

A decorative border resembling a scroll, with a vertical strip on the left and a horizontal strip at the top, both featuring rounded ends and a light gray shaded area.

# **CHAPITRE III:**

## **MODELISATION ET OPTIMISATION DES COEFFICIENTS DE TRANSPORT PAR LES AGs**

### III.1 Introduction

La connaissance des coefficients de transport (mobilité, constante de diffusion,...) d'un matériau semi-conducteur est importante pour l'étude des composants électroniques dans le domaine de la conception et la réalisation des dispositifs microélectroniques. Donc, l'objectif principal de ce chapitre est le développement et l'optimisation d'un modèle analytique de la mobilité qui permet d'étudier l'aspect de transport des électrons dans les matériaux semi-conducteurs en fonction de champ électrique appliqué (faible ou intense,  $\vec{E}$ ), la température ( $T$ ) et le dopage ( $N$ ) en utilisant la méthode d'optimisation par les algorithmes génétiques (AGs).

Dans ce chapitre, nous allons étudier l'efficacité et le rendement de calcul des techniques évolutionnaires (AGs) pour améliorer la gamme de validité (champ, température, dopage) du phénomène de transport des électrons dans les semi-conducteurs et la précision de calcul, afin de développer et améliorer les simulateurs de dispositifs électroniques. Donc, l'utilisation de la technique d'optimisation (AG) est pour le but de rechercher les paramètres optimaux de la mobilité des électrons où la fonction fitness est minimale avec un temps de calcul moins élevé.

### III.2 Modélisation et optimisation de la mobilité des électrons par AG

#### III.2.1 Silicium (Si)

Le Silicium est le matériau le plus utilisé pour la fabrication des composants électroniques. Le Silicium se trouve sous forme de  $\text{SiO}_2$  dans le sable, c'est l'élément le plus abondant sur la terre après l'oxygène. Grâce à sa résistance aux hautes températures (sa température de fusion est de 1415 °C), sa disposition en grande quantité et son affinité chimique est forte à haute température, le Silicium a été privilégié par rapport au Germanium, dès le début des années 50 par l'industrie électronique.

##### III.2.1.1 Cas des champs faibles

###### III.2.1.1.1 Modèle analytique

Le transport des électrons sous l'influence d'un champ électrique  $\vec{E}$  est décrit par :

$$\vec{v} = \mu \cdot \vec{E} \quad (\text{III.1})$$

où  $v$  est la vitesse de dérive d'un électron et  $\mu$  est la mobilité des électrons. Pour des champs faibles la vitesse de l'électron augmente presque linéairement avec le champ appliqué, dans ce cas la mobilité a une valeur constante  $\mu_0$  (la mobilité des champs faible). La mobilité des faibles champs, dépend de dopage et de la température. Une expression largement utilisée pour étudier la dépendance de la mobilité des faibles champs avec le dopage  $N$  a été proposée par Caughey et Thomas [21].

$$\mu_0 = \mu_{min} + \frac{\mu_{max} + \mu_{min}}{1 + \left(\frac{N}{N_{ref}}\right)^\alpha} \quad (\text{III .2})$$

Où  $\mu_{max}$  représente la mobilité d'un échantillon non-dopé,  $\mu_{min}$  est la mobilité d'un matériau fortement dopé,  $\alpha$  est le paramètre qui décrit la façon dont la mobilité bascule de  $\mu_{max}$  vers  $\mu_{min}$  et  $N_{ref}$  représente la concentration des porteurs où la mobilité est au milieu entre  $\mu_{max}$  et  $\mu_{min}$  [22].

En tenant compte de l'effet de la température sur la mobilité des électrons, la variation de la mobilité des champs faibles avec la température peut être donnée par [23] :

$$\mu_0(N, T) = \mu_{max}(T_0) \frac{B(N) \times (T/c)^\beta}{1 + B(N) \times (T/T_0)^{\beta+\alpha}} \quad (\text{III .3.a})$$

$$\text{Où } B(N) = \frac{\mu_{min}(T_0) + \mu_{max}(T_0) \times (N_{ref}/N)^\delta}{\mu_{max}(T_0) - \mu_{min}(T_0)} \quad (\text{III .3.b})$$

où  $T_0 = 300^\circ K$  et  $\mu_{max}$ ,  $\mu_{min}$ ,  $N_{ref}$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$  sont des paramètres à optimiser.

Donc, d'après les équations (III.3.a) et (III.3.b) nous avons un modèle analytique qui décrit la loi de variation de la mobilité des électrons pour les faibles champs, avec six (6) paramètres à optimiser ( $\mu_{max}$ ,  $\mu_{min}$ ,  $N_{ref}$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$ ).

### III.2.1.1.2 Optimisation des paramètres du modèle par AG

#### Processus d'optimisation

Le processus d'optimisation, a été basé sur une population de 100 individus, et un nombre maximum de générations égal à 1000, d'où la stabilité de la fonction de fitness a été obtenue après 1000000 itérations. Les paramètres de l'AG, ont été variés et l'erreur a été enregistrée.

Le tableau ci-dessous représente les valeurs des paramètres utilisés dans l'algorithme d'optimisation par AG.

Paramètres de AG	Valeurs
Taille de la population	100
Nombre de paramètres	6
Nombre maximum de générations	1000
Fonction fitness	$f = \frac{1}{S} \sum_{k=1}^S \frac{(\mu_{exp,k}(N, T) - \mu_{GA,k}(N, T))}{(\mu_{exp,k}(N, T))}$

Tableau III.1: Paramètres utilisés dans l'algorithme de AG

La fonction fitness utilisée pour l'évaluation des chromosomes (pour la technique AG) et défini par :

$$f = \frac{1}{S} \sum_{k=1}^S \frac{(\mu_{exp,k}(N, T) - \mu_{GA,k}(N, T))}{(\mu_{exp,k}(N, T))} \quad (III.4)$$

$S$  représente la taille de la base de données de la consigne (Résultats expérimentaux). L'organigramme de notre approche est détaillé dans la figure III.1.

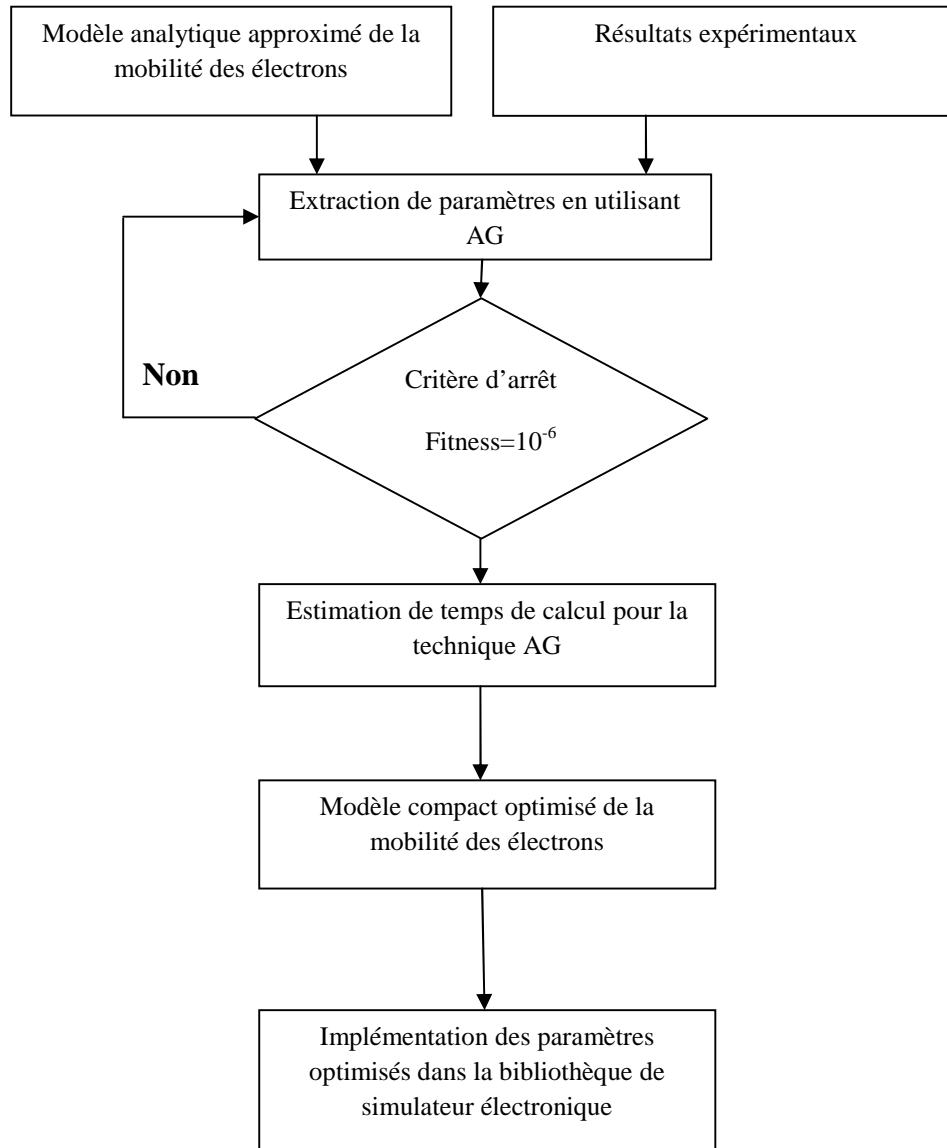


Figure III.1 : Organigramme du processus d'optimisation

### III.2.1.1.3 Résultats d'optimisation

Pour minimiser la fonction fitness (l'expression III.4), des règles de la boîte d'outil de AG sont utilisées. Dans le cas de la technique AG, une population initiale de 100 candidats aléatoires est produite et évoluée pour 1000 générations. Plus précisément, 50 paires de parents sont

choisies par la sélection uniforme à chaque itération. Chacun de ces 50 couples produit deux enfants à l'aide de deux croisements. Ces 100 enfants font appliquer uniformément et les enfants sont alors marqués pour la fonction fitness. Le tableau III.2 montre les paramètres de AG utilisés dans cette étude.

Paramètres
Taille de la population: 100
Nombre maximum de générations: 1000
Type de sélection: uniforme
Type de croisement: dispersé
Type de mutation: uniforme
Valeur obtenue de fitness pour les champs faibles: $7.7 \times 10^{-4}$

Tableau III.2 : Résultats et Paramètres utilisés pour l'optimisation par AG

Pour les configurations obtenues de l'AG, nos résultats après le processus d'optimisation sont récapitulés dans le tableau III.2.

Le tableau III.3 résume les paramètres obtenus de notre modèle analytique de la mobilité des électrons pour notre approche de calculs (AG), où la valeur de la fonction fitness obtenue égale à 0.00077 et presque tous les cas ont été étudiés correctement.

Technique	Paramètres					
	$\mu_{max}$	$\mu_{min}$	$N_{ref}$	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$
AG	1216	44.12	$7.89 \times 10^{16}$	2.12	0.32	0.58

Tableau III.3 : Paramètres optimisés de la mobilité des électrons obtenus par l'algorithme génétique

Afin de valider la propriété prédictive des configurations optimisées de AG, l'ensemble numérique a été comparé aux modèles de mobilités optimisés par les AGs. La figure (III. 3) montre un bon accord entre les résultats numériques et ceux prévus par la technique évolutionnaire. Par conséquent, le modèle analytique optimisé peut être utilisé pour prédire d'autres combinaisons des variables d'entrées (dopage et température pour le champ électrique faible) pour des larges gammes de la température et de dopage pour des faibles champs ( $60^\circ K \leq T \leq 700^\circ K$  et  $10^{14} \text{ cm}^{-3} \leq N \leq 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ). Cette dernière observation montre l'applicabilité des techniques évolutionnaires à l'étude du phénomène de transport dans les dispositifs à base de Si.

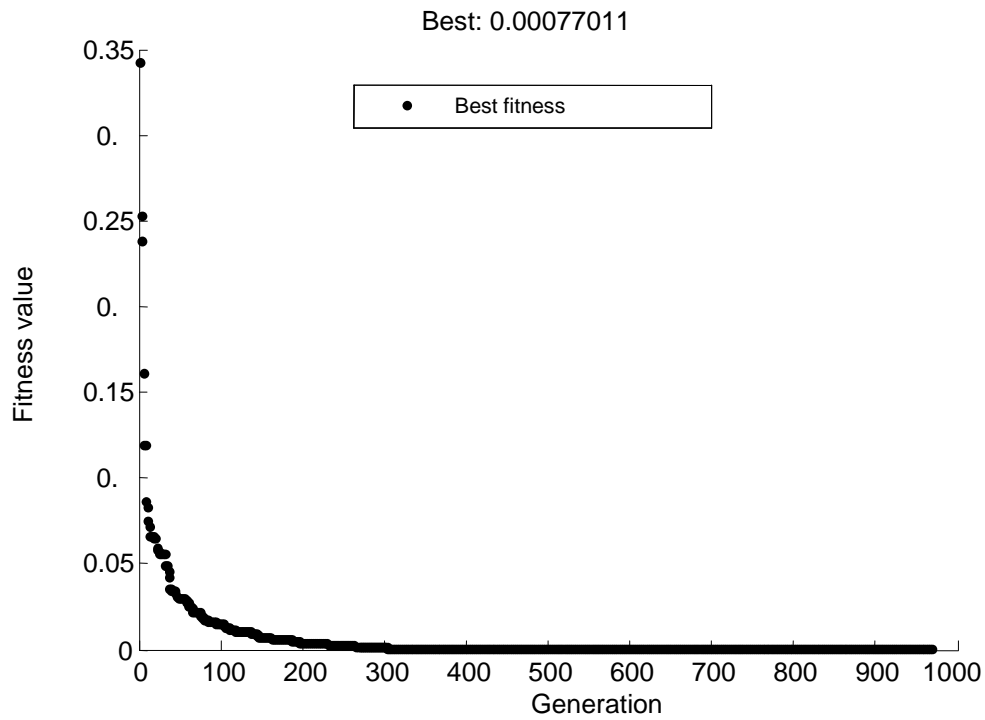


Figure III.2 : Evolution de la fonction fitness

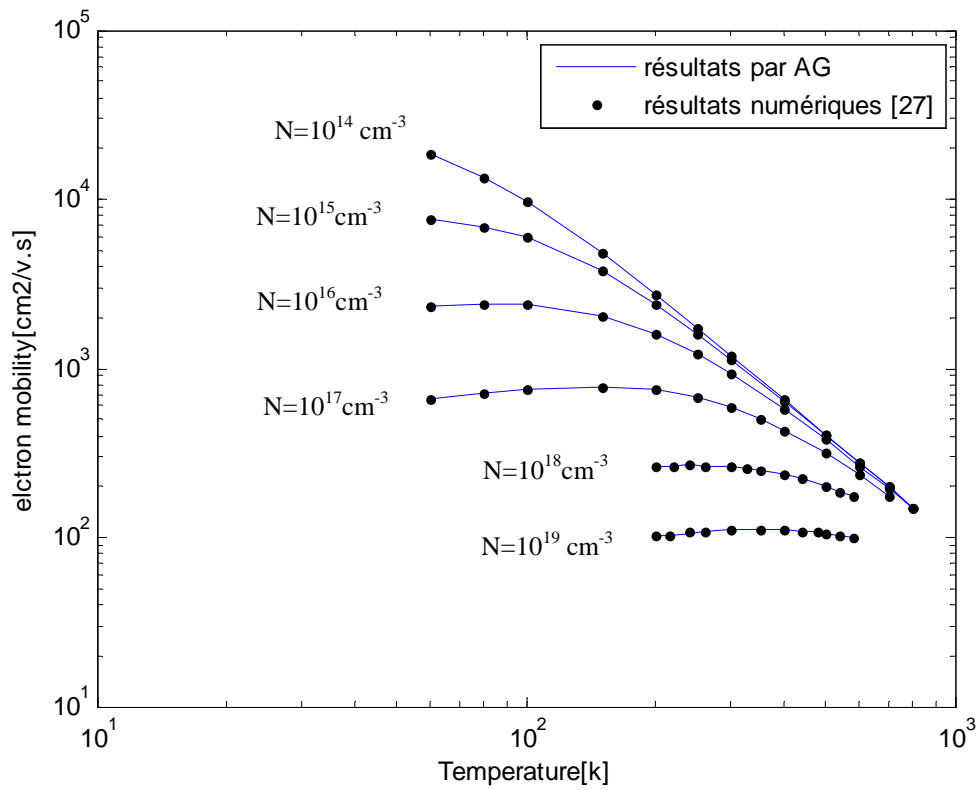


Figure III.3 : Variation de la mobilité avec la température sous l'effet des champs faibles dans le Si et de la concentration de dopage

### III.2.1.2 Cas des champs intense

Comme nous avons déjà discuté dans le premier chapitre, sous l'influence d'un champ électrique intense, la vitesse des électrons ne varie pas linéairement avec le champ électrique. La relation entre la vitesse et le champ doit être décrite par la dépendance de la mobilité avec le champ électrique. La variation de la mobilité avec le champ électrique  $\mu(E)$  peut être convertie à la variation de la vitesse des électrons avec le champ  $v(E)$  par:

$$\vec{v} = \mu \cdot \vec{E} \quad (\text{III.5})$$

#### III.2.1.2.1 Modèle analytique

Pour le Silicium (Si) et autres matériaux, qui montrent un comportement de saturation lent, la variation de la vitesse des électrons avec le champ électrique appliqué peut être donnée par l'expression suivante [22]:

$$v = \frac{\mu_0 E}{\left(1 + \left(\frac{\mu_0 E}{v_{sat}}\right)^\beta\right)^{\frac{1}{\beta}}} \quad (\text{III.6})$$

où  $\beta$  et  $v_{sat}$  sont des paramètres à optimiser.

D'autre part  $v_{sat}$  est la vitesse de saturation,  $\beta$  représente comment la vitesse tend vers la saturation, et  $\mu_0$  est la mobilité pour un des champs faible [23].

Jusqu'à maintenant la mobilité sous l'action d'un faible champ  $\mu_0$  est le seul paramètre de l'équation (III.5) qui représente une dépendance avec la température. Ceci n'est pas suffisant pour étudier la variation de la caractéristique vitesse-champ en fonction de la température.

En se basant sur les résultats de [22], La variation des paramètres à optimiser ( $v_{sat}$ ,  $\beta$ ) avec la température peut être introduite par:

$$Par(T) = Par_0 \times (a + bT + cT^2) \quad (\text{III.7})$$

où  $Par$  : est le paramètre à optimiser ( $v_{sat}$  ou  $\beta$ )

$Par_0$  : la valeur de  $Par$  à  $T=300$  K

$a$ ,  $b$ , et  $c$  sont des constantes qui doivent être aussi optimisées.

Donc les expressions  $v_{sat}(T)$ ,  $\beta(T)$  s'écrivent :

$$v_{sat}(T) = v_{sat} \times (a_{v_{sat}} + b_{v_{sat}}T + c_{v_{sat}}T^2) \quad (\text{III.8})$$

$$\beta(T) = \beta_0 \times (a_\beta + b_\beta T + c_\beta T^2) \quad (\text{III.9})$$

En substituant les équations (III.8) et (III.9) dans (III.6), on a donc un modèle analytique pour la mobilité sous l'action d'un champ électrique intense appliqué avec huit 8 paramètres à optimiser ( $v_{sat}$ ,  $\beta_0$ ,  $a_{v_{sat}}$ ,  $b_{v_{sat}}$ ,  $c_{v_{sat}}$ ,  $a_\beta$ ,  $b_\beta$ ,  $c_\beta$ )

### III.2.1.2.2 Optimisation des paramètres du modèle par AG

#### Processus d'optimisation

Les bases de données expérimentales de la mobilité de Silicium (Si) dans le cas des champs intenses, sont très limitées. Par conséquent on avait besoin d'exploiter les résultats numériques publiés dans [24] combinés avec des résultats expérimentaux, pour former notre base de données.

Le principe de processus d'optimisation reste le même, sauf que le nombre des paramètres à optimiser égal à 8. L'objectif est toujours le même, minimiser la fonction fitness, qui est l'erreur quadratique, son expression est déjà donnée par l'équation (III.5). Dans notre cas actuelle, le vecteur de paramètres est donnée par :

$$\vec{c} = (v_{sat}, \beta_0, a_{v_{sat}}, b_{v_{sat}}, c_{v_{sat}}, a_\beta, b_\beta, c_\beta)$$

Le tableau (III.3) représente les valeurs des paramètres utilisées dans l'algorithme d'optimisation AG.

Paramètres de AG	Valeurs
Taille de la population	100
Nombre de composants	8
Nombre maximum de générations	1000
Fonction fitness	$f = \frac{1}{S} \sum_{k=1}^S \frac{(\mu_{exp,k}(E, T) - \mu_{GA,k}(E, T))}{(\mu_{exp,k}(E, T))}$

Tableau III.5 : Paramètres utilisés dans l'algorithme de AG

Pour notre configuration de l'AG, nous avons obtenu une valeur de la fonction fitness égale à 0.0011. Le tableau ci-dessous résume les valeurs des paramètres optimisés.

$$\vec{c} = (v_{sat}, \beta_0, a_{v_{sat}}, b_{v_{sat}}, c_{v_{sat}}, a_\beta, b_\beta, c_\beta)$$



Paramètres	Valeurs
$v_{sat}$	$9.91 \times 10^6$ cm/s
$\beta_0$	1.71
$a_{v_{sat}}$	$9.07 \times 10^{-1}$
$b_{v_{sat}}$	$3.60 \times 10^{-4}$
$c_{v_{sat}}$	$-1.16 \times 10^{-6}$
$a_\beta$	1.48
$b_\beta$	$-4.07 \times 10^{-4}$
$c_\beta$	$1.84 \times 10^{-6}$

Tableau III.6 : Valeurs des paramètres optimisés

### III.2.1.2.3 Résultats et discussion

Le processus d'optimisation, a été basé sur une population de 100 individus, et un nombre maximum de génération égal à 1000, d'où la stabilité de la fonction fitness a été obtenue. La figure III.4 représente l'évolution de la fonction fitness au cours des générations, on remarque que la fonction fitness se converge vers un minimum global égal à 0.0011.

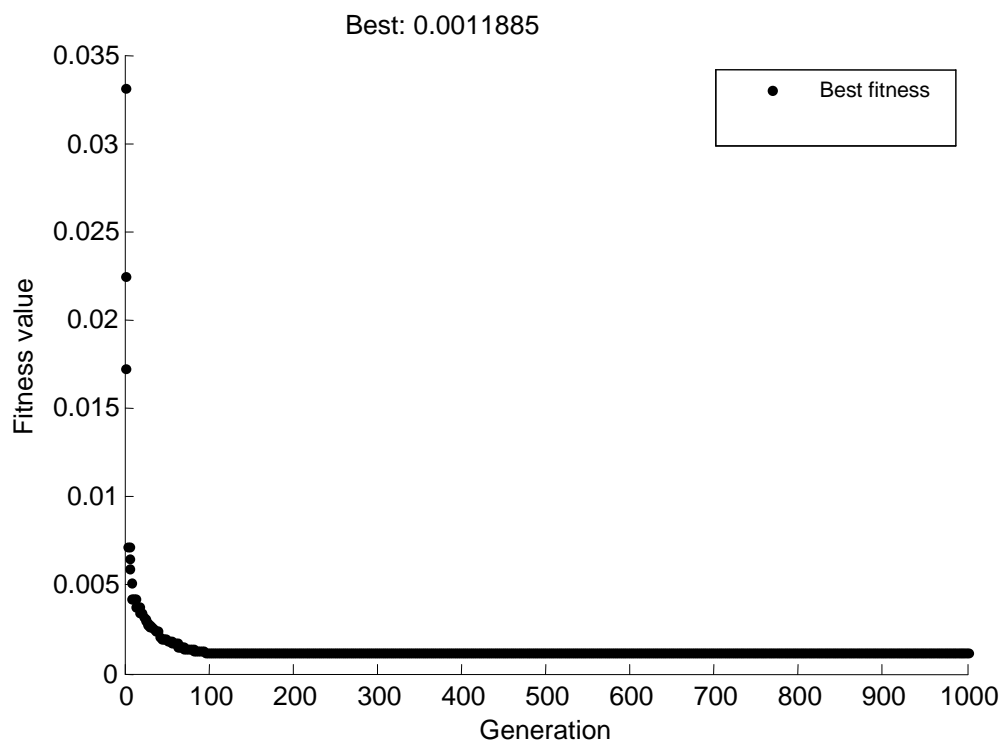


Figure III.4 : Evolution de la fitness

La figure (III.5) représente notre modèle de la mobilité en fonction du champ électrique appliqué, pour différentes valeurs de températures. Donc, le modèle que nous avons obtenu nous permet d'étudier la mobilité des électrons sous l'influence des champs intenses.

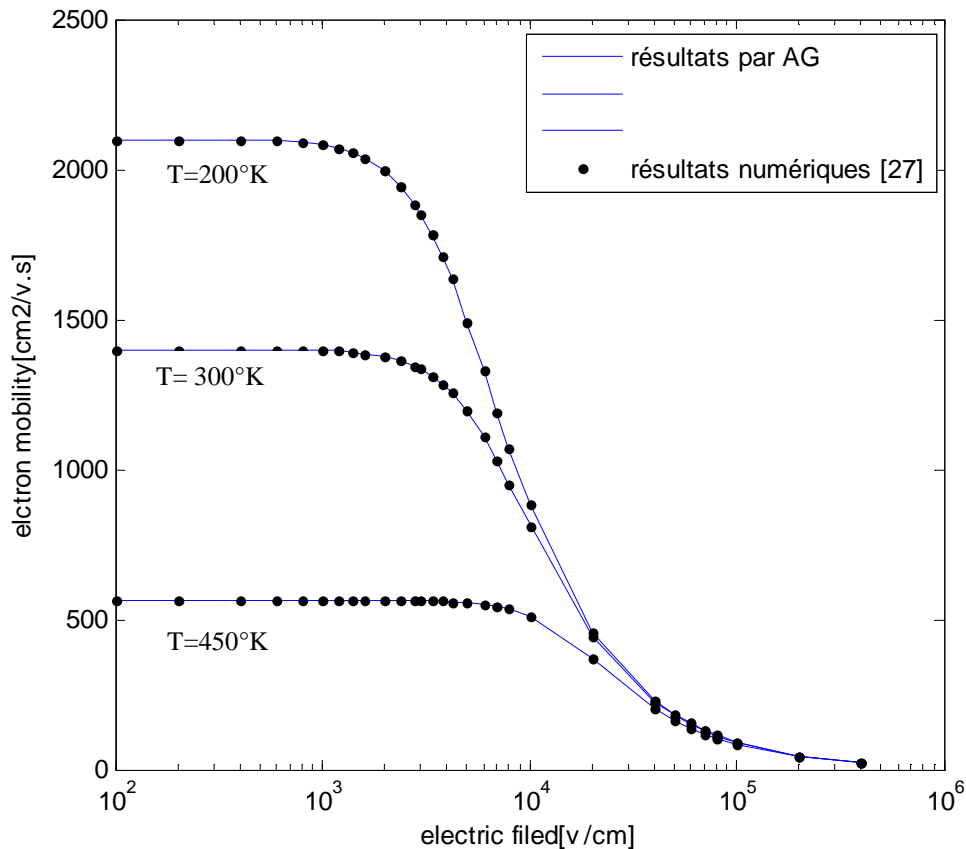


Figure III.5 : Variation de la mobilité avec le champ électrique pour différentes températures pour le Si

### III.2.2 Nitride de gallium (GaN)

Ces dernières années le Nitride du Gallium (GaN) a attiré beaucoup d'attention. Les propriétés de GaN font de lui une matière prometteuse pour une variété de différents dispositifs électroniques et optoélectroniques. Le GaN présente une large bande interdite de 3.4 eV, et un champ de claquage très élevé. En outre, il montre une vitesse de saturation très élevée combinée avec une mobilité assez haute. Le GaN paraît dans deux phases: le wurtzite (hexagonal) ou le zincblende (cubique). Les deux phases de GaN ont été étudiées intensivement, actuellement le wurtzite GaN a une importance fondamentale pour les composants électroniques [25], [26].

Pour progresser le développement, le design, et l'optimisation des composants basés sur le GaN, il est nécessaire d'avoir des informations exactes et détaillées sur les structures du GaN,

où la connaissance de la mobilité des électrons dans ce matériau joue un rôle important pour étudier les composants électroniques à base de GaN.

### III.2.2.1 Cas des champs faibles

#### III.2.2.1.1 Modèle analytique

Pour le GaN, dans le domaine des champs faibles, l'expression du modèle de la mobilité est la même que celle-là proposée dans le cas de Silicium (Si) (voir les équations (III.3.a) et (III.3.b)), sauf que les paramètres ( $\mu_{max}$ ,  $\mu_{min}$ ,  $N_{ref}$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$ ) doivent être ré optimisés en se basant sur une base de données expérimentales de GaN.

#### III.2.2.1.2 Optimisation des paramètres de modèle par AG

##### Processus d'optimisation

Comme le modèle de la mobilité est le même que celui donné pour le Silicium, le processus d'optimisation reste inchangé, sauf au niveau de la base de données expérimentale, qui est bien sûr relative au GaN. Nous avons formé une base de données pour des gammes de températures et dopage larges :

( $60^\circ K \leq T \leq 600^\circ K$  et  $10^{16} \text{ cm}^{-3} \leq N \leq 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ).

##### Résultats d'optimisation

Le processus d'optimisation, a été basé sur une population de 100 individus, et un nombre maximum de génération égal à 1000. Le tableau ci-dessous indique les valeurs des paramètres optimisés.

Paramètres	Valeurs
$\mu_{max}$	1309 $\text{cm}^2/\text{Vs}$
$\mu_{min}$	99.99 $\text{cm}^2/\text{Vs}$
$N_{ref}$	$7.05 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$
$\alpha$	2.6
$\beta$	0.33
$\gamma$	0.91

Tableau III.5 : Valeurs des paramètres optimisés

#### III.2.2.1.3 Résultats et discussion

Nous avons obtenu une fonction fitness égale à 0.0015 figure (III.6), ce qui peut être interprété par le bon accord entre la mobilité expérimentale et la mobilité analytique résultante de notre modèle optimisé. La figure (III.7) montre une comparaison entre la mobilité expérimentale et celle produite par notre modèle analytique.

Comme c'était le cas pour le Silicium, l'avantage de ce modèle est qu'il décrit la variation de la mobilité avec la température et le dopage sous l'action d'un faible champ électrique appliqué pour des gammes de température et de dopage plus larges à celles obtenue par [17] ( $60^\circ K \leq T \leq 600^\circ K$ ) et ( $10^{16} \text{ cm}^{-3} \leq N \leq 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ).

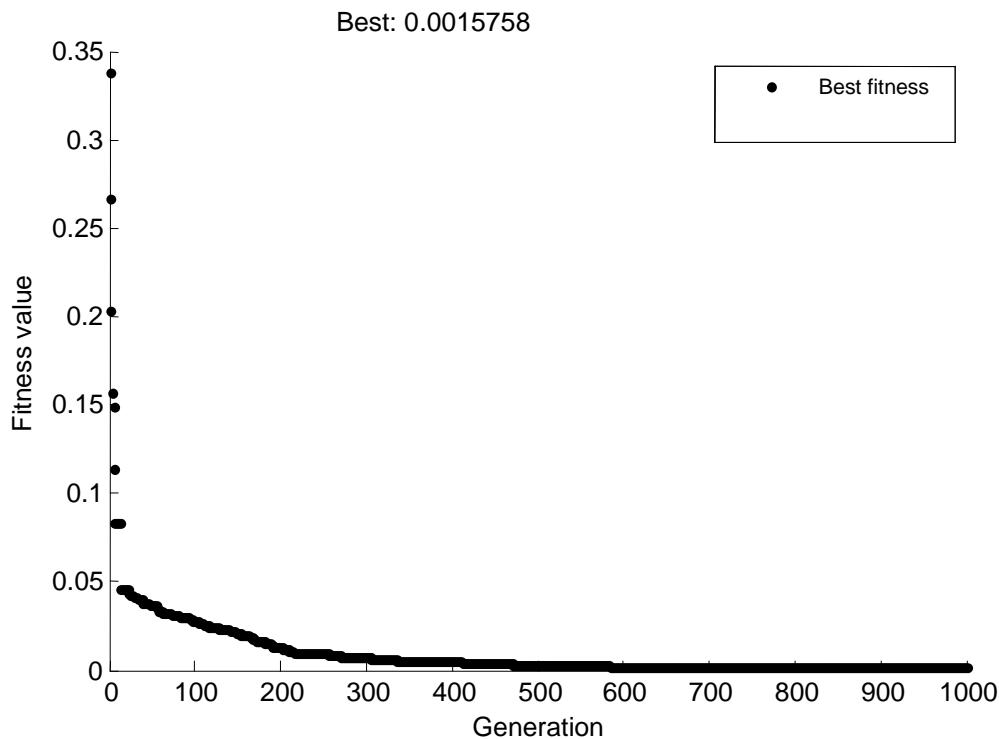


Figure III.6 : Evolution de la fitness

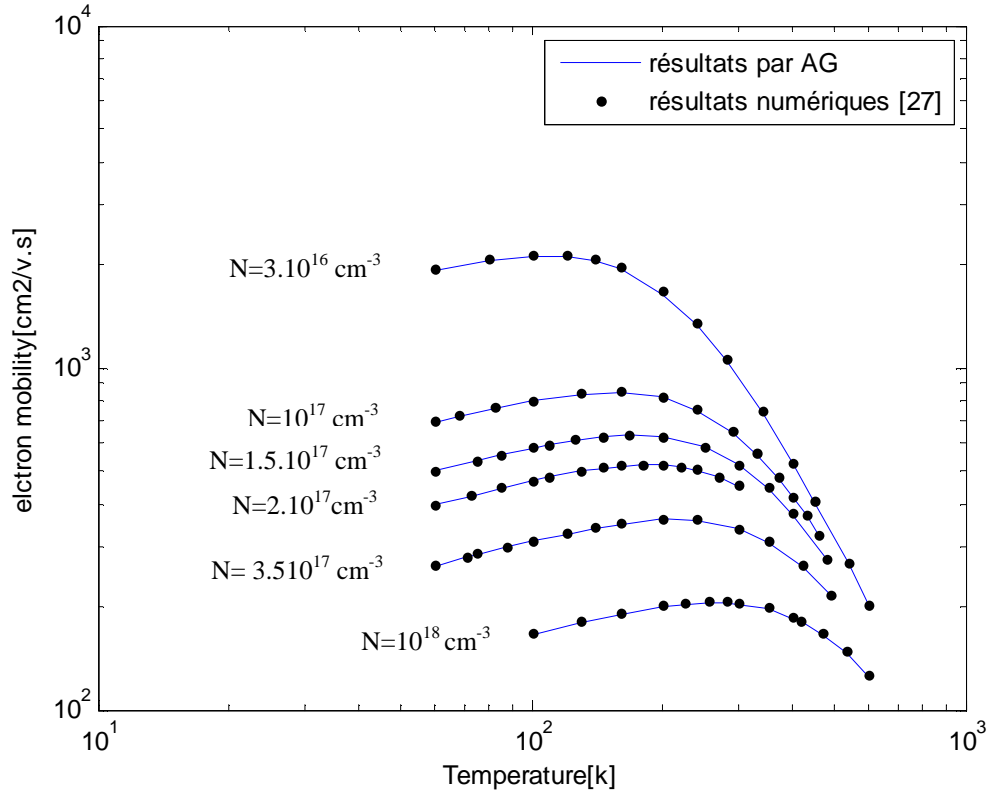


Figure III.7: Variation de la mobilité avec la température sous l'effet des champs faibles dans le GaN et de la concentration de dopage

### III.2.2.2 Cas des champs intenses

#### III.2.2.2.1 Modèle analytique

La modélisation de la mobilité des électrons sous l'effet d'un champ électrique intense est la partie la plus critique du développement des modèles analytiques [29]. La base de données expérimentale dans le domaine de champ électrique intense pour GaN est tout à fait limitée. Par conséquent, les résultats numériques (simulations de MC) [27] ont été utilisés pour développer notre modèle de la mobilité des électrons. Aucun modèle analytique préexistant de la mobilité ne fournit une description satisfaisante de la dépendance de la mobilité en fonction du champ électrique dans le GaN. Par conséquent, le développement d'un modèle analytique optimisé de la mobilité des électrons pour des champs intenses devient crucial. Dans ce contexte, une expression rapprochée convenue au modèle de telle caractéristique de Vitesse-Champ est donné [22] comme:

$$v(E) = \frac{\mu_0(T,N).E + v_{sat}(E/E_c)^{n_1}}{1 + (E/E_c)^{n_1} + n_2(E/E_c)^{n_3}} \quad (\text{III.10})$$

où  $\mu_0$  est la mobilité à faible champ qui dépend de la concentration de dopage et de la température comme exprimé en (III.2),  $v_{sat}$ ,  $E_c$ ,  $n_1$ ,  $n_2$  et  $n_3$  sont des paramètres à optimiser.

En se basant sur le travail publié dans [26], ces paramètres peuvent être donnés comme fonctions de la température,

$$Par(T) = Par_0 \times (a + bT + cT^2) \quad (III.11)$$

avec  $Par$  représente le paramètre adapté de l'expression (III.10),  $Par = (v_{sat}, E_c, n_1, n_2 \text{ et } n_3)$ , les coefficients  $a, b$  et  $c$  sont des constantes qui doivent être optimisées (en utilisant AG).

En substituant l'équation (III.11) dans (III.10), nous avons donc un modèle analytique de la mobilité des électrons sous l'effet d'un champ électrique intense appliqué avec 20 paramètres qui seront optimisés en utilisant les AGs.

### III.2.2.2 Optimisation des paramètres du modèle par AG

#### Processus d'optimisation

Le principe de processus d'optimisation est le même, sauf que le nombre des paramètres est vingt ( $m=20$ ). L'objectif reste le même, minimiser la fonction fitness, son expression est donnée en substituant les équations (III.10) et (III.11) dans l'équation (III.5). Dans ce cas, le vecteur de paramètres à optimiser est donnée par :

$$\vec{c} = (v_{sat}, \beta_{sat}, E_c, n_1, n_2 \text{ et } n_3)$$

Les bases de données expérimentales dans le domaine des champs intenses sont très limitées. La base de données que nous avons formée est une combinaison entre des résultats expérimentaux et numériques. Le tableau suivant montre notre configuration de l'AG.

Paramètres de l'AG	Valeurs
Taille de la population	100
Nombre de paramètres	20
Nombre maximum de générations	1000
Fonction fitness	$f = \frac{1}{S} \sum_{k=1}^S \frac{(\mu_{\text{exp\_num},k}(E, T) - \mu_{GA,k}(E, T))}{(\mu_{\text{exp\_num},k}(E, T))}$

Tableau III.3 : Paramètres utilisés dans l'algorithme de l'AG

#### Résultats d'optimisation

Pour une population de 100 individus avec un nombre de générations égale à 1000, nous avons obtenu une valeur de 0.0064 de la fonction fitness présentée dans la figure III.9. Le tableau suivant représente les valeurs des paramètres optimisées par AGs.

$par$	$v_{sat}$	$E_c$ (V/cm)	$n_1$	$n_2$	$n_3$
$a$	0.90	0.80	4.9	4.3	1.3
$b, K^{-1}$	$0.38 \times 10^{-3}$	$0.49 \times 10^{-3}$	$-0.35 \times 10^{-3}$	-0.01	$-0.15 \times 10^{-2}$
$c, K^{-2}$	$-0.12 \times 10^{-5}$	$-0.49 \times 10^{-6}$	$0.99 \times 10^{-7}$	$0.13 \times 10^{-4}$	$0.21 \times 10^{-5}$
$Par_0$	$0.12 \times 10^8$ cm/s	$0.15 \times 10^6$	0.7	2.6	0.79

Tableau III.4 : Valeurs des paramètres optimisés par AG

### III.2.2.2.3 Résultats et discussion

A l'aide de la technique d'optimisation AG, on a parvient à obtenir un modèle analytique optimisé de la mobilité sous l'influence des champs intenses. La figure (III.9) représente notre modèle de mobilité en fonction du champ électrique appliqué, pour différentes valeurs de températures où un très bon accord entre notre modèle optimisé et les résultats numériques expérimentaux a été obtenue.

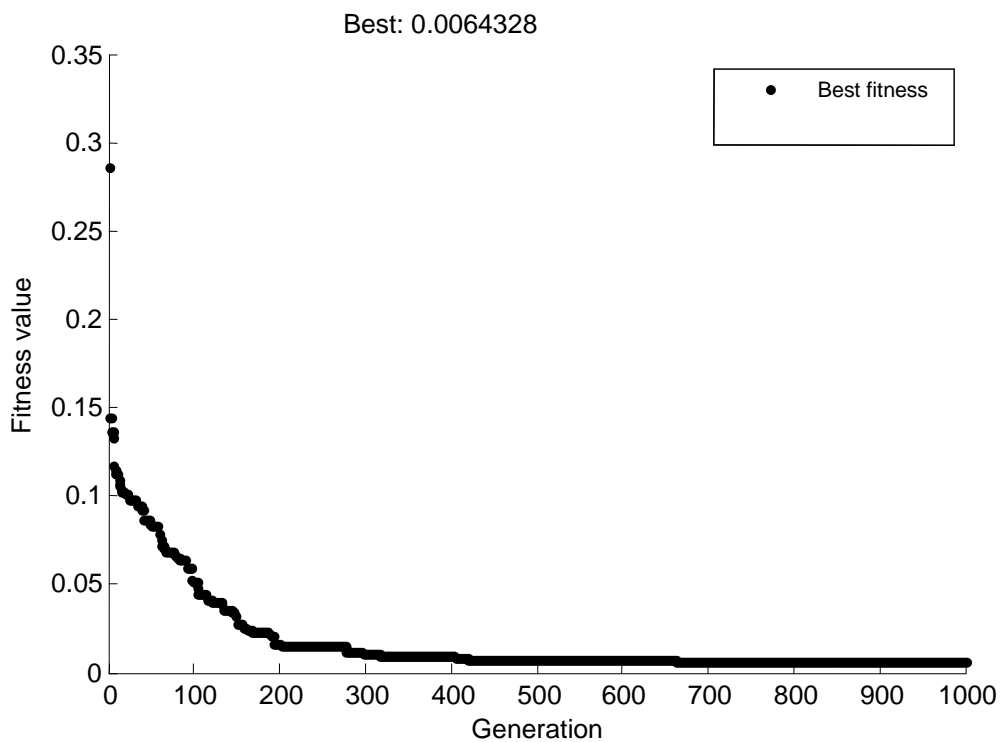


Figure III.8 : Evolution de fitness

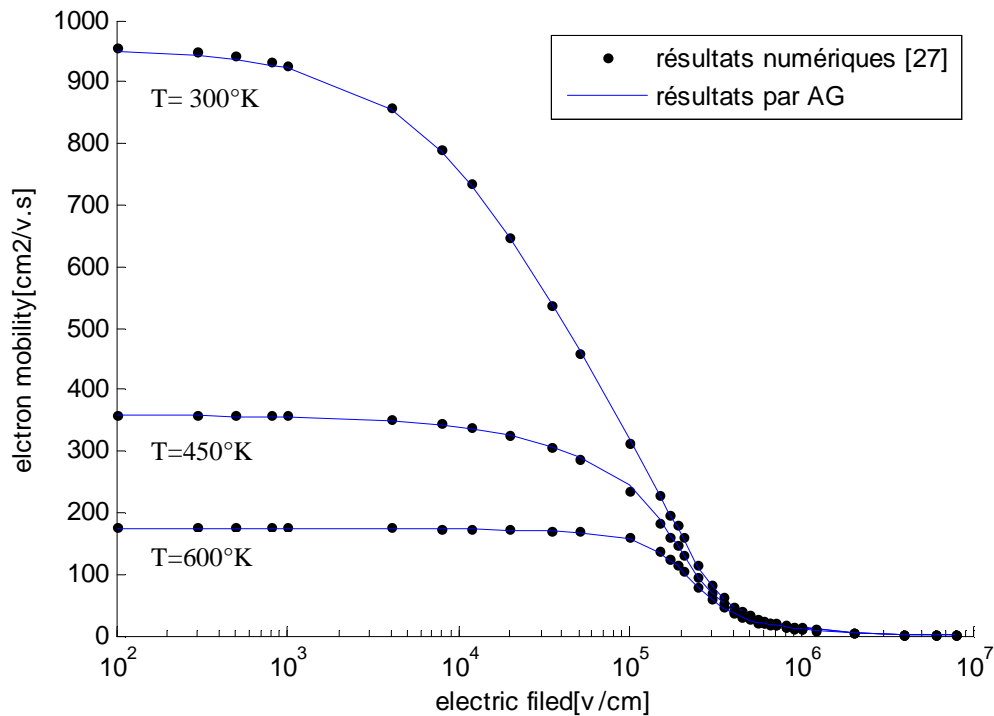


Figure III.9 : Variation de la mobilité avec le champ électrique pour différentes température dans le GaN

### III.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons appliqué la technique d'optimisation évolutionnaire AG pour étudier les phénomènes de transport des électrons dans les semi-conducteurs (Si et GaN). Un très bon accord entre les résultats expérimentaux et les résultats produits par nos modèles a été obtenu, ce qui montre la capacité de nos modèles à simuler et étudier le phénomène de transport dans les composants électroniques à base de Si ou GaN pour des larges gammes de températures et de dopage sous l'effet d'un champ électrique faible ou intense.

Les résultats indiquent que la technique évolutionnaire AG peut être utilisée dans l'optimisation des paramètres pour la modélisation de la mobilité des électrons dans le GaN et Si.