



## **Étude du transport électronique dans le substrat InAs de type N par la simulation de Monte Carlo**

**B. Bouazza<sup>1,\*</sup>, A. Guen-Bouazza<sup>1</sup>, L. Amer<sup>1</sup>, C. Sayeh<sup>1</sup>, N. E. Chabane-Sari<sup>1</sup> et  
C. Gontrand<sup>2</sup>**

*<sup>1</sup>Laboratoire des matériaux et énergies renouvelables, faculté des sciences de  
l'ingénieur, Université Abou-Bekr-Belkaid de Tlemcen,  
BP 119 Tlemcen 13000, Algérie.*

*<sup>2</sup>LPM-Bat 502 – 6ème étage- Blaise Pascal- INSA de Lyon, Villeurbanne cedex, France*

(Reçu le 22 Août 2004, accepté le 28 Décembre 2004)

---

\* Correspondance et tirés à part, e-mail : [bouaquen@yahoo.fr](mailto:bouaquen@yahoo.fr)

### **Résumé**

La compréhension des phénomènes microélectroniques décrivant le comportement des porteurs dans les matériaux semi-conducteurs exige la connaissance de la fonction de distribution d'énergie; celle-ci étant obtenue par la résolution de l'équation de Boltzmann. Or, la solution analytique de l'équation de Boltzmann s'avère très difficile et très complexe. Actuellement plusieurs méthodes numériques sont employées avec succès pour résoudre cette équation, parmi lesquelles la méthode de Monte Carlo qui fait l'objet de ce travail.

La simulation par les méthodes de Monte Carlo est aujourd'hui un des outils les plus utilisés pour l'étude du fonctionnement physique des composants électroniques. Elle consiste à suivre l'évolution des paquets d'électrons dans l'espace réel, où chaque électron soumis au champ électrique dans le matériau entre en interaction avec le réseau cristallin. C'est un processus itératif composé d'une séquence de vols libres, entrecoupée d'interactions acoustiques, piézoélectriques, polaires et non polaires, inter-vallées, impuretés, ionisation et surface.

Nous avons appliqué cette méthode au matériau III-V dans le cas de l'InAs. Nous avons étudié le comportement des porteurs du point de vue dynamique et énergétique (variation de la vitesse et de l'énergie en fonction du champ électrique).

La simulation est appliquée, en tenant compte de la variation des porteurs en fonction du temps (mode non stationnaire), de l'effet de la température, et de l'effet de la concentration (dopage). Les résultats que nous avons obtenus s'avèrent comparables à ceux de la théorie.

**Mots-clés:** *Méthode de Monte Carlo, interactions, structure de bande, composants III-V.*

## **Abstract**

### **Study of electron transport in N-type InAs substrate by Monte Carlo Simulation**

The microelectronic comprehension of the phenomena which describes the behavior of the carriers in semiconductor materials requires the knowledge of energy distribution function. This distribution function is obtained by the resolution of Boltzmann equation which is very hard to solve analytically. Many methods based on modeling are actually successfully used to solve this equation. The Monte Carlo method is among the most methods used for studying electronics components operations.

It consist to follow the evolution of electron packets in real space, where each electron subjected to the electric field present in material goes interact with the crystal lattice. It is therefore an iterative process made up from a whole coasting flights stopped by acoustics interactions, polar and non polar optics, piezoelectric, inter-valley, impurity, ionization and surface.

By applying this method to the III-V material, case of InAs, we have described the behavior of the carriers from dynamic and energetic point of view (speed and energy variation according to the field). The simulation is applied, taking into account variation of the carriers as a function of the time in the non stationary mode, the effect of temperature, and doping concentration. The results we obtained are similar to the theory.

**Keywords:** *Monte Carlo method, interactions, structure of band, III-V components.*

## **1. Introduction**

La connaissance de la fonction de distribution d'énergie est obtenue à partir de la résolution des dérivées partielles d'équation de Boltzmann, et il est possible d'étudier les phénomènes de transport dans les matériaux semi-conducteurs. Néanmoins la solution analytique de cette équation est très complexe, souvent elle fait appel à des techniques de simulations numériques. La simulation par la méthode de Monte Carlo est l'une de ces techniques, elle permet de reproduire exactement les divers phénomènes microscopiques existants dans les matériaux semi-conducteurs [1-3]. Les résultats de la simulation nous permettent de connaître les phénomènes stationnaires et non stationnaires, et d'obtenir directement les paramètres importants dans la dynamique électronique telle que la vitesse et l'énergie. La méthode de Monte Carlo que nous utilisons pour caractériser les matériaux, emploie un modèle avec trois vallées ( $\Gamma$ , L et X) [4], non paraboliques. Le modèle de Monte Carlo

inclut un composant électronique avec des phénomènes optiques polaires, des phénomènes optiques inter- et intra-vallée, équivalent et non équivalent à des phénomènes optiques inter-vallées, piézoélectrique non polaires, des impuretés, et dispersion de phénomènes, ionisé et neutre acoustique d'impureté. En outre, la dispersion d'alliage et les effets de contrainte [ 5 ] sont considérés pour le canal d'InGaAs. Tous les taux de dispersion sont calculés avec un facteur de forme (l'intégrale de chevauchement) proposé par Matz [ 6.7 ].

Dans le présent numéro, nous étudierons l'arsenic de l'indium "InAs". Il intéressant donc de comprendre son opération pour effectuer une étude complète des caractéristiques de ce matériel et pour déterminer l'influence du milieu externe sur les effets qu'il produit [ 8.9 ]. La simulation utilisée dans notre cas permet pour suivre les évolutions des particules représentatives dans les diverses couches de matériaux en fonction du temps.

## 2. La méthode de Monte Carlo

Le principe de cette méthode consiste dans le comportement de chaque électron soumis à un champ électrique, dans le vrai espace et l'espace de vecteurs de vagues [10-12], pour cela :

1 Nous sommes associés pour chaque porteur que nous simulerons la trajectoire, un initial vecteur de vague  $\vec{k} \rightarrow 0$  et une position de vecteur initial.

2 Nous avons employé le procédé "individu-dispersant". Il consiste à établir une distribution de temps suivant une loi dont l'expression est simplifiée par l'introduction d'une interaction factice aux effets nuls connus sous le nom de " individu-dispersant "[1 ]. La connaissance de l'état de l'électron est effectuée pendant l'instant du temps irrégulièrement divisé.

3 A chaque étape nous savons, pour chaque porteur son vecteur de vague et la position à l'instant t où la mesure commence. Alors pour un "p" remarquable par porteur nous savons que :

$$\vec{K}_p(t), \vec{r}_p(t), \vec{E}_p(t) = \vec{E}(\vec{K}_p)$$

(1)

4- Nous accomplissons un vol marchant de la durée  $\Delta t$ , ainsi nous aurons :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{K}_p(t + \Delta t) = \vec{K}_p(t) + \frac{e\vec{E}}{\eta} \Delta t \\ \vec{E}_p(t + \Delta t) = \vec{E}(\vec{K}_p(t + \Delta t)) \\ \vec{r}_p(t + \Delta t) = \int \vec{v}_p(t) dt \end{array} \right. \quad (2)$$

5- Nous recherchons s'il y avait une interaction pendant l'intervalle du temps  $\Delta t$  par la traction au destin d'un nombre aléatoire:

- S'il n'y a aucune interaction, l'état du porteur n'est pas modifié.
- S'il y avait interaction, nous plaçons l'interaction à l'instant  $t + \Delta t$  et on

cherche  $\vec{K}'_p$  après le choc en tirant des sorts d'un nombre aléatoire, son état est défini maintenant par [13.14]:

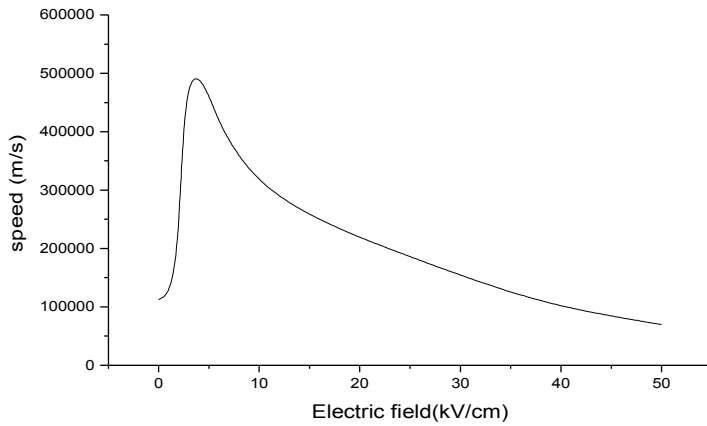
$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{K}'_p(t + \Delta t) \\ \vec{E}'_p(t + \Delta t) = \vec{E}(\vec{K}'_p(t + \Delta t)) \\ \vec{r}'_p(t + \Delta t) = \vec{r}_p(t + \Delta t) \end{array} \right. \quad (3)$$

### 3. Résultats et discussion

Afin de montrer l'intérêt en étudiant le phénomène du transport électronique dans InAs, nous présentons une étude en mode stationnaire et mobile.

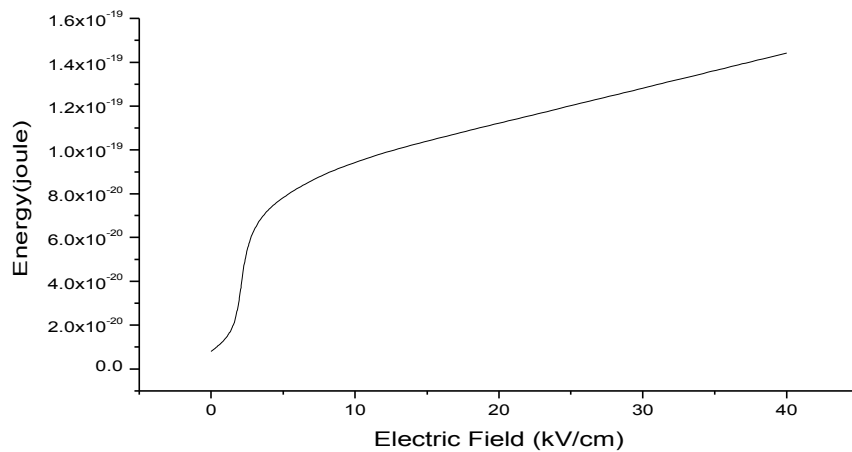
#### 3-1. Mode Stationnaire

Les tailles moyennes directement accessibles dans la simulation sont la vitesse et l'énergie. Voir Figure(1) et (2), la vitesse et la moyenne selon le champ électrique. On note qu'autour du champ critique, la vitesse atteint sa valeur maximum, alors il commence à diminuer de (3.63kV/cm).

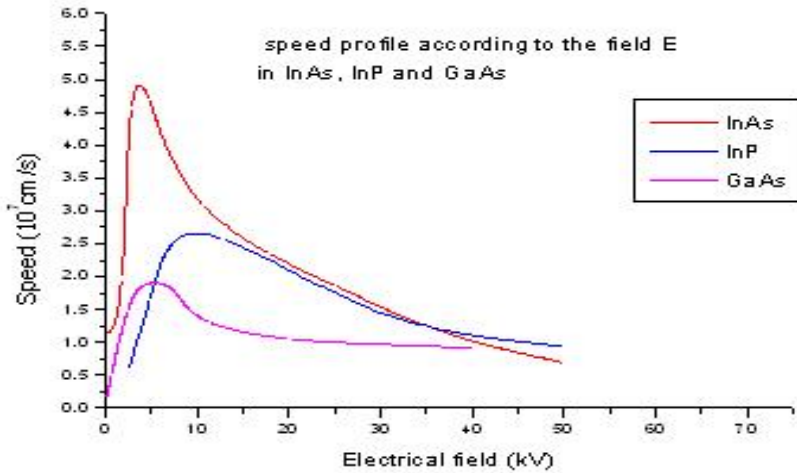


**Figure 1 :** *profil de la vitesse en fonction du champ électrique E dans InAs*

Les porteurs commencent à se déplacer à partir de la vallée  $\Gamma$  vers les vallées plus hautes L et par conséquent leurs vitesses tombent (les porteurs dans la vallée L sont plus lourds que dans la vallée  $\Gamma$  )



**Figure 2 :** *Évolution de l'énergie en fonction du champ électrique E dans InAs*



**Figure 3 :** *profil de la vitesse suivant le champ E dans InAs, INP et GaAs*

Cette énergie prendra des valeurs croissantes mais dans un intervalle des valeurs plutôt petites du champ qui change de 0 (kV/cm) à 3.63 kV/cm. Une fois que cette valeur de champ est dépassée, le porteur aura une énergie qui aura une variation linéaire selon le champ. Si nous faisons une comparaison avec d'autres matériaux tels que le INP ou la GaAs, nous pouvons dire qu'un As a une pente  $\frac{\Delta \epsilon}{\Delta E}$  plus haute puis cela des deux autres matériaux (Figure.3).

En d'autres termes, nous pouvons dire que dans les mêmes conditions, le porteur d'énergie transporte plus que les deux autres matériaux. Cette étude prouve que les matériaux qui avaient une vitesse limitée sont ceux pour lesquels la masse est très basse dans la vallée centrale et un espace d'énergie très élevée entre la vallée centrale et les vallées latérales les plus accessibles, de sorte que pour permettre aux électrons d'avoir assez de temps d'acquérir des vitesses élevées avant d'être transféré.

Le tableau 1 présente le rapport des masses efficaces ( $m_r^*/m_0$ ) et les lacunes d'énergie correspondantes ( $\Delta \Gamma - L$ ) les valeurs respectivement pour des composés d'Institut central des statistiques, de GaAs et de INP. Là les valeurs prouvent que nous pouvons nous attendre à de meilleures exécutions de survitesse pour InAs que cela de la GaAs et du INP assumant les conditions semblables de champ électrique.

Tableau 1 : Rapport des masses efficaces ( $m_{\Gamma}^*/m_0$ ) et des lacunes d'énergie correspondantes ( $\Delta E_{\Gamma L}$ ).

	InP	AsGa	InAs
$m_{\Gamma}^*/m_0$	0.08	0.063	0.022
$\Delta E_{\Gamma L}$	0.61 eV	0.33 eV	0.87 eV

Le schéma 4 présent les résultats expérimentaux du profil expédient selon le champ

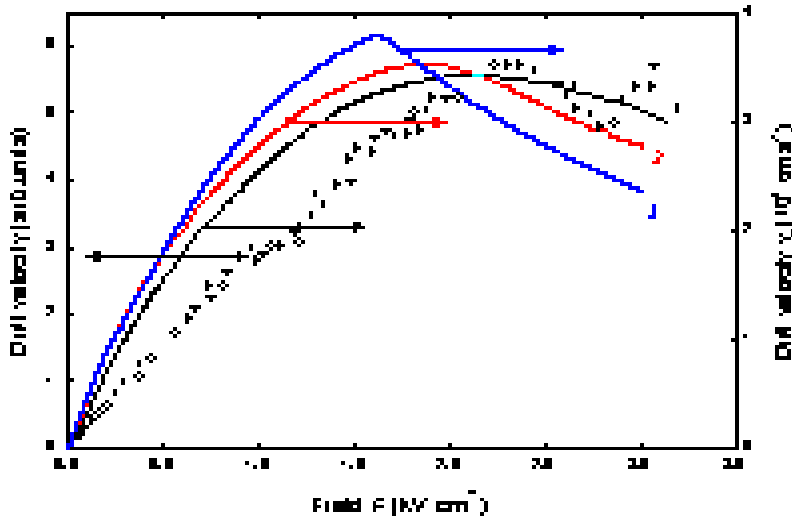
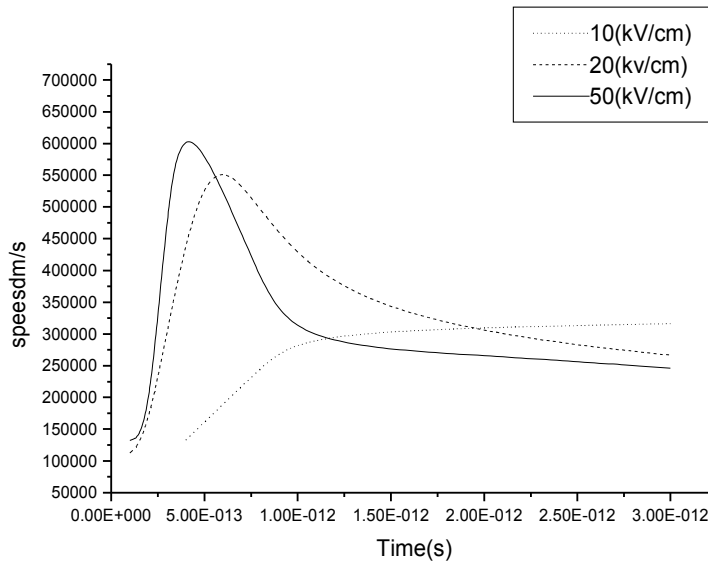


Figure 4 : les résultats expérimentaux du profil de la vitesse en fonction du champ E [ 15,16 ].

### 3-2. Mode non stationnaire

Nous notons le phénomène de "survitesse". La survitesse est le phénomène passager dans lequel les paquets d'électrons prennent des valeurs supérieures à la vitesse stationnaire de mode (le schéma 5). Pour le champ de 10.kV/cm, nous observons l'absence de la survitesse qui implique l'absence de l'excédent d'électron. Pour le champ de 20kV/cm, les phénomènes de survitesse sont situés entre 10-13 s et 10-12 s. Et finalement pour le champ de 50kV/cm, les phénomènes finis de vitesse sont situés entre 10 -13 s et 8.10 -13 s.



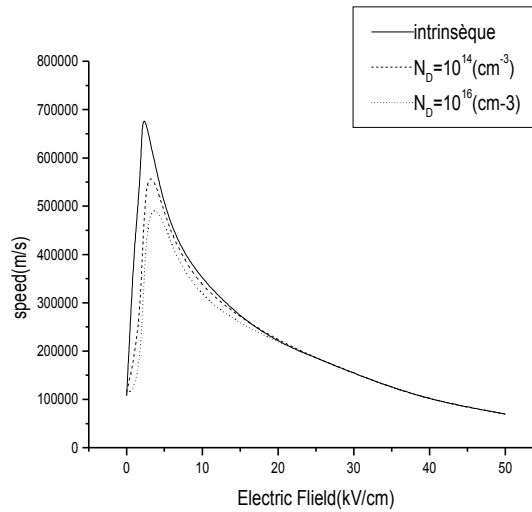
**Figure 5 :** *Évolution de la vitesse en fonction du temps pour différents champs E*

En conséquence nous pouvons conclure qu'il y a une réduction en valeur de vitesse maximum avec la réduction du champ appliqué. D'autre part quand le champ augmente, la survitesse est plus courte. Le rôle du phénomène de survitesse concerne en particulier la détermination des exécutions dans les fréquences et de la puissance des composants effectués du matériel étudié. Il est conditionné par le dernier, la période de transfert des électrons à une distance donnée. Par conséquent nous avons comparé les possibilités offertes par InAs à d'autres matériaux tels que la GaAs et INP et nous avons noté que le matériel d'InAs représente le phénomène de la survitesse le mieux adapté que les deux autres matériaux.

### 3-3. Influence deu dopage

L'effet d'enduire sur la vitesse de porteurs est déterminé par l'application d'un bas champ, cet effet est illustré sur le schéma 6. Il montre la variation de vitesse selon le champ pour différentes concentrations :  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ,  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$  et une courbe intrinsèque de semiconducteur. Ils sont caractérisés par une réduction de la crête de la vitesse et une petite augmentation dans le domaine de seuil. En conséquence une réduction de mobilité dans le bas domaine.



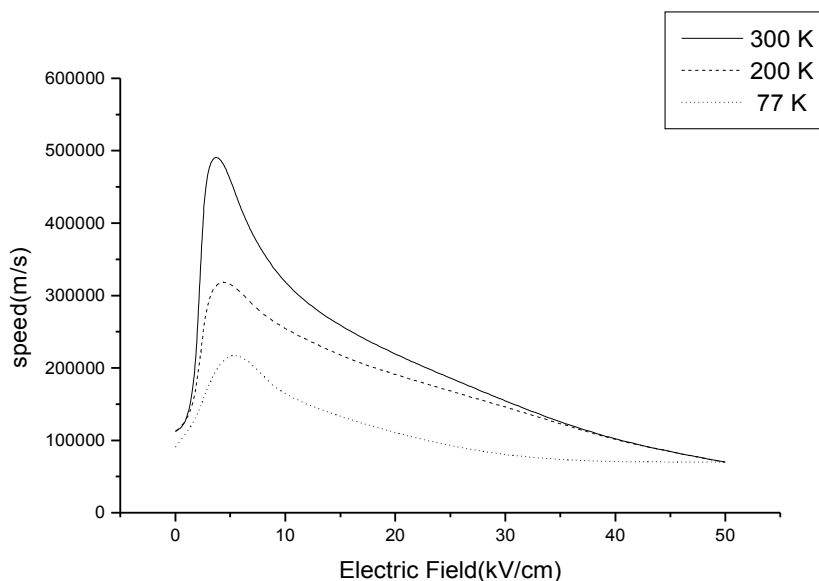


**Figure 6 :** *profil de v suivant le champ E dans InAs pour différents dopages*

Par conséquent on le constate que pour un semi-conducteur intrinsèque, le champ de seuil est égal à 2.31 kV/cm correspondant à une vitesse de  $6,77.10^7 \text{ cm/s}$ , parce que la concentration de  $10^{16}$  centimètres  $^{-3}$ , il est égal à 3.63 kV/cm pour une vitesse de  $4.92.10^7 \text{ cm/s}$ , ou quant à la concentration  $10^{14}$  centimètres  $^{-3}$  le champ de seuil est égal à 3.13 Kv/cm pour une vitesse de  $5.57.10^7 \text{ cm/s}$ . Il est expliqué que, l'effet d'enduire est situé dans un intervalle étroit de champ et dès que nous commencerons à appliquer un champ fort, l'effet enduisant peut être négligé parce que les courbes converges [1].

### 3-4. Influence de la température

Nous avons suivi la variation de la vitesse selon le champ pour la température différente (Figure.7.), il est noté que pour 300 K la vitesse maximum est égale à  $5.10^7 \text{ cm/s}$  pour un champ de seuil de 3.87kV/cm, tandis que pour 200 K la coquille du champ de seuil lui-même à 4.08 kV/cm et la vitesse elle-même diminue à  $3.18.10^7 \text{ cm/s}$ , comme pour 77 K que le champ de seuil augmente à 5 kV/cm qui correspondent à une vitesse maximum de  $2.13.10^7 \text{ cm/s}$ .

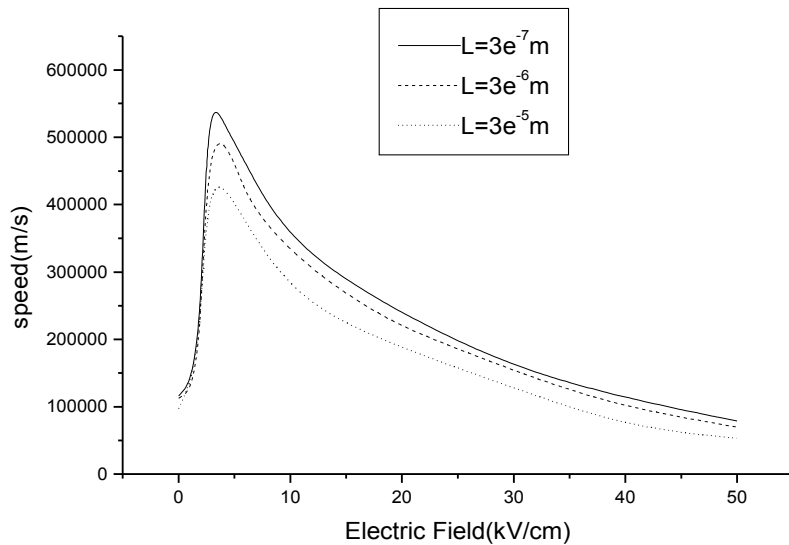


**Figure 7 :** profil selon le champ E dans InAs pour différentes températures.

Nous pouvons conclure que la vitesse influence la température dans le bas domaine. [17] Finalement l'effet de la température est alterné pour les champs élevés. On note que les courbes convergent asymptotiquement à partir du temps où on atteint les champs élevés.

### 3-5. Influence de la longueur

Nous avons également étudié le comportement de la vitesse pour différentes longueurs du matériel. (Figure 8) Les résultats prouvent qu'au bas champ la longueur du matériel pratiquement n'a pas un effet sur la vitesse. Une fois que nous obtenons un niveau de champ au-dessus du champ de seuil, la vitesse diminue à mesure que la longueur du matériel augmente. C'est dû au fait que, quand la longueur est augmentée, le nombre de porteurs augmente, par conséquent le nombre d'interactions augmente et donc la vitesse diminue.



**Figure 8 :** *profil de  $v$  suivant le champ  $E$  dans InAs pour différentes longueurs du matériel*

Enfin quand nous sommes dans des conditions extrêmement élevées le porteur a une vitesse pas très alternatif vers le changement de la longueur du matériel, parce que même dans cet état nous avons une convergence asymptotique des courbes.

#### 4. Conclusion

Nous avons présenté des résultats obtenus par la méthode de Monte Carlo liée au semi-conducteur InAs, à l'énergie, à l'effet enduisant, à la température et à la longueur du matériel. L'influence de ces trois derniers facteurs est prédominante dans le cas de la basse application de champ. Ces résultats sont en accord avec les résultats expérimentaux édités, aussi bien que les résultats numériques édités. La simulation par la méthode de Monte Carlo constitue une étape essentielle vers la connaissance des propriétés de matériaux. Sa flexibilité donne en fait un outil adaptable à une grande diversité des applications.

## Références

- [1] - A. Kasynski, "*study of the phenomena of transport in semiconductor materials by the Monte Carlo method*", thesis of Doctor Engineer- University of technical sciences of Lille (France), July 1979.
- [2] - H. Kosina, M. Nedjlkov, and S. Selberherr, "*A monte carlo method for small signal analysis of the Boltzmann equation*", Journal of Applied Physics, Volume 87, Number 9, May 2000.
- [3] - M. V. Fischetti, "*Monte Carlo simulations in technologically significant semiconductors of the diamond and zinc-blende structures-part I: Homogeneous transport*", IEEE Trans. Electron Devices, 38 (1991) 634-648
- [4] - W. T. Anderson, "*Simulation of Semiconductor Device Failure Mechanisms*", Naval research Laboratory, Washington. D.C,2. Fraunhofer Institute, Freiburg, Germany.
- [5] - Ch. Köpf, H. Kosina and S. Selberherr, "*Physical models for strained and relaxed GaInAs alloys: band structure and low-field transport*", Solid St. Electron. 41 (1997) 1139-1152
- [6] - K. Kalna, S. Roy, A. Asenov, K. Elgaid and I. Thayne, "*RF analysis of aggressively scaled pHEMTs*", Device Modelling Group, Department of Electronics & Electrical Engineering, University of Glasgow, Glasgow G12 8LT, Scotland, United Kingdom
- [7] - D. Matz, "*Effects of nonparabolicity on non-ohmic transport in InSb and InAs*", Phys. Rev. 168 (1968) 843-844
- [8] - J-L. Thobel, F Dessenne, R Fauquembergue, L Baudry and P Bourel, "*Theoretical study of electron transport in  $In_xGa_{1-x}As$  quantum well*", KE Singer, red, Gallium Arsenide and related Compounds 1990. Proceeding of the seven-teenth international symposium on Gallium Arsenide and related compounds held in Jersey, Channel Islands, 24-27 September 1990, tm 112 conference series, pp. 351-356, Institute of Physics, Bristol Philadelphia New York (1991).
- [9] - Jörg. Brühach, "*Ultrathin InAs/GaAs quantum wells : Electronic structure excitonic effect and carrier capture*", P.H.D; Janvier 2001- University Eindhoven — ISBN 90-386-1679-1.
- [10] - M. Fadel, "*Contribution à l'étude du bruit et du transport en régime d'électrons chauds dans l'InP*", Thèse 3ème cycle Electronique, Université des Sciences et Techniques du Languedoc, Académie de Montpellier, Juillet 1983.
- [11] - C. Jacoboni, P. Lugli, "*The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation*", Springer Verlag, Vienna, (1989)
- [12] - C. Moglestue, "*Monte Carlo Simulation of Semiconductor Devices*", Chapman & Hall, London, (1993)

- [13] - M. Nedjalkov, H. Kosina, "*Variance of the ensemble monte carlo algorithm for semiconductor transport modeling*", *Mathematics and Computers in Simulation* 55 (2001) 191-198, Ed. Elsevier
- [14] - J-L. Thobel, A. Sleiman, P Bourel, F Dessenne, et L Baudry ; "*Monte Carlo study of electron transport in III-V heterostructures with doped quantum wells*", *Journal of Applied Physics*, 80(2) (1996) 928-935
- [15] - F. Kuchar, G. Bauer, and H. HiUbrand, *Phys. Status Solidi (A)* 17(2) (1973) 491-496
- [16] - A. Krotkus, and Z. Dobrovolskis, "*Electrical Conductivity of Narrow-Gap Semiconductors*", Vilnius, Mokslas (1988).
- [17] - A. K. Ghorai and D. P. Bhattacharya, "*Mobility characteristics of not equilibrium carriers in III - V compounds At low lattice temperature*", department of physics, jadavpur university, Calcutta.