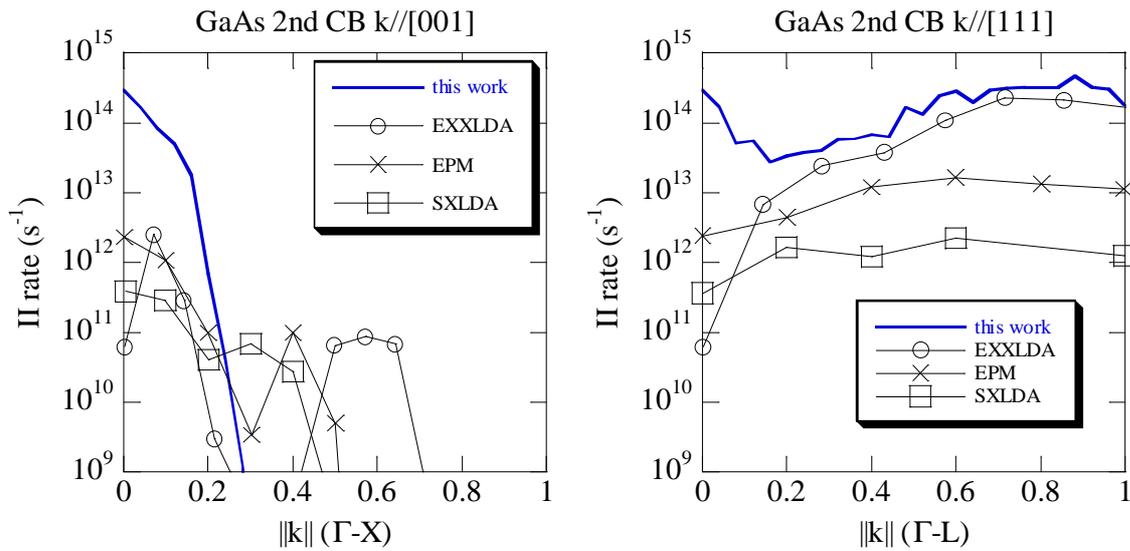


FIG. III.2.2 : Taux d'interaction par IPC dans GaAs en fonction de $\|k\|$ suivant les direction $[001]$ (à gauche) et $[111]$ (à droite) d'un électron dans la seconde bande de conduction.

La FIG. III.2.4 montre les taux d'interaction par IPC pour GaAs, InGaAs et GaAsSb. Pour ces figures, 5 directions ont été prises en compte : il s'agit de 5 directions encadrant la zone irréductible de Brillouin (IBZ) à partir de laquelle, pour des raisons de symétries, la zone de Brillouin peut être repavée en intégralité. Une IBZ, les directions et points de haute symétrie sont montrés en FIG. III.2.3.

- $\Gamma - X : [d, 0, 0]$
- $\Gamma - L : [d, d, d]$
- $\Gamma - K : [d, d, 0]$
- $\Gamma - W : [d, d/2, 0]$
- $\Gamma - U : [d, d/4, d/4]$

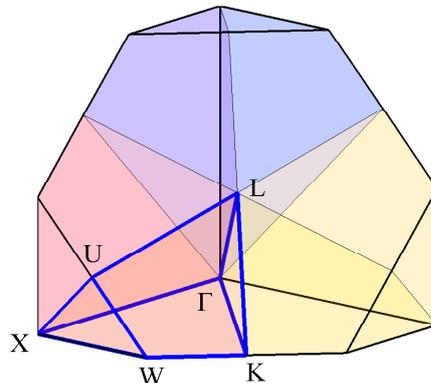


FIG. III.2.3 : $1/8^e$ de la 1^{ère} zone de Brillouin où une zone irréductible (IBZ) a été mise en évidence avec les points de haute symétrie qui l'entourent.

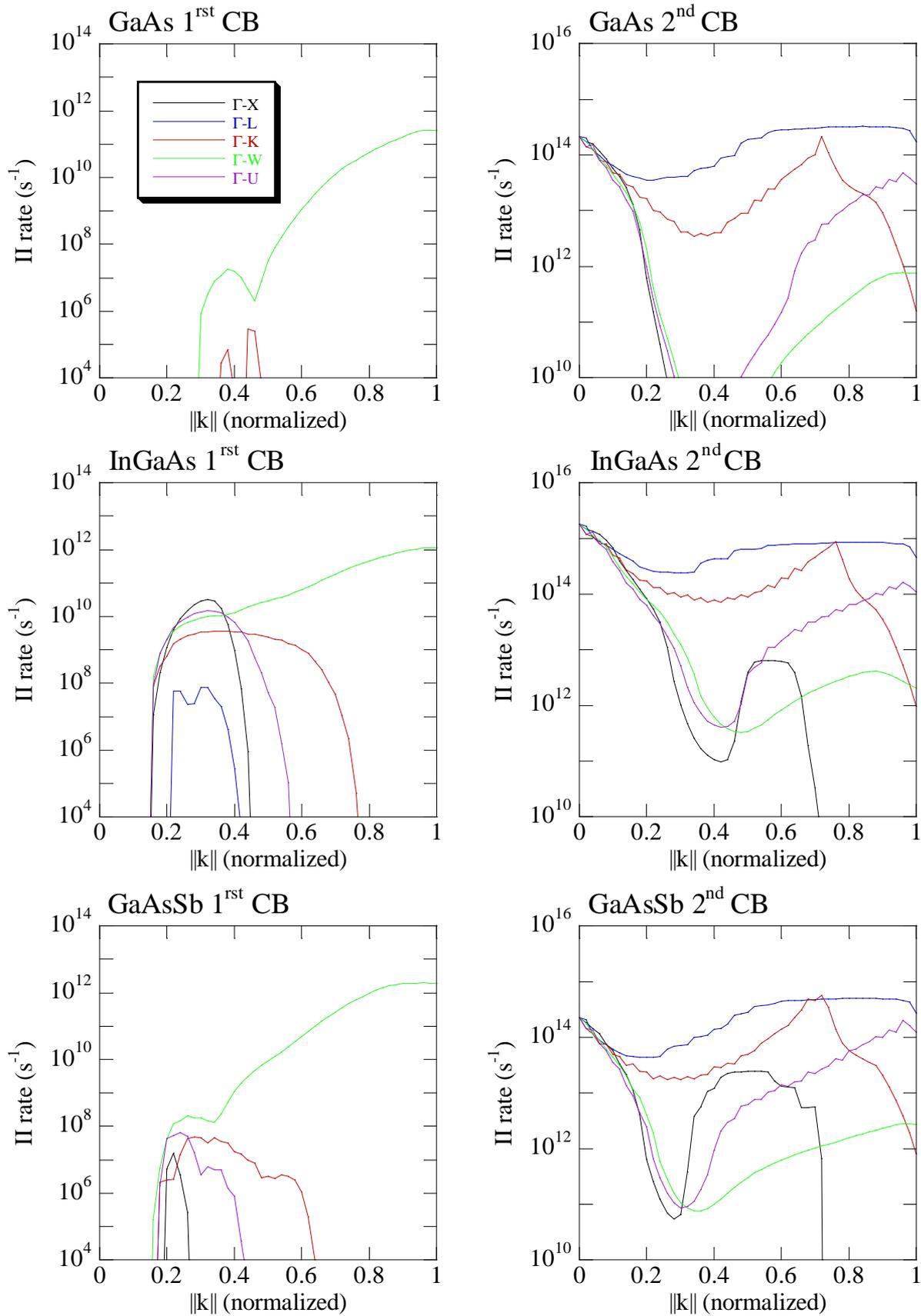


FIG. III.2.4 : Taux d'interaction par IPC dans GaAs, InGaAs et GaAsSb calculés en fonction de $\|k\|$ suivant 5 directions de l'IBZ pour un électron dans la 1^{ère} bande de conduction et la 2^{nde}.

Contrairement à GaAs, InGaAs et GaAsSb autorisent un électron de la 1^{ère} bande de conduction à initier un processus d'IPC le long de [100] et [111]. Leur énergie de bande interdite étant plus petite, l'énergie de seuil au delà de laquelle l'IPC est possible peut être atteinte par un électron entre 2 vallées de la 1^{ère} bande de conduction. L'influence de la structure de bande se voit particulièrement bien dans le taux d'interaction pour un électron de la 1^{ère} bande de conduction suivant [111]. Suivant cet axe, la bande de GaAsSb est relativement plate, ce qui interdit l'IPC. Les 5 directions utilisées dans la FIG. III.2.4 encadrent la zone irréductible de Brillouin (IBZ) (FIG. III.2.3). En effet, pour un cristal cubique face centrée, les états d'énergie et les fonctions d'ondes correspondantes sur l'intégralité de la zone de Brillouin peuvent être reconstruites à partir de la IBZ en appliquant les symétries du cristal. La FIG. III.2.5 montre les taux d'interaction par IPC en fonction de l'énergie de l'électron initiateur k_1 dans l'IBZ. A cause de l'anisotropie des bandes de conduction sur la plage d'énergie considérée, l'approximation $w(E_k) = w(\vec{k})$ n'est plus valide et le taux d'interaction fonction de l'énergie est donc calculé comme une moyenne pondérée par la densité d'état à l'énergie considérée

$$w(E) = \frac{\int w(\vec{k}_1) \delta(E - E_{k_1}) d^3 k_1}{\int \delta(E - E_{k_1}) d^3 k_1} \quad (\text{III.2.11})$$

Comme l'IBZ est le motif irréductible permettant de reconstruire la zone de Brillouin, les intégrales de (III.2.11) peuvent ne couvrir que l'IBZ afin de gagner du temps de calcul. Ce raccourci n'est valide que si les populations d'électrons (influant sur k_1' et k_2') et de trous (influant sur k_2) sont à l'équilibre et respectent donc les symétries utilisées. Le recours à un taux d'interaction tabulé en fonction de l'énergie ou calculé analytiquement (e.g. Keldysh) n'est donc valable qu'en présence de faibles concentration de porteurs ou pour une population globalement proche de l'équilibre. Sur la FIG. III.2.5, les énergies sont mesurées par rapport au minimum de la 1^{ère} bande de conduction. On note que pour GaAs, les résultats de calculs par d'autres auteurs varient sur plusieurs ordres de grandeur, notamment à cause des différences entre les structures de bande utilisées. Pour GaAs et GaAsSb, la prise en compte dans notre modèle de la 2^{nde} bande de conduction donne lieu à un seuil d'ionisation très dur (pente raide autour de l'énergie de seuil d'ionisation). Cela est relié aux facteurs de recouvrements moyens pris en compte. L'InGaAs présente deux seuils. En effet, la 1^{ère} bande de conduction de InGaAs montre des taux d'interaction par IPC non négligeables, et plus

grands que pour GaAs et GaAsSb (FIG. III.2.4). Enfin, GaAsSb semble être le plus sensible à l'ionisation par choc car il présente les taux les plus élevés.

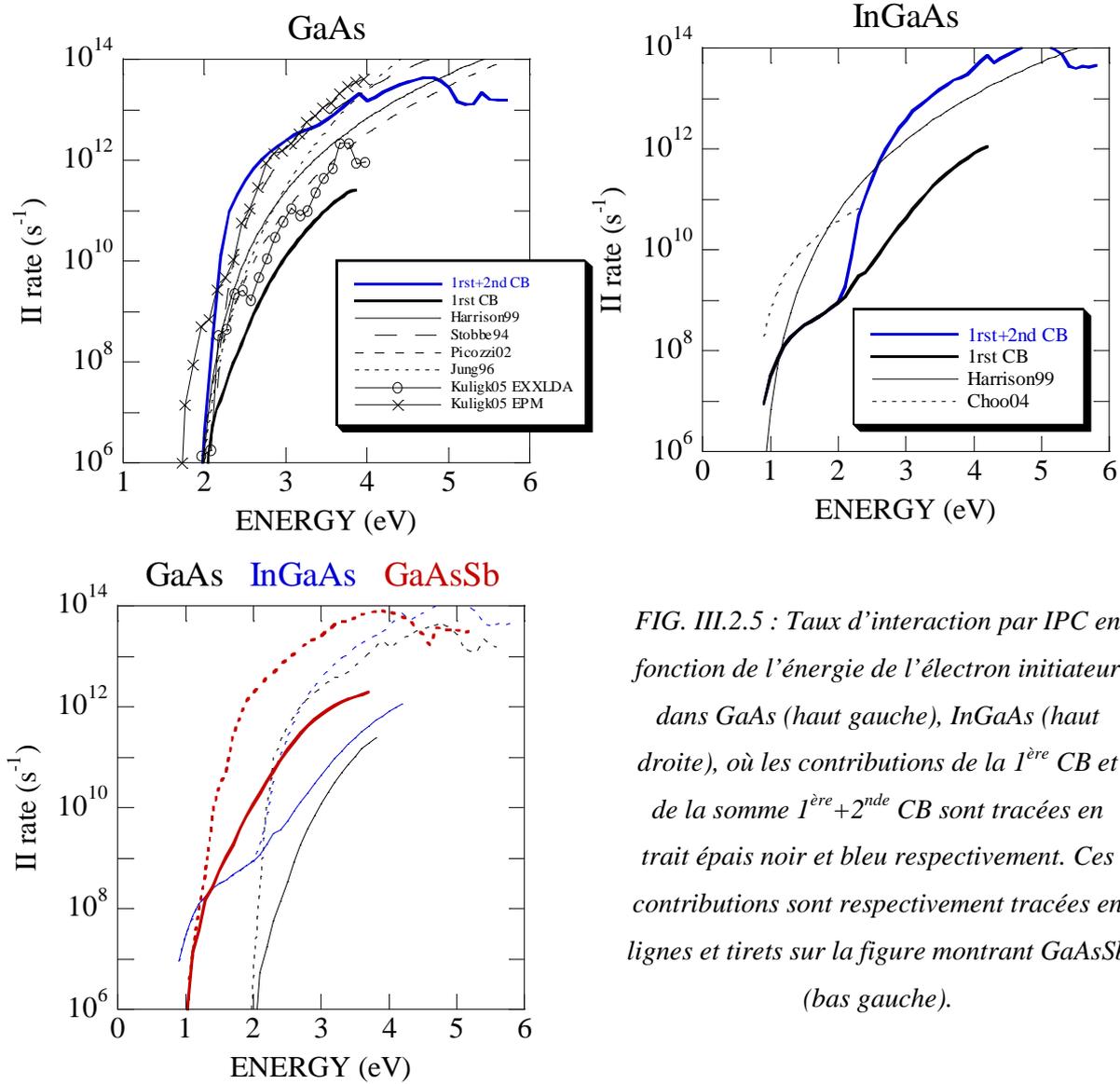


FIG. III.2.5 : Taux d'interaction par IPC en fonction de l'énergie de l'électron initiateur dans GaAs (haut gauche), InGaAs (haut droite), où les contributions de la 1^{ère} CB et de la somme 1^{ère}+2^{nde} CB sont tracées en trait épais noir et bleu respectivement. Ces contributions sont respectivement tracées en lignes et tirets sur la figure montrant GaAsSb (bas gauche).

Ouvrons une parenthèse sur le calcul numérique du taux d'interaction par IPC. L'ingrédient majeur étant la structure de bande, les résultats de différentes méthodes de calcul de taux d'interaction ne peuvent pas forcément être comparés entre eux. Les facteurs de recouvrement sont essentiels à l'obtention d'un taux dans le bon ordre de grandeur. Ils ont été ici pris en compte a minima car la rapidité du calcul a été privilégiée. En effet, les taux d'interaction par IPC sont intégrés aux boucles EMC, et sont donc calculés une multitude de fois durant une simulation. Un autre ingrédient important du calcul est l'évaluation du facteur traduisant la conservation de l'énergie $\delta(E)$ dans (III.2.3). Il est souvent considéré constant. Cependant, dans un calcul où l'espace (k_1, k_1', k_2, k_2') est discrétisé, il représente la densité

d'états à l'énergie totale considérée dans l'hyper volume $dk_1^3 dk_1'^3 dk_2^3 dk_2'^3$, et est donc non constant sur la zone de Brillouin car la courbure des bandes varie énormément. Il est ici évalué pour chaque élément de la somme dans (III.2.10) où les informations sur (k_2, k_2') sont retrouvées à partir de (III.2.7). Enfin, une différence notable entre différents calculs se trouve dans la prise en compte de l'élément de matrice coulombien. Il est pris en compte ici nu, car il n'y a pas de raisons qu'il soit bien approximé par un potentiel écranté statiquement alors que les échanges d'énergie sont de l'ordre de l'énergie de bande interdite. De plus, la prise en compte d'un potentiel écranté statiquement n'influe pas sur les résultats pour un électron initiateur en 1^{ère} bande de conduction car les vecteurs d'onde échangés sont très grands par rapport à la longueur d'écrantage, même pour $n = p = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ avec la longueur d'écrantage $q_s = 2.33 \times 10^8 \text{ m}^{-1}$ comme indiqué en FIG. III.2.6. Les vecteurs d'onde échangés moyens $\langle q \rangle$ sont également tracés en FIG. III.2.6 en fonction de l'énergie de l'électron initiateur. On note que $\langle q \rangle$ varie sur plusieurs ordres de grandeurs et est en général plus grand que q_s , sauf près du seuil d'ionisation pour la 1^{ère} bande de conduction. Cependant, même en considérant un potentiel nu, les taux d'interaction par IPC calculés près des seuils d'ionisation de la 1^{ère} bande de conduction sont peu significatifs. Au delà du seuil, $\langle q \rangle$ continue à varier de façon non négligeable mettant en question les approximations de type CME.

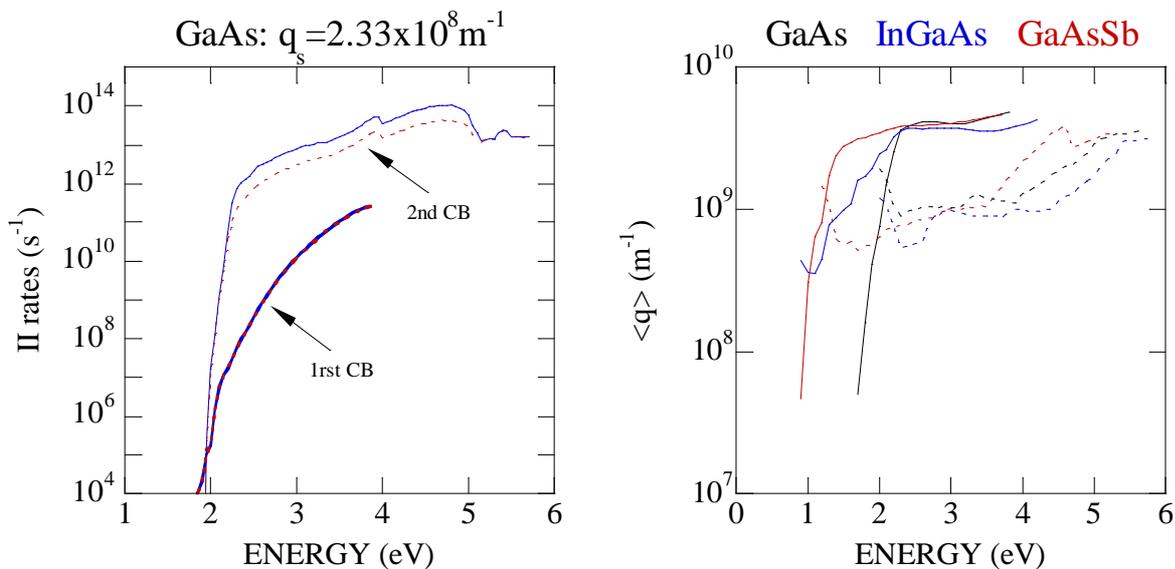


FIG. III.2.6 : Taux d'interaction par IPC dans GaAs avec (tirets) et sans (lignes) écrantage du potentiel (à gauche). Vecteurs d'onde échangés moyens pour un électron initiateur en 1^{ère} (lignes) et 2^{nde} (tirets) bande de conduction.

Expérimentalement, l'efficacité de l'IPC s'apprécie grâce au coefficient d'IPC, qui est l'inverse de la distance parcourue moyenne limitée par les processus d'IPC.

$$\alpha = \frac{\sum_{\vec{k}} w(\vec{k}) f_{\vec{k}}}{\sum_{\vec{k}} v(\vec{k}) f_{\vec{k}}} \quad (\text{III.2.12})$$

où $v(\vec{k})$ est la vitesse et $f_{\vec{k}}$ l'occupation de l'état \vec{k} . Dans la pratique, la vitesse est mesurée suivant l'axe d'application du champ électrique. Le coefficient d'IPC est donc le taux net d'IPC moyenné par la vitesse des porteurs. Un grand coefficient traduit alors des propriétés de transport détériorées par l'IPC. Ce coefficient est illustré dans la FIG. III.2.7. La détermination expérimentale du coefficient d'IPC est une opération délicate, ce qui donne lieu à des valeurs mesurées pouvant varier sur plusieurs décades. Cependant, un grand nombre de mesures permet d'estimer une plage de valeurs pour les coefficients calculés. Pour InGaAs, l'accord avec d'autres calculs [Choo04] [Bude92] et mesures [Ng03] [Osaka85] [Pearsall80] est excellent. Pour GaAs, l'accord avec d'autres calculs [Bude92] et mesures [Bulman85] [Groves03] [Pearsall78] est raisonnable. Aucune mesure du coefficient d'IPC n'a été trouvée pour GaAsSb. GaAsSb est le matériau qui montre le plus grand coefficient d'IPC sur la plage de champs électriques étudiée (de 100 à 500 kV/cm). Il sera donc le matériau qui montrera les propriétés de transport les plus affectées par les processus d'IPC à fort champ électrique.

Outre les effets de l'IPC sur les propriétés de transport, les effets sur les populations de porteurs sont également de grande importance. Il ne faut pas oublier que l'IPC est un processus de génération, laissant derrière lui un paire électron-trou supplémentaire. Ces paires électron-trou, en surplus par rapport aux densités de porteurs nominales des matériaux, vont se recombiner par la suite. Ces processus de recombinaison font l'objet de la prochaine section.

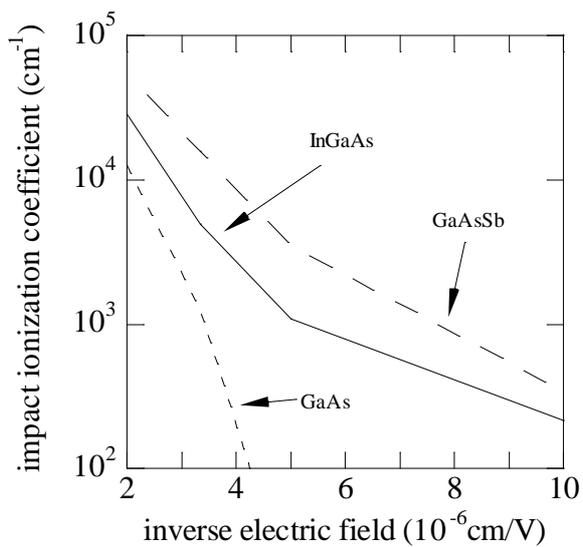
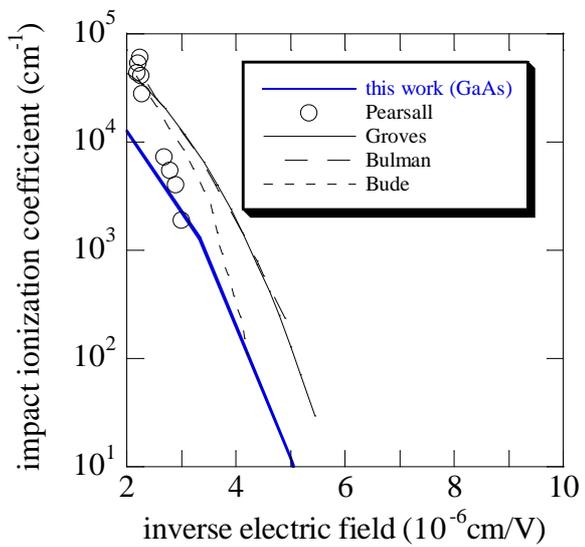
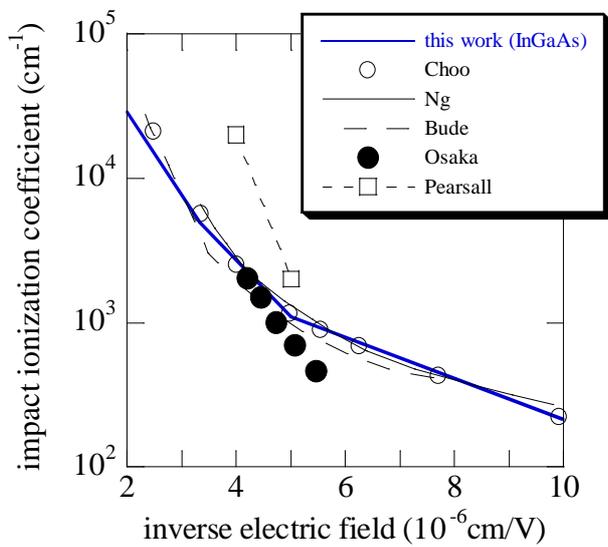


FIG. III.2.7 : Coefficient d'IPC dans InGaAs (en haut à gauche), GaAs (en haut à droite), et comparaison avec GaAsSb (en bas) en fonction de l'inverse du champ électrique appliqué.

3) Recombinaisons non radiatives : processus Auger

Tout système tend à retrouver son état d'équilibre, c'est pourquoi les paires électron-trou excédentaires peuvent se recombiner. Différents processus existent : la recombinaison radiative (c.f. section 1), la recombinaison via des états localisés appelé recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH, qui est processus pouvant nécessiter des phonons) et la recombinaison par effet Auger qui est le processus inverse à l'IPC. Il s'agit d'un processus non radiatif au cours duquel l'énergie de la recombinaison est transmise à un autre porteur (électron ou trou) qui se trouve alors excité vers un état de plus haute énergie. Les recombinaisons SRH requièrent des temps généralement beaucoup plus longs que la recombinaison radiative et l'effet Auger (dans InGaAs [Dutta82]). Ils sont donc moins efficaces et ne seront pas traités dans cette étude.

La dénomination « effet Auger » regroupe en réalité un ensemble disparate de processus. En effet, la paire électron-trou (k_1, k_1') qui se recombine, cède son énergie à un porteur k_2 (électron ou trou) excité vers un état k_2' via une transition intra ou inter bande. Dans un modèle à 3 bandes de conduction et 3 bandes de valence, cela donne $(3 \times 3) \times (3 \times 3 + 3 \times 3) = 162$ processus différents. Dans la pratique, certains de ces processus sont impossibles comme l'excitation d'un électron k_2 de la 3^{ème} bande de conduction vers la 1^{ère} à cause de l'agencement en énergie des bandes de conduction. Ces processus interdits sont exclus automatiquement par le programme développé en fonction de la structure électronique du matériau. Deux des processus théoriquement autorisés sont illustrés sur la FIG. III.3.1.

Comme pour l'IPC, la probabilité d'interaction par unité de temps par effet Auger se calcule à partir de la Règle d'or de Fermi et l'interaction coulombienne

$$S(k_1, k_1', k_2, k_2') = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{e^2}{\epsilon\Omega} \frac{I_{k_1, k_1'} I_{k_2, k_2'}}{q^2} \right|^2 \delta(E) \quad (\text{III.3.1})$$

avec

$$\begin{cases} E_x = E_{k_1} - E_{k_1'} = E_{k_2'} - E_{k_2} \\ \vec{q} = \vec{k}_1 - \vec{k}_1' = \vec{k}_2' - \vec{k}_2 \end{cases} \quad (\text{III.3.2})$$

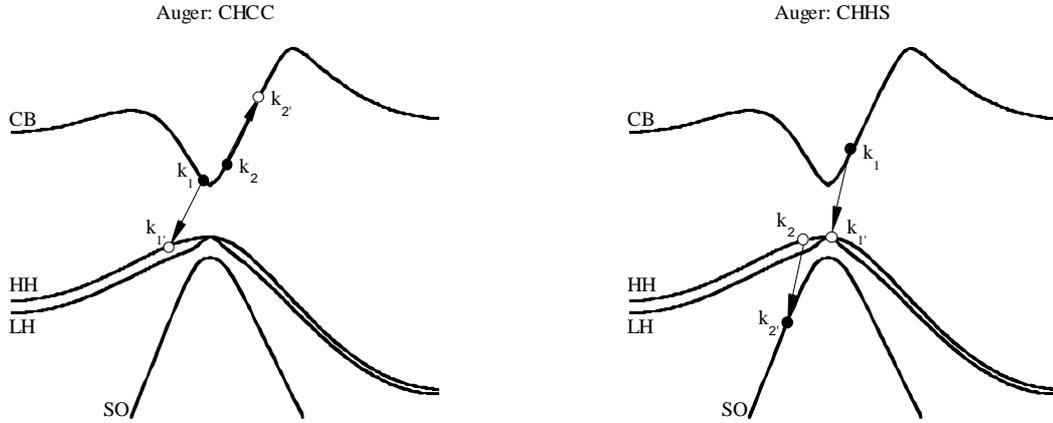


FIG. III.3.1 : Schéma de deux processus Auger. Un électron k_1 se recombine avec un trou k_1' . A gauche, l'énergie de la recombinaison est transférée à un électron k_2 excité vers un état de la même bande k_2' (CHCC). A droite, l'énergie de la recombinaison est transférée à un trou lourd k_2 excité vers un état de la bande split off k_2' (CHHS).

Le taux d'interaction est donné par

$$w(k_1) = \sum_{k_1, k_2, k_2'} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{e^2}{\epsilon\Omega} \frac{I_{k_1, k_1'} I_{k_2, k_2'}}{q^2} \right|^2 \delta(E) \quad (\text{III.3.3})$$

où la conservation de l'impulsion permet encore une fois d'enlever une dimension à la somme

$$w(k_1) = \sum_{k_1, k_2} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{e^2}{\epsilon\Omega} \frac{I_{k_1, k_1'} I_{k_2, k_2'}}{q^2} \right|^2 \delta(E) \quad (\text{III.3.4})$$

La signification de cette équation est assez simple. Pour l'électron k_1 , sont additionnés pour le taux d'interaction, les contributions de chaque recombinaison avec un trou k_1' couplée à l'excitation d'un porteur k_2 vers k_2' (dédit de la conservation de l'impulsion) respectant la conservation de l'énergie. Tirons avantage du fait que les populations d'électron des bandes de conduction et les trous des bandes de valence soient échantillonnées par des pseudoparticules dans l'EMC : $\frac{1}{\Omega} \sum_{k,s} f_{k,s} = \frac{N}{\Omega} = n$ où N est le nombre total d'états k occupés

avec n la densité correspondante, et s un indice repérant le spin. Cela donne donc

$\frac{1}{\Omega} \sum_{k,s} f_{k,s} = \frac{N}{\Omega} = n = \sum_k \frac{n}{N_{MC}}$ avec N_{MC} le nombre de pseudo particules de l'EMC qui

représente une densité n de porteurs. L'expression du taux d'interaction devient

$$w(k_1) = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{p}{P_{MC}} \sum_{k_1}^{MC} \left(\frac{x_2}{X_{MC2}} \sum_{k_2}^{MC} \left| \frac{e^2}{\varepsilon} \frac{I_{k_1,k_1} I_{k_2,k_2}}{q^2} \right|^2 \delta(E) \right) \right) \quad (\text{III.3.5})$$

où p fait référence aux trous des bandes de valence et x_2 aux électrons de conduction (processus type CVCC) ou aux trous des bandes de valences (processus type CVVV). Comme ce taux d'interaction doit être évalué pour chaque électron k_1 , le temps de calcul est, notamment, fonction de $N_{MC} \times P_{MC} \times (N_{MC} + P_{MC})$. Avec $N_{MC} = P_{MC} = 1000$ (ce qui correspond à un échantillonnage très grossier des populations de porteurs), le milliard de termes à sommer est aisément dépassé, chacun de ces termes impliquant un certains nombre (non négligeable) d'opérations ce qui mène à des temps de calcul extrêmement long (plusieurs jours). La recherche d'un état d'équilibre entre différents processus de génération et recombinaison, demandera de nombreuses évaluations du taux d'interaction par effet Auger pour chaque pseudoélectron. Il faut donc recourir à certaines approximations afin d'économiser du temps de calcul. Dans le cœur de (III.3.5) se trouvent les facteurs de recouvrement qui constituent la charge la plus significative. Le recours à des valeurs moyennes permet d'accélérer le calcul sans pour autant recourir à des paramètres d'ajustement. Un autre moyen de gagner encore plus de temps est de grouper les pseudoparticules entre elles. En d'autres termes, traiter en même temps les pseudoparticules se trouvant dans le même élément de volume de la zone de Brillouin discrétisée. Pour cela, il suffit de compter le nombre de pseudoparticules dans chaque élément de volume pour chaque bande X ($nb_{k_{box}}^X$) et faire courir les sommes dans (III.3.5) non pas sur les pseudoparticules mais sur les éléments de volume peuplés. Pour des raisons pratiques et de précision, la discrétisation est celle utilisée pour le calcul de l'énergie par interpolation dans le EMC Full-band. Cette méthode couplée à un calcul parallèle (OpenMP) permet de réduire le temps de calcul initial de plusieurs jours à seulement quelques heures, voire quelques minutes. Le temps de calcul dépend de la distribution des porteurs dans la zone Brillouin. Plus ils sont groupés (équilibre thermodynamique à basse température) plus le temps de calcul est court.

$$w(k_1) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^4}{\varepsilon^2} \left(\frac{p}{P_{MC}} \sum_{k_{1box}}^{nb_{k_{1box}}^V \neq 0} nb_{k_{1box}}^V \langle I_{k_1,k_1}^2 \rangle \left(\frac{x_2}{X_{MC2}} \sum_{k_{2box}}^{nb_{k_{2box}}^X \neq 0} nb_{k_{2box}}^X \frac{\langle I_{k_2,k_2}^2 \rangle}{q^4} \delta(E) \right) \right) \quad (\text{III.3.6})$$

Le taux de recombinaison Auger par unité de volume est obtenu en sommant (III.3.6) sur la population d'électrons k_1 voulant se recombinaison

$$W = \frac{2\pi e^4}{\hbar \epsilon^2} \frac{n}{N_{MC}} \sum_{k_{1box}}^{nb_{k_{1box}}^C \neq 0} nb_{k_{1box}}^C \left(\frac{p}{P_{MC}} \sum_{k_{1box}}^{nb_{k_{1box}}^V \neq 0} nb_{k_{1box}}^V \langle I_{k_1, k_1}^2 \rangle \right) \left(\frac{x_2}{X_{MC2}} \sum_{k_{2box}}^{nb_{k_{2box}}^X \neq 0} nb_{k_{2box}}^X \frac{\langle I_{k_2, k_2}^2 \rangle}{q^4} \delta(E) \right) \quad (\text{III.3.7})$$

Le coefficient Auger est alors donné par

$$C_x = W / (n \times p \times x_2) \quad (\text{III.3.8})$$

Ce qui permet de caractériser l'effet Auger est le temps de vie moyen d'une population de porteurs qui sera limité par les recombinaisons Auger (donc dans un matériau fortement dopé ou présentant des densités n et/ou p élevées). Il est donné de façon équivalente par

$$\begin{cases} \tau = \left(\sum^{process\ Auger} \langle w(k_1) \rangle \right)^{-1} \\ \tau = (C_n nn + C_p pp)^{-1} \end{cases} \quad (\text{III.3.9})$$

Abordons un point qui aidera à la comparaison des résultats calculés aux résultats expérimentaux. Le point commun entre les trois matériaux étudiés (GaAs, InGaAs et GaAsSb) est que le processus de recombinaison Auger le plus efficace est le processus CHHS (c.f. FIG. III.3.1) (par extension $C_p > C_n$). Une masse effective plus grande pour la bande HH que pour la bande SO et un « splitting » spin-orbit, résultent en des conditions favorables pour l'excitation d'un trou lourd vers la bande SO en échangeant un vecteur d'onde et une énergie issus de la recombinaison d'un électron en vallée Γ avec un trou lourd. En effet, une grande différence entre les masses effectives des bandes HH et SO additionné au « splitting » spin-orbit permet au trou excité de gagner un maximum d'énergie avec un minimum de vecteur d'onde échangé rendant les processus CHHS possibles avec des éléments de matrices significatifs (car inversement proportionnels à la norme au carré du vecteur d'onde échangé : $H \propto 1/q^2$). La prédominance des processus CHHS a été vérifiée expérimentalement [Hausser90]. Au regard de (III.3.9) on déduit que le temps de vie limité par les processus de recombinaison Auger dans le cas $n = p$ sera dominé par les processus CHHS et donc $C_{n=p} \simeq C_p$.

Les FIG. III.3.2 et III.3.3 montrent les temps de vie calculés de populations de porteurs à l'équilibre thermodynamique pour InGaAs (mesures dopé n : [Ahrenkiel98] [Metzger01]; et dopé p [Ahrenkiel98] [Vignaud07]), pour GaAs (mesures dopé n :

[Lush92] ; dopé p [Ahrenkiel01] [Nelson78]) et GaAsSb à 300K en fonction de la densité de porteur majoritaire. Les seules mesures disponibles concernant GaAsSb sont des cas dopé p [Bolognesi05] [Vignaud07]. Pour les calculs, la densité de porteurs minoritaires est fixée à $n = 1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Comme évoqué dans [Metzger01], dans InGaAs dopé n à partir de $n = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ les effets de dégénérescence (entre autre le principe d'exclusion de Pauli) des électrons ne permettent pas de caractériser le temps de vie Auger par une expression du type $\tau = (C_n n n)^{-1}$, fonction du carré de la densité d'électrons. En effet, une telle expression matérialise en quelque sorte l'approximation « élément de matrice constant ». Les effets de dégénérescence des électrons brisent cette approximation. Les trous, quant à eux, sont beaucoup moins affectés par les effets de dégénérescence car ils possèdent des densités d'états disponibles très grandes. Tant que le niveau de Fermi ne rentre pas significativement dans la bande, la distribution « spatiale » des électrons/trous dans la zone de Brillouin ne change que très peu quand la densité augmente, ce qui joue en faveur de l'« élément de matrice constant ». Pour InGaAs à 300K, les calculs donnent $C_n = 1.3 \times 10^{-30} \text{ cm}^6 / \text{s}$ (pour $n < 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$), $\tau_n = 1 / (8.9 \times 10^{-40} \times n^{2.5})$ (pour $n > 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) et $C_p = 1.2 \times 10^{-27} \text{ cm}^6 / \text{s}$. Ces valeurs, différentes pour InGaAs dopé n ou p , entourent la valeur commune mesurée $C_{n,p} = 8 \times 10^{-29} \text{ cm}^6 / \text{s}$ [Ahrenkiel98]. Cependant, elles se confrontent favorablement à des mesures montrant 4 ordres de grandeurs entre C_n et C_p [Henry84]. De plus, différentes mesures montrent C_n variant entre $5.0 \times 10^{-30} \text{ cm}^6 / \text{s}$ et $1.8 \times 10^{-28} \text{ cm}^6 / \text{s}$ [Metzger01] [Henry84]. Expérimentalement, C_p varie entre 8.1×10^{-29} et $5 \times 10^{-26} \text{ cm}^6 / \text{s}$ [Vignaud07] [Henry84] et $C_{n=p}$ varie entre 7×10^{-29} et $1.5 \times 10^{-28} \text{ cm}^6 / \text{s}$ [Gfroerer03] [Hauser90] [Sermage86].

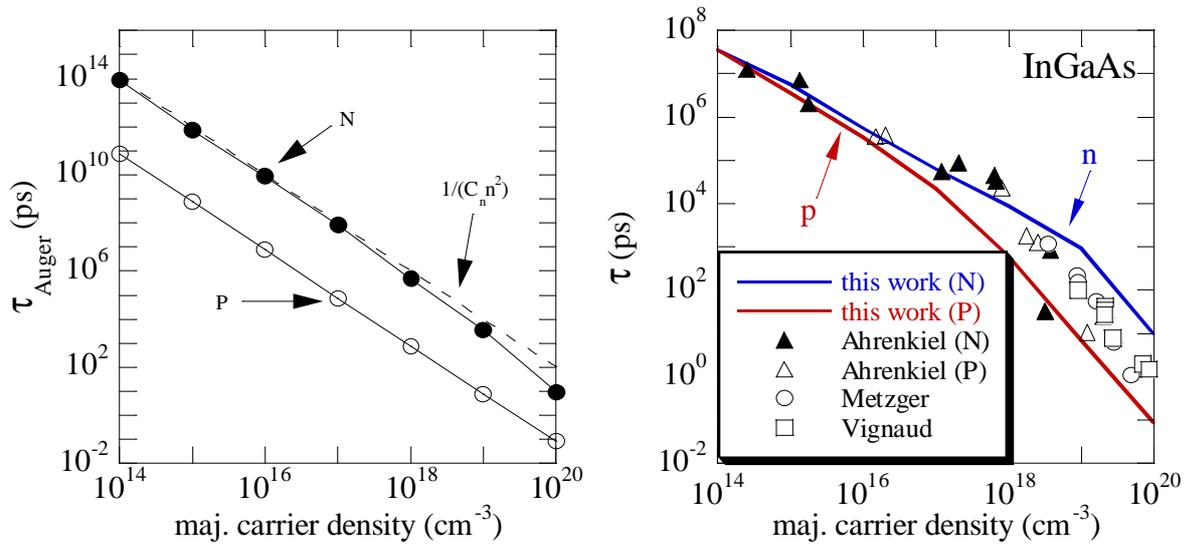


FIG. III.3.2 : Temps de vie dans InGaAs dopé n ou p en fonction de la densité de porteurs majoritaire. A gauche sont montrés les temps de vie Auger uniquement. A droite, la contribution de la recombinaison radiative a été ajoutée pour obtenir le temps de vie total.

Le coefficient Auger de GaAs dopé n montre les mêmes caractéristiques que celui de InGaAs. D'autant plus que pour $n > 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ les vallées satellites de GaAs commencent à être peuplés à 300K. Pour GaAs dopé n , le calcul donne $C_n = 1.4 \times 10^{-36} \text{ cm}^6 / \text{s}$ (pour $n < 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$), $\tau_n = 1 / (3.7 \times 10^{-51} \times n^3)$ (pour $n > 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$). Pour GaAs dopé p , $C_p = 3.2 \times 10^{-29} \text{ cm}^6 / \text{s}$.

Le cas de GaAsSb (dopé n) est un peu plus spécial. Rappelons que c'est un semiconducteur à gap direct mais avec des vallées L très basse en énergie. Pour GaAs et InGaAs, le temps de vie est limité par la recombinaison radiative puis par l'effet Auger au fur et à mesure que la densité d'électrons augmente. Cela donne lieu à un changement de pente sur la courbe du temps de vie en fonction de la densité (échelle log – log). Le passage de relais entre la recombinaison radiative et l'effet Auger dans GaAsSb ne se fait pas de façon aussi directe. En effet, au fur et à mesure que la densité augmente, la capacité de la population d'électrons totale à se recombiner radiativement avec des trous sature avant que l'effet Auger ne limite le temps de vie. Ceci est dû à la structure électronique de GaAsSb. A forte densité, mais pas assez élevée pour que l'effet Auger devienne significatif, une portion non négligeable de la population d'électrons ne se trouve plus en vallée Γ là où la recombinaison

radiative est effective, mais est transférée en vallée L là où la densité d'états accessible est beaucoup plus élevée. Il y a peu de mesures auxquelles confronter les résultats calculés :

$$C_n = 3.0 \times 10^{-32} \text{ cm}^6 / \text{s} \quad (\text{pour } n < 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}), \quad \tau_n = 1 / (3.3 \times 10^{-38} \times n^{2.4}) \quad (\text{pour } n > 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3})$$

$$\text{et } C_p = 1.4 \times 10^{-27} \text{ cm}^6 / \text{s}.$$

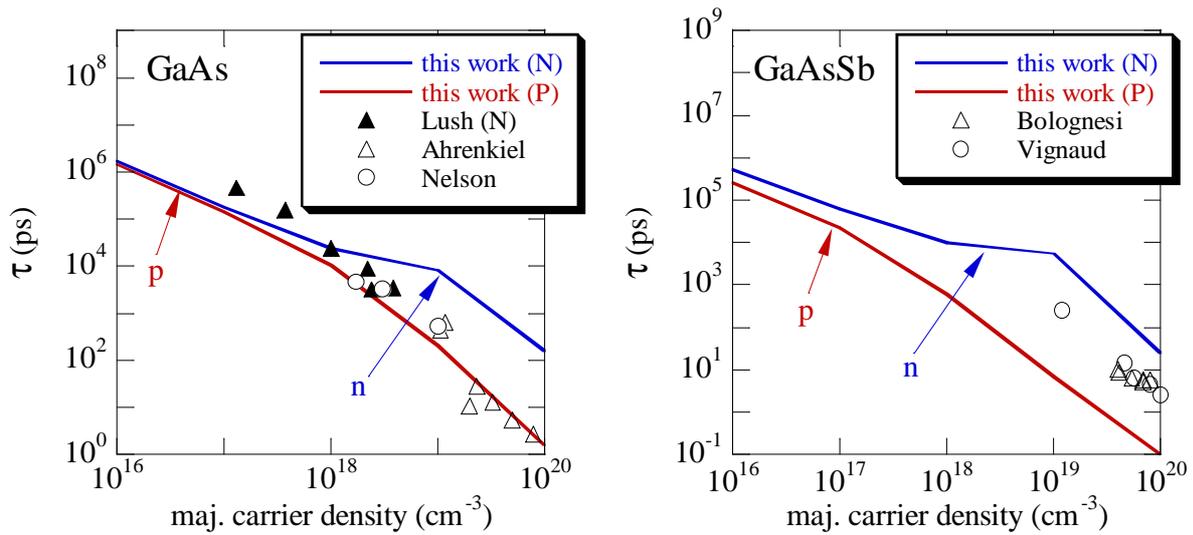


FIG. III.3.3 : Temps de vie total (radiatif+Auger) dans GaAs (à gauche) et GaAsSb (à droite) dopé n ou p en fonction de la densité de porteurs majoritaire. Les symboles pleins représentent des mesures sur des matériaux dopés n. Les symboles vides représentent des mesures sur des matériaux dopés p.

4) Conclusion

Dans ce chapitre, les processus de génération et recombinaison de porteurs de charge ont été abordés. Un soin particulier a été apporté à l'implémentation dans l'EMC afin qu'avec une structure électronique donnée, aucun paramètre superflus soit nécessaire. Les intégrales gouvernant les processus de recombinaison sont évaluées directement sur les distributions de porteurs fournies par l'échantillonnage de l'EMC, et celles gouvernant les processus de génération sont évaluées sur la structure électronique. Les facteurs de recouvrement intra et inter bande calculés par l'EPM. Les modèles développés permettent d'assurer des calculs sans ajustement ni paramétrage, et permettent également de modéliser des populations de porteurs variables. De plus, ces implémentations permettent de rester fidèle à la « philosophie » EMC. Ainsi, les distributions de probabilités pour le choix des particules/états initiaux et finaux sont extraites des taux d'interaction évalués sur l'ensemble structure électronique – distributions de porteurs EMC. La méthode développée pour évaluer l'absorption dépend uniquement de l'intensité de l'excitation optique. Cela permettra de traiter une absorption variable sur un large spectre (corps noir, CHAPITRE VI), et pas seulement l'absorption due à une excitation spectralement fine comme un laser (CHAPITRE V). L'implémentation des processus d'ionisation par choc et Auger permet de traiter ces phénomènes d'égal à égal sans avoir à recourir à des paramètres effectifs. Ainsi, la balance entre les deux, qui n'est pas forcément équilibrée, est prise en charge dans l'EMC de façon naturelle, cohérente et automatique.

Référence Bibliographiques :

- [Adachi92] S. Adachi,
« Physical Properties of III-V Semiconductors Compounds »,
(John Wiley and Sons, 1992)
- [Ahrenkiel92] R. K. Ahrenkiel et al.,
J. Vac. Sci. Technol. A 10, 990 (1992)
- [Ahrenkiel98] R. K. Ahrenkiel, R. Ellington, S. Johnston and M. Wanlass,
Appl. Phys. Lett. 72, 3470 (1998)
- [Ahrenkiel01] R. K. Ahrenkiel et al.,
Appl. Phys. Lett. 78, 1879 (2001)
- [Anderson72] C. L. Anderson and C. R. Crowell,
Phys. Rev. B 5, 2267 (1972)
- [Bolognesi05] C. R. Bolognesi et al.,
Appl. Phys. Lett. 86, 253506 (2005)
- [Bude92] J. Bude and K. Hess,
J. Appl. Phys. 72, 3554 (1992)
- [Casey75] H. C. Casey, D. D. Sell and K. W. Wecht,
J. Appl. Phys. 46, 250 (1975)
- [Choo04] K. Y. Choo and D. S. Ong,
J. Appl. Phys. 96, 5649 (2004)
- [Dutta82] N. K. Dutta and R. J. Nelson,
J. Appl. Phys. 53, 74 (1982)
- [Gfroerer03] T. H. Gfroerer, L. P. Priestley, M. F. Fairley and M. W. Wanlass,
J. Appl. Phys. 94, 1738 (2003)
- [Groves03] C. Groves, R. Ghin, J. P. R. David and G. J. Rees,
IEEE Trans. Electron. Devices 50, 2027 (2003)
- [Harrison99] D. Harrison, R. A. Abram and S. Brand,
J. Appl. Phys. 85, 8186 (1999)
- [Hausser90] S. Hausser et al.,
Appl. Phys. Lett. 56, 913 (1990)
- [Henry84] C. H. Henry, R. A. Logan, F. R. Merrit and C. G. Bethea,
Electron. Lett. 20, 358 (1984)
- [Kane67] E. O. Kane,
Phys. Rev. 159, 624 (1967)

- [Keldysh60] L. V. Keldysh,
Sov. Phys. JETP 10, 509 (1960)
- [Kuligk05] A. Kuligk, N. Fitzer and R. Redmer,
Phys. Rev. B 71, 085201 (2005)
- [Kuzmany98] H. Kuzmany,
« Solid-State Spectroscopy »,
(Springer Verlag, 1998)
- [Lush92] G. B. Lush et al.,
J. Appl. Phys. 72, 1436 (1992)
- [Metzger01] W. K. Metzger et al.,
Appl. Phys. Lett. 79, 3272 (2001)
- [Nelson78] R. J. Nelson and R. G. Sobers,
J. Appl. Phys. 49, 6103 (1978)
- [Ng03] J. S. Ng et al.,
IEEE Trans. Electron. Devices 50, 901 (2003)
- [Osaka85] F. Osaka, T. Mikawa and T. Kaneda,
IEEE J. Quant. El. 21, 1326 (1985)
- [Pearsall78] T. P. Pearsall et al.,
Solid State Electron. 21, 297 (1978)
- [Pearsall80] T. P. Pearsall,
Appl. Phys. Lett. 36, 218 (1980)
- [Picozzi02] S. Picozzi, R. Asahi, C. B. Geller and A. J. Freeman,
Phys. Rev. Lett. 89, 197601 (2002)
- [Puhlmann91] N. Puhlmann, G. Oelgart, V. Gottschalch and R. Nemitz,
Semicond. Sci. Technol. 6, 181 (1991)
- [Ridley99] B. K. Ridley,
« Quantum Processes in Semiconductors »,
4th edition (Oxford University Press, 1999)
- [Sano92] N. Sano and A. Yoshii,
Phys. Rev. B 45, 4171 (1992)
- [Sermage86] B. Sermage, D. S. Chemla, D. Sivco and A. Y. Cho,
IEEE J. Quant. El. 22, 774 (1986)
- [Stobbe91] M. Stobbe et al.,
Phys. Rev. B 44, 11105 (1991)

[Stobbe94] M. Stobbe, R. Redmer and W. Schattke,
Phys. Rev. B 49, 4494 (1994)

[Vignaud07] D. Vignaud et al.,
Appl. Phys. Lett. 90, 242104 (2007)

CHAPITRE IV : ELECTRONS MINORITAIRES

Dans des semi-conducteurs fortement dopés (n ou p), les propriétés de transport de l'espèce minoritaire sont dégradées par la diffusion des ces porteurs de charge sur les atomes dopant (interaction porteur-impureté ionisée), et les collisions porteur minoritaire-porteur majoritaire (interaction porteur-porteur). De forts niveaux de dopages de l'ordre de 10^{19} cm^{-3} sont notamment rencontrés dans les bases de Transistors Bipolaires à Hétéro-jonction (TBH). Une modélisation satisfaisante de ces processus de diffusion est donc nécessaire pour des travaux ultérieurs d'analyse et d'optimisation de composants où le transport des minoritaires est clef. Pour les interactions porteur-impureté ionisée, deux niveaux d'approche sont ici considérés : le modèle de Brooks-Herring, et le modèle phase-shift (CHAPITRE II). En ce qui concerne les interactions porteur-porteur, la prise en compte des collisions élastiques n'est peut-être pas suffisante. En effet, lorsque les densités de porteurs de charge sont élevées, le comportement collectif des porteurs donne naissance à des oscillations du plasma (plasmons). Comme les phonons, les plasmons peuvent interagir avec les porteurs. Du point de vue d'un porteur, les phonons et les plasmons sont donc deux systèmes d'excitation distincts (excitation dans le sens où un porteur va relaxer en excitant un mode de phonon ou de plasmon). Toutefois, un couplage entre les systèmes Phonon Optique Polaire (POP) et plasmons dû à leur nature électromagnétique peut avoir lieu. Ce couplage est particulièrement prononcé lorsque les énergies des POP et des plasmons sont proches et donne lieu à des modes d'excitation hybrides (Longitudinal Optical phonon-Plasmon Coupled Modes (LOPCM)). Cela a été étudié théoriquement [Varga65] [Kim78] et expérimentalement sur GaAs et $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ dopés n (plasmons d'électrons) et dopés p (plasmons de trous) [Mooradian66] [Fukasawa94] [Cusco01] [Mintairov97]. Ce couplage a déjà été utilisé pour étudier la mobilité des électrons minoritaires dans GaAs et $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ avec une méthode itérative [Kaneto93], et des électrons majoritaires dans des puits AlGaIn/GaN [Farvacque05] avec une approche basée sur une définition rigoureuse du temps de relaxation [Farvacque00]. La suite de ce chapitre se focalise sur l'effet de ce couplage sur la mobilité des électrons minoritaires avec une approche EMC dans GaAs, $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ et $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$. Ce dernier est un matériau prometteur pour les Transistors avec des Hetero-jonctions [Bolognesi99] [Bolognesi01]. En effet, dans un Transistor InP/ $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$ /InP, l'hétéro-jonction de type II à l'interface $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$ /InP permet une injection très efficace des électrons de la base (en $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$) vers le collecteur (en InP). Ceci est illustré par le diagramme de bandes sur la FIG. IV.0.1.

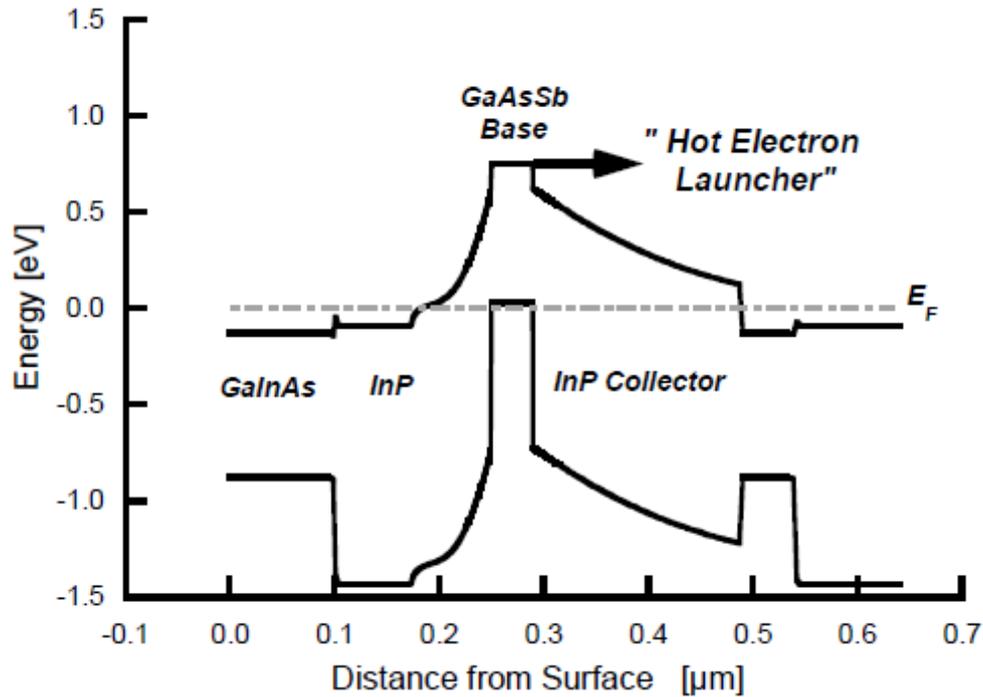


FIG. IV.0.1 : Diagramme de bandes d'un Transistor InP/GaAs_{0.50}Sb_{0.50}/InP (reproduit à partir de [Bolognesi08]).

Ce type d'injection est un atout indéniable pour les Transistors InP/GaAs_{0.50}Sb_{0.50}/InP. Afin de pouvoir mener de futures études et optimisations de ce type de Transistor, il est, entre autre, nécessaire de connaître les propriétés de transport des électrons minoritaires dans la base en GaAs_{0.50}Sb_{0.50} dopée p. Cependant, contrairement à GaAs et In_{0.53}Ga_{0.47}As aucune donnée concernant ses propriétés transport n'est disponible. L'outil de modélisation prend alors ici toute son importance. Ce chapitre fait donc suite au CHAPITRE I où la structure électronique de GaAs_{0.50}Sb_{0.50} a été calculée malgré le manque de données expérimentales. L'approche développée pour la prise en compte du couplage entre les Phonons Optiques Polaires et les plasmons sera dans un premier temps validée sur le transport des électrons minoritaires dans GaAs et In_{0.53}Ga_{0.47}As qui sont des matériaux qui ont été abondamment caractérisés.

1) Fonction diélectrique totale et couplage phonon-plasmon

Afin de prendre en compte le couplage POP - plasmon proprement, la fonction diélectrique totale (porteurs de charges et réseau cristallin) est calculée. En effet, elle va servir

à décrire la réponse du système total à une excitation de vecteur d'onde \vec{q} et pulsation ω (en unité de la permittivité du vide ϵ_0):

$$\epsilon_T(q, \omega) = \epsilon_\infty + \epsilon_{res}(\omega) + \epsilon_e(q, \omega) + \epsilon_h(q, \omega) \quad (IV.1.1)$$

avec $\epsilon_\infty + \epsilon_{res}$ la fonction diélectrique relative du réseau cristallin, et $\epsilon_{e,h}$ les contributions à la susceptibilité dues aux électrons et aux trous. En adoptant le modèle d'Einstein pour les phonons optiques (fréquence de vibration constante sur la 1ère zone de Brillouin, indépendante de \vec{q}), la partie réseau cristallin est donnée par

$$\epsilon_{res}(\omega) = \frac{(\epsilon_s - \epsilon_\infty)\omega_t^2}{(\omega_t^2 - \omega^2) + i\omega\Gamma_p} \quad (IV.1.2)$$

où ϵ_s et ϵ_∞ sont respectivement les constantes diélectriques relatives dites statique et infinie, ω_t la pulsation du phonon optique transverse et Γ_p la constante d'amortissement des phonons optiques. Les susceptibilités des porteurs sont données par le modèle de Mermin qui tient compte des collisions donnant lieu à l'amortissement [Mermin70]

$$\epsilon_{i=e,h}(q, \omega) = \frac{(1 + i\Gamma_i/\omega)\chi_i(q, \omega + i\Gamma_i)}{1 + (i\Gamma_i/\omega)[\chi_i(q, \omega + i\Gamma_i)/\chi_i(q, 0)]} \quad (IV.1.3)$$

où les χ_i sont les susceptibilités du premier ordre, et les Γ_i les constantes d'amortissement. Dans la Random Phase Approximation (RPA), les susceptibilités des porteurs de charge sont données par

$$\chi_{i=e,h}(q, \omega + i\Gamma_i) = \frac{e^2}{\Omega\epsilon_0q^2} \sum_{\vec{k}} I_{k,k+q}^2 \frac{f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}+\vec{q}}}{E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}} - \hbar\omega + i\hbar\Gamma_i/2} \quad (IV.1.4)$$

où $I_{k,k+q}^2$ est le facteur (au carré) de recouvrement des parties périodiques des ondes de Bloch entre les états \vec{k} et $\vec{k} + \vec{q}$. La somme dans Eq. (IV.1.4) court sur les bandes HH, LH et SO en incluant les transitions intra- et inter-bande pour la susceptibilité des trous. Pour les électrons, elle couvre les transitions intra-vallée pour Γ , L et X.

Ce modèle décrivant le couplage phonon-plasmon dépend de la structure de bande du matériau, (connue) des énergies des POP (connues) et des constantes d'amortissement (inconnues). Γ_p est la constante d'amortissement dans l'équation du mouvement de l'oscillateur harmonique utilisée dans le calcul de la fonction diélectrique (IV.1.2). Elle peut être mesurée (largeur de pics Raman) mais dans la pratique, elle est ajustée en calculant le taux d'interaction porteur-POP. Nous avons adopté cette approche car le taux d'interaction porteur-POP (modèle analytique de Fröhlich) peut être établi à partir du taux d'interaction

porteur-LOPCM dans la limite où Γ_p tend vers zéro et où les porteurs ne contribuent pas à la fonction diélectrique (faibles densités de porteurs). De plus, il est assez difficile d'assigner une valeur finie à Γ_p d'après le modèle analytique seul car il y est supposé tendre vers zéro, ce qui permet la manipulation analytique des équations. Dans la susceptibilité des porteurs (IV.1.4), Γ_i est relié au « temps de vie » de la perturbation donnant lieu à la réponse des porteurs. Dans le cas de plasmons/LOPCM, la perturbation est due aux fluctuations dans le gaz de porteurs lui même. Ce qui va détruire ces fluctuations (sans parler d'autres fluctuations) est la redistribution des porteurs due aux processus de diffusion (collisions). Alors $\Gamma_i = 1/\tau_i$, l'inverse du temps de relaxation du moment. Ce choix a été suggéré par Meyer et Bartoli [Meyer83] mais sans qu'aucune explication dans l'article ne vienne le motiver. Γ_e and Γ_h seront, dans la suite, évaluées de façon auto-cohérente dans l'EMC à partir des populations échantillonnées d'électrons et de trous. Le temps de relaxation du moment est donné par (condition d'équilibre avec le champ électrique) :

$$\tau_m = \frac{\langle p_x \rangle}{eF_x} \quad (\text{IV.1.5})$$

où $\langle p_x \rangle$ est l'impulsion moyenne parallèle au champ électrique \vec{F}_x .

La fonction diélectrique totale (IV.1.1) est un tenseur où q est un vecteur et ω un scalaire. Son évaluation répétée durant les simulations EMC représente une charge de calcul très lourde. De plus, la discrétisation de l'espace réciproque pour \vec{q} qui doit en même temps couvrir une zone relativement large tout en restant précise dans la zone $\vec{q} \rightarrow 0$ représente une charge de mémoire considérable. En effet, les bandes de valence étant caractérisées par des masses effectives beaucoup plus grandes que celle de la vallée Γ de la 1^{ère} bande de conduction, les \vec{q} impliqués dans les interactions trou-LOPCM sont beaucoup plus grands que ceux impliqués dans les interactions électron-LOPCM. Cependant, pour les calculs de mobilité, le champ électrique appliqué est faible. Les distributions de porteurs ne doivent donc pas trop s'éloigner de leur forme d'équilibre thermique. On considère donc que la fonction diélectrique totale est isotrope dans l'espace réciproque. Le passage de $\epsilon_T(\vec{q}, \omega)$ à $\epsilon_T(q, \omega)$ est opéré en moyennant la valeur $\epsilon_T(\vec{q}, \omega)$ suivant différentes direction de \vec{q} .

2) Taux d'interaction et états finals après diffusion

Dans le cadre du théorème de dissipation-fluctuation, la probabilité par unité de temps et le taux d'interaction porteur-LOPCM sont respectivement donnés par [Ridley99]

$$S_{LOPCM}(k, k') = \frac{2\pi}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^2}{\Omega q^2} \text{Im} \left(-\frac{1}{\varepsilon_T(q, \omega)} \right) (N_{LOPCM}(\omega) + 1) \delta(E - \hbar\omega - E') \frac{d\hbar\omega}{\pi} \quad (\text{IV.2.1})$$

$$W_{LOPCM}(k) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int S_{LOPCM}(k, k') d^3k' \quad (\text{IV.2.2})$$

où k et k' sont les états initial et final du porteur incident, $N_{LOPCM}(\omega) = 1/(\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1)$ le facteur de Bose-Einstein pour le mode couplé d'énergie $\hbar\omega$ et où $\delta(E - \hbar\omega - E')$ assure la conservation de l'énergie (les processus d'émission et d'absorption correspondent aux valeurs de ω positives et négatives respectivement avec la propriété $N(-\omega) + 1 = -N(\omega)$). Remarquons que la fonction spectrale $\text{Im}(-1/\varepsilon_T)$ apparaît explicitement dans la probabilité d'interaction (IV.2.1).

Les modes d'oscillations libres d'un système sont habituellement donnés par les zéros de la partie réelle de la fonction diélectrique totale ($\text{Re}(\varepsilon_T(q, \omega)) = 0$), zones du plan (q, ω) où le système ne répond pas. Cependant, à cause de l'amortissement dans le système phonons/plasmons, les modes hybrides (en tant qu' « excitations du système ») sont donnés par une fonction spectrale non nulle ($\text{Im}(-1/\varepsilon_T(q, \omega)) \neq 0$). Dans la limite $\Gamma_p \rightarrow 0$, $\text{Im}(-1/(\varepsilon_\infty + \varepsilon_{res}(\omega)))$ présente des pics aux fréquences d'oscillation libre du système phonon. Pour des valeurs d'amortissement finies, les modes d'excitations du système couplé phonon/plasmon ne sont pas repérés par des pics de Dirac de $\text{Im}(-1/\varepsilon_T)$ dans le plan (q, ω) . En effet, l'amortissement élargit les pics. Le volume sous $\text{Im}(-1/\varepsilon_T(q, \omega))$ est donc intégré durant le calcul des taux d'interaction, menant à des contributions de modes ne correspondant pas forcément aux maxima de $\text{Im}(-1/\varepsilon_T(q, \omega))$.

La complexité de (IV.2.1) proscrit toute formulation analytique pour le choix de l'état final d'un porteur après interaction avec un LOPCM. De plus recalculer la distribution de probabilité de l'état final à chaque interaction ou garder en mémoire les contributions de chaque élément de l'espace réciproque discrétisé pour le calcul de (IV.2.2) prendrait trop de temps, et/ou trop de mémoire. Un moyen simple de palier à ce problème est d'abandonner le

principe de tirage aléatoire (respectant une distribution de probabilité) et de recourir à des valeurs moyennes. Pour le choix de l'angle de diffusion, cette idée est traduite par

$$\langle \cos \theta_s \rangle (E_k) = \frac{\int \cos(\theta_{k,k'}) S_{LOPCM}(k, k') d^3 k'}{\int S_{LOPCM}(k, k') d^3 k'} \quad (\text{IV.2.3})$$

où $\theta_{k,k'}$ est l'angle séparant les vecteurs d'onde initial et final, et θ_s l'angle de diffusion moyen. L'énergie moyenne transférée entre le porteur incident et un mode couplé est calculée de façon similaire. Elle n'est pas constante et dépend de l'énergie du porteur incident. Eq. (IV.2.3) constitue une moyenne pondérée afin que les éléments dominant la somme dans (IV.2.2) dominent également dans les valeurs moyennes calculées. Pour des raisons pratiques, les processus d'émission et d'absorption sont traités séparément. Les résultats de la section suivante ont tous été calculés pour un champ électrique de 0,2 kV/cm. Cette valeur est assez faible pour que les porteurs restent en régime de mobilité (distributions peu perturbées) et également assez élevée pour que la population discrétisée de trous dans l'EMC montre une orientation significative suivant le champ pour des temps de calcul raisonnables.

3) Résultats

a) méthode numérique

Les paramètres d'amortissement Γ_e et Γ_p sont calculés de façon auto-cohérente dans l'EMC. Comme de prime abord ces paramètres sont inconnus, à l'instant zéro les populations de porteurs sont initialisées à l'équilibre thermique. Le système évolue ensuite sans le couplage phonon-plasmon pendant le premier pas de temps simulé Δt_{SC0} suffisant pour que les populations de porteurs atteignent un équilibre avec le champ électrique. On obtient alors un aperçu des valeurs de Γ_e et Γ_p , injectées dans le calcul de la fonction diélectrique totale. L'EMC continue alors mais cette fois avec le couplage phonon-plasmon. A l'issue du pas de temps Δt_{SC} , Γ_e et Γ_p sont réévalués et ainsi de suite jusqu'à « convergence » des résultats.

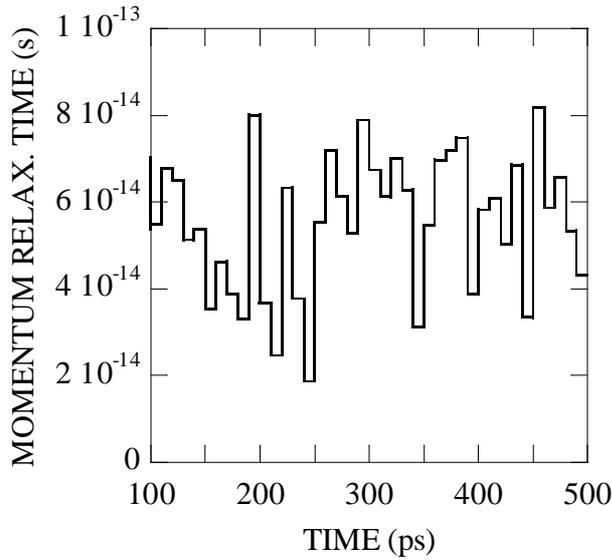


FIG. IV.3.a.1 : Temps de relaxation du moment pour les trous dans GaAsSb en fonction du temps simulé.

Le choix des pas de temps Δt_{sc0} et Δt_{sc} dépend du matériau. En effet, pour GaSb et GaAsSb Δt_{sc0} peut atteindre 100 ps , le temps que la population d'électrons (qui est au début initialisée en vallée Γ), se répartisse correctement entre les vallées Γ et L. Δt_{sc} est de l'ordre de 10 ps pour tout les matériaux. Les propriétés de transport calculées sont extrêmement sensibles à la fonction spectrale. En effet, l'amplitude de $\text{Im}(-1/\epsilon_T(q,\omega))$ dépend des paramètres d'amortissement, tandis que sa forme dans le plan (q,ω) dépend des distributions des porteurs dans l'espace réciproque. La FIG. IV.3.a.1 montre que le temps de relaxation du moment peut varier du simple au quadruple pour $P = 5000$ pseudo-trous représentant une densité de trous $p = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. L'idéal serait évidemment de trouver le ratio p/P pour lequel les résultats n'ont pas de mal à converger puis d'augmenter linéairement le nombre de pseudo-trous avec la densité. Comme dans notre étude du transport des électrons minoritaires la densité de trous peut varier sur au moins 4 décades, ceci est difficilement envisageable si l'on veut rester dans des temps de calculs raisonnables. La stratégie adoptée est donc de simuler des temps plus long afin de pouvoir tirer des moyennes temporelles claires. Ce choix implique que dans ces calculs, les régimes transitoires n'ont pas de sens et seul le régime stationnaire peut être considéré. Ceci est évidemment sans conséquences car ici on s'intéresse aux propriétés de transport en régime stationnaire.

b) fonction spectrale $\text{Im}(-1/\epsilon_T)$

La FIG. IV.3.b.1 montre les fonctions spectrales dans le plan (q, ω) calculées à partir des populations de porteurs en régime stationnaire pour $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3} \leq p \leq 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ dans GaAs. La fonction spectrale décrit les excitations possibles des porteurs (électrons et trous) par les modes couplés (phonons et plasmons) par $\text{Im}(-1/\epsilon_T) \neq 0$, ce qui se traduit par une contribution non nulle au taux d'interaction (IV.2.2). En traits épais apparaissent les bords de la zone dite de Single Particle Excitation (SPE). Il s'agit de la zone définie pour une population de porteur à 0K à l'intérieur de laquelle une excitation caractérisée par (q, ω) peut être absorbée par un porteur seul et caractérise donc une zone où l'écrantage par ces porteurs est effectif. Ici, la totalité de la population de trous reportée dans la vallée HH caractérisée par une masse effective et un coefficient de non parabolicité a été utilisée pour tracer les bords de la SPE. Pour étudier la fonction spectrale il faut également avoir en tête les fréquences plasmon définies ici par $\omega_{\text{plas}} = \sqrt{pe^2 / m_{\text{HH}}^* \epsilon_s}$. Elles sont listées dans la description de la FIG. IV.3.b.1.

Sans les contributions des porteurs à la fonction diélectrique totale, seules celles dues aux phonons sont présentes. Dans ce cas, la structure de $\text{Im}(-1/\epsilon_T)$ consisterait alors en un pic de $\text{Im}(-1/\epsilon_T)$ à l'énergie du POP qui s'étendrait à toutes les valeurs de q , que j'appellerai de façon picturale « ridge phononique ». Cela est à peu près le cas pour $p = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Le couplage phonon-plasmon est faible dans le sens où l'interaction porteur-LOPCM est quasiment de type porteur-POP, sauf à faible q où l'on voit se manifester un « petit » mode de type plasmon. A $p = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ d'autres structures apparaissent dans la fonction spectrale : les LOPCM. En effet, ils sont situés de part et d'autre du ridge phononique et sont souvent nommés d'après leur énergie par rapport à celle du POP : « upper mode » (UM) et « lower mode » (LM). Près de l'énergie du POP, les modes hybrides sont plutôt de type phonon, et plutôt de type plasmon pour des énergies plus éloignées [Ridley99]. Le UM est donc un mode de type phonon tandis que le LM est un mode de type plasmon. Il faut noter que le LM ne rentre pas dans la SPE car il y est fortement écranté. Le UM est, quant à lui, augmenté à cause de l'« anti-screening » [Ridley99]. Ce phénomène apparaît lorsque la fréquence plasmon est inférieure à celle du POP. Les charges ne se déplacent alors pas assez vite pour écranter le POP, et peuvent même faire l'inverse. A $p = 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, les modes hybrides sont tous écrantés dans la SPE (incluant une partie du ridge phononique). La

fréquence plasmon étant comparable à celle du POP, l'anti-screening a disparu. On remarquera que le UM désormais de type plasmon est très mal défini : il s'étale sur une large plage d'énergie indiquant un fort amortissement dans le système. A $p = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ la fonction spectrale présente des caractéristiques similaires à la fonction spectrale pour $p = 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Cependant, le LM se réduit seulement à ce qui reste du ridge phononique après écrantage. En effet, la densité de trous étant élevée, la SPE est très étendue. Le UM est à plus haute énergie et est encore plus étalé.

On peut d'ores et déjà dégager des tendances à partir des fonctions spectrales. En régime de mobilité, les électrons minoritaires se trouveront au fond de la vallée Γ avec une énergie moyenne de $3k_B T / 2 \approx 40 \text{ meV}$ à 300K. Cette vallée a un diamètre maximal d'environ $6 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$ à 3 eV dans les III-V étudiés. A 40 meV la norme du vecteur d'onde correspondant est $2.5 \times 10^8 \text{ m}^{-1}$. Grossièrement, la borne supérieure de la norme du vecteur d'onde échangeable avec les LOPCM est donc $5 \times 10^8 \text{ m}^{-1}$. Le couplage phonon-plasmon aura alors un grand impact sur le transport des minoritaires car la plage de vecteurs d'onde pouvant être émis ou absorbés par les électrons se trouvent dans la zone où le couplage plasmon de trous – phonon se manifeste et modifie fortement la fonction spectrale. Cette zone est en général hors et à gauche de la SPE des trous, et est grossièrement indiquée sur la FIG. IV.3.b.1(d) par une zone rouge.

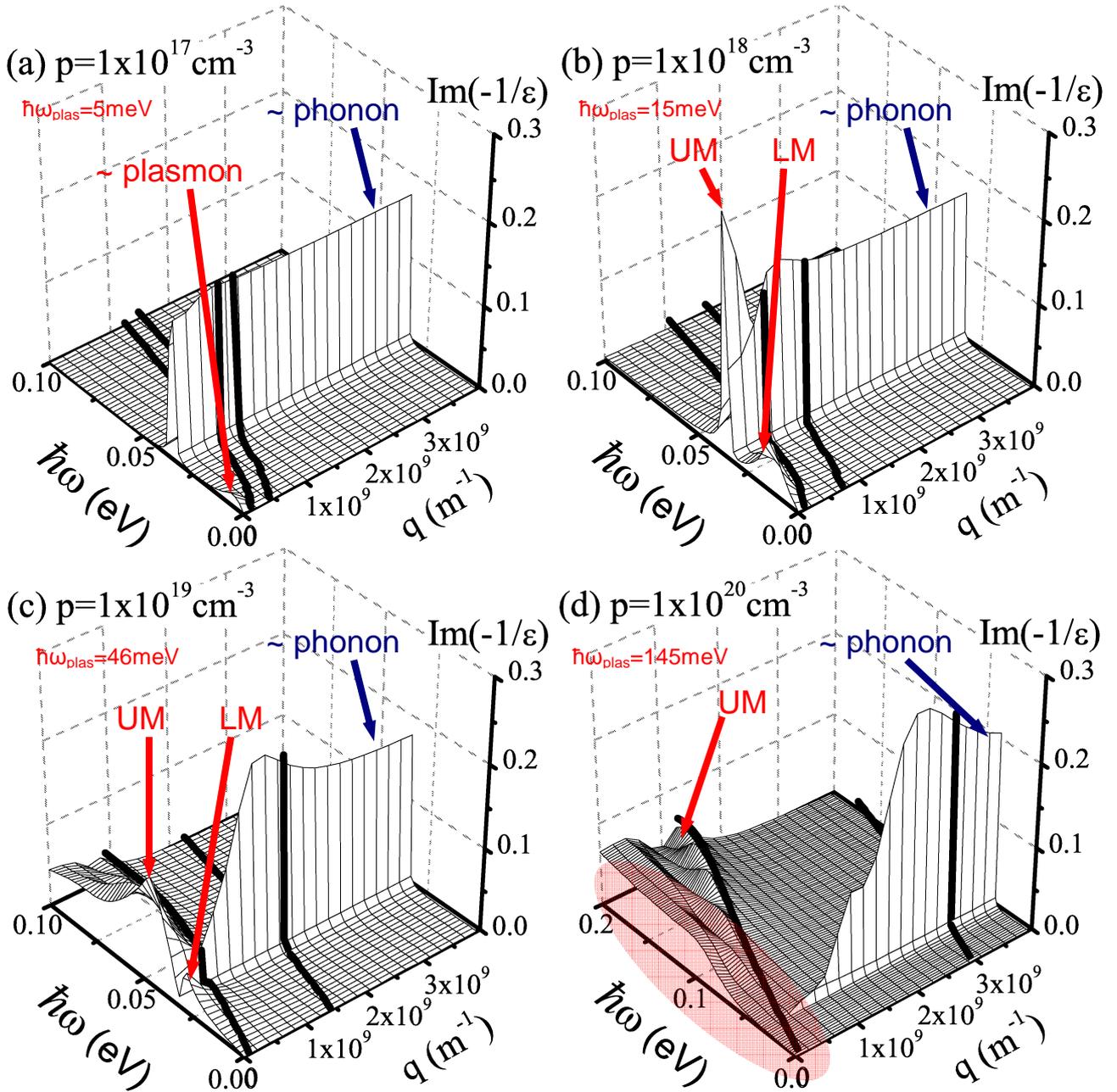


FIG. IV.3.b.1 : Fonctions spectrales $\text{Im}(-1/\epsilon_T(q, \omega))$ calculées à partir des populations de porteurs en régime stationnaire pour différentes densités de trous dans GaAs.

Les traits épais tracés sur les surfaces dans le plan (q, ω) représentent les bords de la SPE.

Les structures de $\text{Im}(-1/\epsilon_T(q, \omega))$ dues aux modes d'excitations de type phonon et plasmon non couplés (à l'énergie du phonon optique polaire et du plasmon) sont annotée par « ~ phonon » et « ~ plasmon » respectivement, et servent de guide pour les yeux.

Les structures de $\text{Im}(-1/\epsilon_T(q, \omega))$ dues aux modes hybrides sont annotée par « UM / LM ».

La plage d'énergie représentée est plus large dans (d).

Les fréquences plasmons ω_{plas} sont 5, 15, 46, 145 meV pour (a), (b), (c) et (d) respectivement.

c) taux d'interaction et états finals

Les FIG. IV.3.c.1, FIG. IV.3.c.2, et FIG. IV.3.c.3 montrent les taux d'interaction électron-LOPCM, les énergies moyennes transférées et les cosinus moyens des angles de diffusion calculés en fonction de l'énergie d'un électron incident dans la vallée Γ de GaAs pour différentes densités de trous. Les traits épais correspondent aux résultats pour l'interaction électron-POP non écranté. Les lignes pleines, tirets longs, tirets courts et pointillés correspondent aux résultats pour l'interaction électron-LOPCM pour les densités de trous $p = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $p = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $p = 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, et $p = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ respectivement. Pour comprendre les formes particulières des taux d'interaction électron-LOPCM par rapport à celles des taux d'interaction électron-POP, il faut examiner les énergies moyennes échangées et les angles de diffusion moyens. De plus, rappelons que d'après (IV.2.1) les taux d'interactions sont, grossièrement, proportionnels à la fonction spectrale $\text{Im}(-1/\varepsilon_T(q, \omega))$, au facteur de Bose-Einstein $N_{LOPCM} = (\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1)^{-1}$, et inversement proportionnels au carré de la norme du vecteur d'onde échangé q^2 . Le facteur de Bose-Einstein est très grand pour des $\hbar\omega$ petits et confère aux excitations de petite énergie un poids non négligeable dans les taux d'interaction. Les excitations caractérisées par de petits q^2 auront aussi un poids non négligeable.

Pour les processus d'absorption, plus la densité de trous est grande est plus l'énergie moyenne échangée est grande. Il en va de même pour l'angle moyen de diffusion et donc le vecteur d'onde échangé aussi. Les cas (densité de trou) présentant des LM de petite énergie pour de petits vecteurs d'onde ont donc des taux d'interaction pour les processus d'absorption plus grands que les cas où il n'y a pas de LM. L'importance de ces LM, même « petit » sur la fonction spectrale, se voit clairement sur la FIG. IV.3.c.2 (partie b) où l'énergie moyenne échangée peut être bien inférieure à celle du POP. Pour les LM, l'échange de petites énergies donne lieu à l'échange de petits vecteurs d'onde et donc à de petits angles de diffusion. L'on notera que pour $p = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, le taux d'interaction électron-LOPCM est similaire à celui de l'interaction électron-POP. Cependant, l'énergie moyenne échangée est plus grande à cause des contributions du UM et cette information est hors de la portée d'un modèle analytique de type interaction électron-POP écranté statiquement.

Pour les processus d'émission, l'analyse est un peu plus complexe. On note que les taux d'interaction électron-LOPCM sont non nuls pour un électron incident sous le seuil d'émission du POP. Ceci est du aux LM et aux UM très étalés dans le cas $p = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$.

Au dessus du seuil d'émission, les taux en fonction de l'énergie de l'électron incident ne gardent pas leur forme générique comme pour les processus d'absorption. En effet, l'énergie de l'électron incident impose une borne supérieure pour $\hbar\omega$ dans l'intégration (IV.2.1), d'où le changement de forme au fur et à mesure que le LM disparaît, que le UM monte en énergie, et que l'écrantage du ridge phononique devient important dans la fonction spectrale.

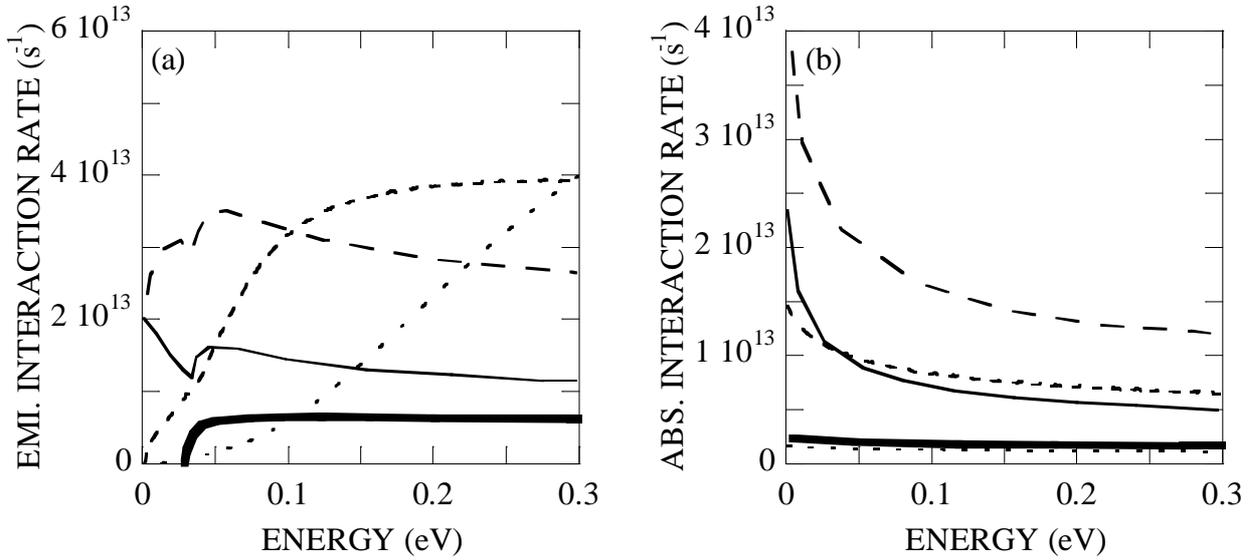


FIG. IV.3.c.1 : Taux d'interaction électron-LOPCM pour les processus d'émission (a) et d'absorption (b) en fonction de la densité de trous :

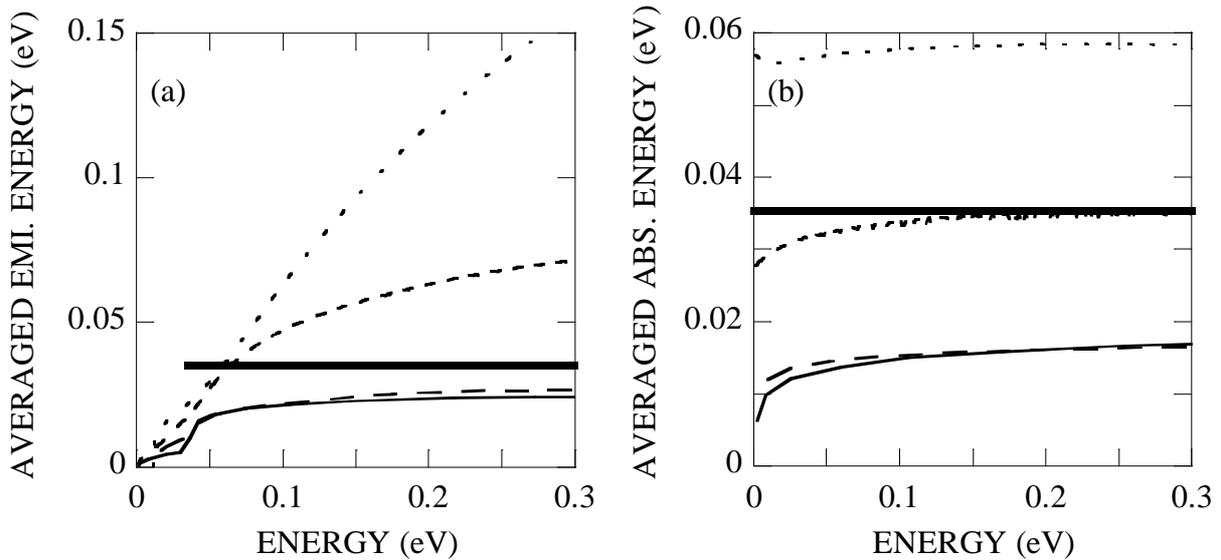
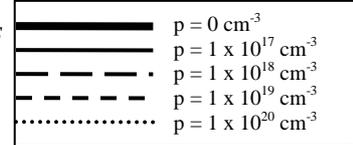
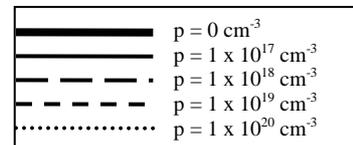


FIG. IV.3.c.2 : Energie moyenne échangée entre un électron et un LOPCM pour les processus d'émission (a) et d'absorption (b) en fonction de la densité de trous :



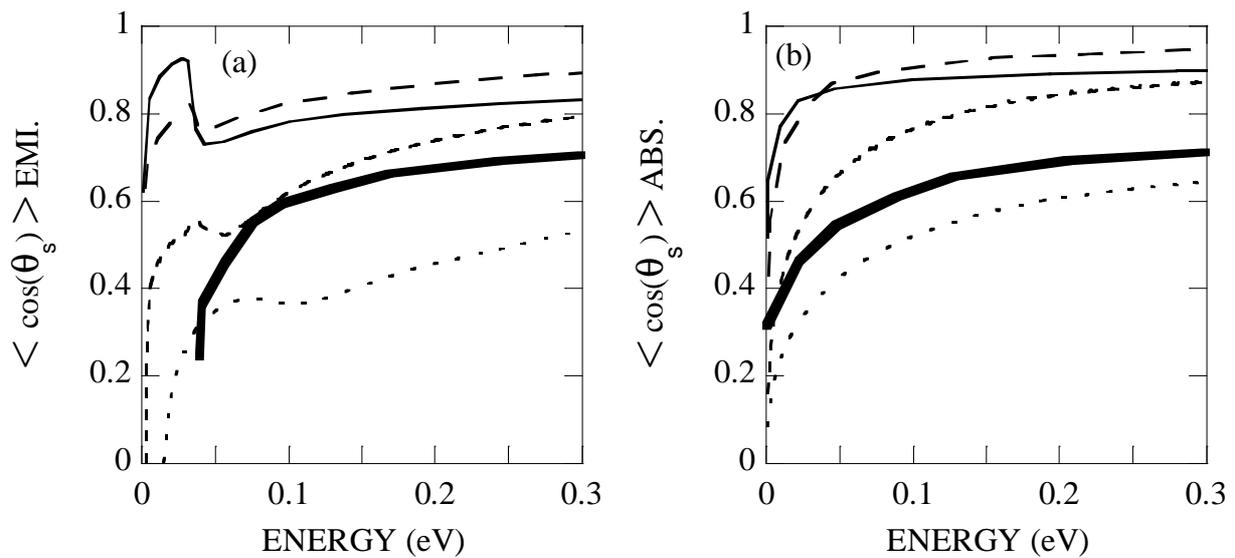
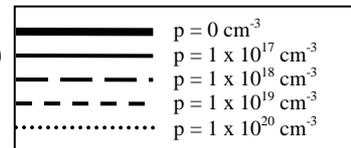


FIG. IV.3.c.3 : Cosinus moyen de l'angle de diffusion par interaction électron-LOPCM pour les processus d'émission (a) et d'absorption (b) en fonction de la densité de trous :



d) mobilités des électrons minoritaires

La FIG. IV.3.d.1 montre les mobilités calculées en fonction de la densité de trous dans GaAs, $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ et $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$. Après examen des taux d'interaction, on peut remarquer que l'interaction électron-LOPCM atteint un maximum d'efficacité pour une densité de trou entre $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Cela résulte en un minimum de mobilité. Le fait que les taux d'interaction électron-LOPCM diminuent pour des densités de trous plus élevées explique la remontée des mobilités avec le niveau de dopage observée expérimentalement dans GaAs et $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ [Kaneto93] [Harmon93]. Négliger le couplage en utilisant un modèle électron-POP non écranté, plus les collisions porteur-porteur élastiques, mène à une surestimation des mobilités indiquant l'importance des LM dans les propriétés de transport. Négliger le couplage en utilisant un modèle électron-POP non écranté, plus les collisions porteur-porteur élastiques, mais cette fois avec le modèle phase-shift pour la diffusion sur les impuretés mène également à une surestimation des mobilités et sans l'augmentation avec le niveau de dopage. Bien que le modèle phase-shift soit plus sophistiqué que le modèle Brooks-Herring et tienne compte de la nature répulsive du potentiel de l'impureté diffusant les électrons minoritaires, il n'explique pas les remontées des mobilités, indiquant que la diffusion porteur-impureté ne constitue pas le processus majeur influant sur la mobilité des électrons minoritaires.

Les résultats pour $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$ ne montrent pas la remontée de la mobilité avec le niveau de dopage. En effet, rappelons que dans ce matériau le minimum d'énergie des vallées L ne se trouve que 121meV au-dessus de celui de la vallée Γ . Cela a une répercussion majeure sur le transport car les vallées L sont à portée des électrons dans la vallée Γ à 300K. A cause de leur grande densité d'états, les vallées L retiennent une bonne partie de la population d'électrons. Bien que la masse effective en Γ de $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$ soit aussi faible que celle de $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ (raison pour laquelle $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$ est actuellement considéré pour des applications en électronique ultra rapide), ses propriétés de transport ne sont pas aussi bonnes à cause des transferts Γ -L et de la vitesse très limitée que peuvent atteindre les électrons en vallée L. Pour $p = 1 \times 10^{20} \text{cm}^{-3}$, environ 30% de la population d'électrons se trouve en vallées L. Comme les masses effectives des vallées L s'approchent de celles de la bande HH, la SPE des électrons en L recouvre celle des trous. Ces 30% d'électron n'ont donc pas accès à la zone du plan (q, ω) de la fonction spectrale qui permet l'augmentation de mobilité. D'après les résultats, cela suffit à compenser l'augmentation de mobilité des 70% restant en vallée Γ .

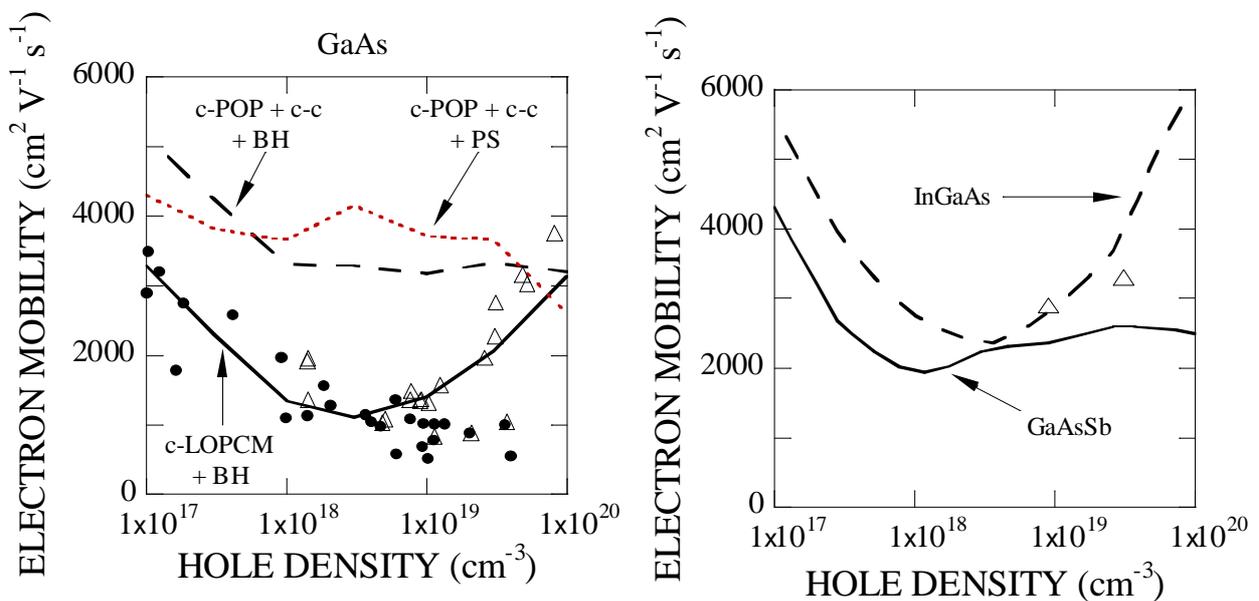


FIG. IV.3.d.1 : A gauche, mobilités des électrons minoritaires en fonction de la densité de trous dans GaAs calculées avec LOPCM (trait plein), calculées sans LOPCM (tirets et pointillés), et mesurées (symboles) [Kaneto93] [Harmon93]. A droite, mobilités des électrons minoritaires en fonction de la densité de trous calculées avec LOPCM dans $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ (tirets) et $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$ (trait plein), et mesurées dans $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ (symboles) [Harmon93].

4) Conclusion

Le travail présenté dans ce chapitre pour GaAs, montre que les effets d'écrantage dynamique des populations de porteurs de charge vont bien au-delà de ce qui est, en général, pris en compte dans une modélisation EMC. En effet, l'interaction porteur-POP ne peut simplement être écrantée statiquement à l'aide de la longueur d'écrantage de Fermi-Dirac dans un semi-conducteur polaire fortement dopé à cause du couplage des modes de phonons optiques polaires avec les modes de plasmons. Pour la même raison, des valeurs de mobilités plus précises ne sont pas obtenues en utilisant une méthode sophistiquée (phase-shift) pour traiter la diffusion des porteurs sur les atomes de dopage, ce qui était le cas dans Si. Ces processus de diffusion se sont révélés être de poids inférieur à celui des interaction porteur-LOPCM. L'effort apporté dans les CHAPITRES I (structure électronique) et II (EMC Full Band) pour traiter les alliages ternaires de façon non arbitraire a permis de reproduire la mobilité des électrons minoritaires dans $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ de façon très satisfaisante étant donné le peu de mesures disponibles. Cela donne confiance dans les prédictions qui concernent $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$, matériau proposé pour de futures applications telles que les Transistors Bipolaires à Hétéro-jonctions, mais très peu caractérisé expérimentalement au niveau de ses propriétés de transport et sa structure électronique.

Référence Bibliographiques :

- [Bolognesi99] C. R. Bolognesi et al.,
IEEE Electron Device Letters 20, 155 (1999)
- [Bolognesi01] C. R. Bolognesi, et al.,
IEEE Trans. Electron Devices 48, 2631 (2001)
- [Bolognesi08] C.R. Bolognesi, H. Liu, O. Ostinelli and Y. Zeng
Proceedings of the 3rd European Microwave Integrated Circuits
Conference, 107 (2008)
- [Cusco01] R. Cusco, L. Artus, S. Hernandez, J. Ibanez and M. Hopkinson,
Phys. Rev. B 65, 35210 (2001)
- [Farvacque00] J. L. Farvacque,
Phys. Rev. B 62, 2536 (2000)
- [Farvacque05] J. L. Farvacque and F. Carosella,
Phys. Rev. B 72, 125344 (2005)
- [Fukasawa94] R. Fukasawa and S. Perkowitz,
Phys. Rev. B 50, 14119 (1994)
- [Harmon93] E. S. Harmon et al.,
Appl. Phys. Lett. 63, 536 (1993); Appl. Phys. Lett. 63, 636 (1993)
- [Kaneto93] T. Kaneto, K. W. Kim and M. A. Littlejohn,
Phys. Rev. B 47, 16257 (1993)
- [Kim78] M.E. Kim, A. Das and S.D. Senturia,
Phys. Rev. B 18, 6890 (1978)
- [Mermin70] N.D. Mermin,
Phys. Rev. B 1, 2362 (1970)
- [Meyer83] J.R. Meyer and F.J. Bartoli,
Phys. Rev. B 28, 915 (1983)
- [Mintairov97] A. M. Mintairov and H. Temkin,
Phys. Rev. B 55, 5117 (1997)
- [Mooradian66] A. Mooradian and G. B. Wright,
Phys. Rev. Lett. 16, 999 (1966)
- [Ridley99] B. K. Ridley,
« Quantum Processes in Semiconductors »,
4th edition (Oxford University Press, 1999)
- [Varga65] B. B. Varga, Phys. Rev. 137, A1896 (1965)

CHAPITRE V : PHONONS CHAUDS ET RELAXATION DES PORTEURS

Des densités de porteurs chauds (énergétiques) photo-générés (paires électron-trou) peuvent facilement atteindre quelques 10^{18} cm^{-3} sous excitations optiques modérément intenses. De telles densités peuvent mener à des effets tels que le chauffage de la distribution de phonons (« les phonons chauds ») et le couplage des phonons optiques polaire (POP) avec des modes de plasmons (LOPCM, CHAPITRE IV). Ces deux phénomènes affectent la relaxation des porteurs chauds et n'ont pas été étudiés en même temps, dans un même calcul/mesure. Cela pose un problème pour l'étude théorique de Cellules Solaires à Porteurs Chauds où une relaxation lente des porteurs est nécessaire pour atteindre, d'après le concept, des rendements potentiellement élevés (CHAPITRE VI). Dans ce chapitre, l'EMC Full-band sera utilisé pour comparer l'influence du couplage phonon/plasmon et des phonons chauds sur la relaxation de porteurs chauds. Dans ce but, des spectres de transmission différentielle normalisée seront modélisés afin de pouvoir confronter les résultats de calculs, incluant les LOPCM ou les phonons chauds, à des résultats d'expériences pompe-sonde. En effet, les montages pompe-sonde permettent de suivre l'évolution temporelle des populations d'électrons et de trous à l'échelle sub picoseconde. GaAs étant le semi-conducteur III-V le plus caractérisé expérimentalement et le mieux connu, il servira de matériau de référence.

1) Phonons Chauds

Dans les semi-conducteurs polaires, quand les électrons sont très excités (possèdent un excès d'énergie non négligeable par rapport au minimum de la bande de conduction), ils relaxent leur excès énergie en la cédant au réseau cristallin. Cette relaxation a lieu au travers d'émission de phonons optiques polaires longitudinaux (LO) via le couplage de Fröhlich (on utilisera ici les abréviations POP et LO de façon interchangeable car on ne sort pas du contexte de semi-conducteur polaires). Considérons que la quantité totale de phonons émis pendant un laps de temps est significative. Si ce laps de temps est relativement court devant la durée de vie des phonons excédentaires (définis par rapport à la quantité de phonons présents à l'équilibre thermique avant la relaxation des électrons), la quantité de phonons émis peut faire dévier la population des phonons LO hors de son équilibre, en augmentant le nombre moyen d'occupation par état N_{LO} . L'excès de phonons donne une population dite de

« phonons chauds » car N_{LO} ne renvoie plus à une statistique de Bose-Einstein évaluée à la température du réseau cristallin à l'équilibre. Des mesures par diffusion Raman donnant des informations sur les populations de phonons ont fourni des preuves de ce phénomène [vonderLinde80] [Tsang85] [Kash85]. Ces phonons chauds peuvent être ré-absorbés par les électrons (toujours en train de relaxer), et peuvent donc réduire le taux net de perte d'énergie des électrons. Ceci est connu sous le nom de « phonon bottleneck effect » pour la relaxation des électrons. Rappelons que les taux d'interactions d'émission et d'absorption d'un phonon LO par un électron sont proportionnels au nombre moyen d'occupation des phonons ($w^{abs}(\vec{k}) \propto N_{LO}(\vec{q})$ pour l'absorption et $w^{emi}(\vec{k}) \propto (N_{LO}(\vec{q})+1)$ pour l'émission). Des informations approfondies sur le « phonon bottleneck effect » peuvent être trouvées dans [Garanin07]. De plus, le taux de ré-absorption de phonons LO par les électrons peut être plus grand que le taux de relaxation des phonons LO par la dynamique du réseau cristallin [Pötz83]. Cela souligne l'importance d'une étude rigoureuse à la fois des électrons et du système de phonons, car ils sont étroitement couplés. Un même niveau de description est donc nécessaire pour l'étude de la dynamique des deux systèmes. Ces considérations s'appliquent également à la relaxation des trous. Une perturbation de la population des phonons LO, alors hors d'équilibre, créant le *bottleneck* peut survenir au cours de la relaxation de relativement grandes densités de porteurs photo-excités, le nombre de phonons émis étant proportionnel à la quantité de porteurs relaxant. De grandes densités de porteurs de charges peuvent aussi être la cause d'effets assez complexes d'écrantage de l'interaction porteur-phonon optique polaire (porteur-POP) et peuvent donner lieu à des modes couplés phonons LO-plasmons (LOPCM) [Varga65] [Kim78]. Au cours de la relaxation des porteurs, les effets liés à leur grande concentration (écrantage, LOPCM) sont en compétition avec le *bottleneck*, ce qui justifie leur étude simultanée.

Des solveurs MC dédiés à la dynamique des phonons ont été publiés dans la littérature [Mazumder01] [Chen05] [Lacroix05]. Ces articles sont cependant axés sur les applications de transport de la chaleur en ignorant les phonons optiques et sans étudier la dynamique des phonons dans l'espace réciproque. Récemment l'importance de la contribution des phonons optiques dans le transport de l'énergie thermique dans Si a été démontrée en prenant en considération les modes de polarisation optique dans des calculs [Mittal10]. Ces « MC phonon », qui ne considèrent pas les interactions porteur-phonon, souffrent d'un manque de traitement de la dynamique des phonons dans l'espace réciproque. Ils utilisent également l'Approximation du Temps de Relaxation (RTA) sans une application rigoureuse des règles

de conservation de l'énergie et du moment dans les interactions à trois phonons. Plusieurs « EMC porteurs » ont déjà entrepris la prise en compte de la dynamique des phonons LO, mais avec la RTA [Lugli89] [Kocevar85]. Le EMC Full band développé dans cette thèse a été couplé à un EMC phonon développé par Hani Hamzeh [Hamzeh11], pour la prise en compte de la dynamique précise de la population des phonons LO. Cela permet le traitement simultané des porteurs et des phonons sans la RTA. Dans les sections suivantes, le couplage entre les deux EMC sera présenté ainsi que les effets que chaque système (porteurs, phonons) a l'un sur l'autre. L'impact des phonons chauds et des LOPCM sur la relaxation de porteurs chauds sera ensuite discuté.

2) Couplage EMC porteurs/phonons

a) EMC porteurs

Dans cette partie, la prise en compte du « phonon bottleneck effect » et des LOPCM va être détaillée. Le *bottleneck* étant issu de l'accumulation de phonons excédentaires (« phonons chauds »), les taux d'interaction porteur-phonon LO doivent être recalculés en permanence tout au long de la simulation en utilisant le « vrai » nombre moyen d'occupation des états de phonon N_{LO} , qui peut dévier de sa valeur d'équilibre. Le calcul de ce taux est opéré à partir du taux d'interaction général porteur-LOPCM qui est donné par (CHAPITRE IV)

$$W(k) = \frac{2\pi}{\hbar} \iint \frac{e^2}{q^2} \text{Im} \left(-\frac{1}{\varepsilon_T(q, \omega)} \right) \left(N(q, \omega) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta_{k \pm q - k'} \delta_{E_k \pm \hbar\omega - E_{k'}} \frac{d\hbar\omega}{\pi} \frac{d^3q}{(2\pi)^3}, \quad (\text{V.2.1})$$

où sont omises les contributions des électrons et des trous à la fonction diélectrique totale ($\varepsilon_T(q, \omega) = \varepsilon_\infty + \varepsilon_{lat}(\omega) + \varepsilon_e(q, \omega) + \varepsilon_h(q, \omega)$ avec $\varepsilon_e(q, \omega) = \varepsilon_h(q, \omega) = 0$). Les signes supérieur et inférieur correspondent respectivement aux processus d'absorption et d'émission. Les deux deltas $\delta_{k \pm q - k'} \delta_{E_k \pm \hbar\omega - E_{k'}}$ assurent la conservation globale (porteur + phonon) de l'énergie et de la quantité de mouvement. q et $\hbar\omega$ sont le vecteur d'onde et l'énergie d'un phonon. Dans le cas où l'on considère une branche de phonon plate ($\omega(q) = \text{constante}$, modèle d'Einstein), la fonction spectrale $\text{Im}(-1/\varepsilon_T(q, \omega))$ peut se réduire à

$$\text{Im}(-1/\varepsilon_T(q, \omega)) = \frac{\omega_{LO}\pi}{2} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right) \delta(\omega - \omega_{LO}) \quad (\text{V.2.2})$$

En considérant aussi que la population de phonon LO est à l'équilibre et donc que $N(q, \omega) = N_{LO} = \text{constante}$, la double intégration de (V.2.1) donne alors le taux d'interaction porteur-POP habituel calculé avec le couplage de Frölich [Ridley99]. En levant l'approximation $N_{LO} = \text{constante}$, on peut insérer le « vrai » nombre d'occupation moyen des états de phonon dans (V.2.1) et intégrer numériquement. Cela permet de prendre en compte l'accumulation des phonons LO et donc le « phonon bottleneck effect ».

Dans cette étude, aucun champ électrique ne sera appliqué. Il n'y aura donc pas d'orientation privilégiée pour les phonons impliqués dans les interactions porteur-POP. Le nombre d'occupation moyen des états de phonon peut donc être considéré isotrope dans l'espace réciproque et être fonction de la norme du vecteur d'onde seulement $N_{LO}(q)$. Dans l'EMC, l'espace réciproque est discrétisé par des sphères avec un pas radial dq . En effet, l'espace réciproque d'un cristal massif étant extrêmement dense, il n'est pas envisageable de traiter numériquement tous les points de l'espace réciproque. $N_{LO}(q_i)$ est alors défini comme le nombre moyen d'occupation des états de phonons entre q_i et $q_{i+1} = q_i + dq$, et couvre le volume de l'espace réciproque $\Omega(q_i) = (4/3)\pi(q_{i+1}^3 - q_i^3)$. Lors de l'émission/absorption d'un phonon LO de vecteur d'onde q_p par une super-particule de l'EMC (électron ou un trou), $N_{LO}(q_i)$ (avec $q_i < q_p \leq q_i + dq$) doit être augmenté/diminué d'une valeur $\Delta N(q_i)$. D'après la définition de $N_{LO}(q_i)$

$$N_{LO}(q_i) = \frac{\text{nombre d'états occupés dans } \Omega(q_i)}{\text{nombre d'états total dans } \Omega(q_i)} \quad (\text{V.2.3})$$

$$\text{et donc } \Delta N(q_i) = \frac{\text{nombre de phonons émis ou absorbés}}{\text{nombre d'états total dans } \Omega(q_i)}$$

Le nombre d'états total dans l'élément $\Omega(q_i)$ de l'espace réciproque est donné par $dN_{tot}(q) = V \times \Omega(q) / (2\pi)^3$ où V est le volume du cristal. Comme dans l'EMC un nombre de porteurs $N_{porteurs}$ est échantillonné par N_{SP} super-particules, le nombre de phonons émis ou absorbés est $N_{porteurs} / N_{SP}$. Le terme d'incrément/décément du nombre moyen d'occupation des états de phonons LO $N_{LO}(q_i)$ est donc donné par

$$\Delta N(q) = \frac{N_{porteurs} / N_{SP}}{dN_{tot}(q)} = \frac{(2\pi)^3 \times (n / N_{SP})}{(4/3)\pi(q_{i+1}^3 - q_i^3)} \quad (\text{V.2.4})$$

où la densité de porteurs est $n = N_{porteurs} / V$.

Afin de prendre en compte dans l'EMC porteurs la partie de l'évolution de la population de phonon LO qui n'est pas due aux interactions porteur-phonon, donc due aux interactions phonon-phonon, un code EMC dédié à la dynamique des phonons, qui sera présenté dans la prochaine section, a été intégré. Un moyen beaucoup plus simple (et systématiquement utilisé dans la littérature : [Lugli89] [Kocevar85] par exemple) que de recourir à un code EMC dédié, est d'utiliser l'Approximation du Temps de Relaxation (RTA). La RTA suppose qu'une distribution de phonons perturbée N_{LO} revient à l'équilibre thermodynamique initial $N_{LO}^{th.}$ de façon exponentielle. En définissant $N_{LO}^{perturb}$ comme la partie de N_{LO} représentant les phonons excédentaires telle que $N_{LO} = N_{LO}^{th.} + N_{LO}^{perturb}$, l'évolution temporelle de N_{LO} est donnée par

$$N_{LO}(t) = N_{LO}^{th.} + \left(N_{LO}^{perturb} \times \exp(-t / \tau_{LO}) \right) \quad (V.2.5)$$

où τ_{LO} est le temps de vie des phonons excédentaires. Comme tout au long d'une simulation « EMC porteurs » $N_{LO}^{perturb}$ varie à chaque pas sur le temps dt , il est plus pratique de recourir à l'évolution temporelle. Comme $N_{LO}^{perturb}$ est à chaque fois redéfini, le temps dans l'exponentielle aussi ($t = 0$)

$$\frac{\partial N_{LO}}{\partial t} = - \frac{N_{LO} - N_{LO}^{th.}}{\tau_{LO}} \quad (V.2.6)$$

La RTA suppose que tous les phonons LO ont le même temps de vie τ_{LO} , indépendamment de leur vecteur d'onde q . Elle suppose également que le temps de vie est constant, et que la distribution de phonons relaxe de façon exponentielle indépendamment de la perturbation $N_{LO}^{perturb}$. Afin d'améliorer la RTA, on introduit dans (V.2.6) un temps de vie dépendant du vecteur d'onde $\tau_{LO}(q)$ calculé à partir des taux de relaxation des phonons LO dû aux interactions à trois phonons [Hamzeh11].

La prise en compte des LOPCM a déjà été détaillée dans le CHAPITRE IV. Rappelons tout de même que la fonction diélectrique totale $\epsilon_T(q, \omega)$, à partir de laquelle est calculé le couplage entre les modes de phonons et les modes de plasmons, contient une partie électronique qui dépend des susceptibilités du premier ordre χ_i , et des constantes d'amortissement Γ_i . D'après le modèle de Mermin elle est donnée par [Mermin70]

$$\epsilon_{i=e,h}(q, \omega) = \frac{(1 + i\Gamma_i / \omega) \chi_i(q, \omega + i\Gamma_i)}{1 + (i\Gamma_i / \omega) [\chi_i(q, \omega + i\Gamma_i) / \chi_i(q, 0)]}, \quad (V.2.7)$$

Les susceptibilités sont calculées « en temps réel » sur les distributions de porteurs de l'EMC. Il en est de même pour les constantes d'amortissement. Il a été suggéré d'utiliser les temps de relaxations du moment pour évaluer ces constantes : $\Gamma_i = 1/\tau_m^i$ [Meyer83]. Cependant, les Γ_i sont des paramètres effectifs servant à mesurer l'amortissement des oscillations des plasmas d'électrons et de trous [Stimets70]. Il n'est donc pas exclu d'utiliser les taux moyen d'interaction total au lieu des temps de relaxation du moment car n'importe quelle interaction contribue à l'amortissement des oscillations, et ce, indépendamment de la déflexion du moment résultant. De plus, il est bien plus pratique d'évaluer les taux moyen d'interaction total en absence de champ électrique. L'évaluation des temps de relaxation du moment en absence de champs électrique nécessite la réintégration complète et répétée de tous les taux d'interaction, ce qui fait perdre le gain en temps de calcul qu'apporte l'utilisation de taux d'interaction formulés en fonction de l'énergie présentés dans le CHAPITRE II. L'évolution temporelle des constantes d'amortissement suivra donc celle des taux d'interaction, le taux moyen d'interaction total étant donné par

$$W_{tot}^{i=e,h} = \sum_{c_i} \left(\sum_{s_i} w_{s_i}(E_{c_i}) (1 - f_i(E_{c_i,f})) \right), \quad (V.2.8)$$

où le prime sur la première somme signifie que le résultat est moyenné sur la population de porteurs i . La seconde somme (loi de Matthiessen) court sur toute les interactions prises en compte dans le modèle, $w_{s_i}(E_{c_i})$ étant le taux d'interaction pour le processus s_i évalué pour le porteur c_i à l'énergie E_{c_i} . Le facteur $(1 - f_i(E_{c_i,f}))$ tient compte du principe d'exclusion de Pauli où $f_i(E_{c_i,f})$ est la fonction de distribution de la population de porteurs i évaluée à l'énergie de l'état final $E_{c_i,f}$ (pour le processus s_i). En d'autres termes, W_{tot}^i est le taux d'interaction total incluant tous les processus de diffusion, moyenné sur la population de porteurs i qui est une donnée dynamique de l'EMC. Comme les LOPCM ont une partie plasmon, l'effet « phonons chauds » n'est pas attendu à cause de l'amortissement des plasmons qui empêchent les effets d'accumulation dans la population des modes. Les temps de vie des phonons LO sont de l'ordre de quelques picosecondes alors que les temps d'interaction (amortissement, $1/W_{tot}^i$) sont subpicosecondes. Le temps de vie effectif d'un LOPCM est donc court et $N(q, \omega)$ dans (V.2.1) est considéré suivre une statistique de Bose-Einstein.

b) EMC phonons

Une présentation de l'EMC phonons développé par Hani Hamzeh peut être trouvée dans [Hamzeh11]. Les lignes directrices vont tout de même être décrites ici. Tous les modes de phonons, acoustiques et optiques, sont considérés. Les relations de dispersions de ces modes sont considérées isotropes et modélisées à partir de mesures dans la zone Brillouin le long de la direction de haute symétrie [100]. En se basant sur ces relations de dispersions, les taux d'interaction à trois phonons (Normal et Umklapp) ont été calculés en utilisant le modèle théorique généralisé de Ridley. Les seules interactions à trois phonons autorisées sont

$$\begin{aligned}
 \text{la fusion :} & \quad \begin{cases} \vec{q}_1 + \vec{q}_2 \Rightarrow \vec{q}_3 \\ \hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 \Rightarrow \hbar\omega_3 \end{cases} \\
 \text{la décomposition :} & \quad \begin{cases} \vec{q}_1 \Rightarrow \vec{q}_2 + \vec{q}_3 \\ \hbar\omega_1 \Rightarrow \hbar\omega_2 + \hbar\omega_3 \end{cases}
 \end{aligned} \tag{V.2.9}$$

Dans les calculs des taux d'interactions à trois phonons, les seuls paramètres d'ajustement sont les coefficients de couplage anharmonique. La conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement (V.2.9) y est implémentée. Dans l'EMC phonons, seules les interactions phonon-phonon sont prises en compte en ne retenant que le terme anharmonique cubique dans le potentiel du cristal qui donne naissance aux processus à trois phonons. En effet, dans les semi-conducteurs III-V les interactions phonon-phonon sont dominantes parmi les différents processus de diffusion de phonon à température ambiante [Mazumder01]. Parmi les interactions phonon-phonon anharmoniques, les processus à trois phonons sont les plus importants et il est courant de négliger les ordres supérieurs d'anharmonicité [Barman02] [Mittal10]. Plus d'informations sur le fondement théorique, les relations de dispersions utilisées, le calcul des taux d'interaction, et la méthode pour déterminer les coefficients de couplage sont consignées dans [Hamzeh11].

Dans l'EMC phonons, les populations de phonons devraient aussi être échantillonnées par des super-particules. Les densités totales de phonons dans un cristal sont extrêmement grandes (même à 300K) et la différence entre les densités d'états de chaque branche varie sur plusieurs ordres de grandeurs. Modéliser la densité totale de phonons par des super-particules n'est donc pas envisageable pour des raisons de quantité de mémoire. Pour palier à ce problème, seules les déviations vis-à-vis du nombre moyen d'occupation à l'équilibre thermodynamique N_{LO}^h sont modélisées et échantillonnées par des super particules dans l'EMC phonons. Au début de chaque simulation, les populations de phonons sont à l'équilibre. Les nombres moyens d'occupation à l'équilibre sont donc donnés par la statistique

de Bose-Einstein à la température du réseau cristallin. Les déviations par rapport à l'équilibre sont issues des processus d'émission/absorption de phonon LO par les porteurs de charge dans l'EMC porteurs. Les porteurs pouvant émettre et absorber des phonons, les déviations par rapport à l'équilibre peuvent être positives (excès de phonons) ou négatives (déficit de phonons). Les super particules peuvent donc être de deux types, correspondant aux déviations positives et négatives. Le concept derrière la déviation négative peut être assimilé à celui de trou en bande de valence. Ce n'est cependant qu'un concept permettant la modélisation numérique.

c) Couplage de l'EMC phonons à l'EMC porteurs

Le couplage entre les deux EMC est réalisé en échangeant des informations sur la fonction de distribution des phonons LO N_{LO} . L'EMC porteurs donne à l'EMC phonons (après un pas de temps donné) la fonction de distribution perturbée à cause des processus d'émission/absorption de phonon par les porteurs (qui ont eu lieu pendant ce pas de temps). L'EMC phonons évalue les déviations correspondantes et traite la dynamique des populations des phonons (pendant ce même pas de temps). L'EMC porteurs met alors à jour sa fonction de distribution de phonon LO à l'aide des résultats donnés par l'EMC phonons, et ainsi de suite. Ce mécanisme est schématisé en FIG. V.2.1.

Seule la fonction de distribution des phonons LO est échangée entre les deux EMC car la perturbation générée par la relaxation des porteurs de charge affecte principalement, et quasi exclusivement, la population de phonons LO de centre de zone. De plus, la décomposition des ces phonons LO étudiée par l'EMC phonons (et donc à l'aide de tous les processus à trois phonons, quelle que soit leur branche) a un impact très faible sur les populations de phonons des autres branches [Hamzeh11]. Les autres branches de phonons sont donc supposées à l'équilibre thermique tout le long de la simulation.

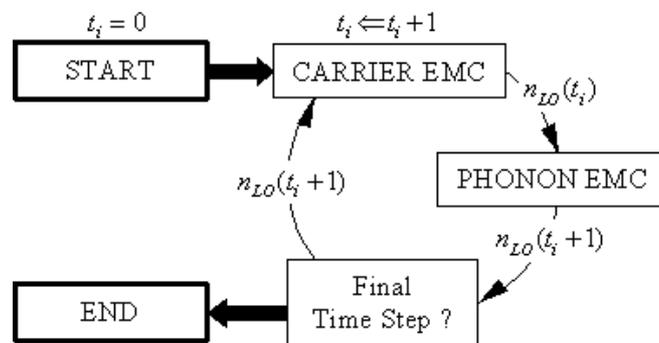


FIG. V.2.1: Schéma simplifié de l'EMC porteurs/phonons couplé montrant la principale boucle d'itération sur le temps et le flux d'informations échangées entre les EMC individuels.

d) Pompe-sonde : principes

Les expériences pompe-sonde permettent l'étude de la dynamique ultra rapide des porteurs de charge avec une résolution subpicoseconde avec des lasers. Dans une expérience pompe-sonde, les paires électron-trou sont photo-générées par une impulsion de pompe centrée à $t_0 = 0$ (origine de l'axe du temps). La puissance de la pompe est réglée afin de photo-générer la densité de paires électron-trou désirée. Ensuite, une impulsion de sonde centrée à $t_s = t$, de puissance bien inférieure afin de ne pas perturber la dynamique enclenchée par la pompe avec trop d'absorption supplémentaire, est envoyée sur le semi-conducteur avec un délai contrôlé $t_d = t - t_0$. A l'aide d'une détection synchrone, la transmission en fonction du temps est mesurée. On peut alors construire un spectre de changement de transmission $\Delta T / T_0$ qui est proportionnel au changement d'absorption $\Delta\alpha$ [Langot96]

$$\left(\Delta T(t) / T_0 = \frac{T(t) - T_0}{T_0} \right) \propto (-\Delta\alpha(t) = -(\alpha(t) - \alpha_0)) \quad (\text{V.2.10})$$

où les symboles portant l'indice 0 correspondent aux valeurs de transmission et d'absorption en absence de pompe. En général, les $\Delta T / T_0$ sont normalisés à 1 pour faciliter les comparaisons donnant les $N\Delta T$. Les $N\Delta T$ permettent donc de suivre l'occupation des états valence-conduction connectés optiquement par la sonde. L'évolution temporelle donne donc des informations sur les taux de remplissage/vidage des états optiquement connectés. Un signal $N\Delta T$ croissant (avec le temps) indique donc le remplissage des états sondés, car l'échantillon devient plus transparent et donc moins absorbant à l'énergie de sonde. Réciproquement, un signal $N\Delta T$ décroissant (avec le temps) indique le vidage des états sondés, car l'échantillon devient moins transparent et donc plus absorbant à l'énergie de sonde. Dans l'EMC, le calcul des spectres $N\Delta T$ est obtenu à partir de l'absorption dont la prise en compte a été présentée dans le CHAPITRE II.

3) Résultats

Dans cette section, les résultats de modélisation d'expériences pompe-sonde serviront de support pour la comparaison des rôles joués par les phonons chauds et les LOPCM dans la relaxation de porteurs photo-excités dans GaAs. Dans les deux expériences modélisées, les densités de porteurs-générés sont « faibles » [Langot96], et « grandes » [Lin86]. Dans chaque

cas, l'influence des phonons chauds et des LOPCM sera étudiée. Pour la dynamique des phonons LO, la RTA et l'EMC phonons seront comparés.

a) densités de paires électron-trou faibles

Langot *et al.* ont étudié le *phonon bottleneck* pour la relaxation des porteurs en utilisant une expérience pompe-sonde non dégénérée. L'énergie des photons de l'impulsion de sonde ($\hbar\omega = 1.46 \text{ eV}$) était inférieure à celle des photons de pompe ($\hbar\omega = 1.59 \text{ eV}$). Dans cette configuration, le spectre $N\Delta T$ donne une image du remplissage des états sondés par les porteurs relaxant depuis les états où ils ont été pompés. La courbure des bandes de valence et de conduction impose aux électrons de récupérer la majeure partie de l'excès d'énergie des photons par rapport à l'énergie de bande interdite. La conséquence de cela est que le remplissage des états sondés vu sur les spectres $N\Delta T$ reflète principalement la dynamique des électrons car les trous sont pompés près (en énergie) des états sondés. De plus, les trous atteignent une configuration d'équilibre plus rapidement que les électrons car les taux d'interaction en bandes de valence sont en général plus grands que les taux d'interaction en bande de conduction. Comme la principale source de relaxation énergétique des porteurs est l'émission de phonons LO, on s'attend à ce que les résultats de mesure et de calcul caractérisent l'interaction porteur-phonon LO.

Les mesures de Langot *et al.* [Langot96] ont montré que le temps de remplissage des états sondés s'allongeait avec des densités de porteurs pompées plus importantes. Ceci est une signature du *phonon bottleneck* où la relaxation des porteurs est ralentie par les processus de ré-absorption des phonons précédemment émis. Ce point est illustré en FIG. V.3.a.1 où la montée du signal $N\Delta T$ est plus lente pour la densité pompée la plus grande ($n = 4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, symboles vides) que pour la densité plus faible ($n = 3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, symboles pleins). Cette tendance est reproduite par les calculs tenant compte de la dynamique des populations de phonons avec l'EMC phonons (phonon EMC: tirets et lignes pleines dans l'encart correspondant à $n = 4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et $n = 3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ respectivement) et ceux utilisant la RTA (RTA: tirets et ligne pleines dans le graphe principal correspondant à $n = 4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et $n = 3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, respectivement).

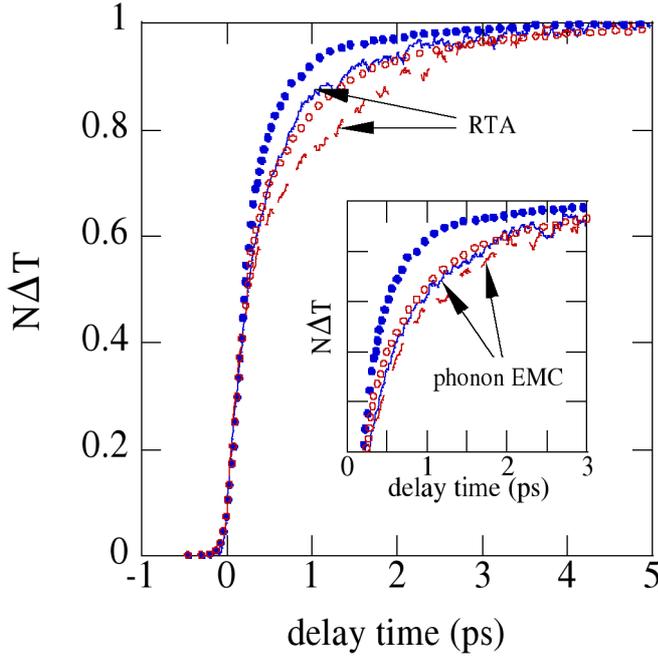


FIG. V.3.a.1: Spectres de changement de transmission normalisé mesurés (symboles [Langot96]) et calculés (lignes) pour des densités de porteurs faibles ($n = 3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$: symboles bleu remplis et lignes pleines) et grandes ($n = 4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$: symboles vides rouge et tirets) Calculs avec RTA sur le graphe principal et avec l'EMC phonons dans l'encart.

Les fonctions de distributions issues des calculs sont représentées en fonction du temps et du vecteur d'onde (donc dans le plan (q, t)) sur FIG. V.3.a.2 pour $n = 4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ en utilisant l'EMC phonons et la RTA (parties a) et b) respectivement). On note que la population des phonons LO de centre de zone dévie fortement de l'équilibre après l'impulsion de pompe (centrée en $t=0$), et relaxe ensuite en quelques picosecondes. Pour des vecteurs d'onde $q > 1 \times 10^7 \text{ cm}^{-1}$ (correspondant à plus de 99% du volume de la 1^{ère} zone de Brillouin) la perturbation de la population de phonon est négligeable.

Les résultats calculés avec l'EMC phonons et la RTA suivent les mêmes tendances. Cependant, comme noté dans [Hamzeh11] plus la perturbation sur la population de phonons LO est intense, plus la population relaxe vite. Ce comportement ne peut être reproduit par la RTA où le temps de vie τ_{LO} est indépendant de la population de phonon, et donc indépendant de la perturbation. Ceci est dû à l'hypothèse que dans la RTA, le retour à l'équilibre se fait de façon exponentielle. Les fonctions de distribution calculées avec la RTA montrent donc des maxima plus élevés que celles calculées avec l'EMC phonon. Elles ont le même comportement qualitatif mais montrent des différences quantitatives. En dépit de ces différences, les résultats concernant les spectres $N\Delta T$ (dynamique des porteurs) diffèrent peu d'une approche à l'autre. Pour les conditions modélisées, l'utilisation d'un modèle tel que la RTA semble suffisant et constitue une bonne approximation.

Sur la FIG. V.3.a.1, on peut noter que les temps de montée des $N_{\Delta T}$ calculés ne reproduisent pas avec précision ceux mesurés. Afin de vérifier si cet écart peut être expliqué par les effets d'écrantage/anti-écrantage de l'interaction porteur-POP, des calculs avec LOPCM mais sans phonons chauds ont été menés. Avec LOPCM, les temps de montée des $N_{\Delta T}$ calculés sont très courts, ce qui suggère que dans ces conditions ($n \leq 4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) les effets dus aux « phonons chauds » dominent.

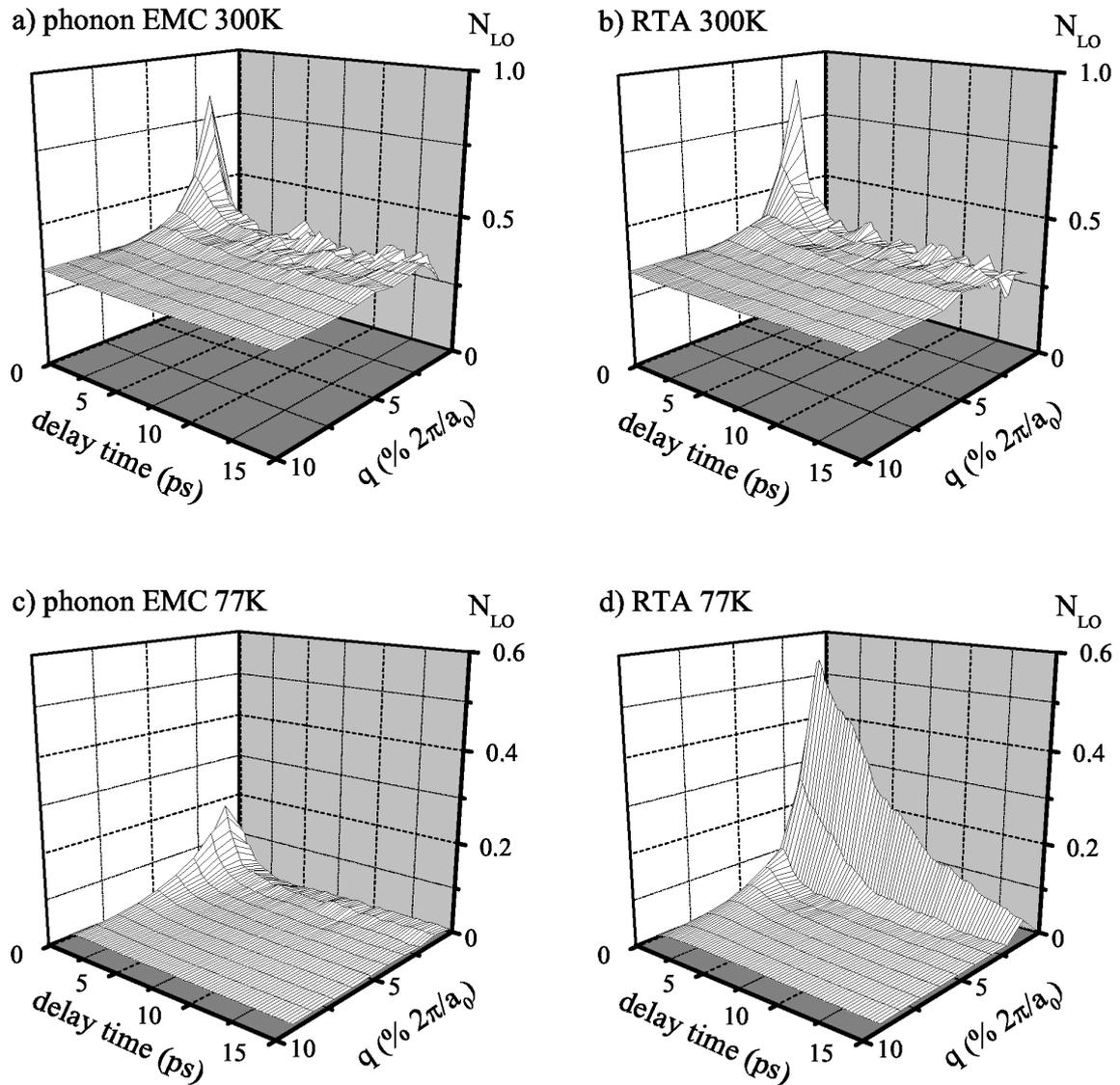


FIG. V.3.a.2: Fonctions de distribution des phonons LO N_{LO} en fonction du temps et du vecteur d'onde calculées à l'aide de l'EMC phonon (à gauche) et avec la RTA (à droite) pour des températures initiales du réseau cristallin de 300K (en haut) et 77K (en bas).

Afin d'approfondir l'étude du *phonon bottleneck* dans cette expérience, les mêmes calculs pour une densité de porteurs photo-générés de $4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ont été menés mais cette fois avec une température initiale du réseau cristallin de 77K au lieu de 300K. A 77K les phonons « thermiques » présents à l'équilibre sont peu nombreux par rapport à 300K. Les phonons LO émis lors de la relaxation des porteurs constituent alors une perturbation énorme. Le *phonon bottleneck* pour la relaxation des porteurs est alors plus important que dans le cas à 300K. La dynamique du système total (porteurs + phonons) dépend alors de façon critique de la rigueur avec laquelle la dynamique des phonons est traitée.

Les fonctions de distribution des phonons LO et les changements de transmission ($\Delta T/T_0$, non normalisés) calculés pour une température initiale du réseau cristallin de 77K sont représentés en FIG. V.3.a.2 (parties (c) pour EMC phonons et (d) pour RTA) et en FIG. V.3.a.3 respectivement. On note que le temps de montée de $\Delta T/T_0$ avec l'EMC phonons (ligne pleine) est légèrement plus lent que celui obtenu en négligeant la perturbation sur la population de phonons (pointillés). Cela indique un *phonon bottleneck* pour la relaxation des porteurs modéré. Les résultats calculés avec la RTA (tirets) sont très différents. Le temps de montée de $\Delta T/T_0$ obtenu avec la RTA est très lent, ce qui indique un *phonon bottleneck* très efficace. La fonction de distribution correspondante illustrée en FIG. V.3.a.2 (partie d)) pique à une valeur beaucoup plus élevée que celle calculée avec l'EMC phonon (FIG. V.3.a.2 partie c)) indiquant une relaxation de la population de la population de phonon très lente. Encore une fois, ceci est dû à l'hypothèse de retour à l'équilibre exponentiel. L'excès de phonons dans le système total généré par la relaxation des porteurs peut être quantifié par le rapport entre la valeur maximale du nombre moyen d'occupation (dans le plan (q,t)) et sa valeur à l'équilibre. Cela fournit une évaluation de la perturbation sur la population de phonon et comment le système total la gère. Pour une température initiale de 77K, ce ratio est ~ 110 et ~ 40 pour les calculs avec RTA et EMC phonons respectivement. Cela montre que la RTA sous estime la relaxation de la population de phonons LO. Cette relaxation est initialement rapide et non exponentielle, ce qui est une caractéristique de l'EMC phonons quand la perturbation est grande. Pour une température initiale de 300K, ce ratio est ~ 2.5 pour les deux approches. A cette température, la différence entre les résultats de la RTA et de l'EMC phonons n'est pas flagrante car la perturbation de la population de phonons LO causée par la relaxation des porteurs est faible à cause des nombres moyens d'occupation des états de phonons plus élevés à l'équilibre thermodynamique. Dans l'EMC phonons, le régime de relaxation rapide non exponentielle est alors très court. D'après l'EMC phonons, la RTA

surestime l'accumulation de phonons LO et donc le *phonon bottleneck* pour la relaxation des porteurs en résultant quand la perturbation initiale sur la population de phonons LO est grande.

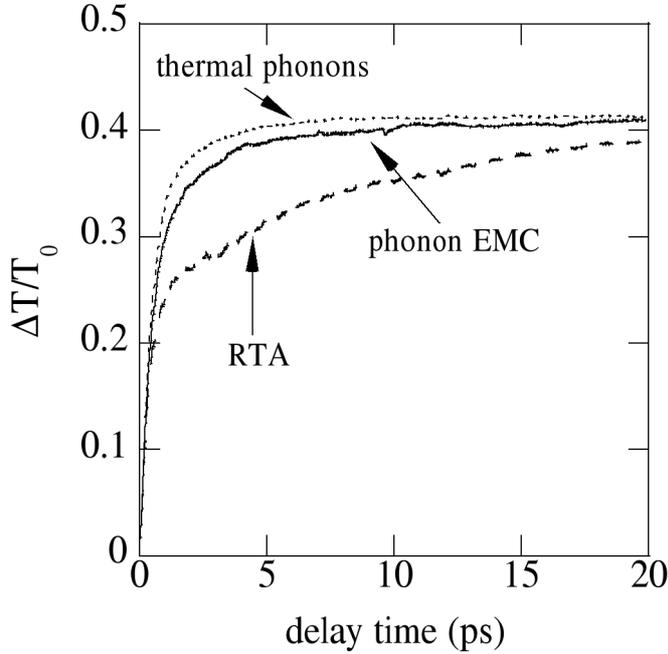


FIG. V.3.a.3: Changements de transmission calculés pour une densité de porteur photo-générée de $n = 4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ en négligeant l'accumulation de phonons LO (thermal phonons à 77K: pointillés), et en tenant compte de l'accumulation de phonons (RTA: tirets, phonon EMC: ligne pleine).

b) densités de paires électron-trou grandes

Lin *et al.* ont étudié la dynamique de relaxation des porteurs photo-générés en utilisant une expérience pompe-sonde dégénérée, où les photons de l'impulsion de pompe et de sonde ont la même énergie. Ainsi le changement de transmission normalisé $N\Delta T$ reflètera le remplissage et le vidage des états valence-conduction optiquement connectés. A cause de l'énergie des photons relativement élevée ($\hbar\omega = 2 \text{ eV}$), trois types de transitions interbandes sont autorisés : les électrons peuvent être photo-excités à partir de la bande des trous lourds (HH), la bande des trous légers (LH), et la bande split-off (SO), vers la vallée centrale de la première bande de conduction (Γ). Les états sondés par les différents types de transition interbande s'étalent sur une gamme d'énergie relativement large. L'excès d'énergie moyen des porteurs photo-générés via les différents types de transition interbande sont listés dans la TABLE V.3.b.1. L'impulsion de pompe photo générant une densité de paires électron-trou évaluée à $n = p = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, le *phonon bottleneck* et les LOPCM peuvent a priori tous deux avoir lieu (pour $n = p = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ photo-généré par des photons à $\hbar\omega = 2 \text{ eV}$, la saturation d'absorption n'est pas atteinte). Une analyse rapide de la TABLE V.3.b.1 peut aider à

comprendre les spectres $N\Delta T$ mesurés [Lin86] et calculés tracés en FIG. V.3.b.1. La discussion va être focalisée sur les électrons car les trous relaxent plus vite et la plupart d'entre eux sont photo-générés près du bord de bande. En effet, pour $t > 0.1 ps$ les trous sont quasiment à l'équilibre.

	$HH \rightarrow \Gamma$	$LH \rightarrow \Gamma$	$SO \rightarrow \Gamma$
excès d'énergie dans la CB	0.490	0.360	0.150
excès d'énergie dans les VBs	0.090	0.220	0.430

TABLE V.3.b.1: Excès d'énergie moyen (en eV) des porteurs photo-générés par des photons à $\hbar\omega = 2 eV$ dans GaAs. Les excès d'énergie dans la bande de conduction (CB) et les bandes de Valence (VBs) sont calculés à partir des extrema des bandes CB et HH respectivement.

Juste après l'impulsion de pompe (centrée à $t=0$), $N\Delta T$ décroît car les porteurs photo-générés sont diffusés hors des états « pompés/sondés » rendant l'échantillon moins transparent. La restauration de la transparence initiale montre cependant deux composantes. La première correspond à la diffusion très rapide des porteurs hors des états sondés (principalement par les transitions $HH \rightarrow \Gamma$) étudiée par Bailey *et al.* par des calculs EMC [Bailey90]. La seconde est plus lente et est gouvernée par la relaxation des électrons photo-excités via les transitions $HH \rightarrow \Gamma$ et $LH \rightarrow \Gamma$. Puisque ces transitions génèrent des électrons à 'haute' énergie, ce qui est vu après $0.1 ps$ est le passage de ces électrons dans les états sondés par les transitions $SO \rightarrow \Gamma$, ce qui caractérise la relaxation des électrons. Bailey *et al.* ont reproduit avec précision la composante rapide en ajustant le potentiel de déformation pour les interactions électron-phonon intervallée $\Gamma-L$. Il a été conclu que la forme de la composante rapide autour de $t=0$ est presque exclusivement contrôlée par ce potentiel de déformation. Cependant, leurs calculs n'ont pu reproduire la composante lente. Ici, tous les potentiels de déformation pour les interactions électron-phonon intervallée dépendent des branches de phonons [Birman66] et ont été ajustés à partir de valeurs calculées [Zollner88] [Zollner90] [Wang92] [Nikitina09] afin de reproduire les propriétés de transport. Aucun paramètre de l'EMC n'a été ajusté pour la modélisation de l'expérience pompe-sonde et le calcul de $N\Delta T$.

En FIG. V.3.b.1, les résultats calculés en tenant compte de l'accumulation de phonons LO avec la RTA et l'EMC phonons (tous deux tracés avec des tirets) sont loin des résultats mesurés pour la seconde composante, tout comme le résultat sans « phonons chauds » (libellé

« raw relaxation »). Cela suggère que dans cette expérience il n’y a pas de phonons chauds et que la relaxation des électrons n’est pas ralentie.

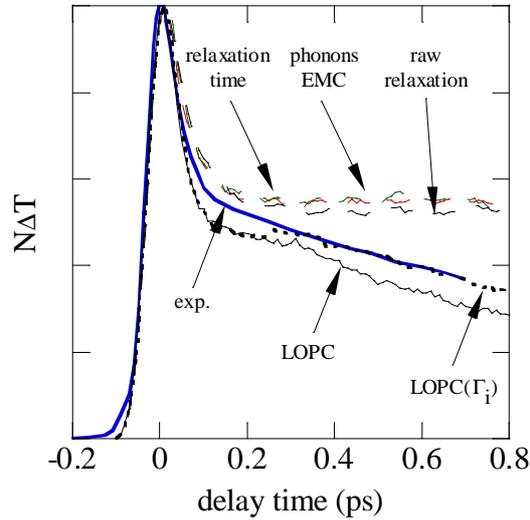


FIG. V.3.b.1: Spectres de changement de transmission normalisés mesurés [Lin86] (exp.: ligne épaisse bleue) et calculés (lignes fines). Les calculs sans accumulation de phonons (raw relaxation), et avec via RTA et l’EMC phonons donnent pratiquement les mêmes résultats (tirets). Les résultats de calculs incluant les LOPCM avec un paramètre d’amortissement constant (LOPC) et un paramètre dynamique ($LOPC(\Gamma_i)$) sont tracés avec une ligne fine et des pointillés gras respectivement.

L’autre effet suspecté d’affecter la relaxation des électrons est le LOPC. Les taux d’interactions porteur-LOPCM dépendent de la fonction diélectrique totale $\epsilon_T(q, \omega)$, qui dépend de la distribution des porteurs et des paramètres d’amortissement Γ_i , qui eux-mêmes dépendent des distributions de porteurs. Les paramètres d’amortissement ne peuvent donc pas être fixés avant un calcul EMC car ils doivent être déterminés par le calcul EMC lui-même afin d’obtenir des résultats consistants d’un point de vue physique. Afin de débiter avec une bonne estimation de ces paramètres, les temps de relaxation du moment ont été déterminés dans des calculs de mobilités auto-cohérents pour $n = p = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (CHAPITRE IV, [Tea11]) : $4 \times 10^{-14} \text{ s}$ et $3 \times 10^{-14} \text{ s}$ pour les électrons et les trous respectivement. En gardant les paramètres d’amortissement alors obtenus ($\Gamma = 1/\tau_m$) constants, la courbe tracée en ligne fine (libellée LOPC) en FIG. V.3.b.1 a été calculée. La même dépendance temporelle que le spectre $N\Delta T$ mesuré est obtenue. Ce résultat suggère que la relaxation des électrons est rapide et qu’il n’y a pas d’accumulation de phonons LO à cause du couplage des phonons

optiques polaires avec les modes de plasmons amortis. Cependant, dans un calcul de mobilité, les distributions de porteurs de charge ne sont que très peu déplacées de leur position d'équilibre. Ce n'est pas le cas lors de la photo-excitation de porteurs par des photons à $\hbar\omega = 2eV$ dans GaAs où ils se trouvent énergétiquement loin des bords de bande. On s'attend donc à ce que les paramètres d'amortissement varient au fur et à mesure que les porteurs relaxent et rejoignent leur distribution d'équilibre thermique. Afin de prendre en compte la dépendance temporelle des paramètres d'amortissement, les taux moyens d'interaction total (V.2.8) sont utilisés ($\Gamma_i = W_{tot}^i$). Les temps moyens d'interaction totaux $1/W_{tot}^i$ calculés sont représentés en FIG. V.3.b.2. Ils varient beaucoup en fonction du temps, ce qui montre l'importance d'un modèle dynamique pour les paramètres d'amortissement. De plus, le changement de transmission normalisé calculé $N\Delta T$ (libellé LOPC(Γ_i)) en FIG. V.3.b.1) reproduit la seconde composante parfaitement ($t > 0.2 ps$). La première composante est contrôlée par les transferts d'électrons $\Gamma-L$, en accord avec [Bailey90]. Ceci est illustré sur la FIG. V.3.b.2 (transfert $\Gamma-L$) où le temps moyen d'interaction total décroît à cause des taux d'interaction plus élevés en vallée L. Il faut noter qu'ici, les potentiels de déformation pour les interactions électron-phonon intervallée $\Gamma-L$ n'ont pas spécifiquement été ajustés pour reproduire $N\Delta T$.

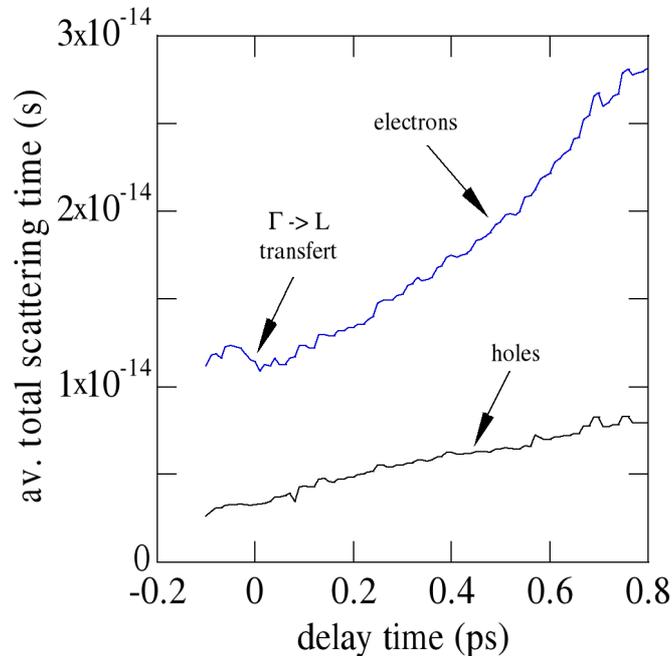


FIG. V.3.b.2: Temps moyens d'interaction total calculés ($1/W_{tot}^{i=e,h}$) pour les électrons et les trous en fonction du temps, issus et utilisés dans les calculs incluant la dépendance temporelle des paramètres d'amortissement ($\Gamma_{i=e,h} = W_{tot}^{i=e,h}$) pour le modèle LOPC.

4) Conclusion

L'étude d'expériences pompe-sonde dans différents régimes de densités de paires électron-trou photo-générées a permis de dégager des tendances vis-à-vis des effets d'accumulation de phonons LO connus sous le nom de « phonons chauds » et vis-à-vis des effets complexes d'écrantage/anti-écrantage de l'interaction porteur-POP menant aux LOPCM. De plus, le couplage de l'EMC porteurs avec un EMC phonons a conclu que la RTA n'est valide pour traiter la dynamique des phonons LO que lorsque la perturbation engendrée par la relaxation de porteurs chauds sur la population de phonons LO est modérée. Dans le cas contraire, la RTA surestime l'accumulation de phonons LO et surestime donc le ralentissement de la relaxation des porteurs photo-générés dû à la ré-absorption des phonons LO émis (« phonon bottleneck »). L'implémentation d'un modèle LOPCM avec des paramètres d'amortissement des modes de plasmons dynamiques et auto-cohérents a permis de conclure qu'au-delà d'une certaine densité de paires électron-trou, il n'y a plus d'accumulation de phonons LO mais couplage des ces modes de phonons avec les modes de plasmon, conclusion tirée de l'observation de la relaxation des porteurs photo-générés. C'est le cas pour GaAs avec $n = p = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

Références Bibliographiques :

- [Bailey90] D. W. Bailey, C. J. Stanton and K. Hess,
Phys. Rev. B 42, 3423 (1990)
- [Barman02] S. Barman and G. P. Srivastava,
Appl. Phys. Lett. 81, 3395 (2002)
- [Birman66] J. L. Birman, M. Lax and R. Loudon,
Phys. Rev. 145, 620 (1966)
- [Chen05] Y. Chen, D. Li, J. R. Lykes, and A. Majumdar,
J. Heat Transfer 127, 1129 (2005)
- [Garanin07] D. A. Garanin,
Phys. Rev. B 75, 94409 (2007)
- [Hamzeh11] H. Hamzeh and F. Aniel,
J. Appl. Phys. 109, 063511 (2011)
- [Kash85] J. A. Kash, J. C. Tsang, and J. M. Hvam,
Phys. Rev. Lett. 54, 2151 (1985)
- [Kim78] M. E. Kim, A. Das and S. D. Senturia,
Phys. Rev. B 18, 6890 (1978)
- [Kocevar85] P. Kocevar,
J. Phys. C 5, 3349 (1972) ; Physica B & C 134, 155 (1985)
- [Lacroix05] D. Lacroix, K. Joulain, and D. Lemonnier,
Phys. Rev. B 72, 064305 (2005)
- [Langot96] P. Langot, N. Del Fatti, D. Christofilos, R. Tommasi and F. Vallée,
Phys. Rev. B 54, 14487 (1996)
- [Lin86] W. Z. Lin, L. G. Fujimoto, E. P. Ippen and R. A. Logan,
Appl. Phys. Lett. 50, 124 (1986)
- [Lugli89] P. Lugli et al.,
Phys. Rev. B 39, 7852 (1989)
- [Mazumder01] S. Mazumder and A. Majumdar,
J. Heat Transfer 123, 749 (2001)
- [Mermin70] N. D. Mermin, Phys.
Rev. B 1, 2362 (1970)
- [Meyer83] J. R. Meyer and F. J. Bartoli,
Phys. Rev. B 28, 915 (1983)

- [Mittal10] A. Mittal and S. Mazumder,
J. Heat Transfer, 132, 052402 (2010)
- [Nikitina09] L. N. Nikitina, S. V. Obukhov and V. G. Tyuterev,
Russian Physics Journal 52, 742 (2009)
- [Pötz83] W. Pötz and P. Kocevar,
Phys. Rev. B 28, 7040 (1983)
- [Ridley99] B. K. Ridley,
« Quantum Processes in Semiconductors »,
4th ed. (Oxford Science Publications, Oxford, 1999)
- [Stimets70] R. W. Stimets and B. Lax,
Phys.Rev. B 1, 4720 (1970)
- [Tea11] E. Tea and F. Aniel,
J. Appl. Phys. 109, 033716 (2011)
- [Tsang85] J. C. Tsang, J. A. Kash, and S. S. Jha,
Physica B & C 134B, 184 (1985)
- [Varga65] B. B. Varga,
Phys. Rev. 137, A1896 (1965)
- [vonderLinde80] D. von der Linde, J. Kuhl, and H. Klingenberg,
Phys. Rev. Lett. 44, 1505 (1980)
- [Wang92] J.-Q. Wang, Z.-Q Gu, M.-F. Li and W.-Y. Lai,
Phys. Rev. B 46, 12358 (1992)
- [Zollner88] S. Zollner, S. Gopalan and M. Cardona,
Appl. Phys. Lett. 54, 614 (1988)
- [Zollner90] S. Zollner, S. Gopalan and M. Cardona,
J. Appl. Phys. 68, 1682 (1990)

CHAPITRE VI : CELLULES SOLAIRES A PORTEURS CHAUDS

La demande en énergie ne cesse d'augmenter avec l'accroissement de la population mondiale et l'amélioration du niveau de vie dans certains pays. A ce jour, le moyen le plus efficace en terme de puissance produite est l'énergie nucléaire. Cependant, même si l'énergie nucléaire (actuelle) a été domptée depuis des décennies, elle reste dangereuse (récent incident au Fukushima Daiichi Nuclear Power Station, Japon, en Mars 2011), sans parler du traitement des déchets. De plus, les réserves de matériaux fissionables ne sont pas infinies et leurs exploitations peuvent donner lieu à des débats politiques houleux... Dans ce contexte, l'énergie solaire se place comme un moyen alternatif pour produire de l'énergie. En effet, le soleil représente une source d'énergie infinie à notre échelle et ne produit pas directement de déchets (sur Terre). Actuellement, la plupart des cellules solaires disponibles sur le marché sont constituées d'absorbant en silicium. On distingue différentes technologies au sein de la famille silicium telles que les poly ou les mono cristallines atteignant des rendements maximum de l'ordre de 20%. De nombreuses autres technologies existent utilisant d'autres matériaux. Citons notamment les cellules multi-jonction qui possède actuellement le record avec un rendement de l'ordre de 40% (FIG. VI.0.1).

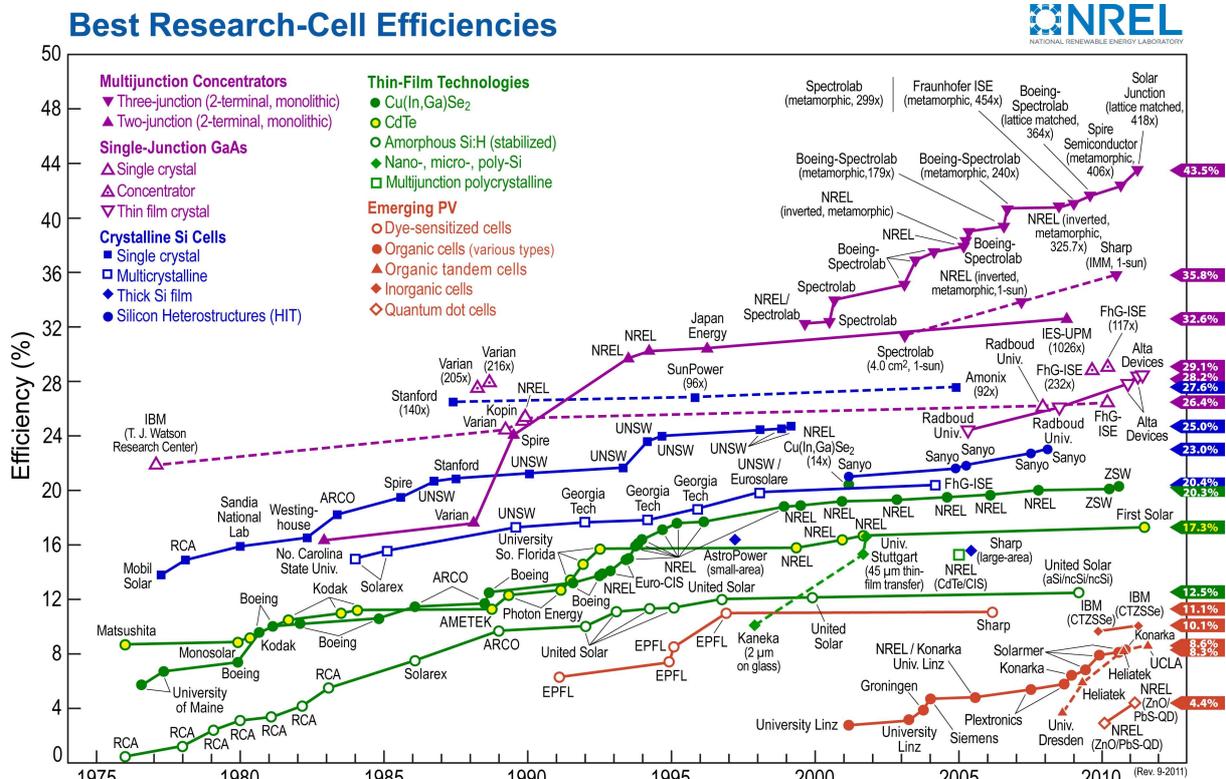


FIG. VI.0.1 : Différentes technologies de cellules solaires et rendements respectifs [Kazmerski11].

Sans perdre de vue les préoccupations relatives à la production des panneaux solaires telles que le coût ou les pollutions associées aux matériaux utilisés [rapport APS/MRS], l'étude présentée ici se focalise sur un matériau disponible à l'heure actuelle : $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$. Il présente une énergie de bande interdite petite et de bonnes propriétés de transport, faisant de lui un bon candidat pour une Cellule Solaire à Porteur Chaud (CSPC). Tout d'abord, afin d'introduire avec plus de précision la problématique accompagnant les CSPCs, les concepts liés aux cellules solaires de 1^{ère} génération vont être présentés. Les différentes sources de « pertes » limitant la conversion de l'énergie solaire en énergie électrique identifiées, le concept de CSPC sera présenté avec les caractéristiques proposant un moyen de réduire les pertes de conversion.

1) Cellule Solaire à Porteurs Chauds

Le cœur de la cellule solaire est l'absorbeur : le matériau absorbant l'énergie solaire en donnant naissance à des paires électron-trou. Ces paires électron-trou photo-générées sont extraites par des contacts et fournissent le courant électrique. Le rendement de la cellule est alors défini par le rapport entre la puissance délivrée par la cellule (le produit du courant avec la tension aux bornes de la cellule $I_{ext} \times V_{ext}$) et la puissance reçue P_{sun}

$$\eta = \frac{I_{ext} \times V_{ext}}{P_{sun}} \quad (\text{VI.1.1})$$

Les CSPC font parties d'une famille de cellules solaires dites de 3^{ème} génération, qui vise à tirer un meilleur profit des paires électron-trou photo-générées que les cellules des générations précédentes afin de maximiser le rendement [Brown09] [Green02]. Leur rendement théorique maximal d'environ 86% se rapproche bien plus de la « limite absolue » (95%, limite de Carnot) que le rendement théorique maximal des cellules de 1^{ère} génération telles que les cellules à base de silicium mono cristallin (40%, limite de Shockley-Queisser). De nombreux facteurs influent sur le rendement final d'une cellule. Le premier est l'éclairement. En effet, les mesures/calculs de rendement se font sur des cellules/modèles éclairés par un spectre de radiation de type solaire. Un tel spectre est souvent modélisé par le rayonnement d'un corps noir à la température $T_{sun} = 5760K$ [Würfel97]. Ce type de spectre reproduit assez fidèlement le rayonnement du soleil mesuré au dessus de l'atmosphère (spectre AM0) [Würfel05]. La FIG. VI.1.1 montre le spectre modélisé, comparé à un spectre typique mesuré au niveau de la

mer dans une région au climat tempéré (spectre AM1.5). Les désignations AM0 et AM1.5 sont standard. Elles servent à paramétrer l'atténuation du rayonnement solaire suite à son passage dans l'atmosphère (où les photons peuvent être absorbés, diffusés, etc.) en fonction de la latitude. La traversée de l'atmosphère fait perdre environ un quart de la puissance du rayonnement solaire (passant d'environ $1.3 \text{ kW} / \text{m}^2$ à $1.0 \text{ kW} / \text{m}^2$). Cependant, l'intérêt n'est pas porté ici sur la modélisation fine du rayonnement incident, et le spectre de type AM0 sera utilisé par la suite. On négligera donc l'absorption atmosphérique. La puissance d'un tel type de spectre (émise par le soleil dans un angle solide donné, par unité de surface et par unité d'énergie) reçue par la cellule est calculée par la loi de Planck

$$\frac{dP_{sun}}{d\hbar\omega} = \frac{(C\Omega_{sun})}{4\pi^3\hbar^3c_0^2} \frac{(\hbar\omega)^3}{\exp(\hbar\omega/k_B T_{sun}) - 1} \quad (\text{VI.1.2})$$

où C est le facteur de concentration et $\Omega_{sun} = 6.8 \times 10^{-5}$ est l'angle solide sous lequel est vu le soleil. L'angle solide maximal sous lequel un rayonnement incident peut être collecté par la cellule, qui est modélisée par un plan, est $\Omega_{max} = \pi$. Donc, dans ce cas la concentration maximale théorique C vaut environ 46200 et sera considérée ici.

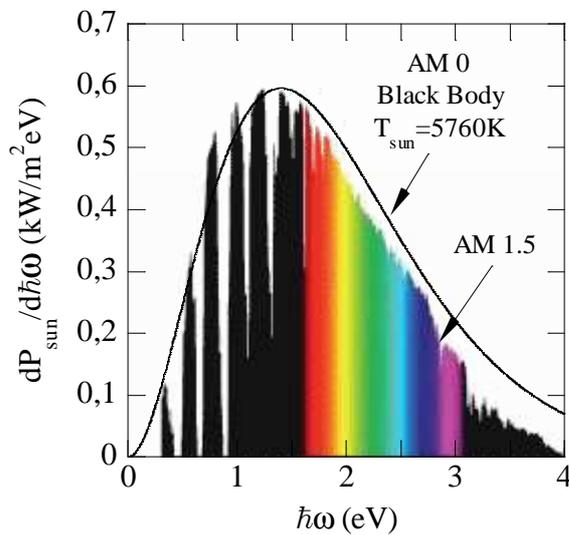


FIG. VI.1.1 : Puissance délivrée par le soleil (pour un angle solide $\Omega_{sun} = 6.8 \times 10^{-5}$, sans concentration) en fonction de l'énergie rayonnée, calculée avec le modèle du corps noir à 5760K, et mesurée (spectre AM1.5, reproduit à partir de [Brown09]).

De façon générale, le rendement croît avec la concentration car le taux d'absorption (et donc le courant) croît avec l'intensité du rayonnement incident. Les autres facteurs influant sur le rendement sont les pertes qui empêchent la restitution de la puissance solaire sous forme électrique. Ces différentes sources de pertes vont être identifiées pour une cellule solaire de 1^{ère} génération idéale.

On considère que la puissance pouvant être délivrée par une cellule, est une fraction de la puissance reçue du soleil, moins la puissance émise radiativement par l'absorbeur (luminescence). Le flux de photons émis (dans un angle solide Ω et par unité d'énergie) est donné par l'équation de Planck généralisée

$$n(E, T, \mu, \Omega) = \frac{\Omega}{4\pi^3 \hbar^3 c_0^2} \frac{E^2}{\exp\left(\frac{E - \mu}{k_B T}\right) - 1} \quad (\text{VI.1.3})$$

où E est l'énergie, T la température et μ le potentiel chimique des photons caractérisant le spectre de luminescence. Le rayonnement solaire incident correspond donc à $n(E, T_{sun}, 0, \Omega_{abs})$ avec $\Omega_{abs} = C\Omega_{sun}$, tandis que le rayonnement émis par l'absorbeur correspond à $n(E, T_A, eV, \Omega_{emi})$ avec $\Omega_{emi} = \pi$ pour une cellule plane. T_A est la température caractérisant les paires électron-trou et V est le potentiel aux bornes de la cellule [Würfel05]. En considérant que tous les photons d'énergie supérieure à l'énergie de bande interdite E_G de l'absorbeur de la cellule soient absorbés, le photo courant $I = Je$ est donné par la conservation du nombre de particule (CNP)

$$I/e = J = \int_{E_G}^{\infty} n(E, T_{sun}, 0, \Omega_{abs}) dE - \int_{E_G}^{\infty} n(E, T_A, eV, \Omega_{emi}) dE = J_{abs} - J_{emi} \quad (\text{VI.1.4})$$

Le rendement est alors donné par le rapport entre la puissance extraite de la cellule ($I \times V$) et la puissance reçue du soleil P_{sun} .

En étudiant le produit $I \times V$ on peut dégager des tendances pour une valeur de E_G donnée. Le courant I_{sc} est maximal à $V = 0$ (court-circuit). Le courant est nul $I = 0$ à la tension maximale V_{oc} (circuit ouvert). Le courant et la tension varient de façon opposée. Cette tendance est illustrée en FIG. VI.1.2 sur une caractéristique courant-tension type. Le courant maximal I_{sc} est lui-même maximal lorsque $E_G \rightarrow 0$ qui maximise le flux de photons absorbés et est donc limité par le flux de photons incident. La tension maximale V_{oc} est elle-même maximale lorsque $E_G \rightarrow \infty$ car elle caractérise le potentiel électro-chimique des paires électron-trou quand $J_{abs} = J_{emi}$, et est limitée par E_G . On s'attend donc à ce que l'énergie de bande interdite optimale aie une valeur finie entre 0 et ∞ . Le rendement et les pertes d'une cellule de 1^{ère} sont représentés en FIG. VI.1.2 en fonction de E_G . En examinant la figure, on retrouve le rendement maximal ($I_{mp} \times V_{mp}$, maximum power point) pour une cellule de 1^{ère}

génération de l'ordre de 30% avec E_G autour de 1.3eV et avec un éclairage sans concentration.

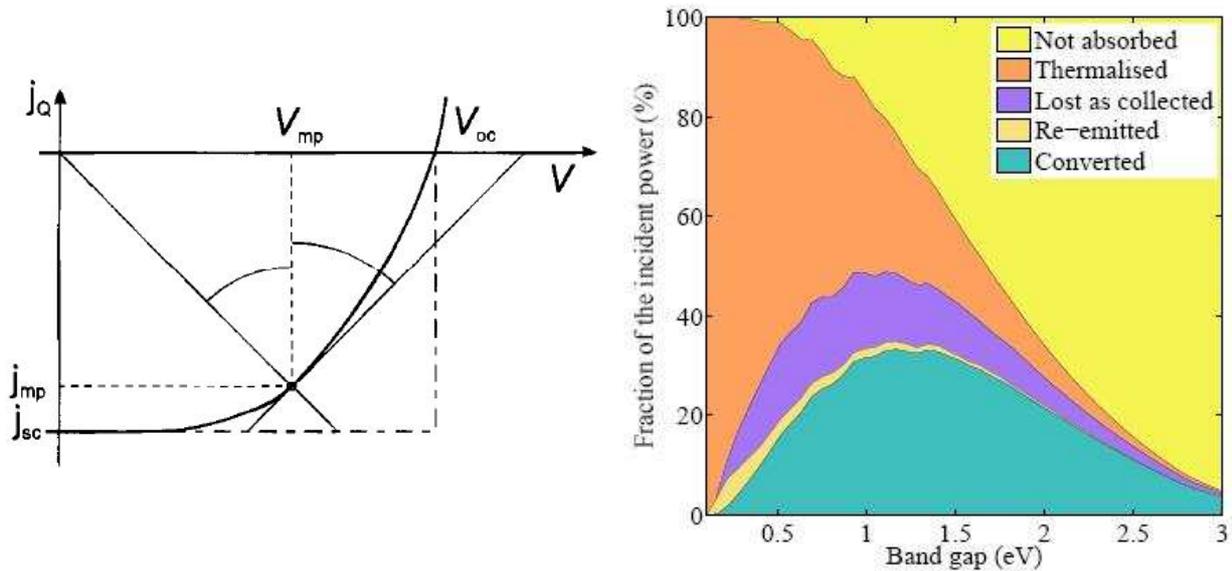


FIG. VI.1.2 : A gauche : caractéristique courant-tension typique. Le courant et la tension maximisant le rendement sont repérés par j_{mp} et V_{mp} (reproduit à partir de [Würfel05]). A droite, rendement (converted) et pertes (not absorbed, thermalised, lost as collected, re-emitted) d'une cellule de 1^{ère} génération (éclairage non concentré) (reproduit à partir de [LeBris11]).

On distingue quatre types de pertes :

- i) pertes E_G : tous les photons dont l'énergie est inférieure à E_G ne sont pas absorbés et ne participent donc pas au courant,
- ii) pertes par thermalisation : les paires électron-trou étant extraites à E_G , l'énergie en excès gagnée par l'absorption de photons de plus haute énergie est cédée au réseau cristallin,
- iii) pertes à l'extraction : lorsque $I \neq 0$, $V < V_{oc}$ ce qui diminue la puissance extractable,
- iv) pertes par ré-émission : les paires électron-trou qui se recombinent (radiativement) ne peuvent plus participer au courant

On retrouve l'échange entre les deux majeures sources de perte, les pertes par thermalisation et les pertes E_G , avec augmentation de E_G . Ceci a motivé le développement d'un type de cellule de 3^{ème} génération : les multi-jonctions. Il s'agit d'empilements de cellules, chacune ayant une énergie de bande interdite E_{Gi} différente. Ces cellules, possédant donc différents

absorbent pour différentes parties du spectre incident, limitent en même temps les pertes E_G et les pertes par thermalisation. Le rendement théorique maximal de ce type de cellule, avec un nombre infini de jonctions et un éclairage sous concentration maximale, est de 87%. Des rendements supérieurs à 40% ont été mesurés expérimentalement [King07] (43,5% [Green11]). D'autres types de cellules de 3^{ème} génération n'existent que sur le plan théorique comme les CSPC dont le fonctionnement théorique va brièvement être présenté.

Une CSPC (schématisée en FIG. VI.1.3) est composée d'un absorbeur, et de deux paires contact + électrode (une pour les électrons et une pour les trous). Les porteurs sont photo-générés dans l'absorbeur où ils s'équilibrent entre eux et où, idéalement, leur relaxation énergétique est très lente. Pour certains modèles théoriques [Ross82] [Würfel97], on considère un absorbeur sans relaxation. Les porteurs donnent alors naissance à des populations de porteurs « chauds » caractérisées par une température T_H (T_e et T_h pour les électrons et les trous) et des quasi niveaux de Fermi μ^e et μ^h résultant en un potentiel électro-chimique $\Delta\mu_H = \mu^e - \mu^h$. Ces porteurs chauds sont extraits de l'absorbeur par des Contacts Sélectifs en Energie (CSE) situés aux énergies E_{ext}^e et E_{ext}^h ($E_{ext} = E_{ext}^e - E_{ext}^h$), et de largeur en énergie δE . Ils sont ensuite injectés dans les électrodes caractérisés par une température T_C (température ambiante) et des quasi niveaux de Fermi μ^n et μ^p résultant en un potentiel électro-chimique $qV_{ext} = \mu^n - \mu^p$. En régime stationnaire, les courants d'électrons et de trous sont égaux $J_{ext} = J_{ext}^e = J_{ext}^h$. L'énergie électrique délivrée par une paire électron-trou extraite est le changement d'énergie libre de la population électron-trou dans l'absorbeur lorsqu'une paire est retranchée. L'énergie libre est l'énergie totale sans l'entropie. L'entropie sert ici à quantifier la chaleur accompagnant les porteurs. Dans le cadre de la CSPC, le changement d'énergie libre dans l'absorbeur par paire électron-trou extraite vers les électrodes (à T_C [Würfel05]) et la puissance délivrée par la cellule P qui en résulte sont donnés par

$$\begin{aligned} \Delta F &= E_{ext} - T_C \Delta S \\ P &= J_{ext} \Delta F = J_{ext} E_{ext} - J_{ext} T_C \Delta S \end{aligned} \quad (\text{VI.1.5})$$

Le terme $P_{ext} = J_{ext} E_{ext}$ est la puissance extraite de l'absorbeur, et non la puissance délivrée par la cellule $I_{ext} V = P$. Le terme $Q = J_{ext} T_C \Delta S$ est le flux de chaleur accompagnant les porteurs extraits, qui fait partie de la puissance totale stockée dans les populations de porteurs chauds mais qui ne peut être transformé en puissance électrique. Le changement d'entropie

ΔS dans l'absorbeur (à T_H [Ross82]) dû à l'extraction d'une paire électron-trou est déterminé à partir de l'équation d'état

$$\Delta S = (E_{ext} - \Delta\mu_H) / T_H \quad (\text{VI.1.6})$$

Comme l'extraction des paires électron-trou de l'absorbeur vers les électrodes à lieu dans des CSE de largeur $\delta E \ll k_B T_C$ où tous les porteurs (de même espèce) ont la même énergie, le transfert peut se faire de façon isentropique [Würfel97] [Humphrey02] [Conibeer10] [König10]. Dans ce cas, $\Delta S = (E_{ext} - qV) / T_H$. La variation d'entropie dans l'absorbeur et dans les électrodes sont identiques et (VI.1.6) peut être injecté dans (VI.1.5) pour trouver la puissance P et le potentiel électrique V délivrés par la cellule

$$\begin{aligned} Q &= J_{ext} (E_{ext} - \Delta\mu_H) \frac{T_C}{T_H} \\ P &= J_{ext} qV = J_{ext} (E_{ext} - (E_{ext} - \Delta\mu_H)(T_C / T_H)) \\ &= J_{ext} (\Delta\mu_H (T_C / T_H) + E_{ext} (1 - T_C / T_H)) \end{aligned} \quad (\text{VI.1.7})$$

Ces définitions ont été publiées dans [Ross82] pour $T_e = T_h = T_H$, et dans [Takeda09] pour $T_e \neq T_h$.

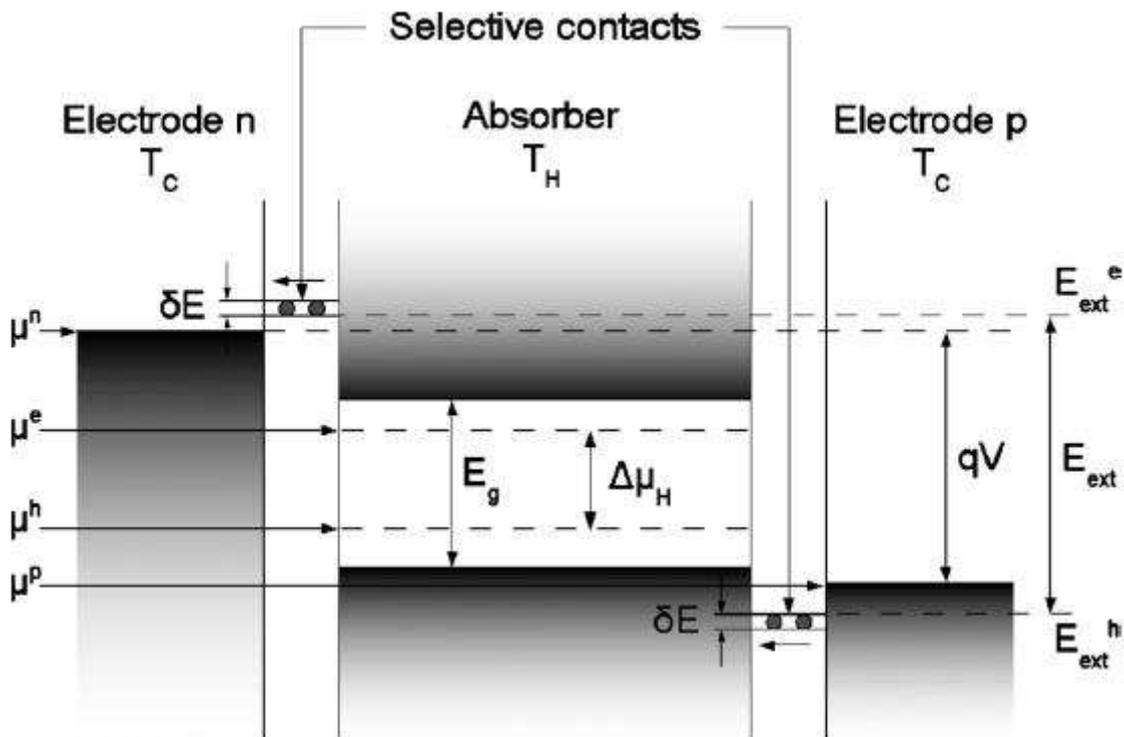


FIG. VI.1.3 : Schéma représentant les différents composants d'une Cellule Solaire à Porteurs Chauds (schéma reproduit de [LeBris10], description dans le texte).

Les différents paramètres entrant dans la définition de la puissance extraite ne sont pas indépendants, mais quelques tendances peuvent tout de même être dégagées. Contrairement à une cellule de 1^{ère} génération, la tension aux bornes d'une CSCP n'est pas limitée par E_G mais est commandée par E_{ext} . En effet, la tension dépend de la température des porteurs chauds T_H , de leur différence de potentiel électro-chimique $\Delta\mu_H$ et de l'énergie d'extraction de l'absorbeur E_{ext} . Dans une CSCP, on peut donc utiliser un absorbeur à petit E_G et ainsi limiter les pertes E_G , une des sources de pertes majeure dans une cellule de 1^{ère} génération. Les CSE limitent les pertes thermiques dans les contacts et ne laissent passer que les porteurs à la bonne énergie. Les porteurs photo-générées par des photons d'énergie $\hbar\omega > E_{ext}$ sont alors conservées dans l'absorbeur. La température élevée T_H résultante faisant tourner le convertisseur thermique ((VI.1.7) dans la limite où $\Delta\mu_H = 0$), la CSCP utilise donc les photons de grande énergie pour la production de puissance [Ross82]. Dans les cellules de 1^{ère} génération, l'énergie de ces photons est systématiquement perdue sous forme de chaleur (pertes thermiques, majeure source de perte).

Dans la littérature, il y a deux modèles pour calculer le rendement d'une CSCP : la conservation du nombre de particules [Ross82] (CNP), et le modèle impact-Auger [Würfel05]. Le modèle CNP n'est valide que si les flux de particules entrantes et sortantes sont égaux, ce qui permet d'écrire (VI.1.5)-(VI.1.7). Dans le modèle impact-Auger, il n'y a pas de conservation des flux de particule car une partie est altérée par les processus d'ionisation par choc et Auger (absents du modèle CNP). J_{ext} est alors déduit de la balance des flux d'énergie en considérant des CSE parfaitement sélectifs

$$J_{ext}E_{ext} = \int_{E_G}^{\infty} n(E, T_{sun}, 0, \Omega_{abs}) dE - \int_{E_G}^{\infty} n(E, T_H, 0, \Omega_{emi}) dE \quad (VI.1.8)$$

En considérant que les taux impact/Auger soient beaucoup plus grands que les taux de génération/recombinaison/extraction, la population de porteurs chauds est caractérisée par un potentiel électro-chimique nul et une température élevée. Les CSE thermalisant les porteurs de T_H à T_C de façon isentropique, on peut réinterpréter le flux d'énergie émis du point de vue des électrodes à T_C et en déduire le potentiel

$$V = \frac{\Delta\mu_H}{e} = \frac{E_{ext}}{e} \left(1 - \frac{T_C}{T_H} \right) \quad (VI.1.9)$$

La température T_H contrôle le courant et le potentiel. Dans la limite $E_G \rightarrow 0$ (couverture maximale du spectre solaire, pertes E_G minimisées), J_{ext} et V varient de façon opposée avec T_H . La même puissance délivrée peut donc être atteinte avec un grand courant et un petit potentiel ou avec un petit courant et un grand potentiel [Würfel05].

Il faut noter que dans ces modèles théoriques où l'absorbeur n'existe qu'au travers de E_G , la puissance dépend de $E_{ext} = E_{ext}^e - E_{ext}^h$ mais pas directement des énergies auxquelles les porteurs sont extraits E_{ext}^e et E_{ext}^h . Grâce à ses caractéristiques particulières, le rendement théorique maximal d'une CSCP est d'environ 65% calculés en CNP sans concentration, 85% et environ 50% calculés en impact-Auger sous concentration maximale et sans concentration respectivement. Ces rendements sont bien supérieurs à ceux de cellules de 1^{ère} génération.

Une des plus lourdes hypothèses de ces modèles est l'absorbeur sans relaxation. En effet, dans les semiconducteurs (matériaux candidat pour le rôle d'absorbeur), il existe un fort couplage porteur-phonon LO via lequel les porteurs relaxent leur énergie en faveur du réseau cristallin et menant donc aux pertes par thermalisation. De plus, dans une CSCP cela empêcherait le maintien de la température T_H élevée des porteurs. Cependant, l'énergie alors stockée dans le bain de phonons ne se dissipe pas instantanément. Ce temps de latence donne lieu aux populations de phonons chauds (CHAPITRE V) qui ont pour effet de ralentir la relaxation énergétique des porteurs. Cela pourrait aider à maintenir la température des porteurs élevée. Des modèles tenant compte des pertes thermiques à l'aide de temps de relaxation ont été développés [Takeda09]. Un autre modèle tient compte des pertes thermiques dans l'absorbeur et, pour la première fois, également dans les contacts [LeBris10]. Dans la configuration utilisée ($T_e \neq T_h, m_e \neq m_h$) et en utilisant des paramètres matériau de type semiconducteur III-V et un facteur de concentration $C = 1000$, le rendement théorique maximal est limité à 50-55%. Cette étude est cependant basée sur le modèle CNP pour le calcul de J_{ext} , qui n'est plus valide si les processus d'ionisation par choc et Auger sont importants. En étudiant les différents paramètres optimisés, l'étude a conclu que, à la vue des densités et températures atteignables dans l'absorbeur modélisé, les processus d'ionisation par choc et Auger peuvent être négligés.

La suite de ce chapitre est dédiée à une modélisation d'une CSCP avec un absorbeur « réel ». Il s'agit de InGaAs dont la structure électronique est calculée par NLEPM et les paramètres de transport fixés par les précédents calculs EMC, donc non ajustables. Les processus de génération/recombinaison incluent la photo-excitation, la recombinaison

radiative, l'ionisation par choc, et tous les processus Auger autorisés dans le modèle à 6 bandes. Ces processus sont tous évalués directement sur la structure électronique NLEPM et sur les populations de porteurs échantillonnées dans l'EMC. La conservation du nombre de particule sera levée car les CSE seront modélisés avec leur fenêtre de transmission en énergie. J_{ext} sera alors déduit des processus de génération/recombinaison avec l'éclairement et de la modélisation des CSE. En négligeant le couplage phonon-plasmon (semi-conducteurs polaires), l'impact des populations de phonons chauds issues de la relaxation des porteurs sera étudié. En effet, T_H sera déterminée par la relaxation des porteurs dans l'EMC, et donc non ajustée.

2) Modélisation des Contacts Sélectifs en Energie

Une des caractéristiques essentielles au bon fonctionnement des CSPCs est l'extraction des porteurs libres via les CSE. En effet, l'extraction par CSE permet un transfert isentropique des porteurs de charge, en limitant les pertes thermiques dans les contacts [Würfel97] [Humphrey02]. Dans la pratique, un CSE peut être réalisé à l'aide d'une barrière tunnel avec un niveau résonant (quantum dot, impureté etc.) [König10] ou avec un matériau à largeur de bande très petite [Würfel97]. Pour la modélisation de ce type de contact, un modèle simple qui permet de calculer les probabilités de passage tunnel très rapidement a été choisi. De plus, un contact « parfait » est considéré. La transmissivité du contact est donc totale dans plage d'énergie δE sur laquelle s'effectue l'extraction des porteurs.

$$\begin{cases} T(E) = 1, & E \in [E_{ext}^{e,h}, E_{ext}^{e,h} + \delta E] \\ T(E) = 0, & E \notin [E_{ext}^{e,h}, E_{ext}^{e,h} + \delta E] \end{cases} \quad (\text{VI.2.1})$$

De tels contacts à la transmission parfaite donneront une information par rapport à la limite supérieure de la puissance extraite. La probabilité $w(\vec{k})$ de passer au travers du contact est calculée à partir de la fréquence à laquelle le porteur se présente devant le contact. En considérant que l'absorbeur est modélisé par un plan infini d'épaisseur L_z , que les porteurs sont totalement réfléchis s'ils ne traversent pas le contact et que le CSE est dans le plan (x, y) , on obtient

$$w(\vec{k}) = \frac{|v_z(\vec{k})|}{2L_z} T(E_{\vec{k}}) \quad (\text{VI.2.2})$$

Un tel modèle permet le calcul du courant sans avoir à recourir à la conservation du nombre de particules ($J_{ext} = J_{abs} - J_{emi}$). En effet, le photo courant peut être obtenu en intégrant (VI.2.2) sur la population de porteurs qui est déterminée par l'éclairement et les processus de génération/recombinaison (et le photo courant) dans l'EMC. Dans cette modélisation, la seule chose imposée est l'éclairement pour les processus d'absorption. A $E_{ext}^{e,h}$, δE et L_z fixes, le courant et la tension délivrés sont alors fonction de (et imposés par) l'éclairement uniquement.

Idéalement, la fenêtre de transmission des CSE doit être infime $\delta E \rightarrow 0$ pour éliminer les pertes thermiques dans les contacts. Dans la suite $L_z = 100 \text{ nm}$ (épaisseur courante, entrant en jeu dans le calcul du courant et de l'absorption) et $\delta E = 10 \text{ meV}$ seront considérés. Dans l'EMC, les densités n de porteurs sont échantillonnées par N super particules. Ces super particules (disons sphériques) occupent donc un volume $n/N = (2/(2\pi)^3) \times (4\pi\Delta k^3/3)$ dans l'espace réciproque et donc possèdent par définition une largeur en énergie $\Delta E \equiv \Delta k \times (dE/dk)$. Il n'est donc pas possible de modéliser des CSE infiniment sélectif dans l'EMC à moins d'avoir un échantillonnage des populations infiniment précis. $\delta E = 10 \text{ meV}$ a été choisi car il s'agit de la borne supérieure pour la sélectivité des CSE. Pour $\delta E < 10 \text{ meV}$, le gain en rendement dû à la diminution des pertes par thermalisation dans les contacts est extrêmement faible [LeBris10]. Pour tous les calculs effectués dans la section suivante, les paramètres d'échantillonnage utilisés sont $n = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et $N = 50 \times 10^3$ (optimisés par rapport aux contraintes imposées par le calculateur IDA de l'université). Une évaluation rapide sur la vallée Γ non parabolique de la 1^{ère} bande de conduction pour $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ donne pour la largeur énergétique des super-particules (électrons) $\Delta E = 6 \text{ meV}$ à $E = 40 \text{ meV}$ et $\Delta E = 12 \text{ meV}$ à $E = 200 \text{ meV}$. Les courants d'électrons calculés seront donc surestimés pour $E_{ext}^e = 200 \text{ meV}$, mais seulement très légèrement (énergies mesurées par rapport au minimum de la bande de conduction). Pour les super-particules (trous) les largeurs énergétiques sont très minces car les masses effectives caractérisant les bandes de valence sont beaucoup plus grandes.

Ce modèle pour le calcul du courant (fonction de l'éclairement et de $E_{ext}^{e,h}$ uniquement) diffère substantiellement des méthodes couramment utilisées. En effet, le courant et la tension aux bornes de la cellule sont fonction l'un de l'autre. Cette dépendance apparaît dans l'expression du courant extrait dans le formalisme de Landauer [LeBris10]

$$J_{ext}^{e,h} = \frac{N_C}{\pi\hbar} \int (f_H^{e,h}(E) - f_C^{e,h}(E)) T^{e,h}(E) dE \quad (\text{VI.2.3})$$

où $T^{e,h}(E)$ est la transmissivité précédemment définie, N_C la densité surfacique des niveaux d'énergie formant les CSE, et où $f_H^{e,h}$ et $f_C^{e,h}$ sont respectivement les fonctions de distribution des électrons/trous dans l'absorbeur et dans les électrodes (la tension V est fonction de $f_C^{e,h}$ FIG. VI.1.3). Ainsi, la caractéristique courant-tension d'une cellule est obtenue en calculant la tension en fonction du courant ou vice versa. Le modèle présenté ici pour le courant correspond au cas $f_C^{e,h} = 0$ ($V \rightarrow -\infty$). Par extension, comme rien ne s'oppose au courant sortant, on considère que l'on est en court circuit ($V = 0$). En effet, en général le courant varie peu dans une caractéristique courant-tension pour les tensions négatives. Le calcul est donc représentatif également de la situation de court circuit. Ce choix permet l'étude du photo-courant en fonction des seuls paramètres « libres » du modèle de la cellule, c'est-à-dire $E_{ext}^{e,h}$ et l'éclairement.

3) Résultats : position énergétique des CSE et éclairement

La plupart des études sur les CSCP sont focalisées sur le rendement maximal que l'on peut obtenir étant données les caractéristiques du modèle pris en compte. Dans cette optique, le maximum de $P_C = I_{ext} \times V_{ext}$ est recherché en faisant varier les différents paramètres du modèle. Les courants d'électrons et de trous dépendent cependant des énergies E_{ext}^e et E_{ext}^h auxquelles se trouvent les CSE. Ces énergies n'apparaissent pas dans les modèles analytiques de CSCP où seule la différence $E_{ext} = E_{ext}^e - E_{ext}^h$ entre en jeu. Ceci ne pose pas de problème si l'on s'intéresse au cas emblématique où les bandes de conduction et de valence sont symétriques, ce qui a permis d'étudier l'influence de la largeur δE des CSE [LeBris10]. Ici, l'étude porte sur $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}$ où toute symétrie entre les bandes de conduction et de valence est inenvisageable du point de vue de la structure électronique, du transport et de la thermalisation. Afin de venir compléter les études théoriques disponibles dans la littérature, les résultats de cette section sont donc présentés en fonction des énergies d'extraction par les CSE E_{ext}^e et E_{ext}^h (valeurs absolues mesurées par rapport aux extrema des bandes) ce qui permettra d'illustrer les éventuels effets de l'asymétrie conduction/valence.

Comme les dépendances vis-à-vis de $E_{ext}^{e,h}$ sont systématiquement prises en compte, deux cas de figures ont été considérés. Dans le premier, un absorbeur simple a été modélisé. Dans le second, un miroir parfait a été ajouté à l'arrière de l'absorbeur afin de rallonger le trajet du rayonnement incident dans l'absorbeur et ainsi favoriser la photo-génération de densités de porteurs plus importantes. Ces configurations sont appelées « sans miroir » et « avec miroir » respectivement et correspondent à deux niveaux d'injection. Le rayonnement incident est considéré normal au plan formé par l'absorbeur. Le chemin optique d'un rayon dans le cas avec miroir est donc simplement doublé par rapport au cas sans miroir. Dans les calculs, l'éclairement est modélisé par le spectre (VI.1.2) sous concentration maximale. D'autres astuces existent pour améliorer l'absorption d'un semi-conducteur telles que par exemple les structurations de surfaces qui piègent la lumière à l'intérieur de l'absorbeur [Esteban10] [LeBris11]. L'utilisation d'un miroir seul permet cependant une étude simple pour deux taux de photo-génération différents. Pour ces deux cas de figures, la thermalisation est prise en compte via les interactions porteur-phonon mais la population de phonons est fixée à 300K (pas de « phonons chauds »). L'effet des populations de phonons chauds sera pris en compte dans la suite pour une configuration (E_{ext}^e, E_{ext}^h) donnée.

Chaque calcul débute avec des populations de porteurs nulles. Cela revient à négliger les densités de porteurs intrinsèques devant les densités qui seront photo-générées. Avec l'éclairement, le système évolue librement jusqu'à atteindre un équilibre, un régime stationnaire. Le temps physique minimal à simuler pour $E_{ext}^{e,h}$ entre 0 et 0.2eV est $t = 3\text{ns}$. Avec toutes les optimisations apportées au code de calcul (incluant la parallélisation sur 4 CPU) chaque calcul pour un point (E_{ext}^e, E_{ext}^h) dure entre 5 et 24 heures. Ces temps de calculs sont poussés à 14 et 46 heures avec la prise en compte des « phonons chauds ».

En FIG. VI.3.1 sont représentés les puissances absorbées et les courants extraits avec et sans miroir. Les portions de puissance absorbées par rapport à la puissance incidente sont 34% et 22% respectivement. Le spectre solaire incident étant le même dans les deux cas, les flux de photons absorbés et donc les taux de photo-génération sont proportionnels aux puissances absorbées. Cette proportionnalité ne s'applique cependant pas aux courants extraits de l'absorbeur. En effet, le courant extrait est le résultat d'un équilibre entre génération, recombinaison et extraction des porteurs. Cet équilibre implique les recombinaisons Auger. Or le taux de recombinaison Auger ne varie pas linéairement avec la densité (c.f. coefficient Auger). Les courants « perdus » à cause des processus Auger sont représentés en FIG. VI.3.2. On note une quasi complémentarité entre les courants extraits et Auger du type

$I_{abs} \approx I_{ext} + I_{Auger}$. Les recombinaisons radiatives sont négligeables devant les recombinaisons Auger. Cela est illustré en FIG. VI.3.3 où les puissances émises radiativement sont inférieures 1% des puissances absorbées.

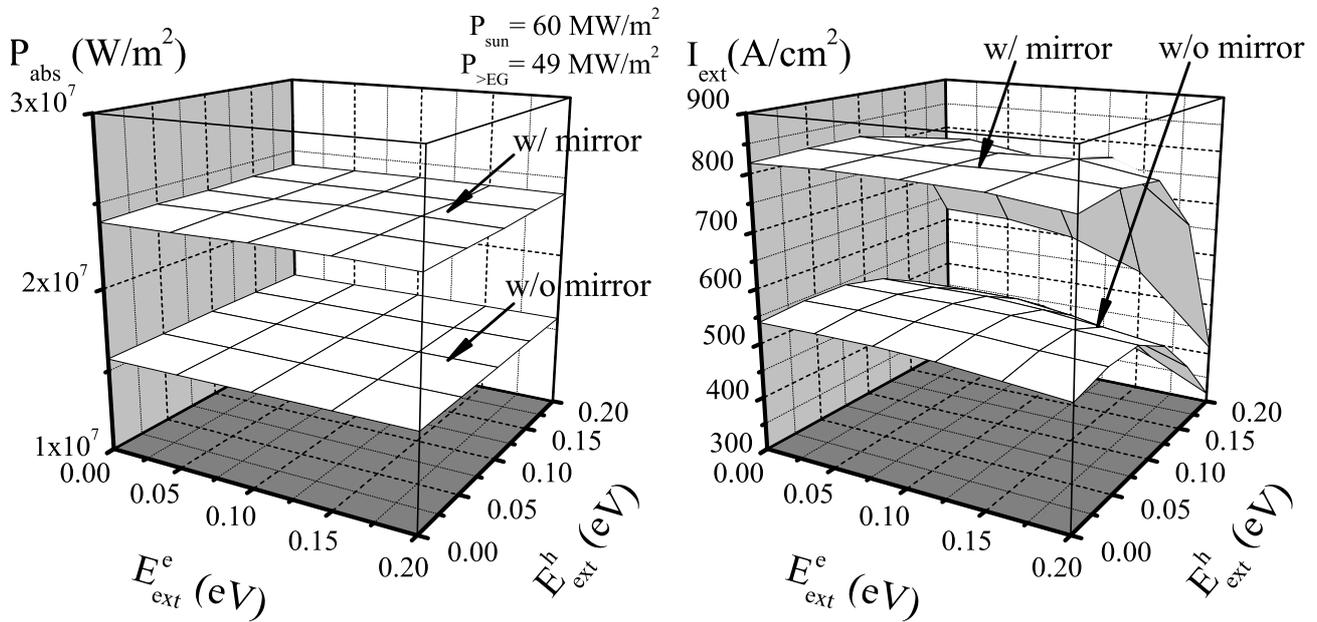


FIG. VI.3.1 : Puissances absorbées (à gauche) et courants extraits (à droite) pour les configurations avec et sans miroir.

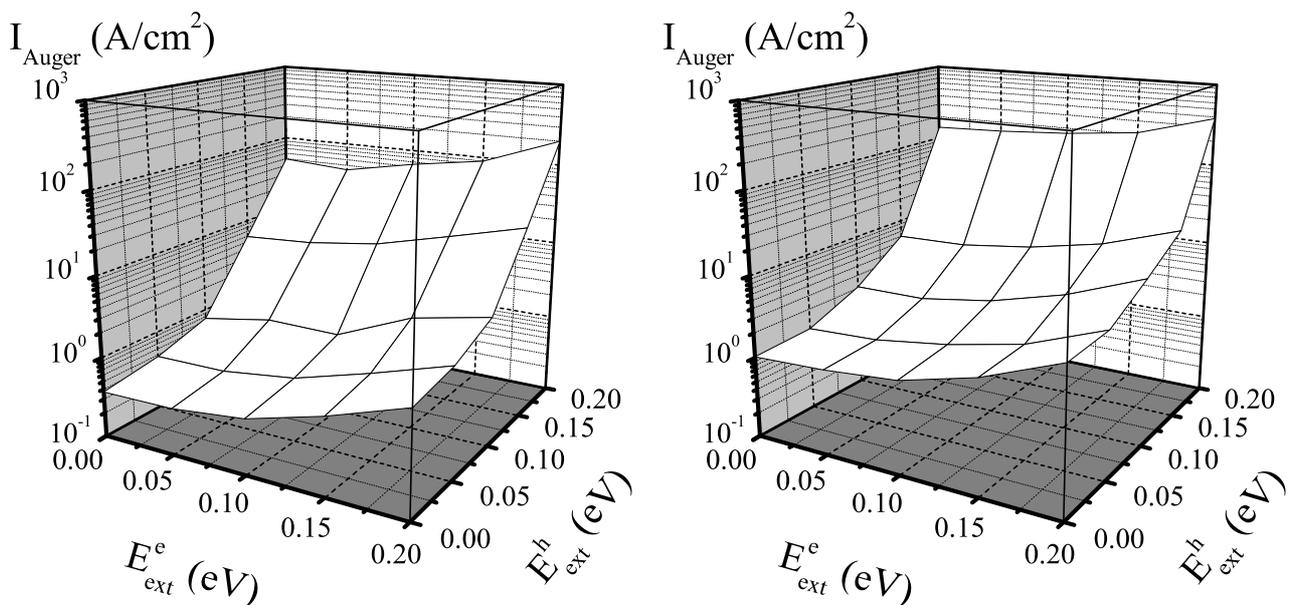


FIG. VI.3.2 : Courants éliminés par les différents processus Auger pour les configurations sans (à gauche) et avec miroir (à droite).

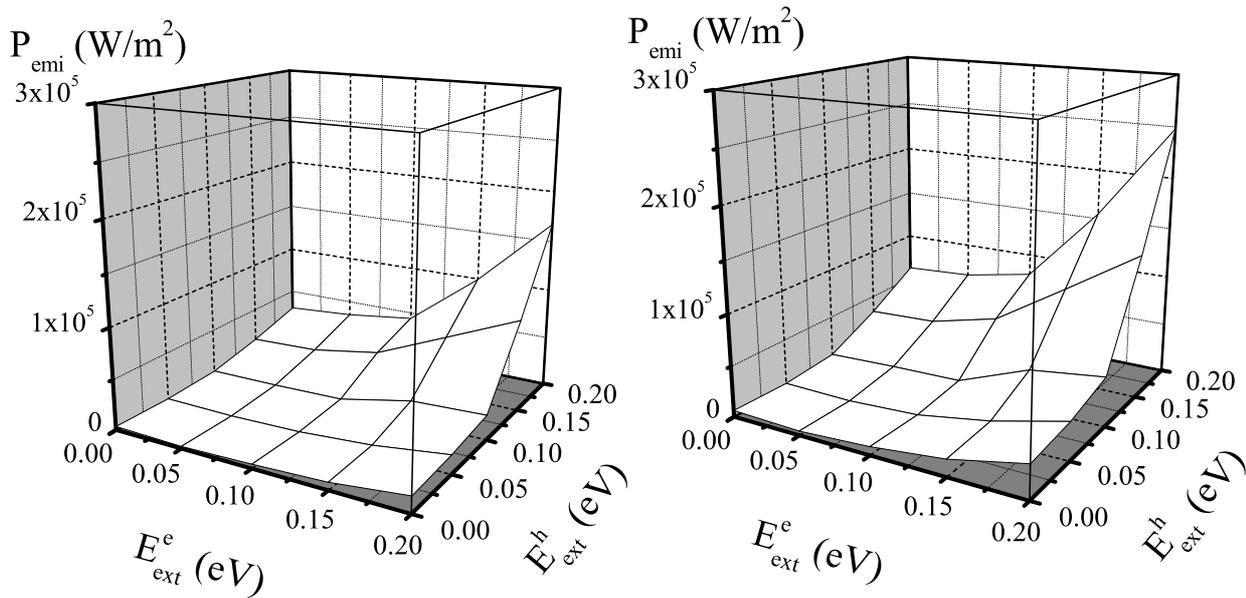


FIG. VI.3.3 : Puissances perdues radiativement pour les configurations sans (à gauche) et avec (à droite) miroir.

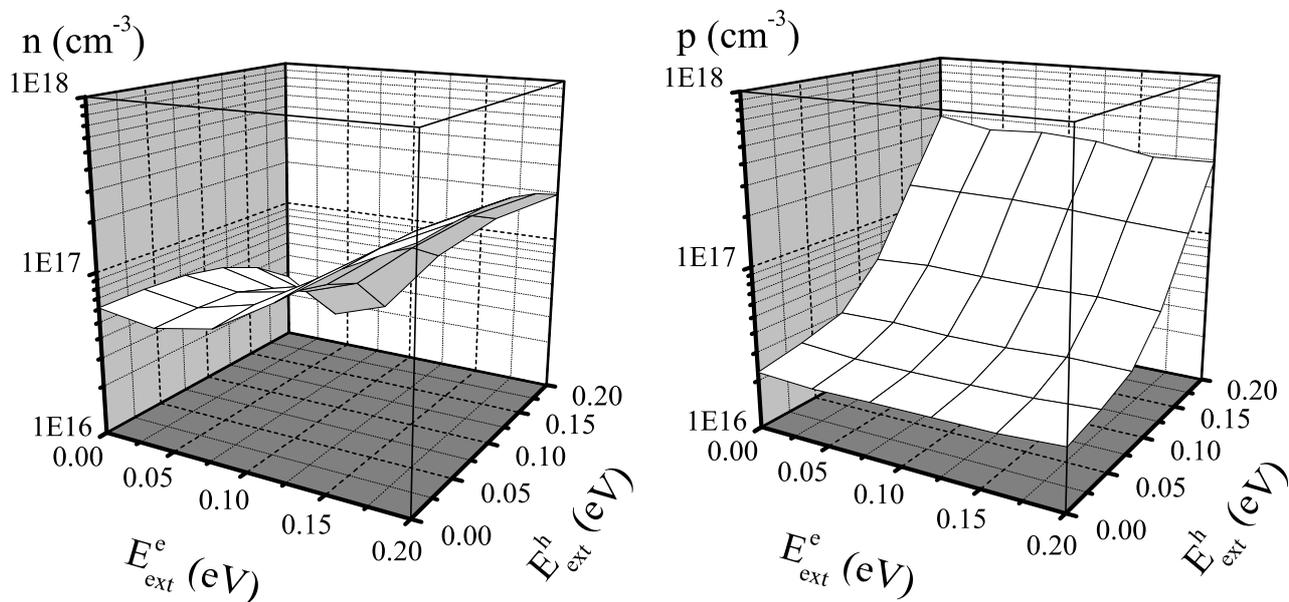


FIG. VI.3.4 : Densités d'électrons (à gauche) et de trous (à droite) retenues dans l'absorbeur (quasi identiques dans les configurations avec et sans miroir à cause des recombinaisons Auger et des courants extraits).

Les densités de porteurs retenues dans l'absorbeur sont représentées en FIG. VI.3.4 pour le cas sans miroir. Avec miroir, les densités retenues suivent les mêmes tendances et sont du même ordre. On note que les densités d'électrons augmentent avec E_{ext}^e , et que les densités de trous augmentent avec E_{ext}^h . Les porteurs répartis entre le bord de bande et $E_{ext}^{e,h}$ sont donc en quelque sorte stockés dans l'absorbeur. Cela est explicité dans (VI.2.3) où les porteurs se trouvant hors des fenêtres $T^{e,h}(E)$ ne participent pas au courant. Cette équation explique aussi pourquoi le courant décroît avec $E_{ext}^{e,h}$ car $f_H^{e,h}(E)$ décroît avec l'énergie quelle que soit la température. On note également que les densités de trous sont peu, voire insensibles à E_{ext}^e alors que la réciproque est fautive. Ceci est expliqué par le fait que le coefficient Auger pour les processus CVVV est plus grand que celui pour les processus CVCC (CHAPITRE III). Afin de caractériser les populations d'électrons et de trous retenues, leurs fonctions de distribution ont servi à ajuster des fonctions de distribution de type Fermi-Dirac à l'aide d'un algorithme de Levenberg-Marquardt modifié. Les résultats pour le cas avec miroir sont consignés en FIG. VI.3.5. On note que la différence de potentiel électro-chimique $\Delta\mu_H$ varie de façon simple avec $E_{ext}^{e,h}$ et suit les mêmes tendances que les densités de porteurs. $\Delta\mu_H$ reste inférieur à l'énergie de bande interdite indiquant des populations de porteurs non dégénérées. Les températures T_e des électrons, T_h des trous, et $T_{e,h}$ des paires électron-trou (obtenues à partir des spectres de luminescence) sont relativement constantes et restent égales à celle du réseau cristallin (300K). Cette caractéristique a également été prédite dans les modèles développés dans [LeBris11]. On note que même dans la configuration $E_{ext}^e = E_{ext}^h = 0.2 eV$, bien que le courant Auger $I_{Auger} = 383 A.cm^{-2}$ soit proche du courant extrait $I_{ext} = 413 A.cm^{-2}$, les populations d'électrons et de trous sont très bien caractérisées par des températures de 300K. Rappelons que lors d'une recombinaison Auger, une paire électron-trou est annihilée et un porteur (électron ou trou) gagne une énergie au moins égale à celle de la bande interdite. Une température de 300K indique alors que les pertes par thermalisations via les interactions porteur-phonon sont énormes.

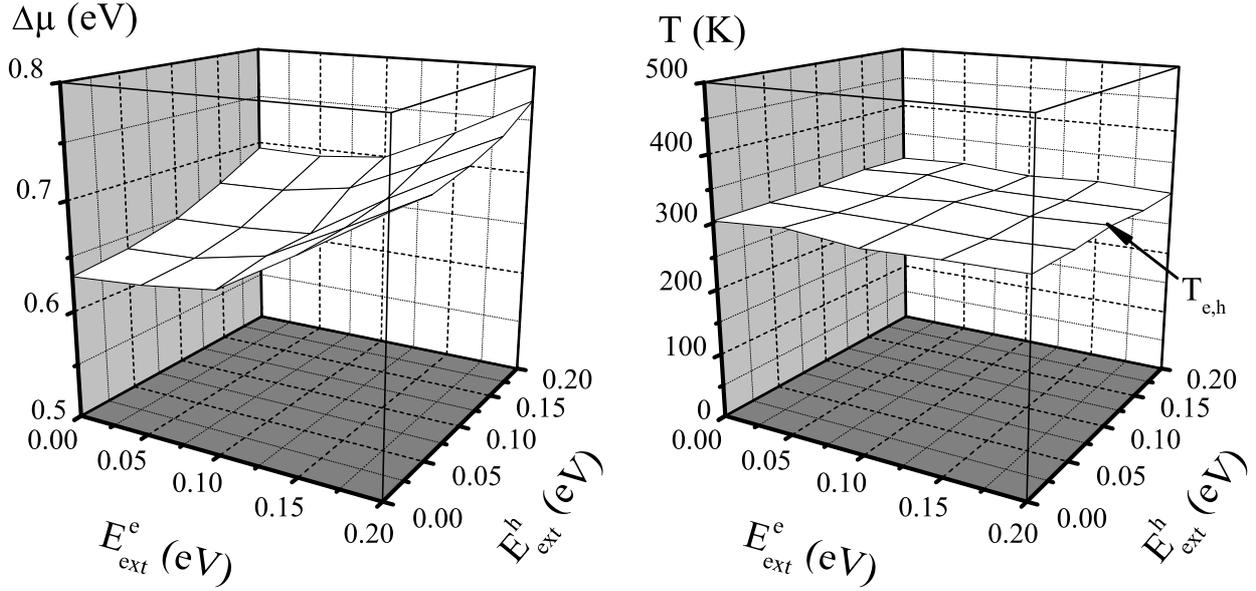


FIG. VI.3.5 : Différence de potentiel électrochimique $\Delta\mu_H$ (à gauche) et température T_H des populations d'électrons et de trous dans l'absorbeur (quasi identique dans les configurations avec et sans miroir).

Les pertes par thermalisation sont illustrées en FIG. VI.3.6, où l'on note que la puissance perdue par thermalisation constitue une bonne partie de la puissance absorbée. Cette fraction, P_{th}^{ext} / P_{abs} est quasi identique dans les configurations avec et sans miroir. La forme de la surface dans le plan (E_{ext}^e, E_{ext}^h) est assez simple. Plus les énergies d'extraction $E_{ext}^{e,h}$ sont grandes, plus la puissance extraite par paire électron-trou est grande, et moins les porteurs ont besoin d'émettre de phonons (relaxation énergétique) pour se trouver dans les fenêtres $T^{e,h}(E)$. Les pertes par thermalisation décroissent donc avec $E_{ext}^{e,h}$. Cependant, les densités de porteurs retenues dans l'absorbeur croissent avec $E_{ext}^{e,h}$ et donnent naissance aux processus Auger. Chaque paire électron-trou annihilée n'est, par définition, pas extraite, et excite un autre porteur qui va devoir perdre son excès d'énergie pour pouvoir se trouver dans une fenêtre $T^{e,h}(E)$. On s'attend donc à ce que les pertes par thermalisation augmentent dans les configurations (E_{ext}^e, E_{ext}^h) où les recombinaisons Auger jouent un rôle non négligeable.

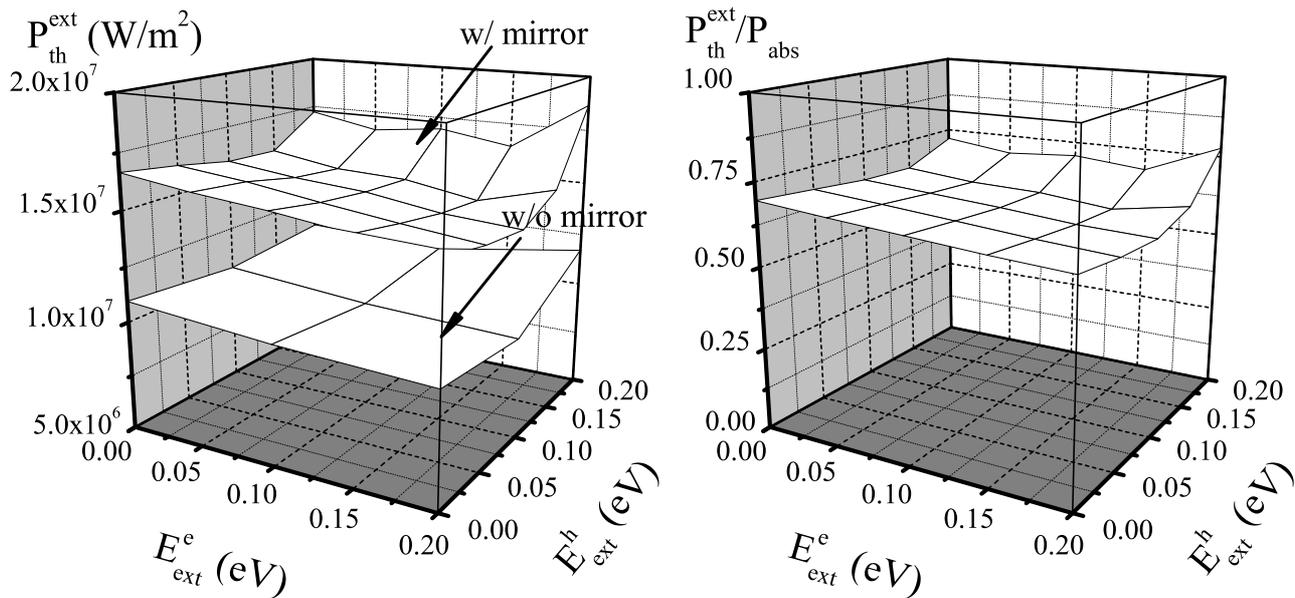


FIG. VI.3.6 : Puissances perdues par thermalisation $P_{th}^{ext} = P_{abs} - P_{emi} - P_{ext}$ évaluées à la sortie de l'absorbeur pour les configurations avec et sans miroir (à gauche) et puissance perdue par thermalisation rapportée à la puissance absorbée (à droite).

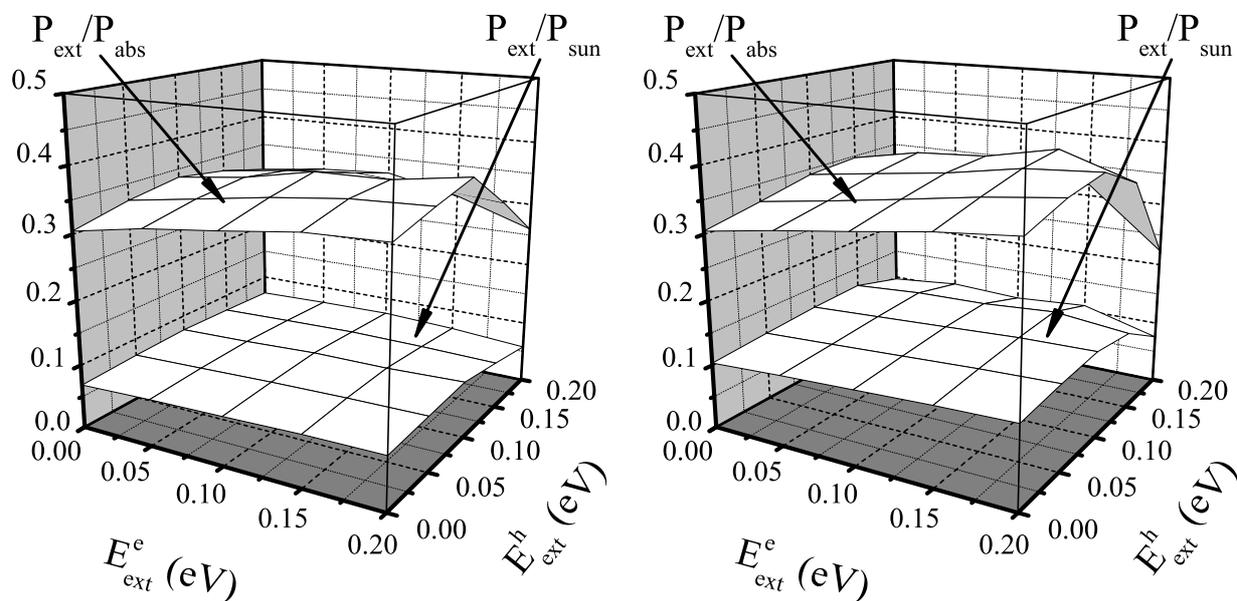


FIG. VI.3.7 : Puissances extraites de l'absorbeur $P_{ext} = J_{ext} \times E_{ext}$ rapportées aux puissances incidentes P_{sun} , et absorbées P_{abs} , pour les configurations sans (à gauche) et avec (à droite) miroir.

Enfin, en FIG. VI.3.7 sont représentées les puissances extraites rapportées aux puissances absorbées et aux puissances incidentes. Il ne s'agit pas des rendements car l'on se trouve dans une situation sans tension. P_{ext} est la puissance extraite de l'absorbeur, pas la puissance délivrée par la cellule. Le rapport puissance extraite sur puissance absorbée permet tout de même d'illustrer l'efficacité de conversion de l'absorbeur en fonction du couple (E_{ext}^e, E_{ext}^h) . Ce rapport, P_{ext}/P_{abs} , est quasiment le complémentaire de P_{th}^{ext}/P_{abs} car la puissance perdue par recombinaison radiative est négligeable.

4) Impact des phonons chauds sur la distribution électronique

Cette section est centrée sur les effets d'accumulation de phonons LO (« phonons chauds ») qui créent le « phonon bottleneck » ralentissant la relaxation des porteurs. Des calculs ont été menés dans les mêmes conditions que les configurations avec miroir pour le point $(E_{ext}^e = 200\text{ meV}, E_{ext}^h = 100\text{ meV})$ où P_{ext} est maximum, en prenant en compte l'accumulation de phonons LO avec l'approximation de temps de relaxation (RTA, CHAPITRE V). Avec un temps de vie $\tau_{LO} = 2.5\text{ ps}$ (inspiré de celui de GaAs, car inconnu dans $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$), on note très peu de modifications vis-à-vis des résultats sans accumulation de phonons. De plus, les fonctions de distribution des électrons et des trous sont encore bien reproduites par la statistique de Fermi-Dirac avec des températures proches de 300K. A la vue des densités de porteurs photo-générées retenues dans l'absorbeur relativement faibles ($n = 3.5 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$ et $p = 5.1 \times 10^{16}\text{ cm}^{-3}$), il n'a pas été jugé nécessaire d'entreprendre une étude avec le couplage des modes de phonons LO avec les modes de plasmons (LOPC, CHAPITRE V).

Des recherches ayant pour but de garder les porteurs « chauds » sont menées en limitant les pertes par thermalisation [LeBris*], ou par ingénierie phononique [Conibeer10]. Dans cette optique, le temps de vie des phonons LO τ_{LO} a été artificiellement allongé à 5, 10 et 20 ps afin de déterminer son impact sur les porteurs. Les fonctions de distribution des phonons LO en fonction du temps sont représentées en FIG. VI.4.1. On note que la perturbation sur la distribution de phonons engendrée par la relaxation des porteurs, qui affecte essentiellement les phonons de centre de zone, est faible pour $\tau_{LO} = 2.5\text{ ps}$. Elle augmente dramatiquement pour des temps de vie plus longs.

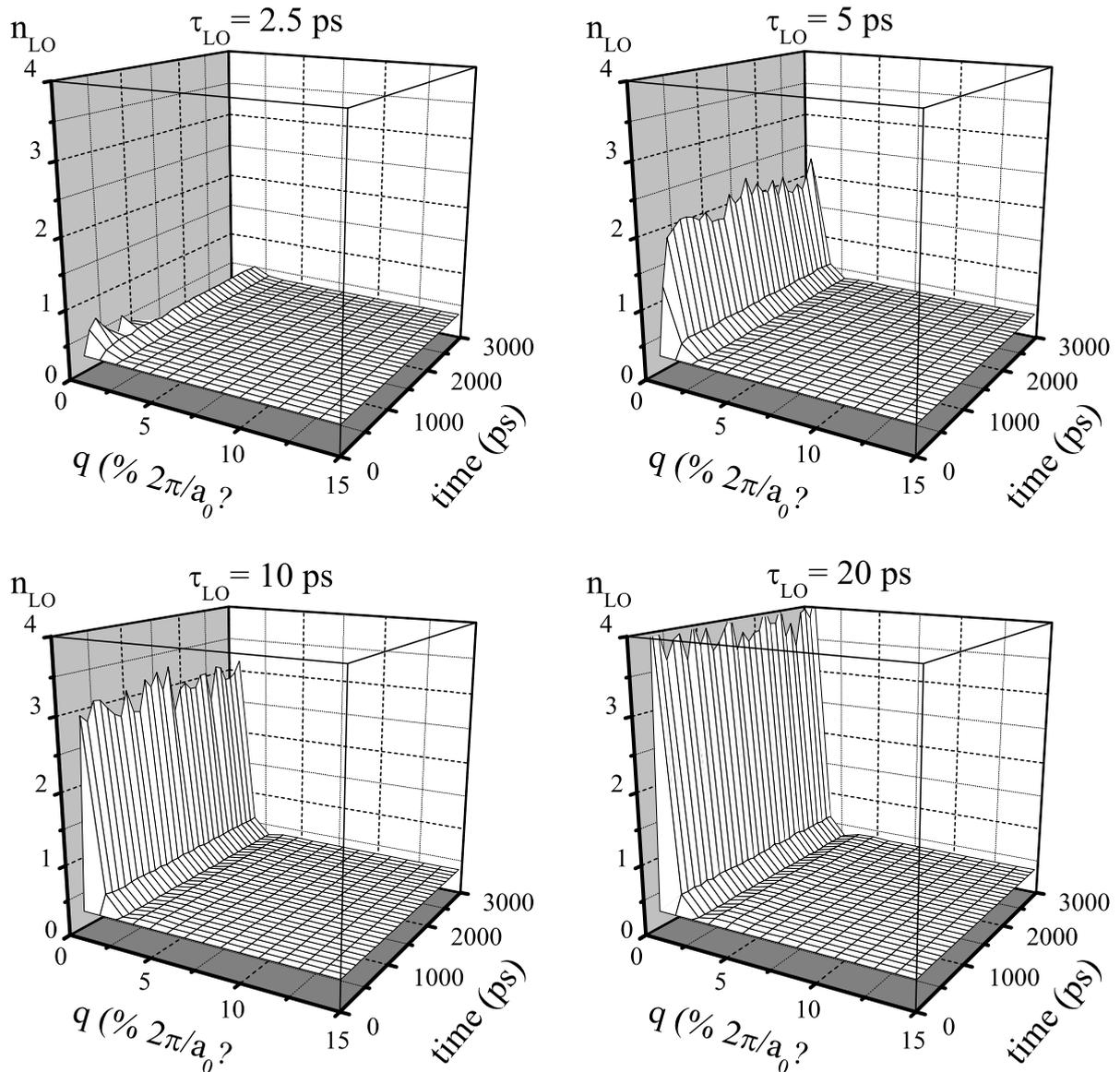


FIG. VI.4.1 : Fonction de distribution des phonons LO en fonction du vecteur d'onde et du temps, pour différents temps de vie considérés.

Alors que pour $\tau_{LO} = 2.5 \text{ ps}$ la distribution des porteurs est peu affectée par le « phonon bottleneck », pour $\tau_{LO} > 2.5 \text{ ps}$ la population d'électrons montre des signes d'échauffement (FIG. VI.4.2). Elle est caractérisée par des températures de plus en plus élevées lorsque les temps de vie τ_{LO} sont longs. Les trous restent cependant « froids » à la température ambiante. Cependant, contrairement à ce que l'on pourrait penser de prime abord, le taux de perte d'énergie $-(dE/dt)$ de la population d'électrons ne diminue pas forcément à cause du ralentissement de la relaxation des électrons dû aux temps de vie τ_{LO} longs (FIG. VI.4.2).

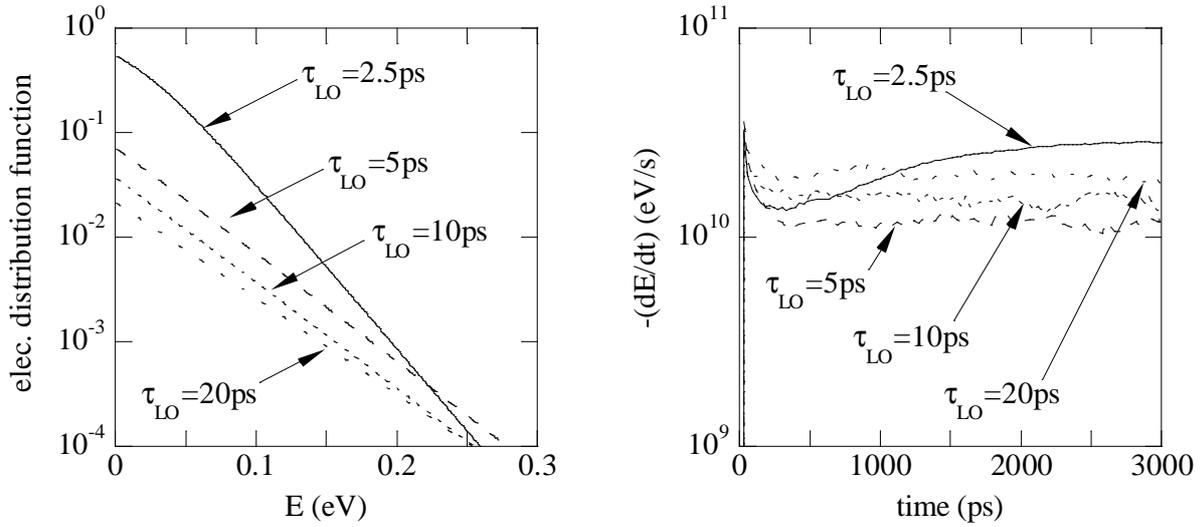


FIG. VI.4.2 : Fonctions de distribution (à gauche) et taux de perte d'énergie (à droite) des électrons, en fonction du temps, pour différents temps de vie τ_{LO} considérés.

En effet, les populations d'électrons sont caractérisées par des températures plus élevées mais aussi par des énergies moyennes plus élevées (TABLE VI.4.1). Les taux d'interaction variant avec la densité d'états à l'énergie de l'état final (CHAPITRE II), ils augmentent avec l'énergie de l'état initial. C'est la raison pour laquelle $-(dE/dt)$ diminue lorsque τ_{LO} passe de 2.5 à 5 ps mais augmente ensuite pour des temps de vie τ_{LO} plus longs. Pour τ_{LO} entre 2.5 et 5 ps, l'énergie moyenne augmente mais le « phonon bottleneck » devient très effectif car la distribution de phonons devient très perturbée (FIG. VI.4.1). Pour des temps de vie τ_{LO} plus longs, l'énergie moyenne augmente toujours mais la perturbation n'augmente plus drastiquement. Bien que présentant une température électronique plus élevée avec un temps de vie de phonons LO long, l'absorbeur est encore loin de remplir les critères optimaux calculés dans [Ross82] ($T_H = 3600K$, $\Delta\mu_H = -4.2 eV$) et [Würfel97] ($T_H = 2470K$).

τ_{LO} (ps)	$\langle E_e \rangle$ (eV)	μ_e (eV)	T_e (K)
2.5	0.060	0.005	320
5	0.099	-0.107	486
10	0.137	-0.140	497
20	0.173	-0.179	544

TABLE VI.4.1 : Energie moyenne, quasi niveau de Fermi et température caractérisant la distribution d'électrons en fonction du temps de vie des phonons LO.

5) Conclusion

La compilation des travaux présentés dans les CHAPITRES I (structure électronique), II (ECM Full Band), III (processus de génération/recombinaison) et V (relaxation des porteurs photo-générés) a permis le développement d'un modèle numérique pour les CSCPs. Appliqué à $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, ce modèle a permis notamment le calcul du photo-courant résultant de l'illumination de la cellule et des pertes qui limitent l'efficacité de conversion de l'énergie solaire en énergie électrique. Dans les conditions modélisées (concentration maximale d'un rayonnement sous incidence normale, et miroir à l'arrière de l'absorbeur) aucun effet de « porteurs chauds » n'a été détecté, les distributions de porteurs pouvant être caractérisées par une température de 300K à cause de la thermalisation des porteurs rapide devant le taux de photo-génération. Un résultat intéressant tiré d'un traitement d'égale rigueur entre ionisation par choc et processus Auger, est le déséquilibre entre ces processus de génération et de recombinaison non radiatifs en faveur des processus Auger. La CSCP ne peut donc pas fonctionner efficacement dans les conditions modélisées. Cependant, plusieurs voies sont en ce moment étudiées afin de garder les populations de porteurs photo-générées « chaudes » telles que l'amélioration de l'absorption par piégeage de la lumière qui augmenterait le taux de photo-génération [Esteban10] [LeBris11], ou le ralentissement de la relaxation des porteurs qui limiterait les pertes par thermalisation. Cette dernière solution présente plusieurs aspects comme l'amincissement de l'absorbeur [LeBris*], ou l'ingénierie phononique [Conibeer10].

Références bibliographiques :

- [rapport APS/MRS] <http://www.mrs.org/advocacy/ece/>
- [Brown09] G. F. Brown and J. Wu,
Laser & Photon. Rev. 3, 394 (2009)
- [Conibeer10] G. Conibeer et al.,
Solar Energy Materials & Solar Cells 94, 1516 (2010)
- [Esteban10] R. Esteban, M. Laroche and J. J. Greffet,
Appl. Phys. Lett. 97, 221111 (2010)
- [Green02] M. A. Green,
Physica E 14, 65 (2002)
- [Green11] M. A. Green et al.,
Prog. Photovolt: Res. Appl 19, 565 (2011), <http://www.sj-solar.com/>
- [Hirst11] L. C. Hirst and N. J. Ekins-Daukes,
Prog. Photovolt: Res. Appl 19, 286 (2011)
- [Humphrey02] T. E. Humphrey, R. Newbury, R. P. Taylor and H. Linke,
Phys. Rev. Lett. 89, 116801 (2002)
- [Kazmerski11] <http://en.wikipedia.org/wiki/File:PVe%28rev110901%29.jpg>
- [King07] R. R. King et al.,
Appl. Phys. Lett. 90, 183516 (2007)
- [König10] D. König et al.,
Physica E 42, 2862 (2010)
- [LeBris10] A. Le Bris and J.-F. Guillemoles,
Appl. Phys. Lett. 97, 113506 (2010)
- [LeBris11] A. Le Bris,
« Etude de faisabilité de dispositifs photovoltaïques à porteurs chauds :
conception, modélisation, caractérisation »,
Thèse Ecole Centrale (2011)
- [LeBris*] soumis à Journal of Photovoltaics
- [Ross82] R. T. Ross and A. J. Nozik,
J. Appl. Phys. 53, 3813 (1982)
- [Strauss93] U. Strauss, W. W. Rühle and K. Köhler,
Appl. Phys. Lett. 62, 55 (1993)

- [Takeda09] Y. Takeda et al,
J. Appl. Phys. 105, 074905 (2009)
- [Würfel05] P. Würfel,
« Physics of Solar Cells »,
1rst edition (WILEY-VCH Verlag GmbH, 2005)
- [Würfel97] P. Würfel,
Solar Energy Materials & Solar Cells 46, 43 (1997)

CHAPITRE VII : PHOTO-COMMUTATEUR

L'équipe Ephykas au sein de laquelle s'est déroulée cette thèse a pour thème phare les dispositifs à semi-conducteur pour le THz. Il est complexe de réaliser des détecteurs ou des sources THz performantes à base de semi-conducteurs entre 500 GHz et 2 THz. Parmi les dispositifs étudiés dans l'équipe, le photo-commutateur THz occupe une place de choix [Sirbu05b] [Tissafi10b]. Deux thèses, [Sirbu05] et [Tissafi10], lui ont été consacrées. Ce chapitre est le fruit d'un travail commun avec Madame Bouchra Tissafi pour la modélisation d'un photo-commutateur et en résume les points clés. Après une description sommaire du photo-commutateur en $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, la version Hydrodynamique du modèle numérique de l'opération Ephykas sera rapidement décrite. C'est pour le calcul des temps de relaxation du moment et de l'énergie, nécessaires au modèle Hydrodynamique, que l'EMC présenté dans le CHAPITRE II a été utilisé.

1) Le photo-commutateur : dispositif

Les photo-commutateurs (PCS) sont des dispositifs ultra-rapides à base de semi-conducteurs qui peuvent émettre des impulsions électromagnétiques allant jusqu'à plusieurs dizaines de THz [Shen03] et des puissances moyennes dans la gamme des μW [Zhao02]. Ces dispositifs ont été proposés par Auston et *al.* [Auston75]. La structure simpliste d'un PCS THz est composée de deux contacts métalliques polarisés par une tension continue et déposés à la surface d'un substrat photoconducteur GaAs Basse Température (GaAs-BT) ou d'InGaAs, par exemple (FIG. VII.1.1). Le processus de génération d'impulsions électriques à partir d'impulsions laser ultra-courtes est basé sur le mécanisme de photoconduction. Ce dernier traduit la variation de la résistivité d'un semi-conducteur sous l'effet d'une excitation optique. Lorsqu'un semi-conducteur est soumis à une excitation lumineuse, dont la longueur d'onde λ satisfait à la condition d'absorption de photons ($\lambda(\mu\text{m}) \leq 1,24/E_G(\text{eV})$) des paires électron-trou sont créées dans la zone éclairée du semi-conducteur, modifiant ainsi la conductivité et la permittivité de cette zone. Dans le cas d' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ ($E_G = 0,75\text{eV}$ à 300K), la longueur d'onde doit être inférieure à $1,65\mu\text{m}$.

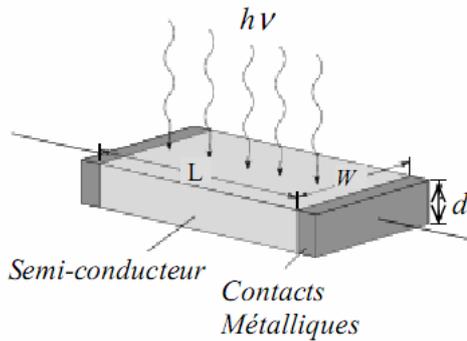


FIG. VII.1.1 : Structure basique d'un photo-commutateur

L'impulsion générée par le photo-commutateur doit se coupler à un des modes de la ligne de transmission pour se propager, d'où l'intérêt de bien choisir la ligne de transmission. Depuis les travaux pionniers d'Auston en 1975 [Auston75], différents phénomènes physiques ont été exploités pour générer et échantillonner des signaux électriques transitoires ultra-rapides par voie optique.

Le premier PCS fut conçu par Auston en 1975 [Auston75] et porte son nom. Il est constitué d'une couche mince de silicium (d'une résistance égale à $104 \Omega.m$) sur laquelle est déposée une ligne microruban présentant un « gap » (FIG. VII.1.2). Deux impulsions retardées et focalisées sur le « gap » permettaient d'exciter le PCS. Les longueurs d'ondes respectives des deux impulsions étaient $1,06 \mu m$ et $0,53 \mu m$. La première impulsion est générée par un laser à blocage de modes (Nd :glass)¹ et la deuxième est produite par le passage de la première impulsion dans un cristal KDP (Phosphate Diacide de Potassium). Le PCS est polarisé avec une tension continue de 20 V. Le processus de génération de l'impulsion optique est basé sur l'absorption de la première impulsion laser dite de 'turn-on' (« d'activation ») qui crée une conductivité de surface et ferme la ligne de transmission. Cependant, l'absorption de la deuxième impulsion dite de 'turn-off' (« de désactivation ») crée quant à elle une conduction de volume qui court-circuite la ligne. Ainsi, Auston réussit à générer et mesurer des impulsions électriques d'une largeur de 25 ps à mi-hauteur avec un temps de montée de 10 ps et un temps de descente d'environ 15 ps. La durée de ces impulsions ne dépend pas de la durée de vie des porteurs dans le silicium (plusieurs centaines de picosecondes) mais plutôt du retard entre les deux impulsions optiques. En se basant sur le

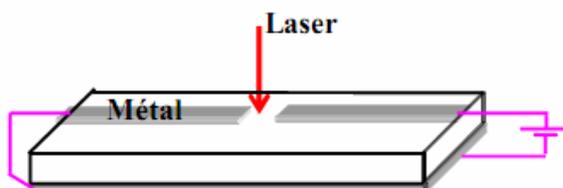


FIG. VII.1.2 : Schéma du photo-commutateur d'Auston

même principe de photoconduction, d'autres types de photo-commutateur ont été réalisés en utilisant une seule impulsion d'excitation et en modifiant la structure du guide qui sert de support de transmission.

¹ Neodymium Glass : Laser au verre de néodyme

Ainsi, Holzman et *al.* ont proposé une technique assez semblable à celle d'Auston mais réalisée sur une ligne microruban sur silicium aminci à 10 μm [Holzman01]. Une seule impulsion optique suffit alors pour réaliser les fonctions de “turn on” et “turn off”. Une impulsion électrique présentant une largeur à mi-hauteur d'environ 1,2 ps et un temps de montée de 10 % à 90 % de 680 fs a été obtenue de la sorte. Keil et *al.* génèrent des impulsions optiques dont la largeur à mi-hauteur peut varier de 450 fs à 3 ps. Ils utilisent pour cela deux faisceaux optiques de pompe décalés longitudinalement suivant la direction de propagation dans la ligne de transmission (guide coplanaire ou ligne coplanaire à fente) [Keil95]. C'est donc la distance séparant les deux spots de pompe qui remplace le retard temporel de l'expérience d'Auston. Afin d'augmenter la capacité de génération, une autre variante du PCS consiste à remplacer le gap simple par un peigne inter-digité. Ce PCS (FIG. VII.1.3) est constitué d'un simple guide coplanaire polarisé par une tension continue et éclairé par un faisceau laser entre ses deux rubans. Contrairement au PCS d'Auston, l'impulsion optique peut être placée n'importe où dans l'espace inter-rubans. Cette technique de photo-

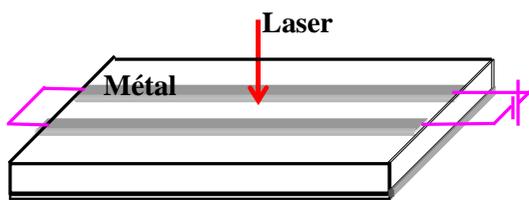


FIG. VII.1.3 : Schéma d'un photo-commutateur à contact glissant.

commutation permet de réaliser un court-circuit électrique entre les deux rubans métalliques et générer par la suite deux impulsions de sens inverse de propagation, on parle de PCS à contact glissant “sliding contact”.

Krökel et *al.* ont réussi à générer des impulsions de 350 fs à mi-hauteur avec un photo-commutateur à contact glissant et des matériaux à temps de vie de plusieurs centaines de ps (0.1 ns) [Krökel89]. Ils ont utilisé des impulsions lasers de 70 fs et une longueur d'onde de 625 nm pour illuminer partiellement un disque de 4 μm de diamètre entre deux rubans d'une ligne coplanaire espacés de 10 μm . La tension qui se propage dans le guide représente la variation du champ électrique total entre les 2 rubans due au champ électrique inverse qui vient s'opposer à la séparation des porteurs de charge positifs et négatifs. Alexandrou et *al.* ont également généré une impulsion de 550 fs (largeur à mi-hauteur) dans le GaAs à partir de l'illumination non uniforme d'un gap glissant dans une ligne coplanaire (CPW) [Alexandrou94] (FIG. VII.1.4). La largeur des rubans de la ligne CPW est égale à celle de ses fentes qui vaut 50 μm . Le but principal de cette expérience était de vérifier l'explication du mécanisme de génération des impulsions THz annoncé par Sano et Shibata [Sano89], et plus

précisément la chute de l'impulsion électrique liée à la chute du champ électrique dans la zone éclairée et non par l'évolution du courant de dérive dans le gap.

Selon Sano et Shibata [Sano89], lorsqu'une impulsion optique est appliquée au bord du PCS, les porteurs photo-générés court-circuitent la zone illuminée en forçant le champ électrique à se redistribuer. Ainsi, le champ décroît dans la zone excitée au fur-et-à mesure que la conductance augmente dans cette zone grâce aux porteurs photo-crés. Cependant, le champ croît dans la région non illuminée pour maintenir la polarisation de la tension totale. C'est cette variation du champ qui produit un déplacement transitoire du courant qui se propage en dehors du PCS sous forme d'une impulsion courte avec une durée correspondante au temps requis pour la redistribution du champ dans le gap. La génération de l'impulsion électrique se termine par la redistribution du champ dans le gap alors que le processus de retour à l'équilibre n'est pas encore atteint puisqu'il dépend du temps de vie et de la recombinaison des porteurs.

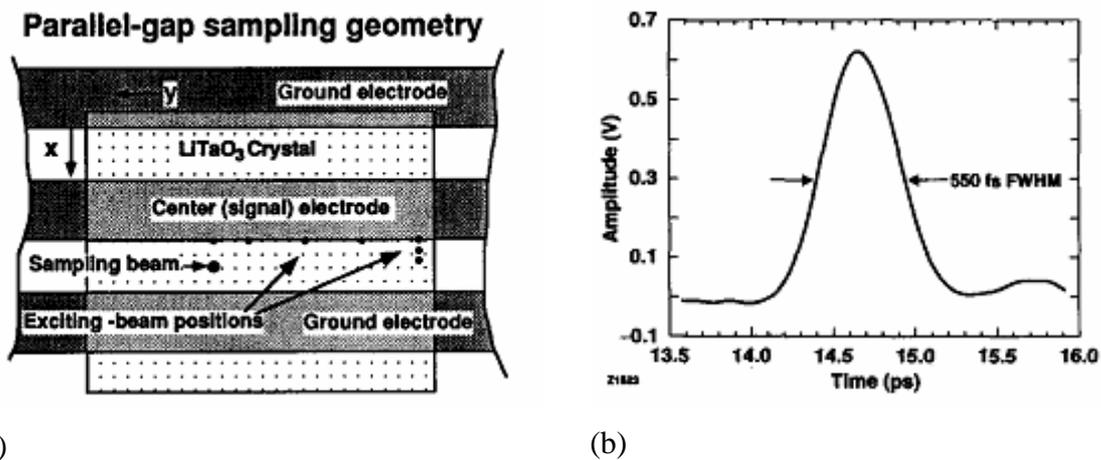


FIG. VII.1.4 : (a) Structure du photo-commutateur à gap parallèle (type de contact glissant) utilisé par Alexandrou [Alexandrou94]. (b) Impulsion générée par la structure.

Par ailleurs, des impulsions sub-picoseconde ont été générées avec un photo-commutateur dans une ligne à fente (slotline) excitée de façon non uniforme. Une première impulsion dont la largeur à mi-hauteur est de 200 fs a été obtenue avec un substrat en GaAs-BT (FIG. VII.1.5b). Une deuxième impulsion de 245 fs a été obtenue avec un substrat GaAs [Keil96].

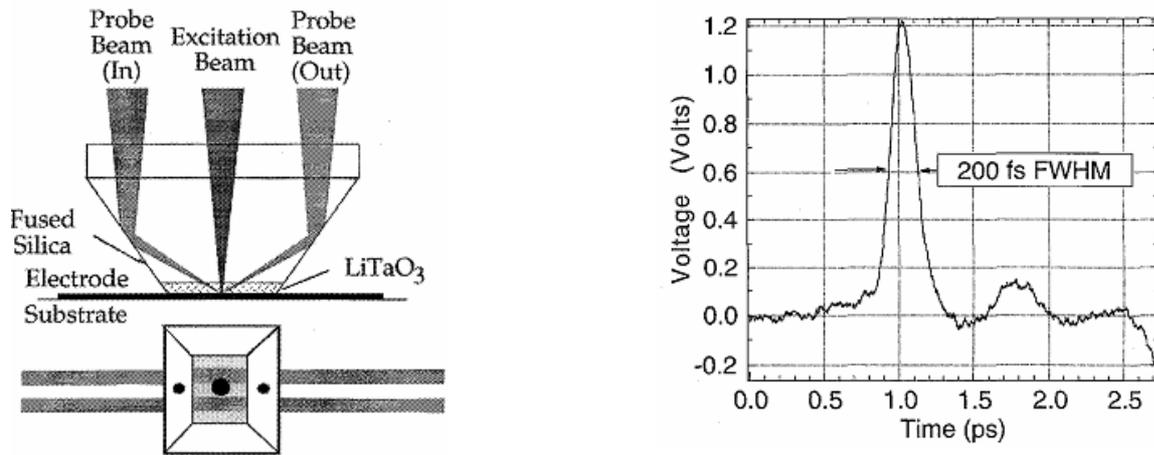


FIG. VII.1.5 : a) Vues de dessus et de face du photo-commutateur utilisé par Keil et Dykaar, b) La réponse impulsionnelle de ce PC utilisant du GaAs-BT [Keil96]

De nombreuses techniques de modélisations sont actuellement utilisées pour modéliser les composants semi-conducteurs. La plus simple consiste en une modélisation analytique basée sur des hypothèses simplificatrices. Ce type de modélisation peut être suffisant pour décrire des phénomènes à basse fréquence ou en régime harmonique. On peut également recourir à un schéma électrique équivalent linéaire ou non linéaire. Des modélisations plus complexes peuvent être utilisées pour décrire de façons plus satisfaisantes les phénomènes physiques. Ces modélisations numériques sont de deux types :

1. Des modélisations microscopiques dans lesquelles les mouvements des porteurs sont modélisés de façon individuelle (modèle particulaire par exemple).
2. Des modélisations macroscopiques dans lesquelles on s'intéresse au comportement de la population électronique moyenne.

Dans ce qui suit, nous nous intéressons plus particulièrement aux modélisations macroscopiques pour décrire plus finement les phénomènes physiques dans les composants semi-conducteurs. Ce choix de type de modélisation repose sur l'invalidité des hypothèses simplificatrices requises par les modèles analytiques dans la gamme THz. D'autre part, les modélisations microscopiques nécessitent des ressources informatiques plus importantes que les modélisations macroscopiques.

2) Photo-commutateur : modélisation

Dans le domaine des THz, la modélisation numérique nécessite l'adaptation des approximations classiques du régime quasi-stationnaire pour le champ électrique. En effet, le temps de propagation des ondes électromagnétiques ne peut pas être négligé devant la période du signal. C'est pourquoi, nous avons adopté une modélisation basée sur un couplage complet des équations de l'électromagnétisme et du transport. Deux approches de ce couplage ont été réalisées. La première approche s'appuie sur le modèle simplifié du transport à travers le système d'équations 'dérive-diffusion' et la deuxième sur le modèle HydroDynamique (HD). C'est sur cette dernière approche que se focalisera cette section car c'est dans le modèle hydrodynamique qu'ont été injectés les résultats des calculs EMC.

Les équations qui sont utilisées par la suite pour la description de la propagation de l'onde électromagnétique sont les équations de Maxwell-Faraday et de Maxwell-Ampère:

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}, t) &= -\frac{\partial}{\partial t} \vec{B}(\vec{r}, t) \\ \vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}, t) &= \frac{\partial}{\partial t} \vec{D}(\vec{r}, t) + \vec{j}_{cond}(\vec{r}, t)\end{aligned}\tag{VII.2.1}$$

où $\vec{E}(\vec{r}, t)$, $\vec{D}(\vec{r}, t)$, $\vec{B}(\vec{r}, t)$ et $\vec{H}(\vec{r}, t)$ sont respectivement le champ électrique, le vecteur déplacement, le champ et l'induction magnétique, et enfin $\vec{j}_{cond}(\vec{r}, t)$ est le courant de conduction. Toutes ces grandeurs dépendent de manière plus ou moins complexe du vecteur position \vec{r} et du temps t .

La structure simulée comprend une zone active (gap) d'une longueur L_g de $2 \mu\text{m}$ placée au milieu du ruban central d'un guide coplanaire, conformément à la FIG. VII.2.1. Le guide coplanaire présente une impédance de 50Ω en basses fréquences. Les bandes métalliques sont de $10 \mu\text{m}$ de large (W) et sont espacées de $6,6 \mu\text{m}$ (structure de référence 50Ω). Le substrat est en InP, qui est transparent à la longueur d'onde de l'impulsion optique ($1,55 \mu\text{m}$). L'utilisation de la filière InP, est motivée par le faible coût des sources à $1,55 \mu\text{m}$ développées pour les applications télécoms. Le semi-conducteur photo-excitable constituant la zone active du PCS est une couche mince d' $\text{In}_{0,57}\text{Ga}_{0,43}\text{As}$, de 300nm d'épaisseur supposée préalablement irradiée afin de réduire à une échelle sub-picoseconde le temps de vie des porteurs [Chimot05].

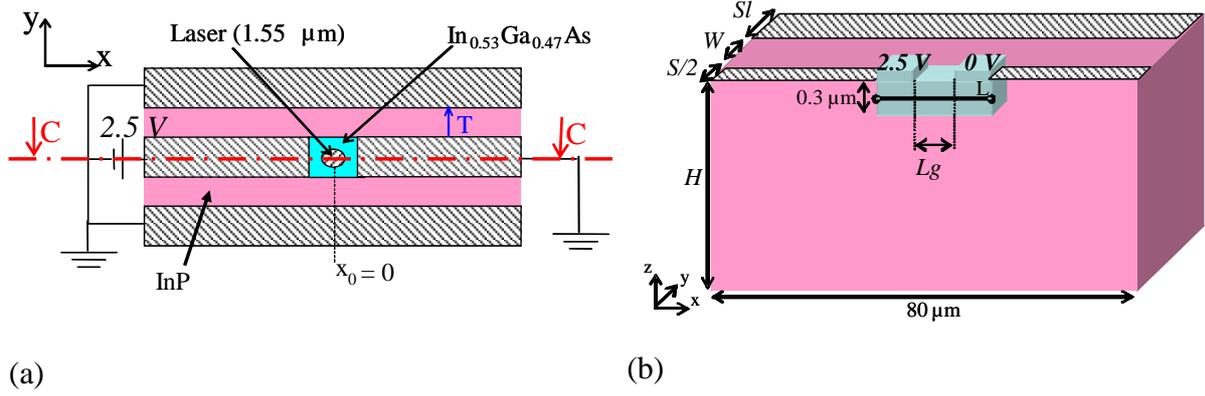


FIG. VII.2.1 : (a) Vue de dessus du photo-commutateur (b) Coupe longitudinale du photo-commutateur suivant le plan de coupe C-C tracé sur la partie (a).

Le modèle HD permet de mettre en évidence des effets de transport non stationnaire. Il est basé sur un système de trois équations couplées : équation de conservation de la charge, équation de conservation du moment, et équation de conservation de l'énergie.

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \Delta(n\vec{v}) = 0 \quad (\text{VII.2.2})$$

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = -q\vec{v} \cdot \vec{E} - \vec{v} \cdot (\nabla \cdot \xi) - \frac{1}{n} \nabla [n\vec{v}k_B T_L] - \frac{\xi - \xi_0}{\tau_\xi(\xi)} \quad (\text{VII.2.3})$$

En utilisant la relation qui relie l'énergie à la température T_L : $\xi = \frac{1}{2} m^*(\xi)v^2 + \frac{3}{2} k_B T_L$,

l'équation (VII.2.3) devient :

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = -q\vec{v} \cdot \vec{E} - \vec{v} \cdot (\nabla \cdot \xi) - \frac{2}{3n} \nabla \left[n\vec{v} \left(\xi - \frac{m^*(\xi)}{2} v^2 \right) \right] - \frac{\xi - \xi_0}{\tau_\xi(\xi)} \quad (\text{VII.2.4})$$

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = -\frac{q\vec{E}}{m^*(\xi)} - (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} - \frac{2}{3m^*(\xi)n} \nabla \cdot (n\xi - nm^*(\xi)v^2) - \frac{\vec{v}}{\tau_m(\xi)} \quad (\text{VII.2.5})$$

La distribution de la densité de courant \vec{J}_n dans le composant actif à chaque instant est donnée par :

$$\vec{J}_n = -qn\vec{v} \quad (\text{VII.2.6})$$

Les variables de ces équations sont :

n : la densité d'électron,

\vec{v} : la vitesse moyenne des électrons,

ξ : l'énergie moyenne,

m^* : la masse effective moyenne des porteurs,

$\tau_m(\xi)$: le temps de relaxation du moment, $\tau_\xi(\xi)$: le temps de relaxation de l'énergie

Les termes de collision dans chacune des équations de conservation décrivent de manière « moyenne » les interactions subies par les porteurs.

Il n'est pas trivial de discrétiser le modèle HD et d'obtenir des résultats stables, corrects et convergents. Les approches utilisées pour discrétiser ce modèle fortement non-linéaire avec un schéma aux différences finies sont basées soit sur l'étalement des paramètres scalaires et vectoriels dans les points nodaux et les demi-points nodaux [Aste03] [McGarvey08], soit en mettant toutes les variables dans les points nodaux au même pas de temps [Alsunaidi97]. Cette dernière approximation s'appuie sur l'hypothèse que les variables ne sont pas capables de se découpler dans le temps pour ne pas rendre le modèle exact au second degré dans l'espace et exact uniquement au premier degré dans le temps. Cette discrétisation ne parvient pas à un modèle numérique stable. Pour corriger ce problème, des techniques de discrétisation avancées ont été mises en place en utilisant le temps. Par exemple, Tomizawa a utilisé une méthode semi-implicite Crank-Nicolson, Aste & Vahldieck [Aste03] ont utilisé un schéma pondéré 'upwind', et El-Ghazaly, qui a mis en oeuvre le couplage d'un code électromagnétique avec un simulateur HD sur le même maillage, a utilisé une méthode hybride qui inclut la méthode standard 'upwind' et la méthode 'Lax-Wendroff' [Alsunaidi97]. La méthode est numériquement stable, mais souffre de dispersion numérique importante en raison de la nature asymétrique de la méthode. Pour El-Ghazaly, il n'y a aucun intérêt dans l'utilisation de schéma semi-implicite ou totalement implicite avec un pas de temps aussi petit que $\Delta t = 10^{-17}$ s.

Le modèle de Aste & Vahldieck ne concerne que la partie hydrodynamique du modèle couplé [Aste03]. Aste & Vahldieck utilisent une notation légèrement différente mais qui est très semblable au modèle d'El-Ghazaly qu'ils tentent d'améliorer. Pour cela, ils utilisent une grille décalée dans l'espace pour l'installation initiale de la grille de discrétisation. Les vecteurs sont placés sur les points nodaux et les scalaires sont mis sur le nœud $\frac{1}{2}$ points, mais ils sont tous évalués au même pas de temps sans aucun saut dans le temps. La méthode est du deuxième ordre dans l'espace, mais seulement du premier ordre dans le temps. Les auteurs parlent de problème de stabilité, et imposent un schéma 'upwind pondéré' à plusieurs variables du modèle pour accroître la stabilité numérique. La méthode 'upwind' est généralement utilisée pour saisir les effets hydrodynamiques comme l'onde de choc, mais elle peut aussi être utilisée pour ajouter de la stabilité.

La discrétisation des équations hydrodynamiques est un peu plus compliquée que la méthode de Yee pour les équations de Maxwell. En général, la grille s'étale en comportant des scalaires et/ou des vecteurs suivant des critères pertinents. La complication réside dans le

fait que les équations contiennent à la fois des scalaires et des vecteurs. La concentration des porteurs est reliée aux points nodaux mais la discrétisation centrale ‘leapfrog’ fait appel aux valeurs vectorielles au centre de la maille (entre deux nœuds). D’où la nécessité de moyenner la valeur scalaire avec les voisins les plus proches. Les quantités scalaires sont reliées ‘naturellement’ aux points et peuvent être utilisés directement [McGarvey08].

Ecrivons, sous une nouvelle forme l’équation de conservation de l’énergie

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = -T\xi_1 - T\xi_2 - T\xi_3 - T\xi_4$$

avec

$$\left\{ \begin{array}{l} T\xi_1 = q\vec{v} \cdot \vec{E} \\ T\xi_2 = \vec{v} \cdot (\nabla \cdot \xi) \\ T\xi_3 = \frac{2}{3n} \nabla \cdot \left[n\vec{v} \left(\xi - \frac{m^*(\xi)}{2} v^2 \right) \right] \\ T\xi_4 = \frac{\xi - \xi_0}{\tau_\xi(\xi)} \end{array} \right.$$

(VII.2.7)

Idem pour l’équation de la conservation du moment

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -Tv_1 - Tv_2 - Tv_3 - Tv_4$$

avec

$$\left\{ \begin{array}{l} Tv_1 = \frac{q\vec{E}}{m^*(\xi)} \\ Tv_2 = (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \\ Tv_3 = \frac{2}{3m^*(\xi)n} \nabla \cdot (n\xi - nm^*(\xi)v^2) \\ Tv_4 = \frac{\vec{v}}{\tau_m(\xi)} \end{array} \right.$$

(VII.2.8)

Cette dernière équation a été modélisée avec la méthode ‘upwind’ pour le terme (VII.2.7) et la méthode aux différences finies à droite pour l’équation (VII.2.8). Cependant, la solution numérique diverge avant d’atteindre l’équilibre et obtenir la réponse temporelle complète. C’est pour cette raison que nous avons simplifié l’équation de conservation du moment en négligeant la variation temporelle du moment. En posant

$$0 = -q\vec{E} - \frac{2}{3n} \nabla \cdot (n\xi - nm^*(\xi)v^2) - \frac{m^*(\xi)\vec{v}}{\tau_m(\xi)}$$

(VII.2.9)

On en déduit une formulation de la mobilité électronique μ_n en fonction de l’énergie moyenne des porteurs :

$$\mu_n(\xi) = \frac{q\tau_m(\xi)}{m^*(\xi)}$$

(VII.2.10)

La densité de courant suivant l’axe ‘x’ devient :

$$J_{n_x} = -qnv_x = q\mu_n \left[nE_x + \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x} (n\xi - nm^*(\xi)v^2) \right]$$

(VII.2.11)

Ce jeu d'équations mène à des composantes de la densité du courant qui comportent des termes de conduction et de diffusion. Ces équations sont introduites dans la plupart des modèles HD commerciaux utilisés pour la modélisation de composants à semi-conducteurs.

3) Calculs des temps de relaxation du moment et de l'énergie pour $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$

La mise en œuvre du modèle HD nécessite un calcul préalable du temps de relaxation du moment (τ_m) et du temps de relaxation de l'énergie (τ_e). Ce calcul est effectué grâce au code Ensemble Monte Carlo (présenté dans le CHAPITRE II). A l'issue de ces calculs, on obtient la variation de la masse effective m^* , du temps de relaxation de l'énergie τ_e , et du temps de relaxation du moment τ_m , en fonction de l'énergie moyenne des électrons et des trous. Ces grandeurs ont été calculées pour un jeu de diverses concentrations de porteurs donné. Ce jeu de concentrations considéré se compose de quatre différentes concentrations allant de $3 \cdot 10^{16}$ à $1,06 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ pour les électrons et les trous. Ce qui génère 16 équations pour chaque paramètre (τ_e , τ_m , m^* , μ) en fonction des concentrations n et p . On tire τ_e et τ_m des équations (VII.2.4) et (VII.2.5) résolues dans l'espace réciproque (i.e. sans gradients spatiaux) et en régime stationnaire tout comme dans [Nougier81] :

$$0 = -q\vec{v} \cdot \vec{E} - \frac{\xi - \xi_0}{\tau_\xi(\xi)} \quad \text{et} \quad 0 = -\frac{q\vec{E}}{m^*(\xi)} - \frac{\vec{v}}{\tau_m(\xi)}$$

a) $n = 1.06 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et $3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3} \leq p \leq 1.06 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

Pour une concentration d'électrons égale à $1,06 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et quatre différentes concentrations de trous allant de $3 \cdot 10^{16}$ à $1.06 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, les variations en fonction de l'énergie du temps de relaxation du moment, du temps de relaxation de l'énergie et de la mobilité sont représentées en FIG. VII.3.a.1, et ceci pour les électrons et les trous. Les temps de relaxation du moment sont très inférieurs (d'une décade) au temps de relaxation de l'énergie. Les courbes sont complexes : à faible énergie, τ_m et τ_e augmentent, passent par un maximum et ensuite diminuent avec l'augmentation de l'énergie moyenne des porteurs. On constate que pour une concentration élevée d'électrons égale à $1,06 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, les temps de relaxation (τ_e et τ_m) des électrons et des trous augmentent avec la valeur de la concentration des trous à cause de l'écrantage des interactions coulombiennes par les trous. En FIG. VII.3.b.1, on représente les variations des temps de relaxation et de la mobilité en fonction de

l'énergie mais pour une concentration d'électrons plus faible égale à $5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. En FIG. VII.3.c.1 et FIG. VII.3.d.1, p vaut $1,06 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et $3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et n varie.

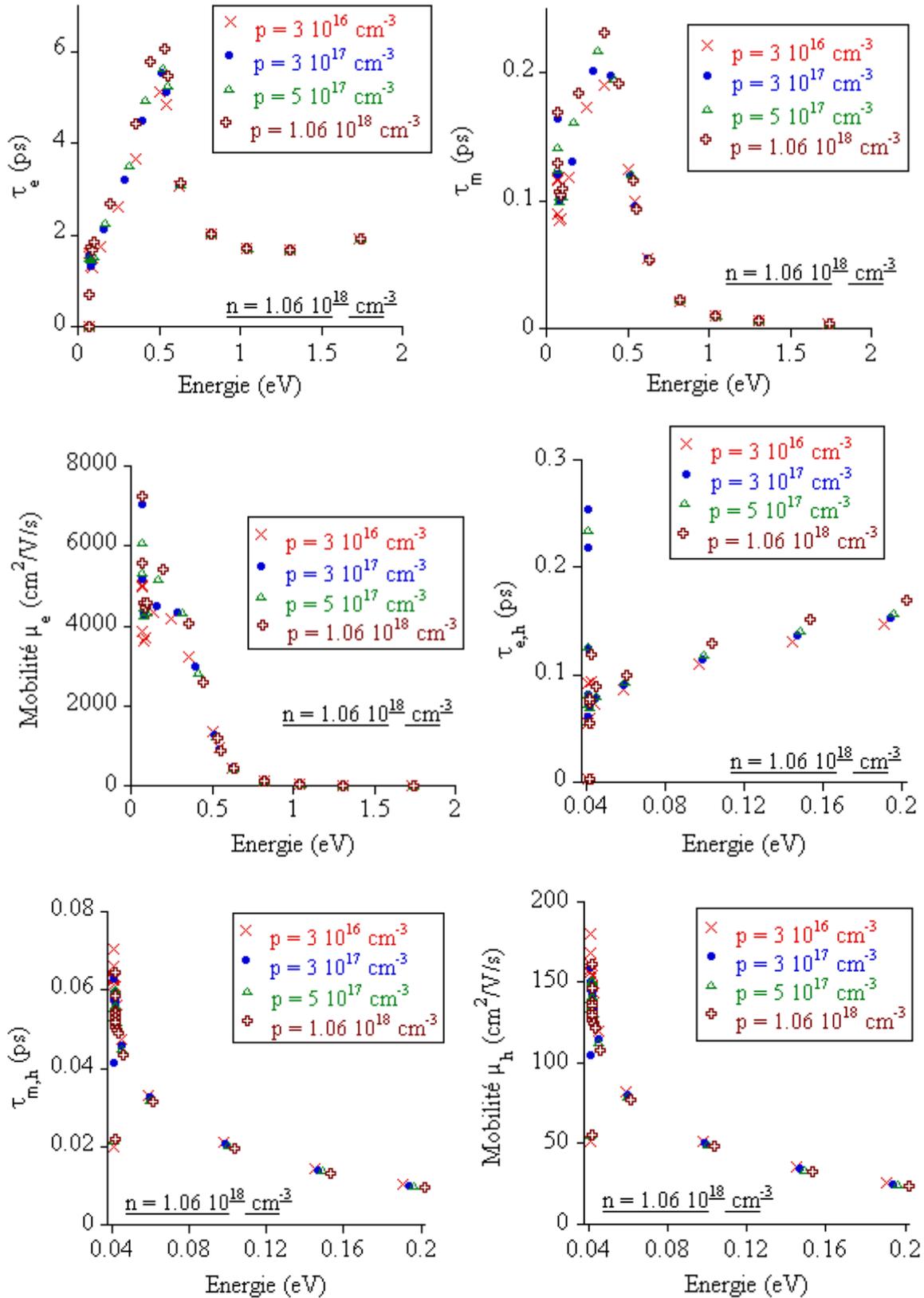


FIG. VII.3.a.1 : Variation du temps de relaxation de l'énergie τ_e et du temps de relaxation du moment τ_m en fonction de l'énergie des porteurs pour les électrons et les trous. Les concentrations de porteurs utilisées dans ce calcul sont les suivantes : $n = 1,06 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et p varie de $3 \cdot 10^{16}$ à $1,06 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

b) $n = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et $3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3} \leq p \leq 1.06 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

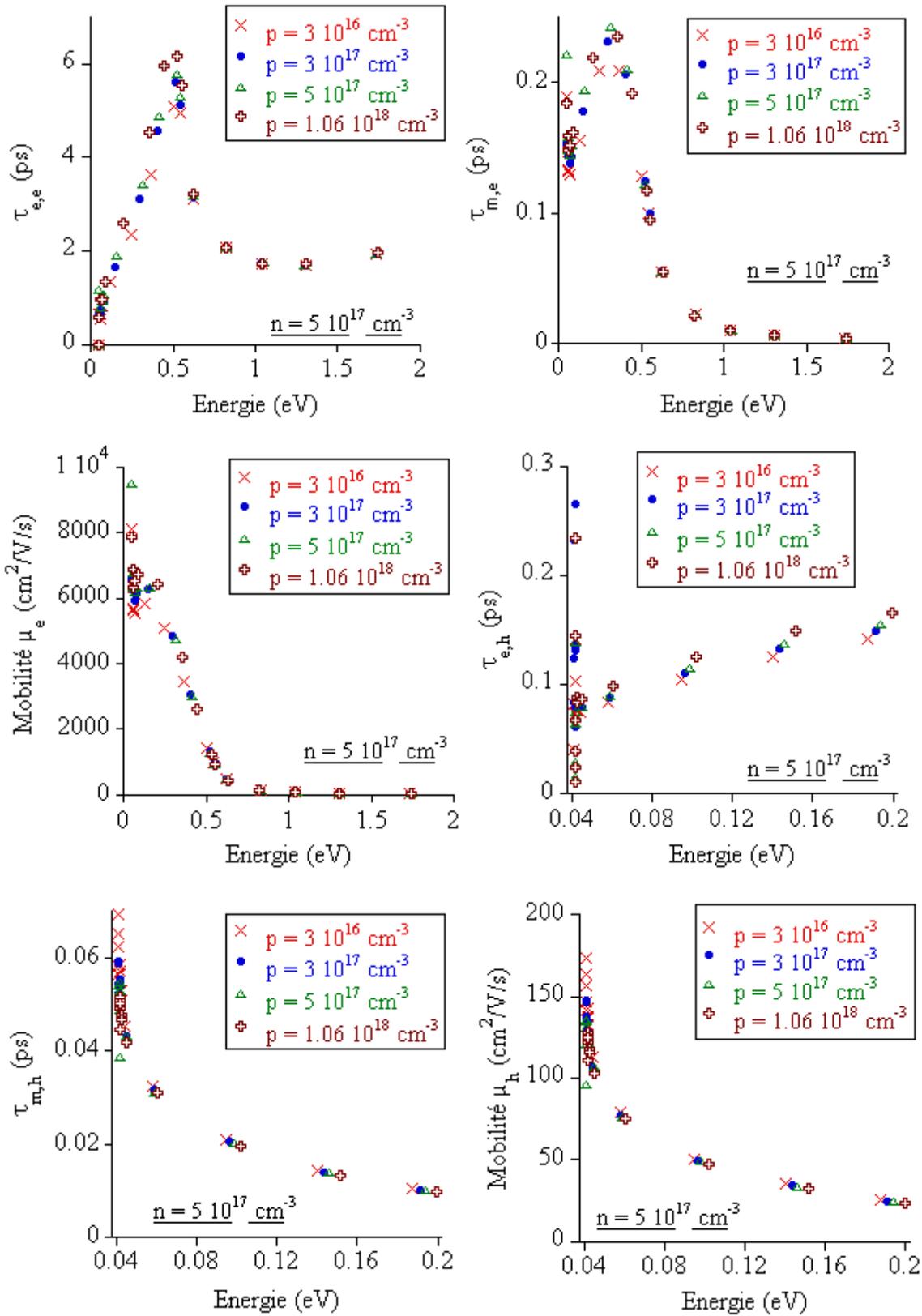


FIG. VII.3.b.1: Variation du temps de relaxation de l'énergie τ_e et du temps de relaxation du moment τ_m en fonction de l'énergie des porteurs pour les électrons et les trous. Les concentrations de porteurs utilisées dans ce calcul sont les suivantes : $n = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et p varie de 3×10^{16} à $1,06 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

c) $p = 1.06 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et $3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3} \leq n \leq 1.06 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

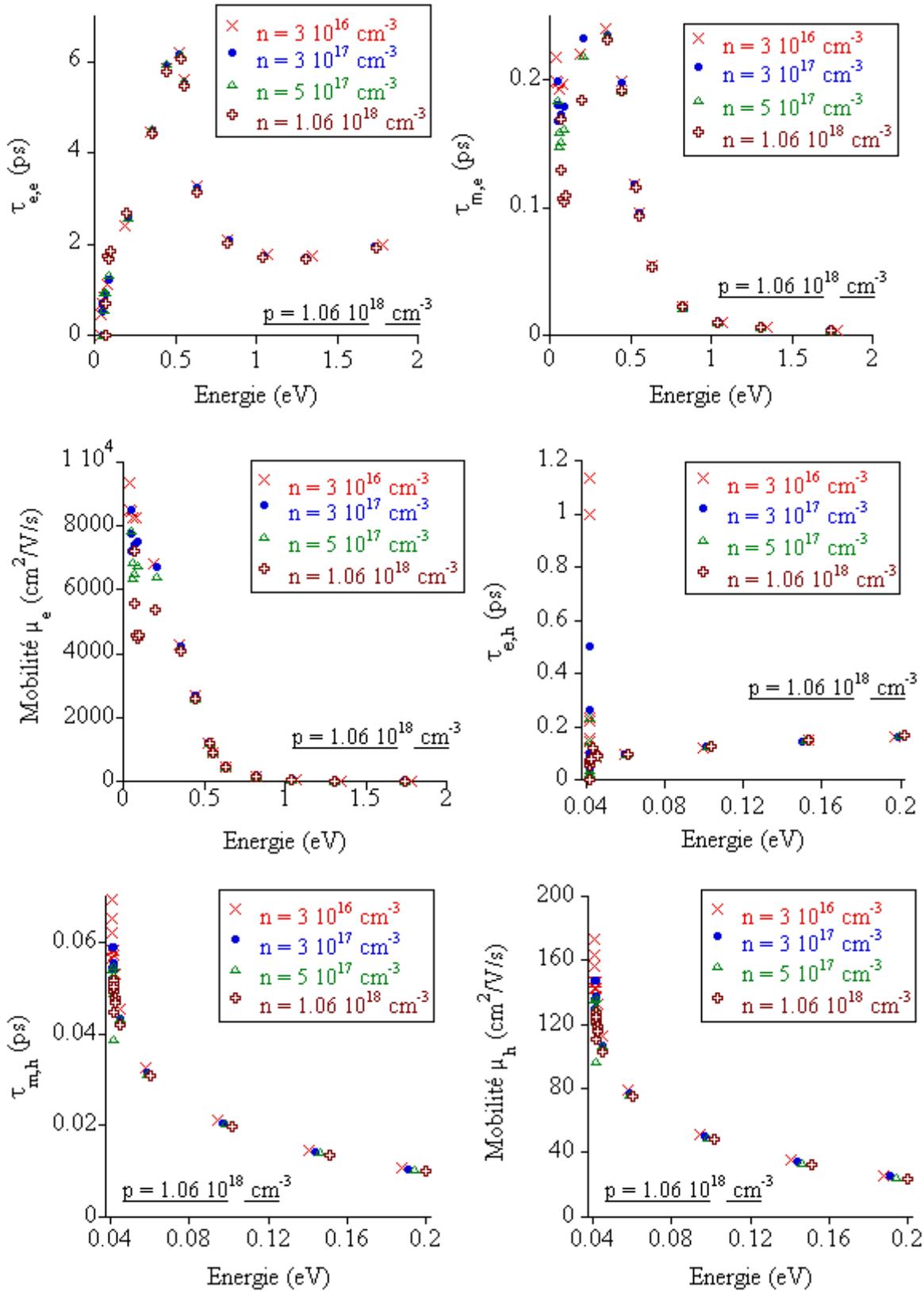


FIG. VII.3.c.1: Variation du temps de relaxation de l'énergie τ_e et du temps de relaxation du moment τ_m en fonction de l'énergie des porteurs pour les électrons et les trous. Les concentrations de porteurs utilisées dans ce calcul sont les suivantes : $p = 1,06 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et n varie de $3 \cdot 10^{16}$ à $1,06 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

d) $p = 3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et $3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3} \leq n \leq 1.06 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

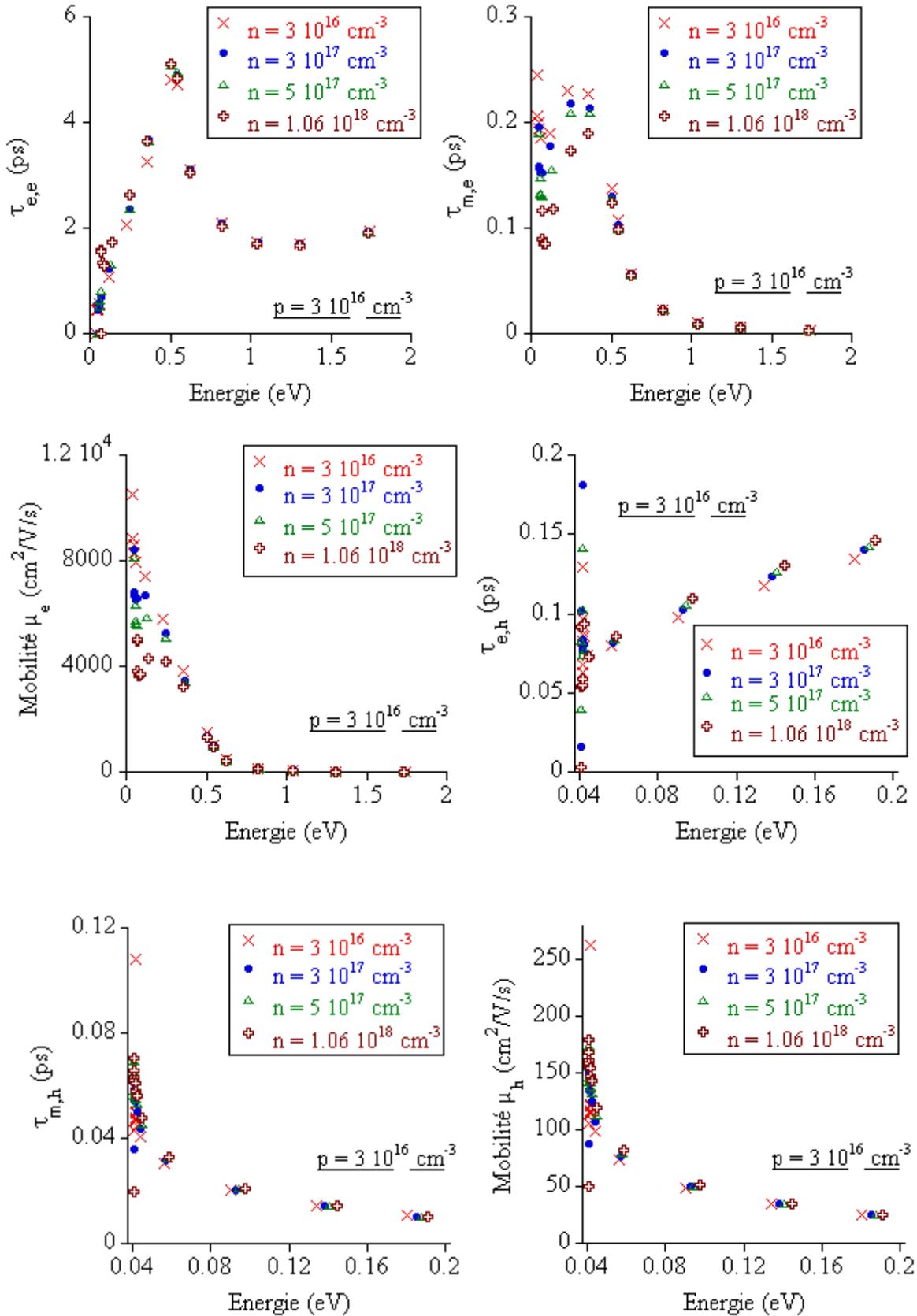


FIG. VII.3.d.1 : Variation du temps de relaxation de l'énergie τ_e et du temps de relaxation du moment τ_m en fonction de l'énergie des porteurs pour les électrons et les trous. Les concentrations de porteurs utilisées dans ce calcul sont les suivantes : $p = 3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et n varie de 3×10^{16} à $1,06 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

e) zones dopées: $n = p = 3,5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

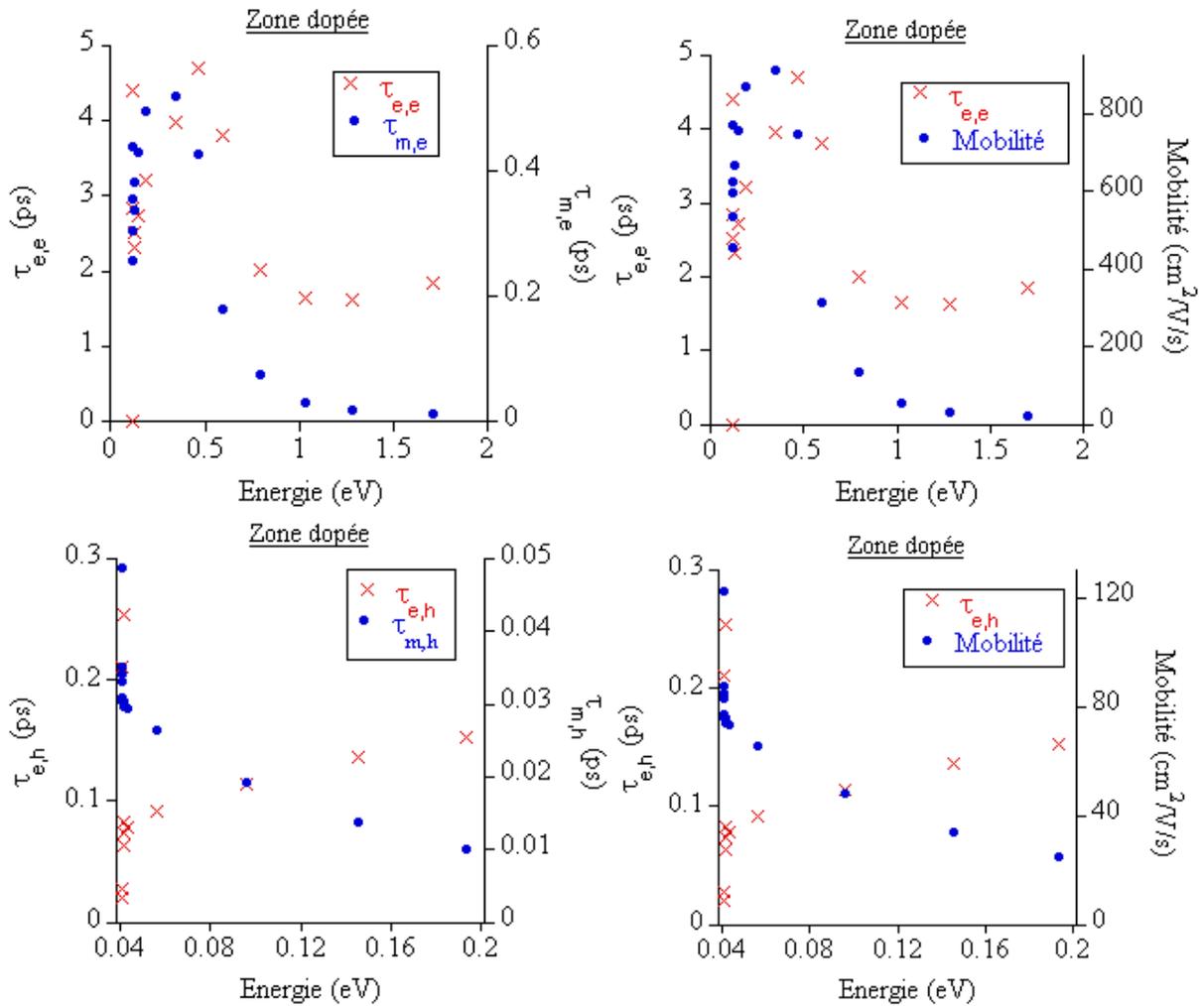


FIG. VII.3.e.1 : Variation du temps de relaxation de l'énergie τ_e et du temps de relaxation du moment τ_m en fonction de l'énergie des porteurs pour les électrons et les trous. Les concentrations de porteurs utilisées dans ce calcul sont celles de la zone dopée : $n = p = 3,5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

Pour les zones d'accès, fortement dopées, les calculs montrent que le temps de relaxation de l'énergie ainsi que la mobilité des porteurs en fonction de l'énergie sont réduits.

4) Résultats de modélisations du PCS avec MAXTRA3D

Le travail présenté dans cette section est un résumé du chapitre 6 du manuscrit de thèse de Bouchra Tissafi [Tissafi10]. Nous commençons tout d'abord par présenter le résultat obtenu à partir de la modélisation du PC avec le modèle HD complet que nous nommerons HD1. Nous rappelons que les équations utilisées pour la conservation de l'énergie et la conservation du moment sont les suivantes :

-Equation de conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = -q \vec{v} \cdot \vec{E} - \vec{v} \cdot (\nabla \cdot \xi) - \frac{2}{3n} \nabla \cdot \left[\left(n \vec{v} - \frac{\kappa}{k_B} \nabla \right) \left(\xi - \frac{m^*(\xi)}{2} v^2 \right) \right] - \frac{\xi - \xi_0}{\tau_\xi(\xi)} \quad (\text{VII.4.1})$$

où κ est la conductivité thermique et peut être écrite comme dans [Baccarani85] [Aste04]

$$\kappa = \left(\frac{5}{2} + r \right) k_B \frac{n \tau_m}{m^*(\xi)} \left(\frac{2}{3} \right) \left(\xi - \frac{m^*(\xi)}{2} v^2 \right) \quad (\text{VII.4.2})$$

-Equation de conservation du moment :

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = -\frac{q \vec{E}}{m^*(\xi)} - \frac{2}{3m^*(\xi)n} \nabla \cdot \left(n \xi - \frac{m^*(\xi)}{2} n v^2 \right) - (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} - \frac{\vec{v}}{\tau_m(\xi)} \quad (\text{VII.4.3})$$

Les temps de relaxation sont calculés en différenciant entre les zones dopées et non dopées. Le niveau de dopage considéré sous les contacts est de $3,5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et la concentration des porteurs dans la zone active est $n = p = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

Le résultat du couplage Maxwell-HD1 est représenté en FIG. VII.4.1. Le PC génère une impulsion THz caractérisée par une amplitude maximale de 0,66 V et une largeur à mi-hauteur de 242,6 fs au bord du gap. Le temps de montée de l'impulsion est de 55 fs avec un délai de propagation de 72 fs.

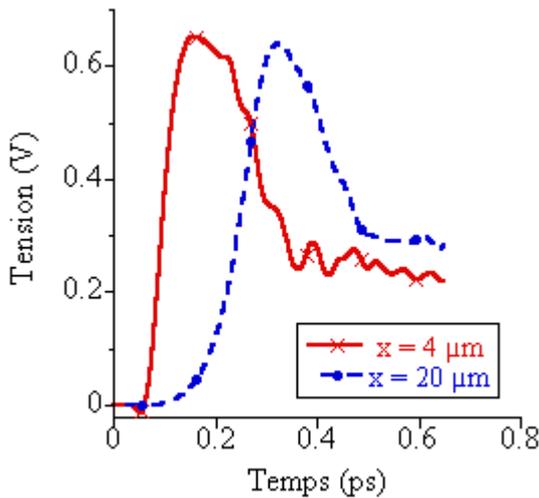


FIG. VII.4.1 : L'onde THz à $x = 4 \mu\text{m}$ et à $x = 20 \mu\text{m}$ du centre du gap. (Résultats obtenus avec le modèle HD1 pour $L_g = 2 \mu\text{m}$, $W/S = 6,6/10$, $\sigma_i = 30 \text{ fs}$, $\sigma_x = \sigma_y = 2,5 \mu\text{m}$, $W_0 = 3,5 \cdot 10^{13} \text{ W/m}^2$, $ddp = 2,5 \text{ V}$).

La suppression de certains termes des équations de conservations de l'énergie et du moment induit de profondes modifications de l'allure de l'impulsion THz générée par le photo-commutateur et perturbe même la convergence du code dans certains cas. Nous présentons, dans ce qui suit, les trois formulations qui ont été dérivées du modèle HD1 pour étudier sa convergence.

En commençant par négliger le troisième terme de l'équation de conservation de l'énergie $-TE_I$ - défini par :

$$TE_I = -\frac{2}{3n} \nabla \left[\left(n\vec{v} - \frac{\kappa}{k_B} \nabla \right) \left(\xi - \frac{m^*(\xi)}{2} v^2 \right) \right] \quad (\text{VII.4.4})$$

nous obtenons un premier modèle HD1-a, dérivée du modèle HD1 et dont les équations sont les suivantes :

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = -q\vec{v} \cdot \vec{E} - \vec{v} \cdot (\nabla \cdot \xi) - \frac{\xi - \xi_0}{\tau_\xi(\xi)} \quad (\text{VII.4.5})$$

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = -\frac{q\vec{E}}{m^*(\xi)} - \frac{2}{3m^*(\xi)n} \nabla \cdot \left(n\xi - \frac{m^*(\xi)}{2} n v^2 \right) - (\vec{v} \nabla) \vec{v} - \frac{\vec{v}}{\tau_m(\xi)} \quad (\text{VII.4.6})$$

En négligeant cette fois-ci le deuxième terme de l'équation de conservation du moment qu'on notera TV_I , tel que :

$$TV_I = \frac{2}{3m^*(\xi)n} \nabla \cdot \left(n\xi - \frac{m^*(\xi)}{2} n v^2 \right) \quad (\text{VII.4.7})$$

on définit le deuxième modèle HD1-b avec les équations suivantes :

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = -q\vec{v} \cdot \vec{E} - \vec{v} \cdot (\nabla \cdot \xi) - \frac{2}{3n} \nabla \left[\left(n\vec{v} - \frac{\kappa}{k_B} \nabla \right) \left(\xi - \frac{m^*(\xi)}{2} v^2 \right) \right] - \frac{\xi - \xi_0}{\tau_\xi(\xi)} \quad (\text{VII.4.8})$$

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = -\frac{q\vec{E}}{m^*(\xi)} - (\vec{v} \nabla) \vec{v} - \frac{\vec{v}}{\tau_m(\xi)} \quad (\text{VII.4.9})$$

La dernière formulation « HD1-c » définie, ne comprend aucun des deux termes TE_I et TV_I . Elle se compose donc, des équations (VII.4.5) et (VII.4.9).

Nous comparons en FIG. VII.4.2 l'onde THz modélisée avec ces trois formulations (HD1-a, HD1-b et HD1-c), ainsi que le modèle complet HD1. Le terme TE_I dans l'équation de l'énergie contribue de façon fondamentale à maintenir la convergence de la solution numérique jusqu'à 0,6 ps. Quant au terme TV_I qui est responsable de la diffusion des porteurs, nous constatons qu'il fait baisser l'amplitude maximale de l'impulsion THz sans trop modifier son allure. Cette dernière remarque illustre une différence majeure entre les résultats obtenus

avec le modèle HD et ceux obtenus avec le modèle DD car le terme de diffusion des porteurs du modèle DD ne joue quasiment aucun rôle dans la modélisation du PCS.

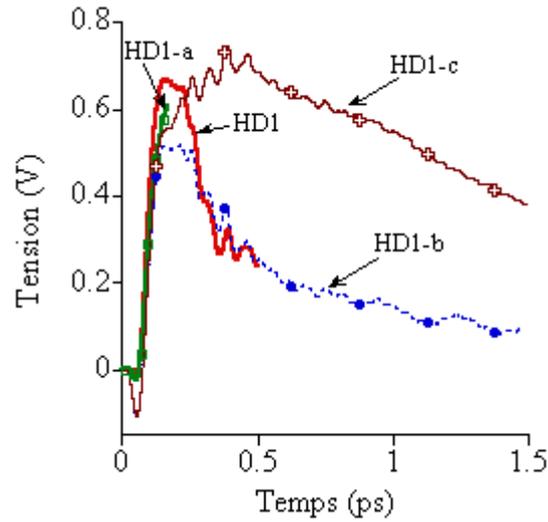


FIG. VII.4.2 : L'onde THz à $x = 4 \mu\text{m}$ de l'excitation pour différentes formulations des équations de conservation du moment et de l'énergie. HD1 : le modèle HD avec tous les termes des équations (VII.4.1) et (VII.4.3), HD1-a : le modèle HD1 sans le terme TE_1 dans l'équation de conservation de l'énergie (VII.4.1), HD1-b : le modèle HD1 sans le terme TV_1 dans l'équation de conservation du moment (VII.4.3) et HD1-c : le modèle HD1 sans aucun des deux termes TV_1 et TE_1 .

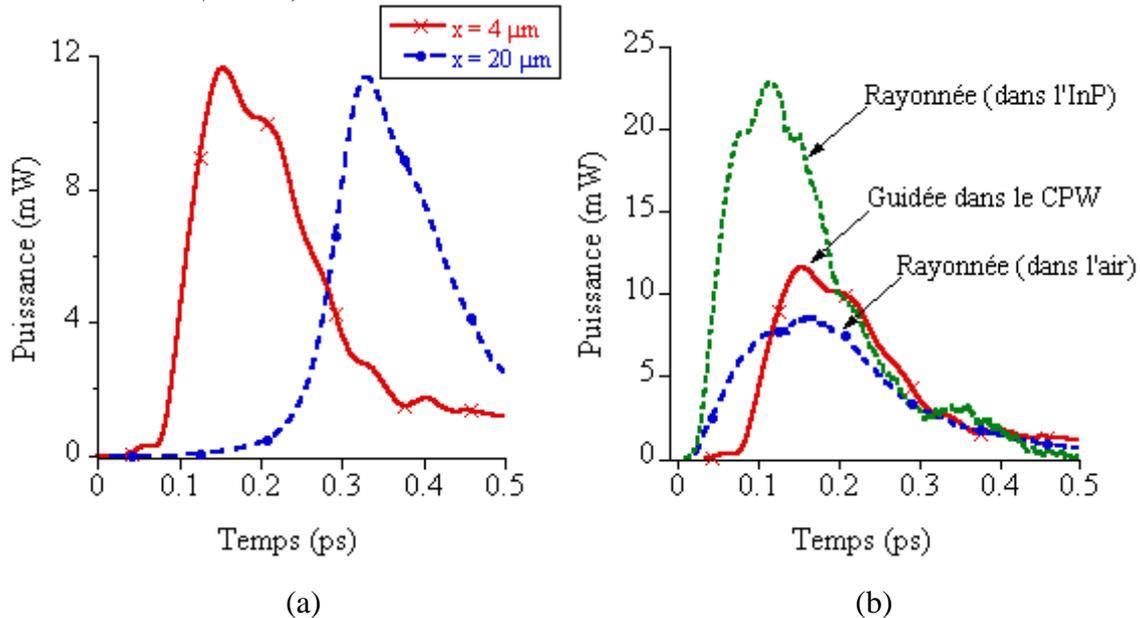


FIG. VII.4.3: a) Puissance guidée : à $x = 4 \mu\text{m}$ et à $x = 20 \mu\text{m}$ du centre du gap, b) Puissances guidée (à $4 \mu\text{m}$ du centre du gap) et rayonnée dans l'air et dans le substrat. (Résultats obtenus avec le modèle HD1 grâce au calcul du vecteur de Poynting).

Ce terme de diffusion contribue également à faire augmenter l'intervalle de convergence de la solution (FIG. VII.4.2). Lorsque cette fois-ci les deux termes TE_1 et TV_1 sont négligés (HD1-c) dans la résolution du couplage Maxwell-HD1, l'impulsion générée s'élargit à cause du terme TE_1 et l'intervalle de calcul augmente grâce à TV_1 . En conclusion,

la stabilité du modèle HD1 est améliorée par la suppression du terme TV1 de l'équation du moment, alors que dans le même temps, ce terme contribue fortement à fixer l'amplitude de l'impulsion THz, d'où son importance.

En gardant le modèle complet du couplage Maxwell-HD1, nous présentons sur la FIG. VII.4.3 le bilan en énergie du PC en traçant d'une part, la propagation de la puissance guidée et d'autre part, les puissances rayonnées dans le substrat et l'air. Comme prévu, la plus grande partie de la puissance transmise au PC est rayonnée dans le substrat. La puissance maximale guidée vaut 12 mW.

Le modèle HD1 souffre de problème de stabilité. Après de très nombreux efforts pour le stabiliser, l'équipe s'est tournée vers un modèle moins ambitieux dans lequel l'équation de relaxation du moment se voyait remplacée par une formulation de la mobilité des porteurs dépendant de leur énergie moyenne. Cette approche est souvent retenue pour la modélisation hydrodynamique de composants actifs y compris dans les logiciels commerciaux de modélisation de composant à semi-conducteurs (ATLAS ou SENTAURUS). Nous notons cette deuxième version du modèle hydrodynamique : HD2 et nous rappelons son jeu d'équations :

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = -q \vec{v} \cdot \vec{E} - \vec{v} \cdot (\nabla \cdot \xi) - \frac{2}{3n} \nabla \cdot \left[\left(n \vec{v} - \frac{\kappa}{k_B} \nabla \right) \left(\xi - \frac{m^*(\xi)}{2} v^2 \right) \right] - \frac{\xi - \xi_0}{\tau_\xi(\xi)} \quad (\text{VII.4.10})$$

$$\vec{v} = -\mu_n(\xi) \left[\vec{E} + \frac{2}{3n} \nabla (n\xi - nm^*(\xi)v^2) \right] \quad (\text{VII.4.11})$$

Les temps de relaxation utilisés dans les équations du modèle HD (toutes les versions) dépendent de la densité d'électrons n et de trous p dans le semi-conducteur. Le couplage Maxwell-HD2 précis, nécessiterait donc, un calcul de $\tau_e(\xi)^2$, $\tau_m(\xi)^3$ et de la masse(ξ) pour tous les couples (n,p) susceptibles d'exister à un instant t dans le semi-conducteur. En nous basant sur le seuil de saturation dans l'InGaAs et sur les valeurs des concentrations calculées lors des précédentes modélisations (DD et HD1), nous avons décidé de calculer $\tau_e(\xi)$, $\tau_m(\xi)$ et de la masse(ξ) sur la gamme des concentrations $[10^{14} ; 1,06 \cdot 10^{18}] \text{ cm}^{-3}$ que nous avons divisée en quatre régions, pour chaque type de porteurs. Par conséquent, 16 régions (4x4) de calcul de $\tau_e(\xi)$, $\tau_m(\xi)$ et de la masse(ξ), en fonction de (n,p), ont été prises en compte dans le couplage Maxwell-HD2.

² Temps de relaxation de l'énergie

³ Temps de relaxation du moment

Nous présentons en FIG. VII.4.4, l'impulsion THz générée par le PC en fonction du couple (n, p) considéré dans la modélisation. Trois couples (n, p) de valeurs constantes ($5 \cdot 10^{17}$, $7 \cdot 10^{17}$, $1,06 \cdot 10^{18}$) cm^{-3} ont été comparés au couple (n, p) dépendant de 16 régions (définies en annexe 1). Nous constatons qu'un pic négatif apparaît au démarrage pour le modèle incluant les concentrations constantes (n et p) les plus élevées qui peuvent exister dans le gap pendant la génération optique des porteurs. Une autre différence est à noter au niveau de l'amplitude maximale qui est de 6 % plus grand pour $(n = p = 1,06 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3})$ par rapport au modèle à 16 combinaisons de (n, p) . Ces différences sont dues à l'utilisation d'un seul couple (n, p) à la place de 16 combinaisons qui permettent plus de précision. Toutefois, les modèles incluant un seul couple (n, p) permettent de réduire le temps de calcul de 40 % puisque le programme ne cherche pas pour chaque cellule et à chaque pas sur le temps à trouver les paramètres dépendant des couples (n, p) les plus pertinents.

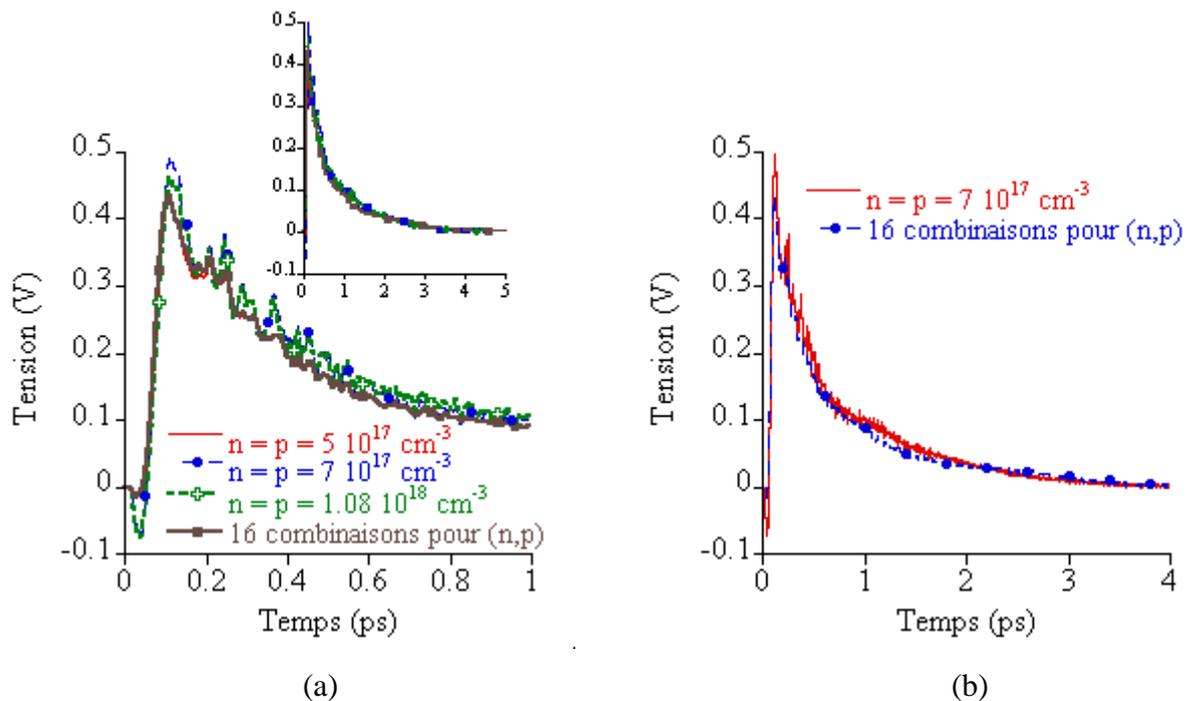


FIG. VII.4.4 : Réponse temporelle du PC avec le modèle HD2 pour : a) quatre différentes configurations du temps de relaxation de l'énergie et de la mobilité (insert représente l'impulsion jusqu'à 5 ps). b) deux configurations. (Le calcul de τ_e et de la mobilité dépend des concentrations utilisées dans le calcul préalable).

Nous présentons les résultats correspondant à la propagation de l'impulsion THz sur la FIG. VII.4.5 pour deux positions de l'impulsion sur le guide : 4 et 20 μm du centre du gap. L'amplitude et la largeur à mi-hauteur de l'impulsion générée au bord du gap sont respectivement égales à 0,48 V et 451 fs. Nous comparons ces résultats à ceux des autres modèles « HD1 » et « DD » dans la section qui suit.

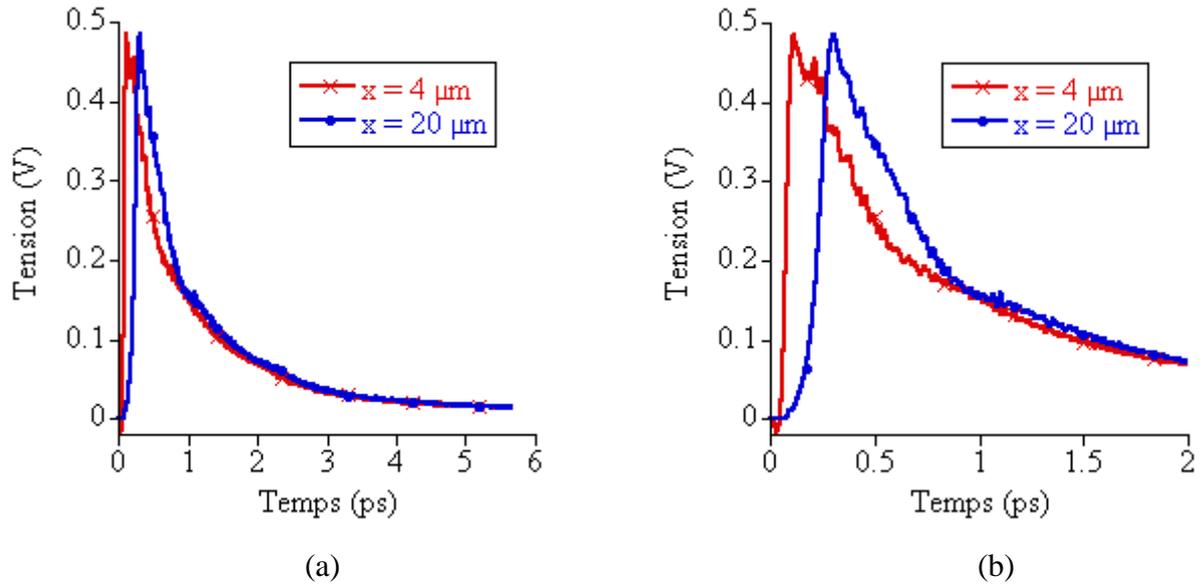


FIG. VII.4.5: a) L'onde THz à $x = 4 \mu\text{m}$ et à $20 \mu\text{m}$ du centre du gap pour le modèle HD2. b) Zoom de (a). (Résultats issus du couplage Maxwell-HD2)

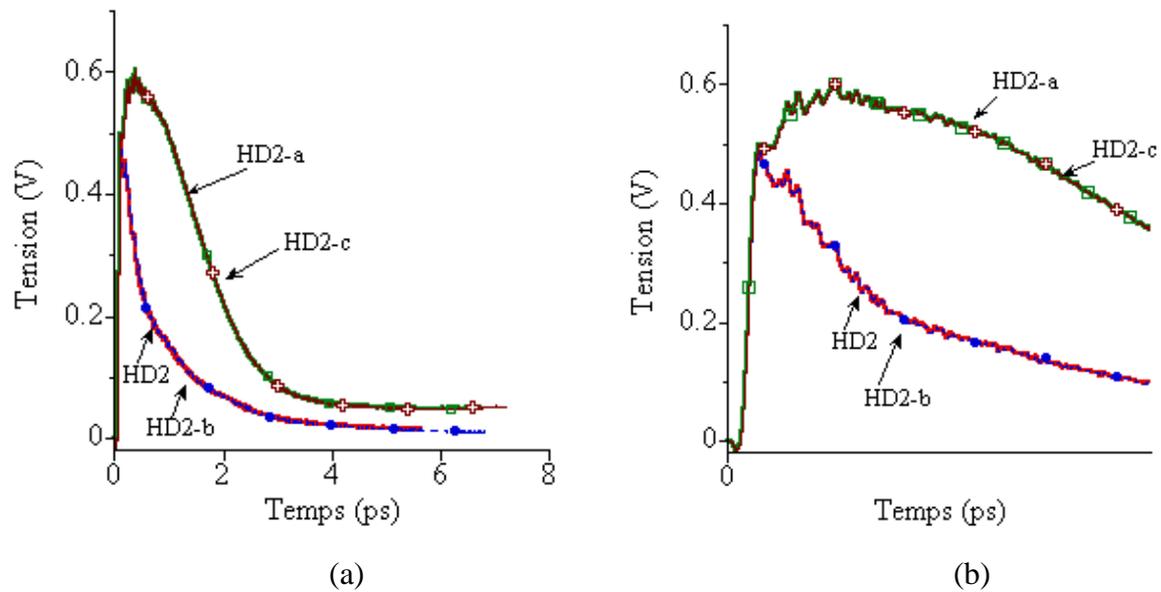


FIG. VII.4.6: a) L'onde THz à $x = 4 \mu\text{m}$ pour différentes formulations des équations de conservation du moment et de l'énergie. HD2 : le modèle HD2 avec tous les termes des équations (VII.4.10) et (VII.4.11), HD2-a : le modèle HD2 sans le terme TE_1 (VII.4.4) dans l'équation de conservation de l'énergie, HD2-b: le modèle HD2 sans le terme TV_2 (VII.4.12) dans l'équation de conservation du moment et HD2-c : le modèle HD2 sans les termes TV_2 et TE_1 . b) Zoom de a) sur $[0 ; 2]$ ps.

Afin d'apprécier l'influence des différents termes liés au gradient de la concentration des porteurs, nous procédons de la même façon que celle décrite ci-dessus pour le modèle HD1, en supprimant certains termes des équations de conservation (VII.4.10) et (VII.4.11). Nous notons : HD2-a le modèle HD2 sans le terme TE_1 (VII.4.4), HD2-b le modèle HD2 sans le terme TV_2 (VII.4.12) et HD2-c le modèle HD2 sans TE_1 et TV_2 .

$$TV_2 = q\mu_n(\xi) \left[\frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x} (n\xi - nm^*(\xi)v^2) \right] \quad (\text{VII.4.12})$$

Nous pouvons remarquer en FIG. VII.4.6 que le terme de diffusion (gradient de la concentration dans l'équation de conservation du moment) ne joue aucun rôle dans la genèse de l'onde THz, tout comme pour le modèle DD. En négligeant le terme TE_1 de l'équation de concentration de l'énergie, nous constatons que le pic d'amplitude de l'impulsion augmente et s'accompagne d'un élargissement de la même façon qu'on a pu observer auparavant avec le modèle HD1.

Dans cette section, nous comparons les résultats obtenus à partir des modèles HD1 et HD2 avec ceux du modèle « dérive-diffusion » (DD) pour une même configuration de porteurs dans le semi-conducteur. Il faut entendre par là que les paramètres de l'équation (VII.4.13) (qui correspond à la loi de vitesse stationnaire des électrons dans les matériaux III-V) ont été ajustés sur les résultats des calculs EMC.

$$\mu_n(E) = \mu_{n0} \times \left(\left(1 + \frac{v_{NS}}{\mu_{n0}E} \left(\frac{E}{E_c} \right)^4 \right) / \left(1 + \left(\frac{E}{E_c} \right)^4 \right) \right) \quad (\text{VII.4.13})$$

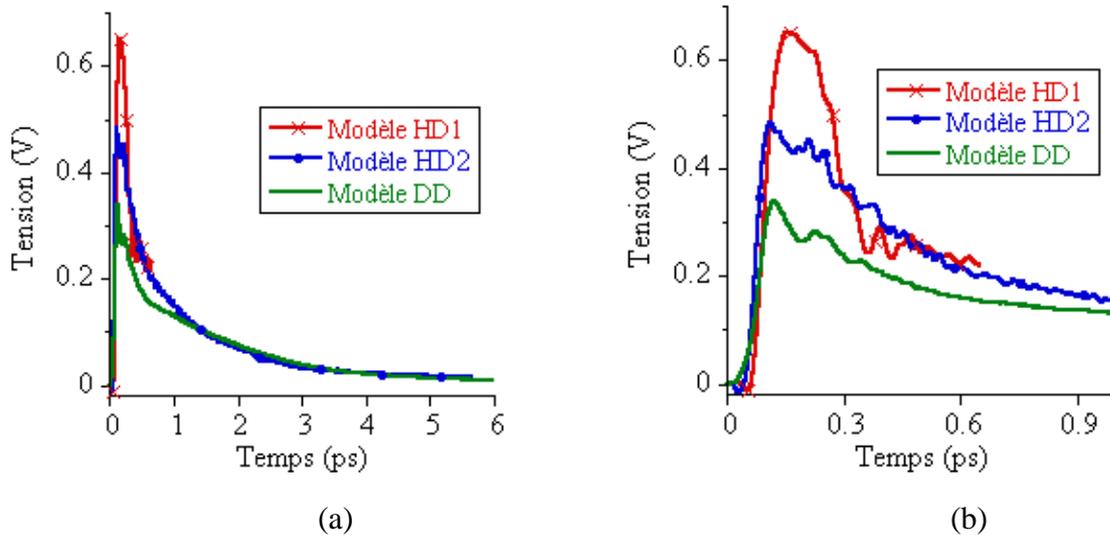


FIG. VII.4.7: a) L'onde THz à $x = 4 \mu\text{m}$ du centre du gap pour les trois modèles de transport : DD, HD1 et HD2, b) Zoom de (a) sur $[0 ; 1]$ ps.

La FIG. VII.4.7 fournit une comparaison des résultats obtenus avec les trois modèles (DD, HD1 et HD2). On peut tout d'abord remarquer que les allures des trois réponses sont proches. Cela donne un certain degré de confiance pour les conclusions (qualitatives sur l'optimisation de la réponse du PC réalisée avec l'approche DD au chapitre 3 de [Tissafi10]). Une observation plus attentive nous indique que le modèle HD2 fournit une réponse

intermédiaire entre celle fournie par HD1 et celle du modèle DD. L'amplitude du pic du modèle HD2 est supérieure à celle du pic obtenu avec DD mais demeure bien inférieure à celle atteinte par HD1. Ce qui est plus décevant est que le retard initial disparaît totalement dans HD2 (tout comme le petit pic négatif qui précède l'impulsion). Il est presque équivalent à celui obtenu avec le modèle DD (54 fs). La largeur à mi-hauteur de l'impulsion est réduite dans le modèle HD1 (242 fs) par rapport au modèle HD2 (451 fs) et DD (458 fs). D'autre part, le délai de réponse du PC ($t_{5\%}$ de l'amplitude maximale) est de 64 % plus grand pour le modèle HD1 que le modèle DD. Cette différence dépend de la relation entre le champ électrique et la vitesse des porteurs. Il aurait été beaucoup plus riche d'aboutir à un code HD1 stable. Cependant le pragmatisme nous a incité à nous focaliser sur le modèle HD2 et à tenter de l'améliorer.

Afin d'évaluer le rôle du transport non stationnaire sur le fonctionnement du PC, nous avons réalisé des modélisations avec le modèle HD en faisant varier la tension de polarisation statique aux bornes d'un « gap » de 2 μm entre 2,5 et 20 Volts. Nous présentons en FIG. VII.4.8 et FIG. VII.4.9 les résultats de modélisations correspondant respectivement aux modèles HD1 et HD2.

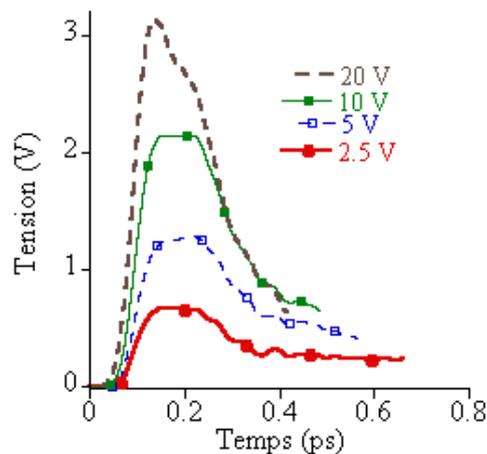


FIG. VII.4.8: Impulsion générée par le PC en fonction de la polarisation appliquée (2,5 ; 5 ; 10 et 20 V). Calcul effectué avec le couplage Maxwell-HD1

Nous observons qu'en utilisant la formulation HD1, l'amplitude de l'impulsion THz augmente en fonction de champ de polarisation alors qu'avec la modèle HD2, le pic d'amplitude sature à partir d'une tension de polarisation de 10 V. Cette saturation résulte de la relation de dépendance entre la mobilité des porteurs et le champ électrique. En effet, à faible champ, les électrons sont à l'équilibre thermique avec le réseau et leur vitesse moyenne est proportionnelle au champ électrique par l'intermédiaire de l'énergie (modèle HD2). La vitesse de dérive des porteurs présente une valeur maximale 'Vmax' obtenue pour une valeur critique

du champ électrique E_c . Lorsque le champ devient important, les interactions des porteurs avec les vibrations du réseau entraînent une diminution de la mobilité des porteurs. Cette diminution de la mobilité se traduit par une variation non linéaire de la vitesse de dérive des électrons, d'où la saturation de l'amplitude maximale de l'impulsion THz pour une polarisation de 10 V dans le cas du modèle HD2. Cependant, nous retrouvons les conclusions obtenues avec le modèle de DD concernant l'augmentation de l'amplitude maximale avec la tension de polarisation. En ce qui concerne les résultats du modèle HD1 (FIG. VII.4.8), l'amplitude maximale de l'impulsion THz augmente avec la tension de polarisation en tirant profit d'un régime de transport très fortement non stationnaire. Cependant, le processus d'ionisation par choc qui se produit à champ élevé et qui n'a pas été pris en compte dans l'approche hydrodynamique constituerait une limite physique à l'augmentation de la polarisation statique.

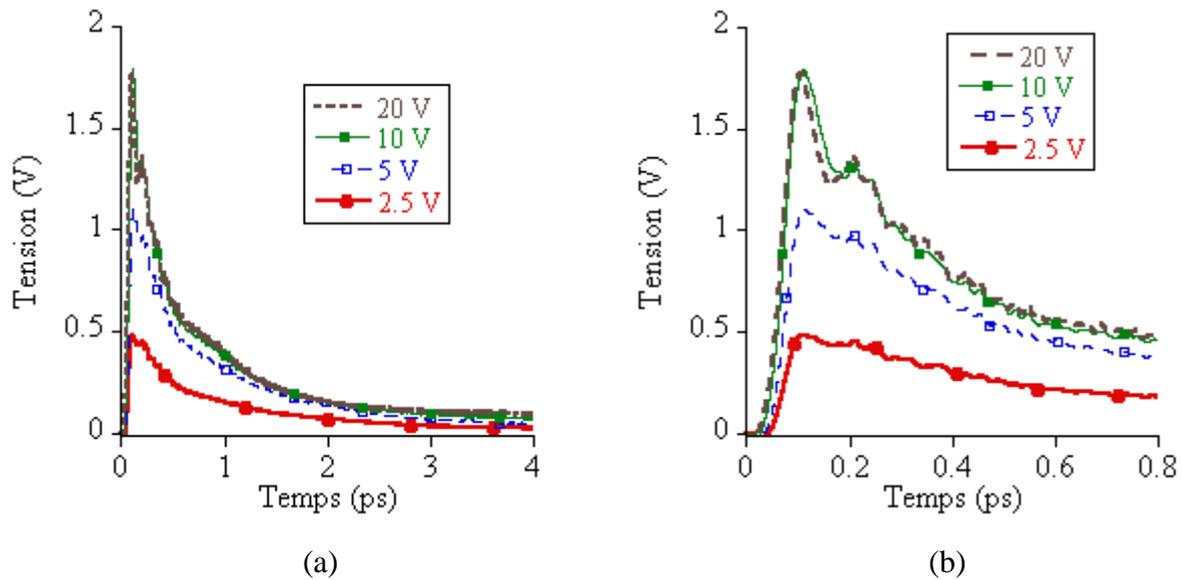


FIG. VII.4.9 : a) Impulsion générée par le PC en fonction de la polarisation appliquée (2,5 ; 5 ; 10 et 20 V), b) Zoom de (a) sur l'intervalle [0 ; 0,8] ps. Calcul effectué avec le couplage Maxwell-HD2

Nous présentons dans cette dernière section, les résultats de modélisation de la structure optimale avec $L_g = 10 \mu\text{m}$ (FIG. VII.4.10) obtenue par B. Tissafi à l'issue d'une étude paramétrique (modèle DD). Un délai de propagation est toujours présent dans la solution de HD2 à cause des phénomènes non stationnaires du transport des porteurs. En outre, le rendement du PC en termes d'amplitude maximale et de largeur à mi-hauteur répond à notre étude d'optimisation et ceci pour les trois approches des équations du transport.

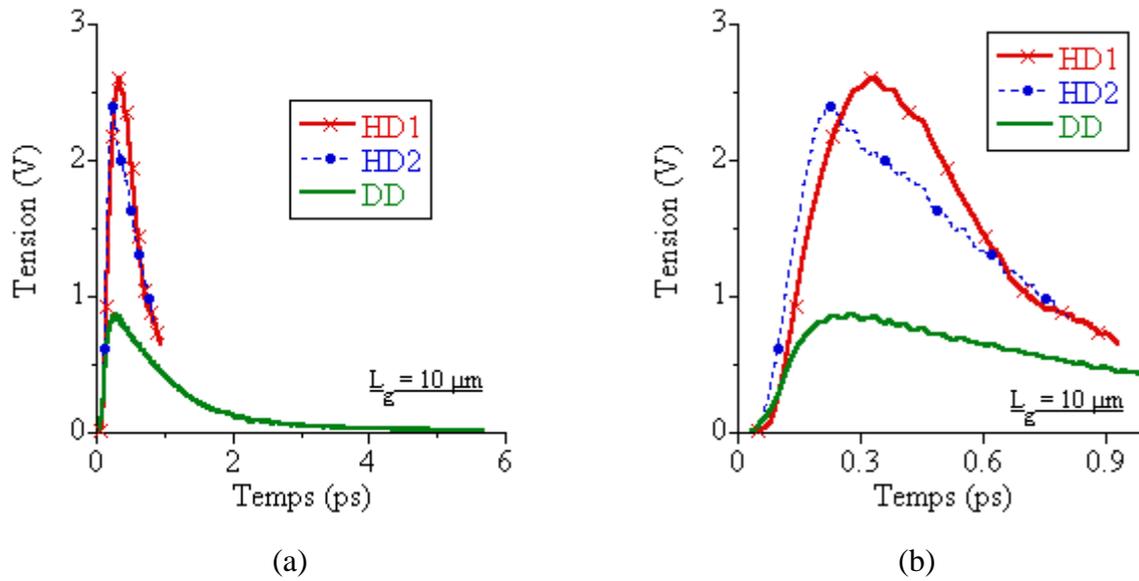


FIG. VII.4.10: Tension de sortie en fonction de l'approche utilisée pour l'équation de Boltzmann pour la structure optimale ($L_g = 10 \mu\text{m}$).

La FIG. VII.4.11 illustre la puissance de l'onde guidée en fonction de l'approche utilisée pour les équations du transport. La puissance maximale guidée dans le CPW est obtenue avec le modèle HD1 et s'élève à 0,13 W. Le modèle DD fournit une puissance maximale de 16 mW à cause du mécanisme de saturation de la vitesse des porteurs inhérent à ce modèle.

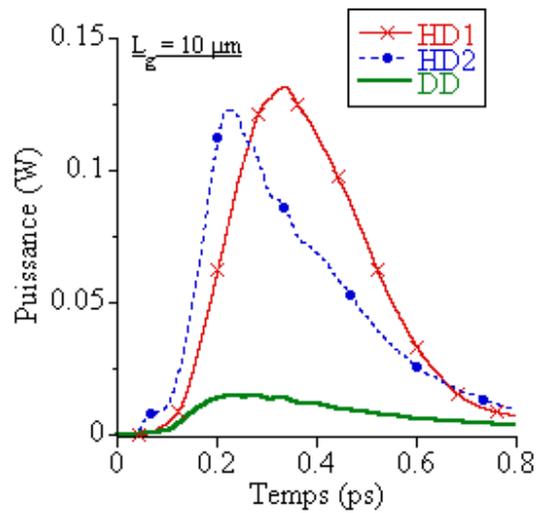


FIG. VII.4.11 : Puissance guidée en fonction de l'approche utilisée pour l'équation de Boltzmann pour la structure optimale ($L_g = 10 \mu\text{m}$).

5) Conclusion

Ce chapitre a été consacré aux résultats issus du couplage des équations de Maxwell et l'équation de Boltzmann approchée par le modèle hydrodynamique. Malgré la divergence de la solution du modèle HD complet au-delà de 0,7 ps, B. Tissafi réussit à montrer l'influence du transport non stationnaire sur l'onde THz générée. Cette étude a été rendue possible par l'utilisation de temps de relaxation calculés à partir de résultats calculés par l'EMC. Ce travail n'avait jamais encore été mené. La différence entre les modèles HD et DD réside dans la prise en compte des effets non stationnaires du transport des porteurs. Cette différence n'influence pas les conclusions qualitatives de l'influence des divers paramètres (géométrie du gap et à l'excitation optique). En revanche l'amplitude de l'impulsion THz et les bilans de puissance sont très différents avec un modèle HD. L'influence de la tension de polarisation statique qui est directement liée au champ électrique local et qui a été étudiée à la fin de ce chapitre avec le modèle HD est également sensiblement différente avec ce modèle. Par manque de temps, une optimisation globale du PCS n'a pu être menée avec le modèle HD dans le cadre de la thèse de B. Tissafi. Ce travail reste à mener. Une prise en compte de l'ionisation par choc apparaît primordiale.

Références bibliographiques :

- [Alexandrou94] S. Alexandrou, C. Wang, R. Sobolewski, T. Y. Hsiang,
IEEE J. Quantum Electron 30, 1332 (1994)
- [Al-Ghazali90] S. M. El-Ghazaly, R. P. Joshi, R. O. Grondin,
IEEE MTT (1990)
- [Alsunaidi97] M. A. Alsunaidi, S. M. Hammadi and S. M. El-ghazaly,
Int. J. Numer. Model. 10, 107 (1997)
- [Aste03] A.Aste, R.Vahldieck,
International Journal of Numerical Modelling 16, 161 (2003)
- [Auston75] D.H.Auston,
Appl. Phys. Lett. 26, 101 (1975)
- [Chimot05] N. Chimot et al.,
Appl. Phys. Lett. 87, 193510 (2005)
- [Holzman01] J.F.Holzman, F.E.Vermeulen and A.Y.Elezzabi,
Appl. Phys. Lett. 79, 4249, (2001)
- [Keil95] U.D.Keil, H.J.Gerritsen, J.E.M.Haverkort, and J.H.Wolter,
Appl. Phys. Lett. 66, 1629 (1995)
- [Keil96] U. D. Keil, D. R. Dykaar,
IEEE J. Quantum Electronics 32, 1664 (1996)
- [Krökel89] D. Krökel, D. Grischkowsky and M. B. Ketchen,
Phys. Lett., 54, 639 (1989)
- [Nougier81] J. P. Nougier et al.,
J. Appl. Phys. 52, 825 (1981)
- [Sano89] E. Sano and T. Shibata,
Appl. Phys. Lett. 55, 2748 (1989)
- [Shen03] Y. C. Shen et al.,
Appl. Phys. Lett. 83, 3117 (2003)
- [Sirbu05] M. Sirbu,
« Couplage des équations de Maxwell avec l'équation de Boltzmann en
3 dimensions, appliqué à la modélisation d'un photo commutateur
TeraHertz »,
Thèse Université Paris-Sud (2005)
- [Sirbu05b] M. Sirbu, S. Lepaul, F. Aniel,
IEEE MTT 53, 2991 (2005)

- [Tissafi10] B. Tissafi,
« Résolution couplée des équations de l'électromagnétisme et du transport en 3D pour des applications THz: Modélisation et optimisation d'un photocommutateur en InGaAs »,
Thèse Université Paris-Sud (2010)
- [Tissafi10b] B. Tissafi et al.,
The Applied Computational Electromagnetics Society 24, No. 4,
August 2009
- [Zhao02] G. Zhao et al.,
Rev. Sc. Inst. 73, 1715 (2002)

CONCLUSION

Ce travail de thèse a relevé de l'analyse et la modélisation de différents mécanismes influant sur la dynamique des porteurs de charge dans les semi-conducteurs III-V en se basant sur l'approche « Ensemble Monte Carlo Full-Band » pour la résolution de l'Equation de Transport de Boltzmann, car cette approche numérique permet de modéliser finement la dynamique des porteurs de charges. L'outil de modélisation développé s'inscrit dans la continuité de précédentes thèses au sein de l'équipe portant, notamment, sur la modélisation de sources et de détecteurs THz. La modélisation microscopique du transport et de la relaxation des porteurs dans ce présent travail de thèse vient donc améliorer les modèles macroscopiques utilisés dans les précédentes. De plus, cet outil peut également améliorer la modélisation du transport et de la relaxation de porteurs photo-excités pour l'étude de cellules photo-voltaïques. Ce nouveau volet de recherche au sein de l'équipe a émergé à la faveur d'une collaboration avec l'IRDEP. Les Cellules Solaires à Porteurs Chauds (concept de cellules photo-voltaïque de 3^{ème} génération) et les composants opto-électronique THz partagent en effet bon nombre de phénomènes physiques. Ces phénomènes ont donc été intégrés dans le code Monte Carlo, après le développement de modèles appropriés. Dans les matériaux ou dans les dispositifs étudiés, on trouve de grandes concentrations de porteurs de charge. Cela a rendu nécessaire l'intégration du Principe d'Exclusion de Pauli de manière automatique (avec un maillage de la zone de Brillouin qui s'adapte au rapport entre la densité de porteur considérée et le nombre de super-particules modélisé), et l'étude détaillée de différentes interactions d'origine Coulombiennes entre porteurs telles que les collisions électron-électron, électron-trou, trou-trou, et l'écrantage. Un écrantage statique fonction des densités de porteurs qui peuvent dépendre du temps (et qui passe continûment du type Debye-Huckel au type Thomas-Fermi) à fait l'objet d'un soin particulier afin de ne pas trop allonger les temps de calculs. Un autre point commun aux différents domaines de recherche des équipes au service desquels ce travail est venu en support, concerne la famille de matériaux considérée : les semi-conducteurs III-V. Plus particulièrement, GaAs, InAs, GaSb, ainsi que leurs alliages $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ et $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$ ont été étudiés dans cette thèse.

L'étude de ces matériaux a nécessité la connaissance de leur structure électronique. Afin de les calculer, un modèle de pseudo-potentiels empiriques incluant les termes non locaux (dont le couplage spin-orbite) a été développé afin de pouvoir traiter les alliages ternaires. En effet, dans la Méthode des Pseudo-potentiels Empiriques la prise en compte des

alliages est bien plus aisée qu'en $k.p$ (30 bandes), codes de calcul que possède déjà l'équipe pour différents semi-conducteurs III-V et IV-IV binaires. Cette partie du travail a été motivée par l'étude de $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$ (pour des applications Transistors Bipolaires à Hétéro-jonction), matériau dont seules les énergies de bande interdite et splitting spin-orbit en centre de zone sont connues. Il était donc nécessaire d'accéder à l'alliage à partir des composés binaires qui ont constitué la source de données expérimentales. Ce travail sera également utile à l'équipe car il facilitera l'ajustement des Hamiltoniens $k.p$ (pour les alliages) pour lesquels de nombreux perfectionnements ont déjà été effectués. De plus les calculs en $k.p$ sont beaucoup plus rapides qu'en Pseudo-potentiels, atout en faveur d'une future intégration du code $k.p$ dans le code Monte Carlo Full-Band. Cela présentera plusieurs avantages. D'une part, les états d'énergie pourront être calculés dans la totalité de la zone de Brillouin sans devoir recourir à une procédure d'interpolation sur une structure électronique pré-tabulée. D'autre part, les facteurs de recouvrement des parties périodiques des ondes de Bloch entre états couplés par une interaction (dénommé $I(k,k')$ dans le chapitre II) pourront également être calculés à la volée, sans devoir recourir à différentes approximations (approximations imposées par la lenteur des calculs en Pseudo-potentiels). Ainsi, la modélisation (inédite) Full-Band du transport des trous avec une prise en compte rigoureuse des facteurs de recouvrement présentée dans le chapitre II pourra être améliorée et accélérée.

Ces facteurs de recouvrement se sont révélés vitaux à la modélisation de l'absorption optique (impulsions et CW) et la modélisation de la recombinaison radiative. Les routines développées permettent de modéliser des expériences de type « pompe–sonde » dégénérées ou non, où seuls les paramètres physiques de l'excitation (puissance, FWHM temporelle et spectrale) déterminent l'absorption sans autres paramétrages « artificiels ». Le principe d'exclusion de Pauli faisant systématiquement partie du code Monte Carlo global, les phénomènes tels que le blanchiment de l'absorption en bords de bandes peuvent être implicitement traités. Ces facteurs de recouvrement se sont également révélés indispensables à la modélisation des processus d'ionisation par choc. Le modèle développé inclut le calcul de l'élément de matrice et une conservation fine de la quantité de mouvement et de l'énergie. Ce modèle s'approche des calculs ab initio et se place au-delà de l'approche « random-k » de Kane et, bien entendu, du modèle analytique de Keldysh. De plus, le taux d'ionisation par choc étant calculé « en interne », la réelle distribution des porteurs dans l'espace réciproque (et par causalité l'anisotropie des taux d'ionisation par choc) et la non conservation du nombre de particule sont pris en compte. Cela permet de dépasser la pratique habituelle, dans

laquelle l'ionisation par choc est introduite dans un modèle Monte Carlo de façon paramétrée et ne permet que le calcul du coefficient d'ionisation qui est, in fine, tout aussi paramétré. De manière symétrique (bien que dans la pratique de manière très différente), un modèle pour les processus Auger a été développé avec le même souci de rigueur. Ce modèle calcule également le taux de recombinaison Auger en interne et s'affranchit donc d'un paramétrage du type coefficients Auger, coefficients qui ne sont pas toujours disponibles expérimentalement en fonction de la température. L'effet Auger joue un rôle clef dans les dispositifs ambipolaires où les densités de plasmas de porteurs sont très élevées. Ces modèles non paramétrés pour les processus de génération et de recombinaison de paires électron-trou (i.e. : absorption de photon, émission de photon, ionisation par choc, processus Auger) ont permis la modélisation d'un absorbeur de Cellule Solaire à Porteurs Chauds en $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ où l'équilibre entre les processus de génération et de recombinaison est fonction de l'intensité de l'excitation optique uniquement. L'étude a révélé que la recombinaison radiative est faible devant les recombinaisons Auger. L'étude a également révélé que l'ionisation par choc et les processus Auger (réciproque l'un l'autre) ne se compensent pas dans les conditions modélisées et que la balance penche en faveur des processus Auger.

La modélisation de l'absorbeur d'une Cellules Solaires à Porteurs Chauds en $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ a été alimentée par un travail effectué en collaboration avec Hani Hamzeh. Il s'agit du couplage du code Monte Carlo pour les porteurs avec un code modélisant cette équation pour les phonons. Ce couplage permet d'accéder aux propriétés de transport en présence de « phonons chauds » (accumulation de phonons LO) qui contribuent à modifier la relaxation énergétique des porteurs (« phonon bottleneck »). Cette relaxation est au cœur du concept de Cellules Solaires à Porteurs Chauds, où dans le cas théorique idéal elle n'a pas lieu. Dans les matériaux considérés la relaxation des porteurs de charge ne peut, à l'heure actuelle, être supprimée, mais elle peut être ralentie à l'aide du « phonon bottleneck » qui est créé par l'accumulation de phonons LO issue de la relaxation des porteurs même. Le « phonon bottleneck » bien que présent dans l'absorbeur modélisé, ne ralentit pas assez la relaxation des porteurs photo-excités pour permettre un fonctionnement efficace de la Cellules Solaires à Porteurs Chauds. L'accumulation de phonons est favorisée en présence de grandes densités de porteurs. Cependant, l'étude de ces phonons chauds a montré, à l'aide de comparaison avec des mesures issues d'expériences pompe-sonde, que lorsque les populations de porteurs sont dégénérées le « phonon bottleneck » est absent car il y a couplage entre les modes de phonons LO et les modes de plasmons.

Ce couplage entre les modes de phonons LO et les modes de plasmons a été étudié lors des travaux menés sur le transport des électrons minoritaires pour des applications Transistors Bipolaires à Hétéro-jonction. Il s'agit d'un sujet complexe. Des résultats non intuitifs de mesures, sur GaAs et $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, ont montré une augmentation de la mobilité des électrons minoritaires avec le niveau de dopage en accepteurs. L'approche sophistiquée « phase-shift » pour l'interaction électron-impureté ionisée (atomes dopants) n'a pas permis de reproduire ces résultats. Ce travail a été effectué en collaboration avec Marc Michailat, qui dans sa thèse, a appliqué avec succès l'approche « phase-shift » dans le cas de semi-conducteurs IV-IV (Si et SiGe). Le modèle développé pour le couplage entre les modes de phonons optiques polaires longitudinaux et les modes de plasmons a permis de reproduire ces résultats expérimentaux dans GaAs et $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$. Les calculs ont également montré que ce gain de mobilité n'est pas présent dans $\text{GaAs}_{0.50}\text{Sb}_{0.50}$ car sa structure électronique ne s'y prête pas. Ce matériau intéresse particulièrement la communauté du monde des Transistors Bipolaire à Hétéro-jonction III-V car les TBH GaAsSb sont de solides candidats pour supplanter les TBH InGaAs qui détiennent cependant aujourd'hui encore les records de performances micro-ondes. Le transport des électrons qui constituent les porteurs minoritaires dans la base est un point clé, nécessaire à toute modélisation de composants notamment dans les environnements de simulation commerciaux proposant des modèles à Balance d'Énergie (Silvaco, Sentaurus, etc.).

Enfin, une dernière collaboration a permis de largement améliorer la modélisation d'un photo-commutateur à l'aide d'un modèle Hydro-Dynamique tenant compte de temps de relaxation reflétant la nature hors équilibre des distribution de porteurs (temps de relaxation du moment et de l'énergie fonction de l'énergie moyenne).

Ces études ont été réalisées à l'aide du modèle Monte Carlo développé durant cette thèse. La mise au point et les tests des différentes composantes d'un tel code de calcul, dont la portée est désormais très large, a cependant demandé beaucoup de temps. Ce temps, nécessaire pour mener les nombreuses études désormais accessibles grâce aux possibilités offertes par le modèle Monte Carlo global, a manqué à la fin de cette thèse. Ces longues périodes de développement et de test ont tout de même été l'occasion d'étudier en détail les différents volets composant le modèle Monte Carlo global. Cela est reflété par le nombre de résultats dans chacun des chapitres qui composent ce manuscrit. Des études qui prolongeraient ce travail de thèse pourraient être menées prochainement. On peut citer, de façon non exhaustive, l'étude approfondie de l'ionisation par choc et des processus Auger

(pouvant impliquer des phonons) en fonction de la température, une étude plus approfondie du concept de « phonons chauds » en présence du couplage phonon-plasmon, la modélisation d'une Cellule Solaire à Porteurs Chauds en fonctionnement (avec un potentiel appliqué aux bornes), et le couplage avec l'espace réel qui rendrait possible la modélisation d'un dispositif « physique ».

Liste d'acronymes

Dans ce manuscrit, un certains nombre d'acronymes ont été utilisés. Bien qu'ils apparaissent dans différents chapitres, la plupart n'ont été défini qu'à la première utilisation.

BTE (Boltzmann Transport Equation)

BZ (Brillouin Zone)

CB (Conduction Band)

CHCC (processus Auger, voir CVCC)

CHHS (processus Auger, voir CVVV)

CNP (Conservation du Nombre de Particules)

CSCP (Cellule Solaire à Porteurs Chauds)

CSE (Contact Sélectif en Energie)

CVCC (processus Auger excitant un électron)

CVVV (processus Auger excitant un trou)

DD (Dérive-Diffusion)

DH (Debye-Hückel)

EMC (Ensemble Monte Carlo)

EMCA (Ensemble Monte Carlo « analytique »)

EPM (Empirical Pseudopotential Method)

FBEMC (Full Band Ensemble Monte Carlo)

FGR (Fermi's Golden Rule)

HD (HydroDynamique)

HH (Heavy Hole band)

IBZ (Irreducible Brillouin Zone)

IEF (Institut d'Electronique Fondamentale)

IPC (Ionisation Par Choc)

IRDEP (Institut de Recherche et Développement sur l'Energie Photovoltaïque)

LH (Light Hole band)

LM (Lower Mode, voir LOPCM)

LOPC (Longitudinal Optical phonon – Plasmon Coupling)

LOPCM (Longitudinal Optical phonon – Plasmon Coupled Modes)

MB (Meyer & Bartoli)

NLEPM (Non Local Empirical Pseudopotential Method)

PC, PCS (Photo-Commutateur)

PI (porteur-impureté)

POP (Polar Optical Phonon)

PP (porteur-porteur)

RPA (Random Phase Approximation)

RTA (Relaxation Time Approximation)

SO (Split-Off band)

SPE (Single Particle Excitation)

TBH (Transistor Bipolaire à Hétérojonction)

TF (Thomas-Fermi)

UM (Upper Mode, voir LOPCM)

VCA (Virtual Crystal Approximation)