



**MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITÉ «ABBÈS LAGHROUR» - KHENCHELA
CULTURE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE**



Département des Sciences de la matière

N° de série :.....

Mémoire de fin d'études

Pour l'obtention du diplôme de Master (L.M.D)

Filière: Physique

Spécialité: Physique des matériaux

Calcul de la conductivité électrique dans les semi-conducteurs

Dirigé par : Mr. HEMAME Zoubir

*Réalisé par:
-Bourfia Samiha
-Boutouil Khadidja*

Devant le jury :

président : LEKMINE FARID

Examineurs : BOUROUCHA AZEDINE

Présenté le.....

Remerciements

Tout d'abord, nous remercions le Dieu, notre créateur de nos avoir donné les forces, la volonté et le courage afin d'accomplir ce travail modeste.

*Nous adressons le grand remerciement à notre encadreur : **Dr. HEMAME ZOUBIRE** qui a proposé le thème de ce mémoire, pour ses conseils et ses dirigés du début à la fin de ce travail.*

Nous tenons également à remercier les membres de jury pour l'honneur qu'ils nous ont fait en acceptant de siéger à notre soutenance, tout particulièrement :

***Mr .HEMAME ZOUBIR** pour nous avoir fait l'honneur de présider le jury de cette mémoire.*

*Nous souhaitons exprimer notre gratitude à Monsieur **LEKMINE FARIDE** et Monsieur **BOUROUCHA AZZEDDINE** pour avoir faire de lecteur notre mémoire, aller l'examiner et ils peuvent évaluer cette mémoire.*

Nous vous remercions pour l'intérêt que vous avez porté à ce travail et pour vos précieux conseils et remarques.

Enfin, nous tenons à exprimer notre profonde gratitude à nos familles qui nous ont toujours soutenues et à tout ce qui participe de réaliser ce mémoire .Ainsi que l'ensemble des enseignants qui ont contribué à notre formation.



Je dédie ce travail à

Mon père et à ma très chère mère pour leurs affections

et Leur amour que dieu les garde et les protège

A Mes sœurs et Mes frère A Mes amis

RHADIDA



Je dédie ce travail à

Mon père et à ma très chère mère pour leurs affections

et Leur amour que dieu les garde et les protège

A Mes sœurs et Mes frères A Mes amis

SAMPA

Liste des symboles

Symbole	Signification
E	Energie
E_F	Niveau de fermi
E_C	Energie de bas de la bande de condition
E_V	Energie de bas de la bande de valence
E_g	Gap ou largeur de la bande interdite
\vec{E}	Champ électrique
h	Constant de Planck ($6.62 \times 10^{-34} JS$)
\hbar	Constant de Planck réduite $\frac{h}{2\pi}$
K	Constant de Boltzmann ($1.38 \times 10^{-23} JK^{-1}$)
m	Masse de l'électron
m^*	Masse effective de l'électron
P	Impulsion
N_v	Densité d'états équivalente dans la B_V , ramenée E_V
N_c	Densité d'états équivalente dans la B_C , ramenée E_C
m_p^*	Masse effective des électrons
m_n^*	Masse effective des trous
n	Symbole associée des électrons
$f_n(E)$	Probabilité d'occupation d'un niveau d'énergie E par un électron
$f_p(E)$	Probabilité d'occupation d'un niveau d'énergie E par un trou
T	Température absolue
ρ	La densité de charge
σ	Conductivité = $1/\text{résistivité} \Omega^{-1} m^{-1}$

Listes Des Figures & Des Tableaux

Chapitre : I

Figures	Titre	N° de page
Figure I.1	Diagramme des bandes d'énergies des différents types d'éléments.	01
Figure I.2	Simulation d'une courbe E_g en fonction de la température pour différents matériaux.	03
Figure I.3	Simulation d'une courbe n_i au Silicium en fonction de l'inverse de la température ($A = 3.1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3} \text{ K}^{-3/2}$, $E_{g0} = 1.206 \text{ eV}$) [3].	05
Figure I.4	Simulation d'une courbe n des électrons et de trous du Silicium en fonction de la température ($T_{ref} = 300^\circ \text{K}$, $\alpha = 2.2$, $\mu_{no} = 1430 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, $\mu_{po} = 495 \text{ cm}^2/\text{Vs}$)	06
Figure I.5	Variation de la mobilité des électrons et de trous du silicium en fonction de la concentration en impuretés	06
Tableau I.1	paramètres de la variation de la bande interdite en fonction de la température	04

Chapitre : III

Figure	Titre	N° de page
Figure III.1	Composante isotrope de la fonction de distribution f_0 , en	37

FigureIII.2	fonction du carré de la vitesse adimensionnelle $x = v/\sqrt{2}v_t$. Composante isotrope de la fonction de distribution f_0 en fonction de la vitesse adimensionnelle $x = v/\sqrt{2}v_t$	38
FigureIII.3	Première anisotropie de la fonction de distribution f_1 en fonction de la vitesse adimensionnelle $x = v/\sqrt{2}v_t$	39
FigureIII.4	Conductivité électrique \dagger en fonction du champ électrique E	40
FigureIII.5	Conductivité électrique \dagger en fonction du champ électrique E pour les modèles cinétiques à deux et quatre équations	42
FigureIII.6	Conductivité électrique \dagger en fonction du champ électrique E pour les modèles cinétiques à deux équations (trait en pointillé), à quatre équations (trait plein) et à six équations (trait en tiret).	45
FigureIII.7	Même résultats que ceux de la figure III.6 représentés sur un intervalle de champ électrique plus réduit	45
FigureIII.8	Vitesse de dérive V_x en fonction du champ électrique E pour les modèles cinétiques à deux équations (trait en tiret) , à quatre équations (trait plein) et à six équations(trait en pointillé).	46
FigureIII.9	Conductivité électrique \dagger en fonction du champ électrique E pour deux densités d'électrons de conduction	49
FigureIII.10	Vitesse de dérive V_x en fonction du champ électrique E pour deux densités d'électrons de conduction	49

Table de matière :

Liste des symboles

Liste des figures & des tableaux

Table Des Matières

INTRODUCTION GENERALE 01

Chapitre I : théorie du transport dans les semi-conducteurs

- I-1 INTRODUCTION 03
- I-2 ISOLANTS, SEMI-CONDUCTEURS, CONDUCTEURS 03
- I-3 Généralités 04

II- PROPRIETES PHYSIQUES DES SEMI CONDUCTEURS 05

- II-1 ENERGIE DE BANDE INTERDITE (LE GAP) 05
- II-2 DENSITE DE PORTEURS INTRINSEQUES 06
- II-3 LA MOBILITE ET LA VITESSE DES PORTEURS 07
- II-4-Densité d'état 09

2. Propriétés de la fonction de distribution de Fermi-Dirac 10

3- Fonction de distribution statistique des porteurs de charge dans les semi-conducteurs 11

III. Equation de Boltzmann 13

- III .1 L'intégrale de collision de l'équation de Boltzmann 13
- III .1 .2 L'intégrale de collision 14
- III .1 .3 Diffusion par les impuretés 14
- III .1 .4- Diffusion par les vibrations de réseau 15
- III .1 .5 - L'équilibre détaillé 17
- III .1 .6 - Diffusion par les impuretés 17
- III .1 .7 - Diffusion par les vibrations de réseau 18
- III .1 .8 - Approximation du temps de relaxation 19

· III .1 .9 - Terme de force de l'équation de Boltzmann	20
---------------------------------------------------------	----

Chapitre II : modèle cinétique

Introduction	22
---------------------	-----------

1. a- Equation de Boltzmann	22
------------------------------------	-----------

2- Quelques relations mathématiques	23
--------------------------------------------	-----------

3- Les termes de collision	24
-----------------------------------	-----------

4-Projection l'équation cinétique	26
------------------------------------------	-----------

chapitre3 : RESULTATS NUMERIQUES ET INTERPRETATION

I. METHODES NUMERIQUES	31
-------------------------------	-----------

Méthode de résolution de l'équation de Boltzmann	31
--------------------------------------------------	----

II. RESULTATS NUMERIQUES	32
---------------------------------	-----------

1. Modèle à une composante	33
----------------------------	----

2. Modèle à deux composantes	35
------------------------------	----

3. Modèle à quatre composantes	40
--------------------------------	----

4. Modèle à six composantes	42
-----------------------------	----

5. Effet de la dégénérescence sur le transport de charge	46
----------------------------------------------------------	----

CONCLUSION GENERALE	50
----------------------------	-----------

Référence bibliographique

Résumé

INTRODUCTION GENERALE

INTRODUCTION GENERALE

Le développement rapide de la technologie VLSI (acronyme en Anglais de, Very Large Scale Intégration, signifiant, Intégration à très grande échelle) nécessite actuellement de développer des dispositifs semi-conducteurs de dimensions de plus en plus petites, typiquement inférieures au micromètre. Les théories classiques pour décrire les propriétés des semi-conducteurs, basées sur des modèles de type dérive-diffusion doivent alors être revisitées et jusqu'à ce jour plusieurs phénomènes physiques restent encore non interprétés. Pour modéliser les dispositifs submicroniques il faut revenir aux théories microscopiques qui sont basées sur l'équation de Schrödinger et l'équation de Wigner pour décrire des effets purement quantiques typiques des dispositifs nanométriques, et sur l'équation de Boltzmann semi-classique pour simuler les dispositifs semi-conducteurs de dimensions typiques entre le nanomètre et le micromètre. L'approche utilisée consiste à calculer dans une première étape à partir des théories microscopiques les grandeurs responsables du transport dans les semi-conducteurs que sont notamment la conductivité électrique, la vitesse de dérive des porteurs de charges, le flux de chaleur, etc. Ces grandeurs physiques sont ensuite utilisées dans des équations macroscopiques comme relations de fermeture. Ces équations macroscopiques sont les équations hydrodynamiques qui vont décrire des bilans d'énergie dans les semi-conducteurs soumis à différentes forces thermodynamiques (champ électrique, gradient de densité, gradient de température, etc.) et elles s'expriment par rapport à des variables macroscopiques mesurables expérimentalement. Dans le cadre de la théorie linéaire correspondant à un état proche de l'équilibre ou les perturbations du système sont relativement faibles les relations entre les forces thermodynamiques et les grandeurs de transport sont linéaires. En revanche pour les régimes non linéaires il est difficile de prévoir et de comprendre les propriétés de transport dans les semi-conducteurs. Le problème qui se pose alors est comment modéliser de façon précise le transport des charges dans ces conditions physiques. Plus précisément quel est le modèle d'équations qu'il faut développer pour décrire ces semi-conducteurs. C'est dans ce cadre que s'inscrit le travail présenté dans ce mémoire.

On a développé un modèle théorique basé sur l'équation de Boltzmann semi-classique en régime non linéaire en champ. Notre objectif consiste à résoudre l'équation de Boltzmann

Introduction générale

semi-classique pour décrire les propriétés de transport de charge dans les semi-conducteurs submicroniques à base de silicium soumis à des champs d'intensité arbitraire. Pour des intensités de champ électriques plus importantes que le kilovolt par centimètre, des effets non linéaires sont exhibés. Cette situation est typique des semi-conducteurs actuels soumis à des tensions de l'ordre de quelques volts et dont la longueur est inférieure au micromètre. L'approche utilisée consiste à estimer le nombre de composantes anisotropes de la fonction de distribution dans l'équation cinétique qui permet de décrire de façon suffisamment précise le transport de charge dans le silicium. On a mis en évidence le rôle des effets non linéaires sur la conductivité électrique. Pour la conductivité, ces effets ont tendance à la faire décroître de façon très significative.

On présente dans le premier chapitre de ce manuscrit le cadre théorique général utilisé, avec une partie consacrée aux rappels sur les semi-conducteurs et une autre partie consacrée au modèle théorique. Notamment un accent particulier a été mis sur l'équation de Boltzmann qui représente l'outil central utilisé dans ce travail. Dans un deuxième chapitre on présente le modèle cinétique. Il est basé sur le développement de l'équation de Boltzmann semi-classique sur la base des polynômes de Legendre. L'opérateur de diffusion électron-phonon optique a été modélisé par un terme de relaxation. Le troisième chapitre est consacré à notre contribution au calcul de la conductivité électrique (ou la mobilité électrique). On a résolu numériquement l'équation de Boltzmann en gardant six composantes de la fonction de distribution, une isotrope et cinq anisotropes pour décrire correctement les effets non linéaires en champ électrique. Les effets de la dégénérescence sur le transport de charge ont été évalués et un ajustement numérique de forme relativement simple de la conductivité électrique du silicium fortement dégénéré, a été proposé pour des champs électriques d'intensité faible. Le rôle des interactions électron-phonon optique a été estimé et des comparaisons qualitatives avec deux résultats de la littérature sont également rapportés. Enfin on a résumé les principaux résultats obtenus dans ce manuscrit dans une conclusion générale et on a aussi proposé quelques perspectives susceptibles d'être étudiées dans un travail futur.

CHAPITRE I :
THEORIE DU
TRANSPORT DANS LES
SEMI-CONDUCTEURS

Chapitre 1 théorie du transport dans les semi-conducteurs

I-1 INTRODUCTION

Ce chapitre est consacré à la présentation de la théorie du transport dans les semi-conducteurs. On va dans une première étape présenter les propriétés des semi-conducteurs en mettant en évidence notamment les différences physiques entre ces cristaux et les isolants et les conducteurs. Dans une deuxième étape on présente l'équation de Boltzmann semi-classique qui constitue l'équation centrale de la théorie du transport dans les semi-conducteurs.

I-2 ISOLANTS, SEMI-CONDUCTEURS, CONDUCTEURS

On distingue isolants, semi-conducteurs et conducteurs à partir de leur structure de bande d'énergie (figure I.1) [2]. E_c est la limite basse en énergie de la bande de conduction. E_v est la limite haute en énergie de la bande de valence. L'énergie s'exprime en électron-volt (eV). A la température 0°K , tous les électrons se trouvent dans la bande de valence pour les isolants et les semi-conducteurs. Lorsque la température s'élève, l'énergie apportée aux électrons n'est pas suffisante pour les faire passer de la bande de valence à la bande de conduction pour un isolant ($E_g = 6 \text{ eV}$) tandis que pour un semi-conducteur quelques électrons passeront de la bande de valence à la bande de conduction ($E_g = 1 \text{ à } 1,5 \text{ eV}$)

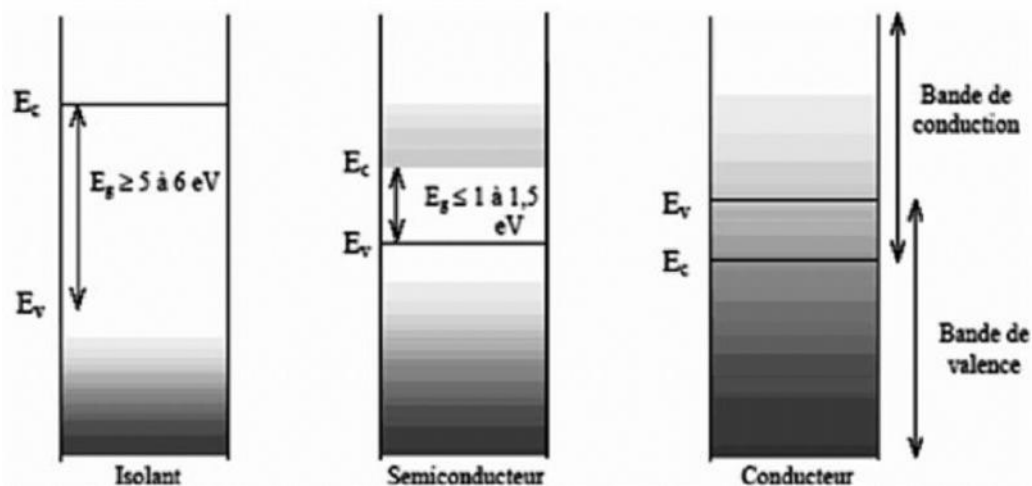


Figure (I-1) : Diagramme des bandes d'énergie des différents types d'éléments.

Chapitre 1 théorie du transport dans les semi-conducteurs

I-3 Généralités

Les principes fondamentaux de la physique des semi-conducteurs reposent sur la théorie des bandes des solides cristallins et sur la statistique de Fermi-Dirac. L'étude des propriétés électriques de ces matériaux semi-conducteurs a révélé l'existence de deux bandes d'énergies caractéristiques séparées par un "gap" ou bande interdite (Bi). Ces deux bandes sont définies respectivement pour la plus haute et la plus basse en énergie comme bande de valence (B_V) et bande de conduction (B_C) [2-3-4].

Du point de vue de leur conductivité électrique, les semi-conducteurs occupent une place intermédiaire entre les métaux et les isolants, Ces valeurs peuvent changer :

- Nature et quantité des impuretés,
- Température,
- Champ électrique ou excitation par des photons.

En général, les semi-conducteurs sont classés en deux groupes :

- Les semi-conducteurs intrinsèques,
- Les semi-conducteurs extrinsèques.

Les semi-conducteurs se présentent sous plusieurs compositions chimiques avec une grande variété de structures cristallines. On peut avoir les semi-conducteurs élémentaires tels que le Si, le Ge ou des composés binaires tels que le GaAs. Plusieurs composés organiques comme le polyacétyle ($(CH)_n$) sont des semi-conducteurs. Quelques semi-conducteurs présentent un comportement magnétique ($Cd_{1-x}Mn_xTe$) ou ferroélectrique (SbSI), d'autres deviennent supraconducteurs lorsqu'ils sont dopés avec des porteurs suffisants (GeTe et SrTiO₃). Certains supraconducteurs à haute température découverts récemment et qui ont des phases non métalliques sont aussi des semi-conducteurs. Par exemple, le La₂CuO₄ est un semi-conducteur mais il devient supraconducteur lorsqu'il est allié avec le Sr pour former le (La_{1-x}Sr_x)₂CuO₄.

II- PROPRIETES PHYSIQUES DES SEMI CONDUCTEURS

II-1 ENERGIE DE BANDE INTERDITE (LE GAP)

L'énergie de bande interdite (notée E_g , unité : eV) est la quantité d'énergie nécessaire à un électron pour passer de la bande de valence E_V à la bande de conduction E_C lorsque celui-ci est soumis à une excitation. En d'autre terme, le gap est l'énergie minimal nécessaire à la création d'une paire électron-trou. Cette énergie diminue très lentement avec Fragmentation de la température selon la fonction [2] :

Chapitre 1 théorie du transport dans les semi-conducteurs

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{(\alpha \cdot 10^{-4}) \cdot T^2}{T + b} \quad (I.1)$$

$E_g(T=0)$: est la valeur d'énergie de bande interdite à $T=0^\circ\text{K}$

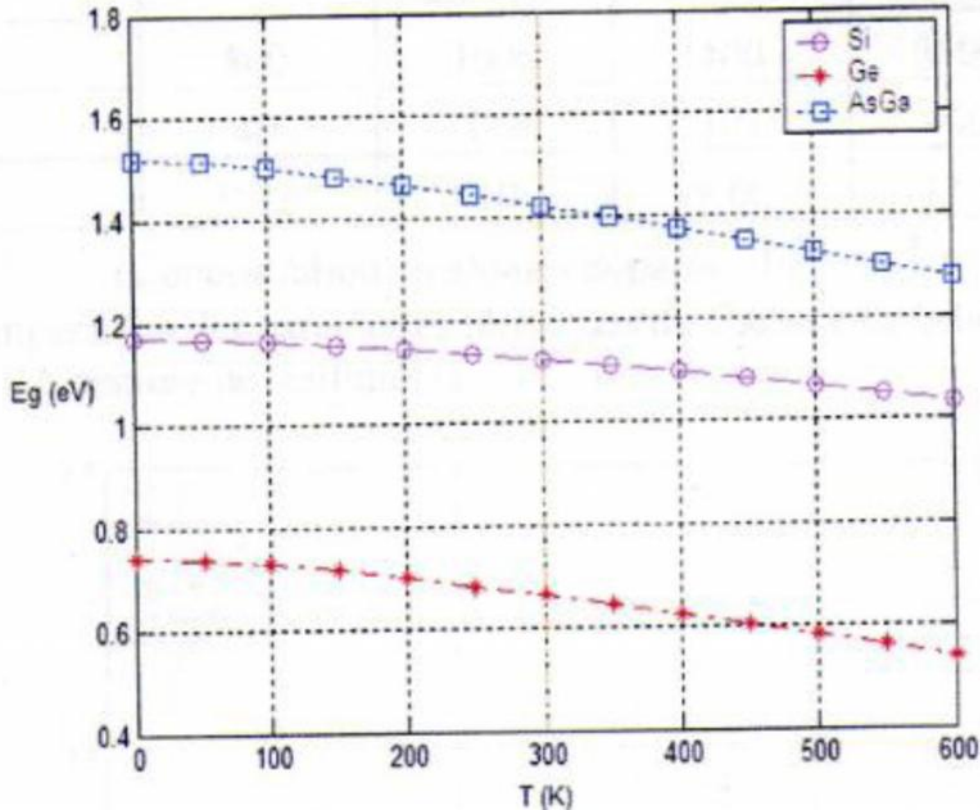


Figure (I-2): Simulation de E_g en fonction de la température pour différents matériaux.

Semi-conducteur	$E_g(0)(\text{Ev})$	$a(\text{eV/K})$	$b(\text{K})$
AsGa	1.519	5.405	204
Si	1.17	4.73	636
Ge	0.7437	4.774	235
GaN	3.509	7.32	700
AIM	6.118	17.99	1432

Tableau (I-1): paramètres de la variation de la bande interdite en fonction de la température [5]

II-3 DENSITE DE PORTEURS INTRINSEQUES

La densité de porteurs intrinsèques (notée n_i , unité cm^{-3}) est les nombres volumiques des porteurs de charge dans un cristal idéalement pur (sans défaut ni chimique, ni structural)

Chapitre 1 théorie du transport dans les semi-conducteurs

et strictement neutre électriquement, La concentration de porteurs intrinsèques varie avec la température absolue (T) suivant une loi de type [3]:

$$n_i^2 = AT^3 e^{-\frac{E_{go}}{KT}} \quad (I.2)$$

Ou:

A : est une constante dépendante du matériau mais indépendante de la température.

E_{go} : est la valeur de gap à 0° K (énergie d'activation).

K : est la constante de Boltzmann (1.38×10^{-23} J/K ou 8.62×10^{-5} eV/ K).

A partir de l'équation (II. 2), le facteur T^3 est moins important que le facteur $e^{-\frac{E_{go}}{KT}}$, la concentration de porteurs intrinsèques est donc un paramètre important à prendre en compte pour des applications à haute température. Le matériau grand gap ($E_g > 2\text{eV}$) ayant une faible valeur de densité de porteurs intrinsèques mais peut être un excellent choix pour les applications à hautes températures.

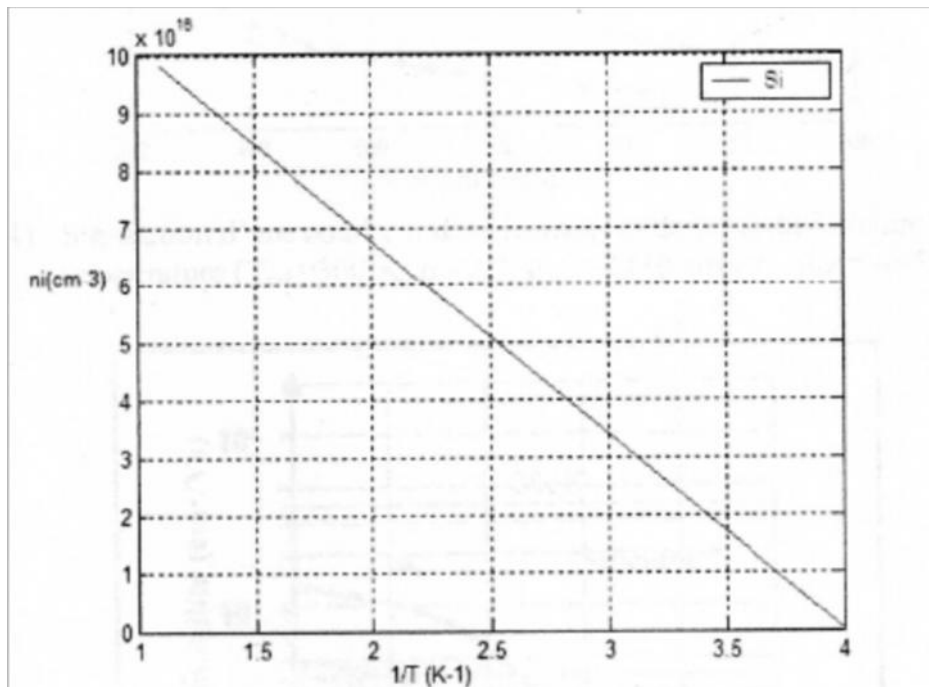


Figure (I-3) : Simulation de le nombre n_i au Silicium en fonction de l'inverse de la température ($A = 3.1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3} \text{ K}^{-3/2}$, $E_{go} = 1.206\text{eV}$) [3].

II-4 LA MOBILITE ET LA VITESSE DES PORTEURS

Chapitre 1 théorie du transport dans les semi-conducteurs

La mobilité (notée μ unité: $\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$) est une mesure de la facilité avec laquelle se déplace un porteur de charge dans un matériau particulier, toute modification du réseau cristallin entraîne une modification de cette mobilité. En effet, l'élévation de la température (Figure I-4) ou l'ajout d'atomes dopants (Figure I-5), créent des perturbations dans le cristal et affectent la mobilité. Dans les matériaux faiblement dopés, la mobilité des porteurs est limitée par leurs interactions avec le réseau cristallin et varie avec la température suivant une loi du type [3]:

$$\mu = \mu_0 \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^{-\alpha} \quad (\text{I.3})$$

Où:

μ_0 : représentant la valeur de mobilité à la température de référence (T_{ref}).

T : la température (K)

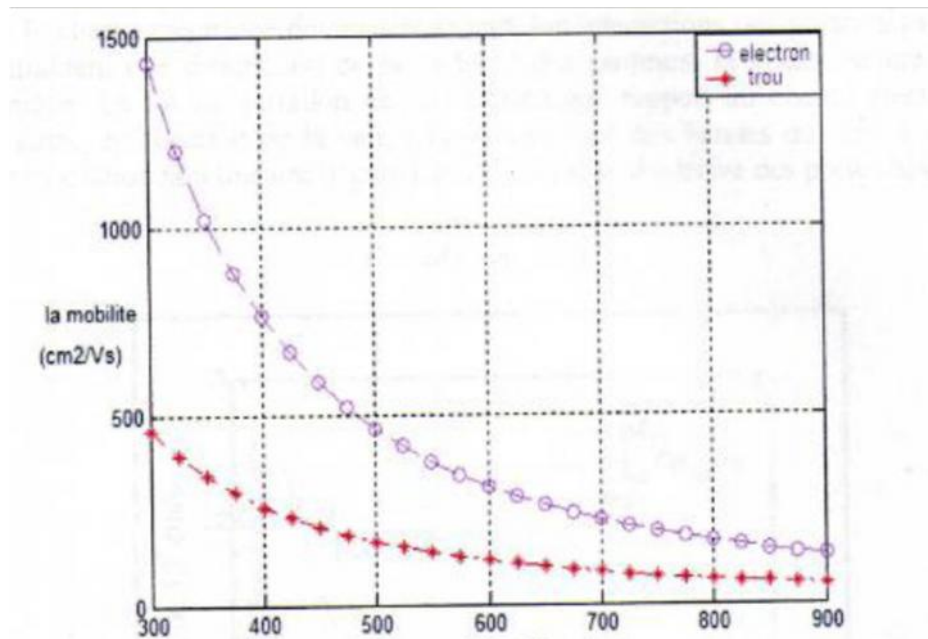


Figure (I-4) : Simulation de nombre n des électrons et de trous du Silicium en fonction de la température ($T_{ref} = 300^\circ\text{K}$, $\alpha = 2.2$, $\mu_{n0} = 1430 \text{cm}^2/\text{Vs}$, $\mu_{p0} = 495 \text{cm}^2/\text{Vs}$)

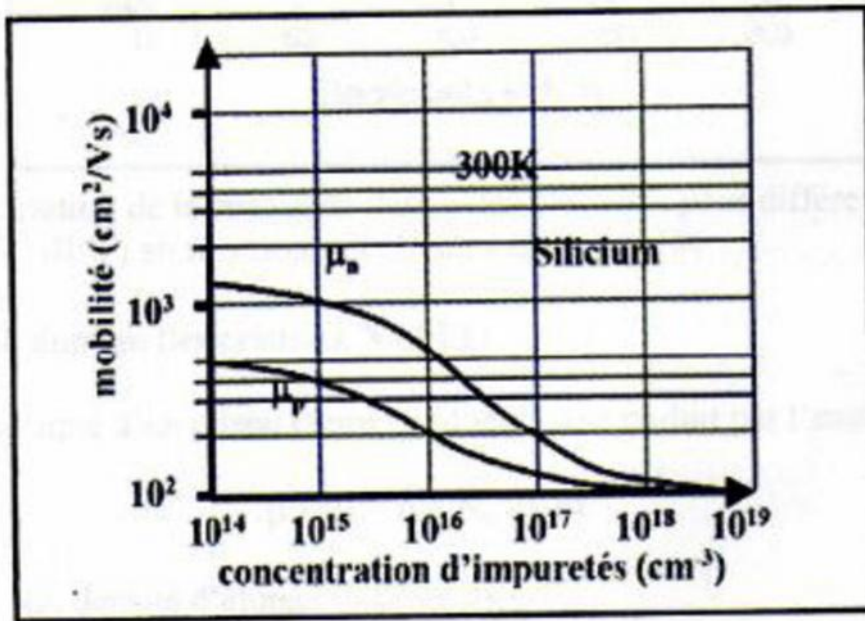


Figure (I-5): Variation de la mobilité des électrons et de trous du silicium en fonction de la concentration en impuretés [7]

A faible champ électrique, les porteurs libres sont en équilibre thermodynamique avec le réseau, et leur vitesse moyenne (notée \bar{V} , unité μ cm/s) est proportionnelle au champ électrique telle que :

$$\bar{V} = \mp \mu_0 \cdot \vec{E} \quad (I.4)$$

$$\mu_0 = \frac{e\tau}{m^*} \quad (I.5)$$

μ_0 : est la mobilité pour des champs faibles (constante).

τ : est le temps de relaxation.

m^* : est la masse effective de l'électron

e : est la charge élémentaire ($1,6 \cdot 10^{-19}$ C)

III. Equation de Boltzmann

II-5-Densité d'état

A la température 0 K, les électrons dans un solide occupent les états d'énergie conformément à la structure de bande et en accord avec le principe d'exclusion de Pauli. Deux électrons seulement, de nombres quantiques de spin opposés, peuvent occuper chaque état

Chapitre 1 théorie du transport dans les semi-conducteurs

quantique. Il y a autant de paires d'électrons que d'états quantiques. A $T = 0K$, la densité d'état électronique est définie par :

$$D(v) = \frac{V}{2f^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{v}. \quad (I.6)$$

La densité d'états est proportionnelle à $\varepsilon^{1/2}$ et au volume de l'échantillon. Il est possible de normaliser la densité par unité de volume, avec l'inconvénient que la densité prend de très grandes valeurs. Il est donc préférable de normaliser la densité d'états par rapport au volume atomique.

Cette densité d'état tient compte des deux orientations possibles de spin. Par intégration sur tous les états d'énergie on obtient la densité électronique,

$$n = \int_0^{\tilde{\varepsilon}_c} D(v) dv \quad (I.7)$$

où $\tilde{\varepsilon}_c$ est l'énergie de Fermi qui est l'énergie maximale occupée par des électrons à $T=0K$. Aux températures finies, des électrons sont excités dans des niveaux supérieurs à l'énergie de Fermi en libérant des niveaux inférieurs. Dans les semi-conducteurs en particulier, l'excitation thermique peut faire passer des électrons de la bande de valence au-dessous du niveau de Fermi, dans la bande de conduction située au-dessus de ce dernier. L'effet de la température crée des trous au sommet de la bande de valence. Il s'agit d'une production de paires électron-trou. La probabilité d'occupation d'un niveau d'énergie v , à une température finie T , est donnée par une fonction de distribution statistique. Pour les électrons de nombre quantique de spin $1/2$. Cette fonction de distribution est celle de Fermi-Dirac :

$$f_{FD}(v) = \left[1 + \exp\left(\frac{v - \tilde{\varepsilon}_c}{k_B T} \right) \right]^{-1} \quad (I.8)$$

où $k_B \approx 1.3810^{-23} J/K$ est la constante de Boltzmann et $\tilde{\varepsilon}_c$ est l'énergie de Fermi, qui apparaît également en tant que potentiel chimique. La densité d'électron s'écrit dans ce cas,

$$n = \int_0^{\infty} D(v) f_{FD} dv \quad (I.9)$$

Chapitre 1 théorie du transport dans les semi-conducteurs

2. Propriétés de la fonction de distribution de Fermi-Dirac :

La fonction $f_{FD}(v)$ dépend de la différence d'énergie $v - \sim_c$ et non du choix de l'origine sur l'échelle des énergies. Pour les métaux, l'origine est choisie en général au minimum de la bande de conduction. Dans les semi-conducteurs l'origine peut correspondre avec le fond de la bande de valence, donc loin de la bande interdite et du niveau de Fermi. En pratique on fait correspondre l'origine de l'échelle des énergies avec le sommet de la bande de valence v_v . La fonction (I. 6) ne peut prendre que des valeurs entre 1 et 0, soit

$$0 \leq f_{FD}(v) \leq 1. \quad (\text{I. 10})$$

En particulier :

$$T = 0K \begin{cases} \varepsilon > \mu_c \rightarrow f_{FD}(\varepsilon) = 0 \\ \varepsilon \leq \mu_c \rightarrow f_{FD}(\varepsilon) = 1 \end{cases} \quad (\text{I. 11})$$

$$T > 0K \begin{cases} \varepsilon \gg \mu_c \rightarrow f_{FD}(\varepsilon) = 0 \\ \varepsilon \ll \mu_c \rightarrow f_{FD}(\varepsilon) = 1 \\ \varepsilon = \mu_c \rightarrow f_{FD}(\varepsilon) = \frac{1}{2} \end{cases} \quad (\text{I. 12})$$

A $T = 0K$, la probabilité d'occupation d'un niveau d'énergie v au-dessous de \sim_c , vaut 1. Cela signifie que niveaux d'énergie $v \leq \sim_c$ sont tous occupés. La probabilité zéro pour les niveaux d'énergie $v > \sim_c$ signifie que les niveaux sont bien vides.

A $T > 0K$, le comportement de $f_{FD}(v)$ est semblable mais la croissance de la fonction au voisinage de \sim_c n'est pas discontinue. Elle s'étale sur un intervalle d'énergie de $k_B T$, sous l'effet d'une élévation de température. Seule une faible fraction des électrons au voisinage du niveau de Fermi sont en mesure d'absorber un accroissement d'énergie.

L'énergie limite de Fermi n'est pas une constante, elle est fonction de la température et décroît faiblement quand la température augmente.

Chapitre 1 théorie du transport dans les semi-conducteurs

3- Fonction de distribution statistique des porteurs de charge dans les semi-conducteurs

Dans un semi-conducteur, les niveaux d'énergie de part et d'autre du niveau de Fermi sont séparés par une bande interdite. L'excitation d'électrons de la bande de valence (saturée à $T = 0K$) dans la bande de conduction (vide à $T = 0K$) demande une énergie ΔV au moins supérieure à la largeur de bande interdite v_g (énergie de gap). Dans un semi-conducteur v_g est de l'ordre de l'électronvolt

$$k_B T \ll v_g = v_c - v_v. \quad (I.13)$$

Puisque $\tilde{\epsilon}_c > v_v$ et $\tilde{\epsilon}_c < v_c$, pour des valeurs V dans la bande valence et de conduction

l'inégalité

$$|V - \tilde{\epsilon}_c| \gg 2k_B T \quad (I.14)$$

est valable et la fonction de distribution (I.5) devient :

$$f_{FD}(V) = \left[1 + \exp\left(\frac{V - \tilde{\epsilon}_c}{k_B T}\right) \right]^{-1} \approx \exp\left(\frac{-V + \tilde{\epsilon}_c}{k_B T}\right) = \exp\left(\frac{\tilde{\epsilon}_c}{k_B T}\right) \exp\left(\frac{-V}{k_B T}\right). \quad (I.15)$$

La fonction de Fermi-Dirac est donc bien représentée par un facteur de Boltzmann, pourvu qu'on s'intéresse à des niveaux d'énergie loin au-dessus du niveau de Fermi dans la bande de conduction. En outre, dans un semi-conducteur, en plus des électrons dans la bande de conduction, il y a des trous qui sont des quasi-particules correspondant à des états électroniques inoccupés au sommet d'une bande. Le nombre de trous sur des niveaux d'énergie compris entre les valeurs V et $V + dV$ est la fonction de distribution statistique des trous,

$$f_p(V) = 1 - f_n(V) = 1 - f_{FD}(V), \quad (I.16)$$

où $f_n(V)$ est la fonction de distribution statistique des électrons donnée par (I.5). En

particulier, dans la bande de valence sous la condition $\tilde{\epsilon}_c - V \gg k_B T$,

Chapitre 1 théorie du transport dans les semi-conducteurs

$$f_p(v) = 1 - \left[1 + \exp\left(\frac{v - \tilde{c}}{k_B T}\right) \right]^{-1} \approx \exp\left(\frac{v - \tilde{c}}{k_B T}\right) \sim \exp\left(-\frac{|v|}{k_B T}\right) \quad (\text{I. 17})$$

L'énergie cinétique des trous croît lorsqu'on s'éloigne du niveau de Fermi vers la bande de valence.

III. Equation de Boltzmann

L'équation de transport de Boltzmann (BTE) est la forme de la fonction de distribution des Charges dans des conditions hors équilibre dans un semi-conducteur :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v}_k \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{collisions}} \quad (\text{I. 18})$$

où $F(r, t) = q[E(r, t) + v_k \times B(r, t)]$ est la force de Lorentz.

Cette équation régit le mouvement des charges dans l'espace des phases à six dimensions formé par l'espace réel et les vecteurs d'onde (appelé aussi l'espace des phases ou k-points).

La fonction de distribution $f(k, r, t)$ définit la probabilité de trouver une particule à la position r dans l'espace réel, avec k vecteur d'onde au temps t . A partir d'une distribution initiale donnée de particules, la BTE décrit le comportement de la fonction de distribution f en fonction du temps.

Dans l'équation de Boltzmann (III. 16) il est nécessaire de préciser l'expression de l'intégrale

De collision $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}}$ pour les différents type de collision que peuvent effectuer les électrons, en tenant compte du fait que ceux-ci sont de fermions, donc obéissent au principe d'exclusion de Pauli.

III .1 L'intégrale de collision de l'équation de Boltzmann

Dans l'approximation des électrons indépendants, l'interaction Coulombienne entre électrons est prise en compte de façon moyenne dans le Hamiltonien à un électron. Les écarts par rapport à cette moyenne correspondent à des collisions électron-électron. Celles-ci jouent un rôle mineur dans la conduction dans les solides. Aux hautes températures, les collisions électron-électron sont beaucoup moins importantes beaucoup moins importantes que interactions avec les vibrations thermiques du réseau. Aux basses températures, sauf dans des cristaux extrêmement purs, ce sont les collisions des électrons avec les impuretés et les défauts du réseau qui sont importantes.

Chapitre 1 théorie du transport dans les semi-conducteurs

De façon générale, les processus de collision conduisent à une modification du vecteur d'onde de l'électron et aussi dans certains cas à l'énergie.

III .1 .2 L'intégrale de collision

L'intégrale de collision fait intervenir la probabilité par unité de temps pour qu'un électron, initialement dans un état de vecteur d'onde \vec{k} , soit diffusé dans un état de vecteur d'onde \vec{k}' . Selon la théorie de Bloch, un électron évoluant dans un arrangement parfaitement périodique d'ions ne subit aucune collision. Dans l'approximation des électrons indépendants, les collisions, qui produisent les transitions d'un état de Bloch à un autre, sont nécessairement induites par des irrégularités dans le réseau cristallin. La description de ces irrégularités conduit en effet à écrire un nouveau terme de potentiel, non périodique, dans le Hamiltonien des électrons. Dans l'approximation de Born, la probabilité de transition est proportionnelle au carré du module de l'élément de matrice du potentiel perturbateur.

III .1 .3 Diffusion par les impuretés

L'exemple le plus simple de processus de collision est la collision d'un électron avec un centre diffuseur localisé, comme par exemple une impureté. Dans une telle collision, l'électron passe d'un état $|k\rangle$ à un état $|k'\rangle$, la différence de quantité de mouvement correspondante, $\Delta p = \hbar(k - k')$ étant absorbée par l'impureté. L'énergie de celle-ci change donc de $(\Delta p)^2 / 2M$, M étant sa masse. Comme cette masse est beaucoup plus grande que celle de l'électron, ce changement d'énergie est très petit par rapport à l'énergie initiale de l'électron. Cette énergie n'est donc pratiquement pas modifiée par ce type diffusion, qui est dite pour cette raison élastique.

Le seul paramètre nécessaire à la description de la collision est le vecteur d'onde \vec{k} de l'électron. La position \vec{r} et le temps t sont fixés. La fonction de distribution $f(r, k, t)$, notée pour souci de simplification, f_k , représente la probabilité pour que l'état $|k\rangle$ soit occupé par un électron (la probabilité pour que l'état $|k\rangle$ soit vide est donc $1 - f_k$).

Pour écrire l'intégrale de collision électron-impureté, il convient d'introduire la probabilité conditionnelle $w_{k',k} dt$ pour qu'une transition de l'état $|k\rangle$ vers l'état $|k'\rangle$ se produise dans l'intervalle de temps dt . Si le potentiel d'interaction est suffisamment faible, on peut utiliser

Chapitre 1 théorie du transport dans les semi-conducteurs

l'approximation de Born de la diffusion. On obtient ainsi l'expression du taux de transition de l'état $|k\rangle$ vers l'état $|k'\rangle$:

$$w_{k',k} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle k'|V_i|k\rangle|^2 \delta(\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_{k'}) \quad (\text{I.19})$$

Dans la formule (8.1), V_i désigne le potentiel d'interaction électron-impureté et la fonction de Dirac $\delta(\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_{k'})$ le fait que l'énergie de l'électron n'est pas modifiée par la collision .

Pour obtenir la probabilité d'une transition entre les états $|k\rangle$ et $|k'\rangle$ dans l'intervalle de temps dt , étant donné qu'initialement l'électron est dans l'état $|k\rangle$ et que l'état $|k'\rangle$ est vide, il faut multiplier $w_{k',k}$ par la probabilité f_k pour que l'état $|k\rangle$ contienne un électron et par la probabilité $1 - f_{k'}$ pour que l'état $|k'\rangle$ soit vide. L'intégrale de collision pour des collisions sur des impuretés s'écrit donc

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \sum_k w_{k,k'} f_k (1 - f_{k'}) - w_{k',k} f_{k'} (1 - f_k) \quad (\text{I.20})$$

Soit encore

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int [w_{k,k'} f_k (1 - f_{k'}) - w_{k',k} f_{k'} (1 - f_k)] dk' \quad (\text{I.21})$$

où V désigne le volume de l'échantillon considéré.

III .1 .4- Diffusion par les vibrations de réseau

Les ions ne sont pas rigoureusement fixes en un arrangement périodique, mais subissent par rapport à leur position d'équilibre des oscillations (correspondant à des vibrations du réseau) dont l'amplitude croît avec la température. Ces oscillations donnent lieu à une diffusion des électrons, que l'on décrit généralement en termes d'interaction électron-phonon.

Comme autre exemple, considérons la collision d'un électron avec un phonon. Il s'agit d'une collision inélastique dans laquelle l'énergie de l'électron n'est pas conservée. Nous ne donnerons pas ici de traitement détaillé de l'interaction électron-phonon et nous nous limiterons à l'étude d'un modèle schématique permettant de se faire une idée de la forme de l'intégrale de collision. Il s'agit du modèle d'Einstein, dans lequel chaque atome est supposé vibrer comme un oscillateur harmonique, indépendamment des autres atomes. Les états d'énergie de l'oscillateur sont indépendantes de ceux des autres atomes. Les états de

Chapitre 1 théorie du transport dans les semi-conducteurs

l'oscillateur ont des énergie E_v associée à la probabilité d'occupation p_v . La probabilité de transition correspondant à une diffusion est de la forme $w_{k',k,v',v}$ avec $v' = v \pm 1$. Elle est proportionnelle à $\delta(\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_k + E_{v'} - E_v)$, ce qui traduit la conservation de l'énergie totale. l'intégrale de collision s'écrit donc :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \sum_{k',v,v'} [w_{k,k',v,v'} p_{v'} f_{k'} (1 - f_k) - w_{k',k,v',v} p_v f_k (1 - f_{k'})] \quad (I.22)$$

Soit, en utilisant pour le vecteur d'onde une description continue :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \frac{v}{(2\pi)^3} \int [\Lambda_{k,k} f_{k'} (1 - f_k) - \Lambda_{k',k} f_k (1 - f_{k'})] dk' \quad (I.23)$$

Dans la formule (??), comme $v' = v \pm 1$, on a

$$\Lambda_{k,k} = \sum_v [w_{k',k,v+1,v} p_{v'} + w_{k',k,v,v+1} p_{v+1}] \quad (I.24)$$

L'intégrale de collision (I.23) correspondant aux processus de collision électron-phonon est formellement analogue à l'intégrale de collision (I.21) décrivant les collision électron-impureté. Il faut cependant noter que, tandis que dans l'équation (I.21) $w_{k',k}$ est proportionnel à $\delta(\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_k)$, il n'en est pas ainsi dans l'équation (I.23), où $\Lambda_{k',k}$ décrit en effet des processus au cours desquels l'énergie de l'électron est modifiée.

Notons pour conclure que, si deux ou plusieurs processus de diffusion indépendants sont à prendre en compte, alors l'intégrale de collision est la somme des intégrale de collision correspondant à chaque processus.

III .1 .5 - L'équilibre détaillé

La distribution d'équilibre global $f_0(E)$ est la solution indépendante du temps de l'équation de Boltzmann (III.16) La distribution de fonction f_0 est également solution de

l'équation $\left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{coll} = 0$. Nous allons étudier les conséquences de cette propriété dans le cas de la

diffusion par les impuretés et dans celui de la diffusion par les vibrations de réseau.

III .1 .6 - Diffusion par les impuretés

Les collisions électron-impureté sont décrites par l'intégrale de collision (I.22) le principe du l'équilibre détaillé s'écrit donc, dans ce cas :

Chapitre 1 théorie du transport dans les semi-conducteurs

$$w_{k,k'} f_0(\epsilon_k) [1 - f_0(\epsilon_k)] = w_{k',k} f_0(\epsilon_k) [1 - f_0(\epsilon_k)] \quad (I.25)$$

Pour ces collisions, $w_{k',k}$ est nul sauf si $\epsilon_k = \epsilon_{k'}$. Les fonctions de Fermi-Dirac dans l'équation (I.21) disparaissent donc et il vient

$$w_{k,k'} = w_{k',k} \quad (I.26)$$

On retrouve ainsi la propriété de micro-réversibilité. Elle se vérifie d'ailleurs directement sur la formule (I.18) pour $w_{k',k}$, puisque le potentiel perturbateur V_i est hermitique. Le principe de l'équilibre détaillé implique donc que, pour les processus de diffusion qui conservent l'énergie, les probabilités de transition sont symétriques. Ceci conduit à une simplification de l'intégrale de collision (I.21) qui devient :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int w_{k',k} (f_{k'} - f_k) dk \quad (I.27)$$

Le principe d'exclusion de Pauli n'a pas d'effet sur les processus de diffusion de ce type. L'expression (I.27) aurait été la même en l'absence de restrictions sur l'occupation de l'état final.

III .1 .7 - Diffusion par les vibrations de réseau

Dans ce cas les processus de collision ne conservent pas l'énergie électronique, comme par exemple l'interaction électron-phonon décrites par l'intégrale de collision (I.20). Il vient alors

$$\Lambda_{k,k'} f_0(\epsilon_k) [1 - f_0(\epsilon_k)] = \Lambda_{k',k} f_0(\epsilon_k) [1 - f_0(\epsilon_k)] \quad (I.28)$$

En utilisant le fait qu'à l'équilibre

$$\frac{P_{v'}}{P_v} = \exp \frac{E_v - E_{v'}}{kT},$$

$$\frac{1-f_0}{f_0} = \exp \frac{\epsilon - \mu}{kT}, \quad (I.29)$$

ainsi que la conservation de l'énergie totale, on arrive encore à la conclusion :

$$w_{k,k',v,v'} = w_{k',k,v,v'} \quad (I.30)$$

Chapitre 1 théorie du transport dans les semi-conducteurs

Les probabilités de transition par unité de temps sont donc encore symétriques. Cependant, les quantités $\Lambda_{k',k}$ définie par la formule (8.10) ne le sont pas et vérifient l'égalité

$$\Lambda_{k,k} = \Lambda_{k',k} \exp \frac{\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k}{KT} \quad (\text{I.31})$$

de sorte que l'intégrale de collision (I.21) ne peut être simplifiée davantage. Dans ce cas, le principe de l'équilibre détaillé ne permet pas de s'affranchir des restrictions liées au principe d'exclusion.

III .1 .8 - Approximation du temps de relaxation

Dans ce paragraphe on va s'intéresser à l'opérateur de collision dans l'approximation du temps de relaxation. Pour résoudre l'équation de Boltzmann (I.18), on met en œuvre chaque fois que s'est possible , une méthode approchée reposant sur l'idée selon laquelle l'effet principal du terme $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}$ est de faire relaxer la fonction de distribution vers une distribution d'équilibre local. Dans le cas du gaz d'électrons, les distributions d'équilibre local sont des fonctions de Fermi-Dirac, que l'on écrit

$$f_0(r, \varepsilon_k, t) = \left[\exp \left(\frac{\varepsilon_k - \mu(r,t)}{k_B T(r,t)} \right) + 1 \right]^{-1} \quad (\text{I.32})$$

Dans l'expression (III.30), $T(r,t)$ et $\mu(r,t)$ sont les valeurs d'équilibre local de la température et du potentiel chimique. L'intégrale de collision est exprimée, lorsque c'est possible, dans l'approximation du temps de relaxation

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} \simeq -\frac{f-f_0}{\tau} \quad (\text{I.33})$$

où $\tau = \tau(k)$ est le temps de relaxation qui dépend en général du vecteur d'onde k (ou de l'énergie ε_k dans un système isotrope). La dépendance de τ par rapport à k ou à ε_k dépend du détail des mécanismes de collision.

III .1 .9 - Terme de force de l'équation de Boltzmann

En ce qui concerne le premier membre de l'équation de Boltzmann ((I.18)), il convient de remarquer que le champ électrique et le champ magnétique agissent sur les porteurs de charge de manière très différente champ électrique leur cède en effet de l'énergie, mais pas le champ magnétique. Si les écarts à l'équilibre local restent petits, on cherche la

Chapitre 1 théorie du transport dans les semi-conducteurs

solution de l'équation de Boltzmann sous la forme $f = f_0(\mathcal{E}_k) + f_1$, où $f_1 \ll f_0$ est du premier ordre par rapport au champ électrique, au gradient du potentiel chimique et au gradient de température, mais contient en revanche des termes de tous les ordres de grandeur en champ magnétique. Dans le terme en champ magnétique, la fonction de distribution f_0 ne joue aucun rôle, on effectue f_0 dépendant de k via l'énergie \mathcal{E}_k , on a

$$\nabla_k f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_k} \nabla_k \mathcal{E}_k = v_k \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_k} \quad (\text{I.34})$$

Le terme en produit mixte $(v_k \times B) \cdot \nabla_k f_0$ est donc nul. On obtient ainsi pour un état stationnaire l'équation pour f_{01} :

$$v_k \cdot \left[\frac{\mathcal{E}_k - \mu}{T} \nabla_r T + \nabla_r \mu - qE \right] \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_k} \right) + \frac{q}{\hbar} (v_k \times B) \cdot \nabla_k f_1 = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (\text{I.35})$$

L'équation de transport (I.18), avec la forme (I.34) de l'intégrale de collision, permet d'analyser divers phénomènes de transport, tels que la conductivité électrique et la conductivité thermique, ainsi que les effets croisés associés (effet Seebeck et effet Peltier). On peut aussi, en présence d'un gradient de concentration, calculer le courant de particules et le coefficient de diffusion correspondant. Enfin, il est possible d'analyser les divers phénomènes de transport en présence de champ magnétique (effet Hall, magnétorésistance longitudinale, etc).

Chapitre II

MODELE CENETIQUE

Chapitre II : modèle cénétique

Introduction :

Notre méthode dans ce travail consiste à développer l'équation de Boltzmann sur la base des polynômes de Legendre. Ces polynômes sont appropriés dans la théorie du transport car chaque terme a un sens physique bien précis. En effet par exemple la première composante anisotrope sur cette base décrit les flux dans le gaz des porteurs de charges et en particulier la densité de courant qui est la grandeur de transport de base dans ce travail. Par ailleurs ces polynômes sont adaptés dans la description du transport avec une symétrie axiale comme c'est le cas dans notre modèle. Nous donnons ci-après les quelques premiers polynômes de Legendre

1.a- Equation de Boltzmann

Pour écrire l'équation de Boltzmann, nous allons raisonner sur le développe l'équation de Boltzmann sur les polynômes de Legendre ,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \frac{q}{m^*} (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \cdot \nabla_{\vec{v}} f = C_{op}(f) + C_{ac}(f) \quad (II.1)$$

Où q la charge électrique de porteurs de charge, \vec{E} et \vec{B} le champ électrique et magnétique respectivement, et $\vec{v} = \frac{\partial \epsilon_n(k)}{\partial k}$ la vitesse de groupe, $f(r, k, t)$ la fonction de distribution.

On à deux approximation :

$$1^{ere} - \frac{\partial f}{\partial t} = 0 \text{ (stationnaire)} \quad (II.2)$$

$$2^{eme} - \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} = 0 \text{ (homogene)} \quad (II.3)$$

On prend le champ électrique constant ($\vec{E} = cte$) et le champ magnétique nul ($\vec{B} = \vec{0}$)

où :

$$\vec{E} = E_x \vec{e}_x \quad (II.4)$$

On remplace l'équation (II.3) et (II.4) , avec $\vec{B} = \vec{0}$ dans l'équation (II.1) elle devient :

$$\frac{q}{m^*} \frac{\partial f(v, \mu)}{\partial v_x} = c_{ac}(f) + c_{op}(f) \quad (II.5)$$

2- Quelques relations mathématiques

$$P_0(\cos \theta) = 1 \text{ Fonction isotrope}$$

$$P_1(\cos \theta) = \cos \theta = \mu$$

$$P_2(\cos \theta) = \frac{1}{2}(3\cos^3\theta - 1) = \frac{1}{2}(3\mu^2 - 1) = \frac{3}{2}\left(\mu^2 - \frac{1}{3}\right)$$

$$P_3(\cos \theta) = \frac{1}{2}(5\cos^3\theta - 3\cos\theta) = \frac{1}{2}(5\mu^3 - 3\mu)$$

Il existe des relations récurrence sur les polynômes de Legendre. Ces relation sont très utiles lorsque l'on fait des calculs avec des polynômes de Legendre car elles nous permettent d'ordonner les séries suivant un degré l

$$\mu P_l(\mu) = \frac{l}{2l+1} P_{l-1} + \frac{l+1}{2l+1} P_{l+1} \quad (\text{II. 6})$$

$$(1 - \mu^2) \frac{\partial P_l}{\partial \mu} = \frac{(l+1)l}{2l+1} P_{l-1} - \frac{l(l+1)}{2l+1} P_{l+1} \quad (\text{II. 7})$$

$$\int_{-1}^{+1} P_0 P_0 = 2$$

$$\int_{-1}^{+1} P_0 P_1 = 0$$

$$\int_{-1}^{+1} P_1 P_1 = \frac{2}{3}$$

$$\int_{-1}^{+1} P_l(\mu) P_{l'}(\mu) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'} \quad (\text{II. 8})$$

Où $\delta_{ll'}$ delta kronecker

$$\delta_{ll'} = \begin{cases} 1 & l = l' \\ 0 & l \neq l' \end{cases} \quad (\text{II.9})$$

$$P_0(x) = 1, P_1(x) = x, P_2(x) = \frac{3}{2}\left(x^2 - \frac{1}{3}\right), \text{ et } P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x).$$

Chapitre II : modèle cénétique

Il existe des relation récurrence utiles que nous utilisons dans nos calculs que sont

$$\mu P_l(\mu) = \frac{l}{2l+1} P_{l-1} + \frac{l+1}{2l+1} P_{l+1} \quad (2.1) \quad (\text{II.10})$$

$$(1 - \mu^2) \frac{\partial P_l}{\partial \mu} = \frac{(l+1)l}{2l+1} P_{l-1} - \frac{l(l+1)}{2l+1} P_{l+1} \quad (2.2) \quad (\text{II.11})$$

$$\int_{-1}^{+1} P_l(\mu) P_{l'}(\mu) d\mu = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}, \quad (2.3) \quad (\text{II.12})$$

où $\delta_{ll'}$ est le symbole de kronecker.

3) Les termes de collision :

Dans le second membre de l'équation (II.1) il apparaît deux termes de collision dont les expressions sont données par [S.F liotta et H.Struchture]

$$c_{ac}(f) = Av[f(\vec{v}) - f_0(v)] \quad (\text{II.13})$$

$$c_{op} = -B\sqrt{v^2 + \chi} \left[f - \frac{e^{\frac{\theta}{T_0}}}{2} \int f^{(+)} \sin \theta d\theta \right] - B\sqrt{v^2 - \chi} \left[e^{\frac{\theta}{T_0}} f(\vec{v}) - \frac{1}{2} \int f^{(-)} \sin \theta d\theta \right] \quad (\text{II.14})$$

où

$$A = \frac{1}{\pi} \frac{m^2 k_B \varepsilon_l^2}{\hbar^4 \rho U_l^2} T_0, \quad B = \frac{1}{2\pi} \frac{m^2 (D_t K)^2}{\hbar^4 \rho K_B \theta} \frac{1}{\exp \frac{\theta}{T_0} - 1}, \quad \chi = \frac{2\hbar\omega}{m} = \frac{2K_B\theta}{m}$$

$$f^{(\pm)} = f(\sqrt{v^2 \pm \chi}, \chi)$$

$$f^{(\pm)} = f(\sqrt{c^2 \pm \chi}, \chi), \quad \sqrt{(c^2 - \chi)_{|\pm}} = \begin{cases} \sqrt{(c^2 - \chi)_{|+}}, & c^2 \geq \chi \\ 0 & c^2 < \chi \end{cases}$$

Pour le silicium les paramètres physiques sont $\varepsilon_l = 9eV$ pour le potentiel de déformation, $\rho = 2330 \text{ kg/m}^3$ pour la densité du cristal et $U_l = 9040 \text{ m/s}$ pour la vitesse du son longitudinale. De plus $D_t K = 11.410^{10} \frac{eV}{m}$ est un autre potentiel de déformation, $\omega = 0.063eV$ est l'énergie des phonons optique et $T_{ph} = \hbar\omega / k_B$, la température équivalente. T_0 représente la température du gaz de porteurs de charge supposée être constante et k_B et \hbar sont les constantes de Boltzmann et de Planck

Chapitre II :modèle cénétique

respectivement. Dans la relation (II.11), θ est l'angle entre le vecteur vitesse \vec{v} et l'axe de symétrie du problème Ox , d'où on peut exprimer la fonction de distribution sous la forme

$$f(\vec{v}) = f(v, \cos \theta) \quad (\text{II.15})$$

où

$$\cos \theta = \frac{v_x}{v} \quad (3.4) \quad (\text{II.13})$$

En posant

$$\mu = \cos \theta \quad (\text{II.14})$$

la fonction de distribution développée sur la base de Legendre s'écrit,

$$f(\vec{v}) = \sum_{l=0}^{\infty} p_l(\mu) f_l(v) \quad (3.7) \quad (\text{II.15})$$

où les $P_l(\sim)$ sont les polynômes de Legendre d'ordre l . Notons que le terme isotrope $f_0(v)$ intervient dans l'équation (II.10) qui définit l'opérateur de collision électron-phonon acoustique. Cet opérateur développé sur la base des $P_l(\sim)$ donne

$$P_0 \rightarrow C_{ac} = 0$$

$$P_1 \rightarrow C_{ac} = -Av[f_1(v)P_1 - 0]$$

$$P_n \rightarrow C_{ac} = -Avf_n(v)P_n \quad (\text{II.16})$$

Par ailleurs l'opérateur électron-phonon optique n'est pas analysé ici dans la mesure où il est modélisé plus bas par une expression plus simple sous la forme d'un opérateur de relaxation.

4-Projection l'équation cinétique :

On va à présent projeter l'équation de Boltzmann (II.6) sur la base des polynômes de Legendre. Dans son membre de gauche on opère la dérivation suivante,

$$\frac{\partial}{\partial v_x} f(v, \mu) = \frac{dv}{dv_x} \frac{\partial f}{\partial v} + \frac{d\mu}{dv_x} \frac{\partial f}{\partial \mu} \quad (4.2) \quad (\text{II.17})$$

En utilisant les développements

$$\frac{dv}{dv_x} = 2v_x \frac{1}{2v} = \frac{v_x}{v} = \mu \quad (4.4) \quad (\text{II.18})$$

et

$$\frac{d\mu}{dv_x} = \frac{d}{dv_x} \left(\frac{v_x}{v} \right) = \frac{1}{v} + v_x \left(-\frac{1}{v^2} \right) \frac{v_v}{v} = \frac{1}{v} (1 - \mu^2) \quad (4.5) \quad (\text{II.19})$$

l'équation (II.17) devient

$$\frac{\partial}{\partial v_x} f(v, \mu) = \mu \frac{\partial f}{\partial v} + \frac{1}{v} (1 - \mu^2) \frac{\partial f}{\partial \mu} \quad (\text{II.20})$$

En utilisant le développement sur la base des polynômes de Legendre on déduit

$$\frac{\partial f}{\partial v} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l \frac{\partial f_l}{\partial v} \quad (4.7) \quad (\text{II.21})$$

$$\frac{\partial f}{\partial \mu} = \sum_{l=0}^{\infty} f_l \frac{\partial f}{\partial \mu} \quad (4.8) \quad (\text{II.22})$$

En utilisant ces relations (II.21) et (II.22) l'équation (II.20) s'écrit comme

$$\frac{\partial}{\partial v_x} f(v, \mu) = \sum_{l=0}^{\infty} \mu P_l(\mu) \frac{\partial f_l}{\partial v} + \sum_{l=0}^{\infty} (1 - \mu^2) \frac{1}{v} \frac{\partial P_l}{\partial \mu} f_l(v) \quad (\text{II.23})$$

On remplace les expression (II. ??)et (II. ??) dans l'équation (II.23) obtenant,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial v_x} f(v, \mu) &= \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{l}{2l+1} P_{l-1} + \frac{l+1}{2l+1} P_{l+1} \right) \frac{\partial f_l}{\partial v} \\ &\quad + \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2l+1} [(l+1)l P_{l-1} - l(l+1)P_{l+1}] \frac{1}{v} f_l(v) \end{aligned}$$

(II.24)

Par récurrence on trouve :

$$\frac{\partial}{\partial v_x} f(v, \mu) = \left[\frac{l}{2l-1} v^{l-1} \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{f_{l-1}}{v^{l-1}} \right) + \frac{l+1}{2l+3} \frac{1}{v^{l+2}} \frac{\partial}{\partial v} (v^{l+2} f_{l+1}) \right] \quad (\text{II.25})$$

Finalement on remplace les équations (II. ??) et (II. ??) dans l'équation (II. ??) on obtient

$$\frac{q}{m} E \left[\frac{l}{2l-1} v^{l-1} \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{f_{l-1}}{v^{l-1}} \right) + \frac{l+1}{2l+3} \frac{1}{v^{l+2}} \frac{\partial}{\partial v} (v^{l+2} f_{l+1}) \right] P_l = C_{op}(f_l) + C_{ac}(f_l) \quad (\text{II.26})$$

Chapitre II : modèle cénétique

En posant $x = \frac{v}{\sqrt{2}v_t}$ où $v_t = \sqrt{\frac{k_B T}{m}}$ est la vitesse thermique

l'équation (II.26) se réécrit sous la forme

$$\begin{aligned} \frac{q}{m} E \frac{1}{\sqrt{2}v_t} \left[\frac{l}{2l-1} x^{l-1} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{f_{l-1}}{x^{l-1}} \right) + \frac{l+1}{2l+3} \frac{1}{x^{l+2}} \frac{\partial}{\partial x} (x^{l+2} f_{l+1}) \right] \\ = C_{ac}(f_l) + C_{op}(f_l) \quad (II.27) \end{aligned}$$

On donne ci-dessous les 6 premières projections que nous utilisons dans le prochain chapitre.

i) Pour l=0

$$C_{ac}(f_0) = 0 \quad (II.28)$$

Par ailleurs en modélisant l'opérateur de collision électron-phonon optique par un opérateur de relaxation on obtient

$$C_{op}(f_0) = -\frac{Av_t \sqrt{2}}{Z} (f_0 - f_{FD}) \quad (II.29)$$

où $\epsilon_{ac} = Av_t \sqrt{2}$, f_{FD} est la fonction de Fermi-Dirac et Z est paramètre ajustable correspondant au rapport des fréquences de collision électron-phonon acoustique et électron-phonon optique.

D'où l'équation (II.27) devient

$$\frac{q}{m} E \frac{1}{\sqrt{2}v_t} \left[\frac{1}{3} \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} (x^2 f_1) \right] = \frac{q}{m} E \frac{1}{\sqrt{2}v_t} \left[\frac{1}{3} \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{2}{3} \frac{1}{x} f_1 \right] = -\frac{Av_t \sqrt{2}}{Z} (f_0 - f_{FD}) \quad (II.30)$$

On pose :

$$v = \frac{v_{ac}}{qE} m \sqrt{2} v_t \quad (II.31)$$

Il vient alors

$$\frac{1}{3} \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{2}{3} \frac{1}{x} f_1 = \frac{v}{Z} (f_0 - f_{FD}) \quad (II.32)$$

Chapitre II :modèle cénétique

Pour $l > 0$, on prend $C_{op}(f_l) = 0$ étant donné que sa contribution est plus faible que celle des phonons acoustiques. Comme $C_{ac}(f_l) = -vx f_l$, on trouve les équations jusqu'à l'ordre 6 suivantes,

ii) pour $l=1$

$$\frac{\partial f_0}{\partial x} + \frac{2}{5} \frac{\partial f_2}{\partial x} + \frac{6}{5x} f_2 = -vx f_1 \quad (\text{II.33})$$

iii) pour $l=2$

$$\frac{2}{3} \frac{\partial f_2}{\partial x} - \frac{6}{5x} f_2 + \frac{3}{7} \frac{\partial f_3}{\partial x} + \frac{12}{7x} f_3 = -vx f_2 \quad (\text{II.34})$$

iv) pour $l=3$

$$\frac{3}{5} \frac{\partial f_2}{\partial x} + \frac{6}{5x} f_1 + \frac{4}{9} \frac{\partial f_4}{\partial x} + \frac{20}{9x} f_4 = -vx f_3 \quad (\text{II.35})$$

v) pour $l=4$

$$\frac{4}{7} \frac{\partial f_3}{\partial x} - \frac{12}{7x} f_3 + \frac{5}{11} \frac{\partial f_5}{\partial x} + \frac{30}{11x} f_5 = -vx f_4 \quad (\text{II.36})$$

vi) pour $l=5$

$$\frac{5}{9} \frac{\partial f_4}{\partial x} - \frac{20}{9x} f_4 + \frac{6}{13} \frac{\partial f_6}{\partial x} + \frac{42}{13x} f_6 = -vx f_5 \quad (\text{II.37})$$

CHAPITRE : III

RESULTATS

NUMERIQUES ET

INTERPRETATION

chapitre3 :RESULTATS NUMERIQUES ET INTERPRETATION

I. METHODES NUMERIQUES

1) Méthode de résolution de l'équation de Boltzmann

Comme on l'a montré dans le chapitre précédent l'équation de Boltzmann est réduite mathématiquement en utilisant sa projection sur la base des polynômes orthogonaux de Legendre. L'intérêt de cette projection est que l'on transforme l'équation de Boltzmann qui est une équation aux dérivées partielles dans l'espace des phases (correspondant à l'espace des impulsions en l'absence de gradients dans le dispositif semi-conducteur) en une infinité d'équation différentielles couplées. Les composantes de la fonction de distribution $f_i(p)$ dans la base des polynômes de Legendre ont un sens physique bien défini. En particulier la première anisotropie $f_1(p)$ décrit les flux et par conséquent c'est la fonction recherchée pour calculer les coefficients de transport désirés que sont la conductivité électrique \uparrow (et donc la mobilité de porteurs de charge, $\mu_e = \frac{\uparrow}{n|q|}$ où q est la charge électronique) et la vitesse de dérive des porteurs de charge V_x suivant la direction 'Ox', correspondant à celle du champ électrique. En effet ces deux grandeurs sont définies par la densité de courant J_x , qui représente le flux de charges dans le semi-conducteur, soit

$$j_x = \uparrow E \tag{III.5}$$

$$j_x = nqV_x \tag{III.6}$$

où la densité de courant s'écrit par rapport à la première anisotropie comme

$$J_x = \frac{8f}{3h^3 m} q \int_0^\infty p^3 f_1(p) dp . \tag{III.7}$$

L'avantage du développement sur les polynômes de Legendre provient de la possibilité d'opérer des troncatures sur le système infini d'équations différentielles. Ces troncatures peuvent se justifier en fonction de la valeur du paramètre pertinent, $R = \frac{eE}{\sqrt{2}mv_t \epsilon_{ac}}$ (voir Eq. II. ???), qui apparaît dans les équations différentielles et qui mesure le poids des effets de dérive induits par le champ électrique par rapport à celui des effets collisionnels.

chapitre3 :RESULTATS NUMERIQUES ET INTERPRETATION

Plus précisément pour un dispositif semi-conducteur donné (défini par le type de semi-conducteur, la densité électronique,...) et pour un champ électrique appliqué à ce dispositif, il résulte un paramètre R bien défini. La méthodologie utilisée est la suivante. On opère une troncature à deux équations et on résout numériquement le problème. On réitère ensuite l'opération avec trois équations, quatre équations, etc, jusqu'à ce que la solution ne varie plus de façon significative. Dans ce cas on peut conclure que le nombre d'équations différentielles final est suffisant pour décrire les propriétés du semi-conducteur défini par le paramètre R .

Pour résoudre le système d'équations différentielles (II. ???) on le réécrit sous la forme d'un système d'équations différentielles du premier ordre couplées. Dans une première tentative on a essayé de résoudre les équations avec des conditions initiales à l'aide de la méthode d'intégration des équations différentielles de Runge-Kutta d'ordre quatre. Nous avons obtenu des solutions qui divergent car les équations à résoudre sont très sensibles aux conditions initiales. Nous avons donc opté pour la deuxième approche qui prend en compte les conditions aux limites. Cette méthode nécessite de discrétiser le problème sur tout le domaine d'intégration. La discrétisation a été effectuée avec les différences finies et le système d'équations algébriques linéaires qui résulte de la discrétisation est résolu par la méthode de Gauss.

II. RESULTATS NUMERIQUES

Nous avons considéré quatre modèles cinétiques qui nous ont permis de décrire la conductivité électrique et la vitesse de dérive pour des champs électriques variant d'une valeur relativement faible ($R \ll 1$) à des valeurs très importantes ($R \gg 1$). Nous allons présenter chaque modèle utilisé ainsi que les résultats obtenus.

1) Modèle à une composante

Ce modèle numérique est celui que l'on utilise le plus dans la littérature car il admet une solution analytique en fonction des intégrales de Fermi [??]. Il consiste à supposer que la partie isotrope de la fonction de distribution est une Fermi-Dirac, soit, $f_0 = f_{FD}$ et on garde seulement la première anisotropie en négligeant donc toutes les autres anisotropies d'ordre supérieur à $n=1$. Il résulte la solution analytique

$$f_1 = -\frac{1}{x} \frac{\partial f_1}{\partial t} - \frac{R}{x} \frac{df_{FD}}{dx}. \quad (\text{III.8})$$

chapitre3 :RESULTATS NUMERIQUES ET INTERPRETATION

où nous rappelons que $x = \frac{\hbar k}{\sqrt{2m}v_t}$ est la vitesse normalisée à la vitesse thermique $v_t = \sqrt{\frac{k_B T}{m}}$,

et f_{FD} est la fonction de distribution de Fermi-Dirac. En utilisant l'équation (III.7) on déduit la densité de courant

$$J_x = -\frac{32f m (k_B T)^2 R}{3h^3} e \int_0^\infty x^2 \frac{df_{FD}}{dx} dx \quad (III.9)$$

On peut alors calculer l'expression de la conductivité électrique à partir de l'équation (III.5)

$$\dagger = -\frac{32f \sqrt{m} (k_B T)^{3/2} e^2}{3\sqrt{2} h^3 \epsilon_{ac}} \int_0^\infty x^2 \frac{df_{FD}}{dx} dx \quad (III.10)$$

Cette conductivité électrique n'est valable que pour des systèmes très proches de l'équilibre thermodynamique car on a supposé que f_0 est la fonction de distribution de Fermi-Dirac. Nous notons également qu'elle ne dépend pas du champ électrique et elle fournit une relation linéaire entre la densité de courant et le champ électrique.

Notre exemple numérique est celui du silicium à température ambiante, $T = 300K$. On a pris une valeur typique de la masse effective des électrons dans le silicium, $m \approx 2.91510^{-31} kg$, utilisée plus haut pour le calcul des potentiels chimiques (tableau I). La valeur de la densité des électrons de

conduction utilisée est, $n = 10^{15} cm^{-3}$. Si on considère la fréquence de collision $\epsilon_{ac} = A_{ac} \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}$

dont on rappelle l'expression

$$\epsilon_{ac} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m} \frac{m^2 v_{ac}^2 k_B T}{f \hbar^4 \dots}} \quad (III.11)$$

et dont les valeurs typiques des paramètres physiques pour le silicium sont

$$\dots = 2330 kg / m^3$$

pour la masse volumique du silicium

$$v_{ac} = 9eV$$

pour le potentiel de déformation et

$$U_{ac} = 9040m / s ,$$

pour la vitesse longitudinale, on obtient

$$\epsilon_{ac} \approx 1.610^{12} s^{-1} .$$

Cependant nous avons plutôt utilisé dans ce travail une fréquence de collision électron-phonon de l'ordre de $\epsilon_{ac} \approx 1.210^{12} s^{-1}$. Cette valeur numérique est obtenue en calculant la conductivité électrique pour des champs électriques faibles du silicium intrinsèque dont la densité des électrons de conduction est $n = 710^9 cm^{-3}$, et en ajustant cette valeur à la valeur expérimentale de la conductivité donnée dans la référence [0]. Avec cette fréquence de collision ajustée nous retrouvons la conductivité expérimentale qui vaut $\uparrow \approx 3.83 10^{-4} \Omega^{-1} m^{-1}$. La conductivité électrique est calculée numériquement par la méthode standard de Simpson.

2) Modèle à deux composantes

A présent on garde la composante isotrope f_0 et la première anisotropie f_1 . Le système d'équation s'écrit en éliminant la fonction isotrope comme,

$$\frac{df_1}{dx} = U, \dots, V = \frac{\partial f_0}{\partial t}; ; W = \frac{\partial f_1}{\partial t} \quad (III.12)$$

$$\frac{dU}{dx} = \frac{3}{ZR^2} W - \frac{3}{R} \frac{dV}{dx} - \frac{2U}{x} + \left(\frac{2}{x^2} + 3xR^2 / Z \right) f_1 + \frac{3R}{Z} \frac{df_{FD}}{dx} \quad (III.13)$$

L'opérateur de collision électron-phonon optique est modélisé par l'opérateur de Krook et l'expression de la fréquence de collision électron-phonon optique normalisée est approximée par $\epsilon_{op} = \epsilon_{ac} / Z$ où Z est un paramètre ajustable qui dépend du type de semi-conducteur considéré. Pour le silicium nous avons calculé la fréquence de collision électron-phonon optique (voir § II. ??)

$$\epsilon_{op} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}} \frac{m^2 v_{op}^2}{2f \hbar^2 \dots \hbar \tilde{S}} \frac{1}{\exp(\hbar \tilde{S} / k_B T)} \quad (III.14)$$

où les valeurs utilisées sont

$$v_{op} = 11.410^{10} eV / m ,$$

pour la constante de couplage optique et

chapitre3 :RESULTATS NUMERIQUES ET INTERPRETATION

$$\hbar\tilde{S} = 0.063 eV,$$

pour l'énergie des photons optiques. Nous avons déduit alors la valeur de Z qui vaut

$$Z = \epsilon_{ac} / \epsilon_{op} \approx 4.24. \quad (\text{III.15})$$

Nous avons résolu ce système d'équations en utilisant la condition triviale à droite, $f_1(\infty) = 0$, et la condition $f_1(0) = 0$, à gauche de l'intervalle d'intégration. Cette dernière condition est due au fait que l'anisotropie dans l'espace des vitesses n'existe que pour des vitesses non nulles. La limite maximum de l'intervalle d'intégration est prise à $x_{\max} = 25$. Nous avons vérifié que lorsqu'on prenait une borne plus grande, le résultat obtenu restait inchangé. Cet intervalle de champ électrique ainsi que les données physiques du problème (fréquence de collision, densité des électrons libres...) sont utilisés dans toute la suite de notre analyse numérique à quelques exceptions près qui seront précisées.

En fixant la densité des électrons (ou bien le potentiel chimique) et le paramètre Z , nous avons résolu numériquement les équations (III.11) et (III.12).

Nous reportons sur les figures III.1 et III.2, la fonction de distribution isotrope $f_1(0) = 0$ en fonction de la variable vitesse normalisée x , pour des champs électriques appliqués très faibles, $R \ll 1$. Cette condition signifie aussi que le gaz d'électrons de conduction est très collisionnel. Deux densités électroniques sont considérées, $n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ et $n = 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ correspondant respectivement à un gaz d'électron classique et dégénéré respectivement. On note que comme il se doit nous retrouvons la Maxwellienne sur la figure III.1. Ceci est dû au fait que le système étant très collisionnel, la fonction de distribution est très proche de la Maxwellienne qui décrit l'équilibre thermodynamique. Sur la figure III.2, nous retrouvons la fonction de distribution de Fermi-Dirac d'un gaz dégénéré qui se caractérise par une forme proche d'une marche d'escalier.

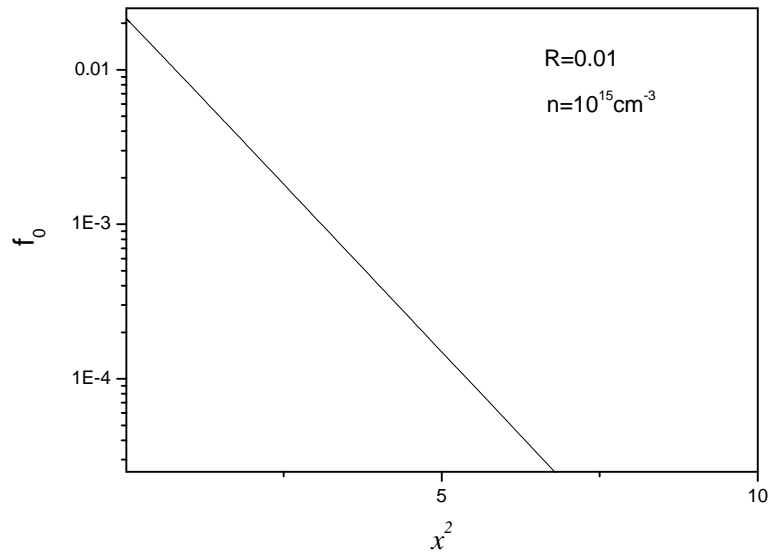


Figure III.1

Composante isotrope de la fonction de distribution f_0 , en fonction du carré de la vitesse adimensionnelle $x = v/\sqrt{2}v_t$.

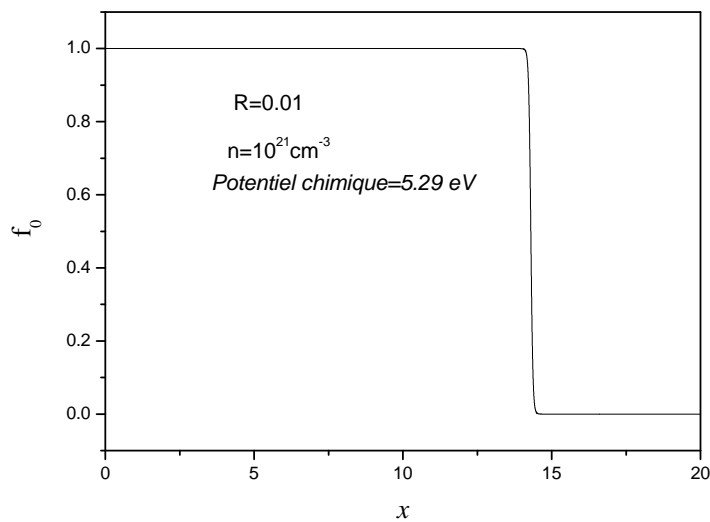


Figure III.2 Composante isotrope de la fonction de distribution f_0 en fonction de la vitesse adimensionnelle $x = v/\sqrt{2}v_t$.

chapitre3 :RESULTATS NUMERIQUES ET INTERPRETATION

Nous donnons sur la figure III.3, la dépendance de la première anisotropie par rapport à la vitesse normalisée. Nous pouvons constater qu'elle passe par un maximum dont la vitesse correspondante correspond aux électrons qui contribuent de façon efficace au transport de charge. La valeur du maximum est de plus en plus importante lorsque le système est de plus en plus collisionnel ce qui explique que la conductivité diminue lorsque le champ électrique augmente.

Nous avons aussi calculé la conductivité électrique en fonction du champ électrique E (Fig. III.4). L'intervalle considéré varie du régime champ faible au régime champ intense. Nous avons également reporté le résultat classique obtenu avec le modèle à une équation.

Nous constatons que les deux modèles donnent le même résultat pour des champs relativement faibles. Lorsque R augmente l'écart entre les deux résultats augmente pour atteindre plusieurs ordres de grandeurs. Les effets du champ fort ont tendance à diminuer la conductivité électrique. Les collisions jouent un rôle prépondérant encore plus important ce qui a pour effet de réduire leur mobilité et donc la conductivité électrique. Notons également que dans le régime champ intense, la dépendance de la densité de courant en fonction du champ n'est plus linéaire mais non linéaire.

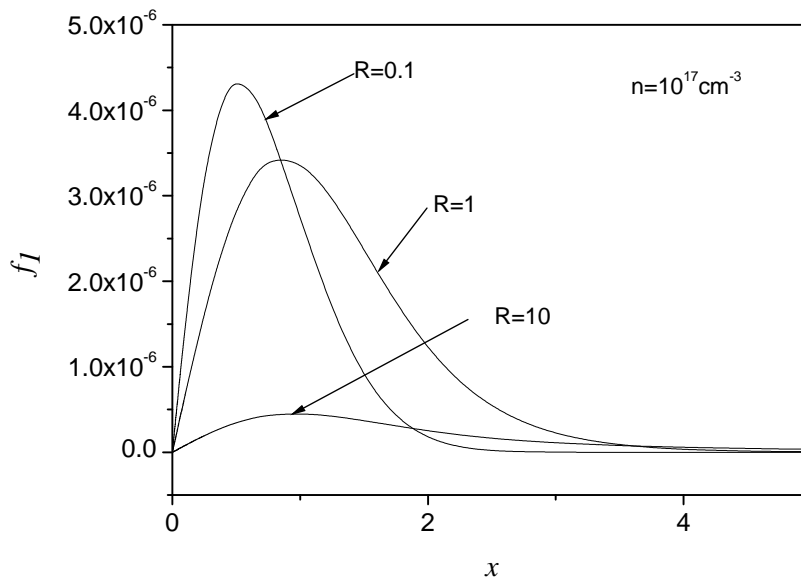


Figure III.3 Première anisotropie de la fonction de distribution f_1 en fonction de la vitesse adimensionnelle $x = v/\sqrt{2}v_t$.

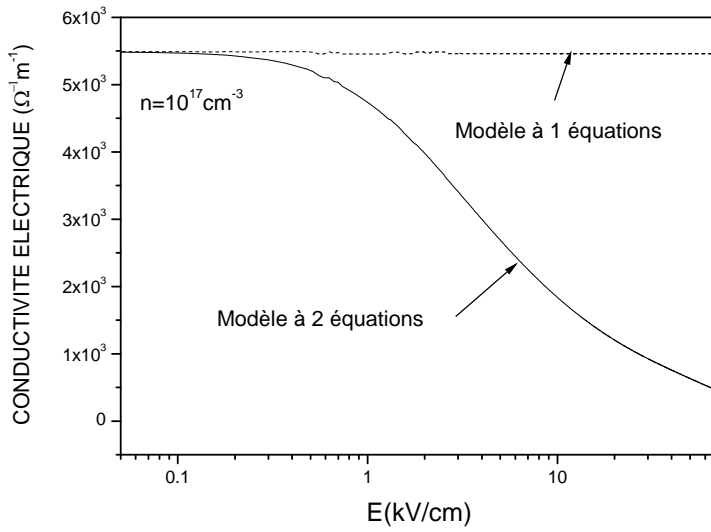


Figure III.4 Conductivité électrique \uparrow en fonction du champ électrique E

3) Modèle à quatre composantes :

On garde dans ce modèle cinétique les quatre premières composantes de la fonction de distribution. Les équations du modèle dans ce cas sont

$$\frac{dU}{dx} = \frac{1}{B_1} \left(B_2 U + B_3 f_1 - \frac{2V}{5} - \frac{6W}{5x} - \frac{df_{FD}}{dx} \right) \quad (\text{III.13})$$

$$\frac{df_1}{dx} = U \quad (\text{III.14})$$

$$\frac{dV}{dx} = \frac{1}{C_1} \left(C_2 V + C_3 W - \frac{2U}{3} + \frac{2f_1}{3x} \right) \quad (\text{III.15})$$

$$\frac{dW}{dx} = V \quad (\text{III.16})$$

où

$$B_1 = -\frac{Z}{3R}, \quad B_2 = -\frac{2Z}{3Rx}, \quad B_3 = -\frac{2Z}{3Rx^2} - Rx, \quad C_1 = -\frac{9Z}{35Rx}, \quad C_2 = \frac{9Z}{35Rx^2} \quad \text{et}$$

$$C_3 = -\frac{36Z}{35Rx^3} - Rx.$$

chapitre3 :RESULTATS NUMERIQUES ET INTERPRETATION

Les conditions aux limites utilisées sont

$$f_1(0) = 0, W(0) = 0, U(\infty) = 0, \text{ et, } V(\infty) = 0.$$

En résolvant numériquement ce système d'équation nous avons calculé la conductivité électrique. Ce résultat est représenté sur la figure III.5. La conductivité électrique obtenue à partir d'un système à deux équations est également représentée. Nous pouvons constater que les deux résultats sont très proches pour des champs électriques relativement faibles ($R \ll I$). En revanche lorsque le champ électrique augmente un écart significatif apparaît entre les deux conductivités. La prise en compte d'équations supplémentaires a tendance à réduire davantage la conductivité parce que des termes d'ordres supérieurs en champ sont ainsi pris en considération. Ces derniers vont contribuer à rendre plus efficace le rôle du champ électrique qui va réduire la conductivité par un effet non linéaire. Ce résultat nous impose d'aller plus loin en gardant plus d'équations dans notre modèle.

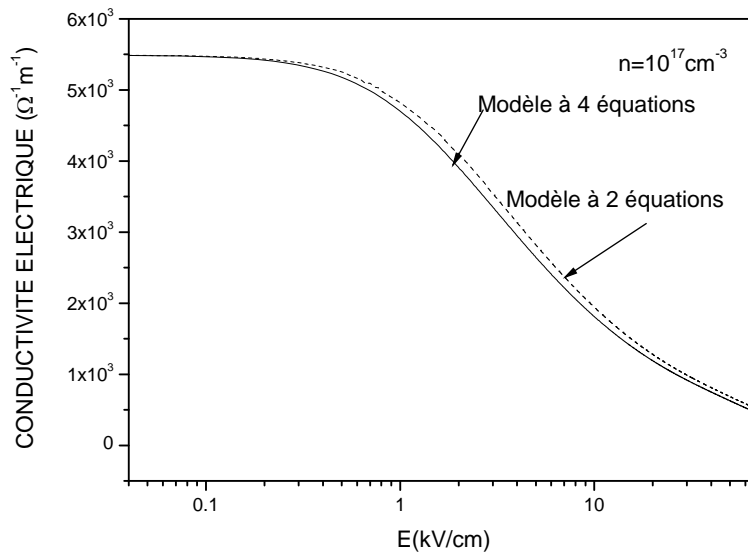


Figure III.5

Conductivité électrique † en fonction du champ électrique E pour les modèles cinétiques à deux et quatre équations

4) Modèle à six composantes

Dans ce paragraphe on garde la composante isotrope f_0 et les cinq premières composantes anisotropes $f_1 - f_5$. Après quelques manipulations mathématiques le système d'équations correspondant s'écrit sous la forme

$$\frac{df_1}{dx} = U \quad (\text{III.17})$$

$$\frac{df_4}{dx} = V \quad (\text{III.18})$$

$$\frac{dU}{dx} = -\frac{2}{x}U + \left(\frac{2}{x^2} + \frac{3x}{ZR^2}\right)f_1 - \frac{6}{ZRx}f_2 + \frac{24}{27ZR}V + \frac{120}{27ZRx}f_4 - \frac{2}{ZR^2}xf_3 - \frac{3}{ZR}\frac{df_{FD}}{dx} \quad (\text{III.19})$$

$$\frac{df_2}{dx} = \frac{2}{x}f_2 - \frac{20}{27}V - \frac{100}{27x}f_4 + \frac{5}{3R}xf_3 \quad (\text{III.20})$$

$$\frac{df_3}{dx} = -\frac{14}{9}U + \frac{14}{9x}f_1 - \frac{4}{x}f_3 + \frac{7}{3R}xf_2 \quad (\text{III.21})$$

$$\frac{dV}{dx} = \frac{616x}{75R}U - \frac{616}{75R}f_1 - \frac{308x^2}{25R^2}f_2 + \frac{4884}{175R}f_3 - \frac{1}{x}V + \left(\frac{16}{x^2} + \frac{99x^2}{25R^2}\right)f_4 \quad (\text{III.22})$$

Et les conditions aux limites utilisées sont

$$f_1(0) = 0$$

$$f_2(0) = 0$$

$$f_4(0) = 0$$

$$f_5(\infty) = 0$$

$$U(\infty) = 0$$

$$V(\infty) = 0.$$

Nous avons reporté sur la figure III.6 la conductivité électrique calculée numériquement. Nous pouvons observer que les courbes calculées à partir des modèles à quatre équations et à six équations sont quasiment superposées. Pour bien vérifier ce résultat nous avons fait un zoom sur un intervalle de champ électrique très faible comme l'indique la figure III.7. On peut effectivement noter que l'écart entre les modèles à quatre et à six équations est parfaitement négligeable. Nous pouvons conclure par conséquent que nous avons atteint la bonne précision désirée pour calculer la densité de courant ainsi

chapitre3 :RESULTATS NUMERIQUES ET INTERPRETATION

que la conductivité et la vitesse de dérive des électrons de conduction d'un semi-conducteur de silicium. Il est probablement nécessaire pour chaque semi-conducteur défini par sa nature et son dopage de refaire à chaque fois une analyse numérique semblable pour calculer ses propriétés de conduction.

Nous avons complété l'analyse du problème en calculant la vitesse de dérive des porteurs de charges en fonction du champ électrique. Cette analyse a été effectuée avec les trois modèles cinétiques et les résultats obtenus sont représentés sur la figure III.8.

Les conclusions obtenues concernant le nombre d'équations requis pour décrire correctement la conductivité électrique restent valables pour la vitesse de dérive. Plus clairement on calcule de façon très précise la vitesse de dérive à partir d'un système à six équations comprenant les six premières composantes de la fonction de distribution développée sur la base des polynômes de Legendre. Par contre la dépendance de la vitesse de dérive par rapport au champ électrique est différente comme le montrent les figures III.6 et III.8. En effet pour des champs électriques relativement faibles ($R \ll I$) la dépendance par rapport à E est linéaire jusqu'à $E \approx 10^{-1} kV / cm$. Au delà de cette limite la vitesse a tendance à croître moins rapidement qu'une croissance linéaire jusqu'à une valeur de l'ordre de $E_{\max} \approx 45 kV / cm$. Pour des champs électriques encore plus intenses, la vitesse de dérive sature à une valeur constante de l'ordre de $V_x \approx 1.9 \cdot 10^7 cm / s$. Ceci peut s'expliquer comme suit. Le champ électrique a tendance à accélérer les électrons libres. Plus il est intense et plus leur vitesse est importante (ils gagnent plus d'énergie). D'un autre côté lorsque le champ électrique est important la fréquence de collision devient plus importante et cela a pour effet de freiner les électrons. Ces deux effets physiques s'annihilent et cela conduit donc à une saturation de la vitesse de dérive des électrons.

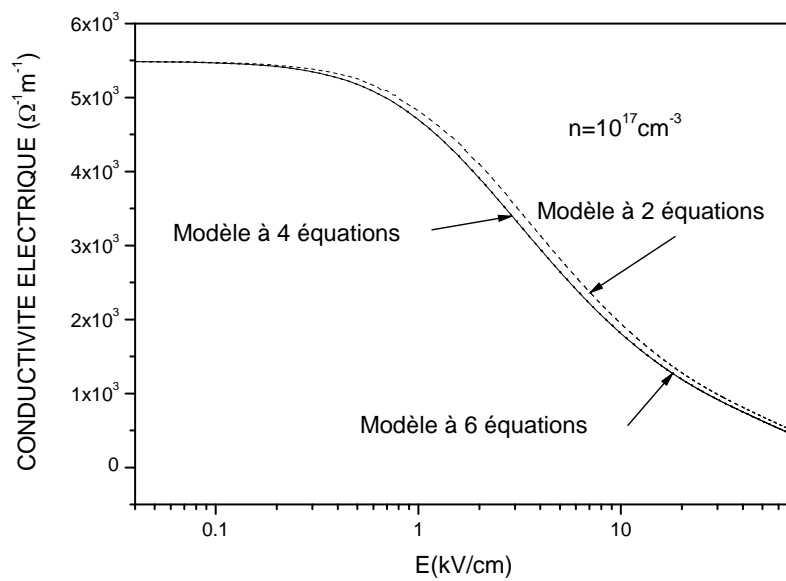


Figure III.6 Conductivité électrique \uparrow en fonction du champ électrique E pour les modèles

cinétiques à deux équations (trait en pointillé), à quatre équations (trait plein) et à six équations (trait en tiret).

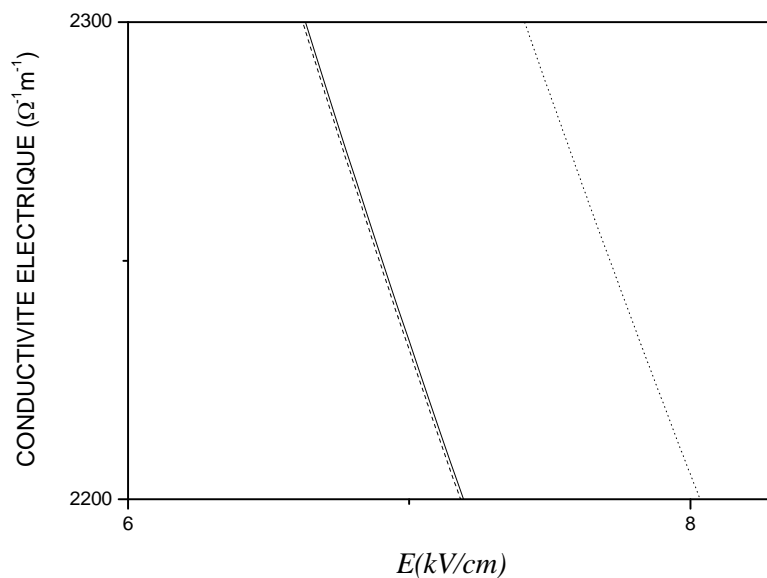


Figure III.7 Même résultats que ceux de la figure III.6 représentés sur un intervalle de champ électrique plus réduit

5) Effet de la dégénérescence sur le transport de charge

On va étudier à présent, en utilisant le modèle à 6 équations, l'effet de la dégénérescence sur la conductivité électrique et la vitesse de dérive dans les semi-conducteurs. Pour cela on considère deux densités électroniques $n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ et $n = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Ces deux densités correspondent à deux potentiels chimiques que sont $\sim_c = -0.218 \text{ eV}$ et $\sim_c = 0.04 \text{ eV}$ respectivement. Dans le premier cas les électrons sont non dégénérés tandis que dans le deuxième, les effets de dégénérescence quantique sont significatifs. Nous rappelons que les effets de dégénérescence sont mesurés par le rapport $\eta = T_F / T$, de la température de Fermi T_F à la température ambiante T , du dispositif à semi-conducteur. La température de Fermi est définie par la densité des porteurs de charges par l'expression

$$k_B T_F = \frac{[\hbar(3f^2 n)^{1/3}]^2}{2m} \quad (\text{III.23})$$

Le système est classique (non dégénéré) lorsque $\eta \ll 1$ et il est partiellement ou fortement dégénéré lorsque $\eta \geq 1$. Par conséquent plus la densité est importante plus le système est dégénéré.

Nous avons représenté sur les figures III.9 la conductivité. Nous pouvons noter que lorsque la densité augmente la conductivité électrique augmente fortement. On peut observer entre les deux cas, quatre ordres de grandeur de différence pour la conductivité. Cette dépendance peut se scinder en deux contributions. La première est liée à la densité des porteurs de charges et la deuxième aux effets de dégénérescence des électrons. Pour des champs électriques faibles nous trouvons pour la conductivité électrique

$$\dagger (n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}) = 54.92 \Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$$

et

$$\dagger (n = 10^{19} \text{ cm}^{-3}) = 434725.6 \Omega^{-1} \text{ m}^{-1}.$$

Comparons nos résultats à l'expression de la conductivité des métaux (systèmes complètement dégénérés) qui peut s'écrire approximativement comme

$$\dagger = \frac{ne^2}{m \langle \epsilon_{coll} \rangle} \quad (\text{III.24})$$

chapitre3 :RESULTATS NUMERIQUES ET INTERPRETATION

où $\langle \epsilon_{coll} \rangle$ est une fréquence de collision moyenne. On note que cette loi est vérifiée en ordre de grandeur et donc la conductivité des semi-conducteurs est proportionnelle à la densité comme dans la formule (III.24). Cette tendance se confirme pour le calcul de la vitesse de dérive dans la figure III.10. Etant donné que $V_x \propto \dagger / n$, la dépendance de la vitesse de dérive par rapport à la densité est relativement faible. Nous avons évalué numériquement la fréquence moyenne dans l'expression (III.24) dont la valeur est de l'ordre de

$$\langle \epsilon_{coll} \rangle \approx 1.9510^{13} s^{-1} \quad (III.25)$$

L'équation (III.24) s'écrit alors

$$\dagger = \frac{510^{-14} ne^2}{m} \quad (III.26)$$

Cette expression (III.26) est un ajustement numérique de la conductivité électrique du silicium à température normale pour des champs électriques faibles et des densités de porteurs de charge supérieures à $n \approx 10^{19} cm^{-3}$. Pour des densités faibles correspondant aux semi-conducteurs faiblement dopés ou intrinsèques, cette loi d'échelle n'est plus valable.

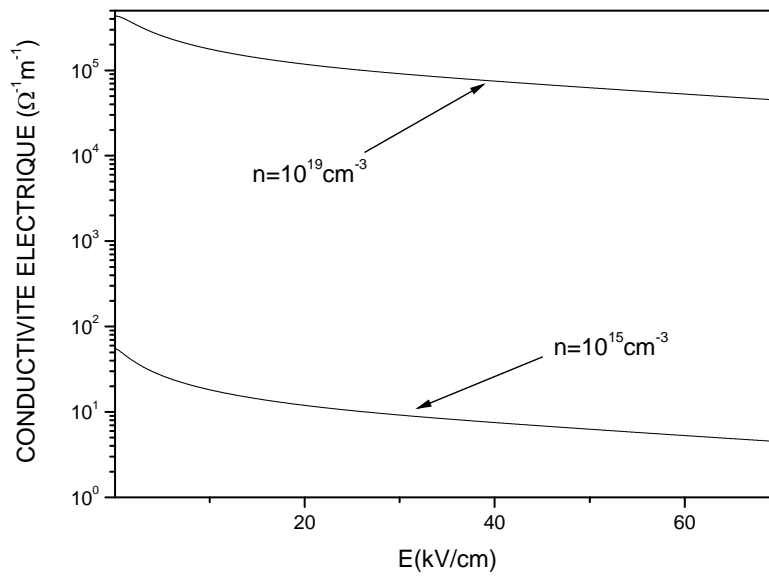


Figure III.9 Conductivité électrique \dagger en fonction du champ électrique E pour deux densités d'électrons de conduction

CONCLUSION

GENERALE

CONCLUSION

GENERALE

CONCLUSION GENERALE

CONCLUSION GENERALE

Dans ce travail, on a utilisé la théorie cinétique pour étudier les propriétés de transport de charge dans des cristaux de silicium intrinsèque ou extrinsèque soumis à des champs électriques d'intensité arbitraire. Ainsi on a pu étudier ces propriétés du régime linéaire au régime fortement non linéaire en champ électrique.

Dans une première étape, à partir de l'équation de Boltzmann on a développé un modèle d'équations cinétiques. Ce modèle prend en compte les principales interactions des électrons de la bande de conduction avec le réseau que sont les interactions électron-phonon. Si les interactions des électrons avec les phonons acoustiques (interactions élastiques) sont décrites avec les opérateurs exacts, en revanche les interactions des électrons avec les phonons optiques (interactions inélastiques) sont modélisées par un opérateur de relaxation du type Krook [1-3]. Pour résoudre de façon plus aisée l'équation de Boltzmann semi-classique qui est une équation aux dérivées partielles, on l'a développé sur la base des polynômes de Legendre. Cette approche permet de transformer cette équation en une infinité d'équations couplées. Une procédure de troncature permet *in fine* d'obtenir un système d'équations différentielles couplées qui sont nettement plus aisées à résoudre numériquement que l'équation de Boltzmann sous sa forme générale.

La résolution numérique de ce système d'équations a été exécutée avec la méthode des différences finies en considérant le problème avec des conditions aux limites. Cette méthode s'est avérée très performante dans la mesure où la convergence de l'algorithme utilisé est très rapide. Nous avons également vérifié que les méthodes qui utilisent les conditions initiales telles que celles de Runge-Kutta ne convergeaient pas. Par ailleurs un deuxième code numérique qui calcule le potentiel chimique de la fonction de distribution de Fermi-Dirac connaissant la température et la densité électronique des électrons de conduction, a été mis en œuvre en utilisant la méthode itérative.

Les principaux résultats obtenus concernent le calcul de la conductivité en fonction du champ électrique appliqué au semi-conducteur. Nous avons retrouvé les lois linéaires habituelles caractérisées par une conductivité constante et une vitesse de dérive linéaire par rapport au champ. Typiquement à partir des intensités du champ électrique au-delà de 1 kV/cm , les effets non linéaires du champ se font sentir. Ils vont réduire de façon importante la conductivité électrique et réduire la croissance linéaire de la vitesse de dérive pour la faire tendre vers un plateau de saturation. Ces résultats ont nécessité de garder six composantes de la fonction de distribution sur la base des polynômes de Legendre.

CONCLUSION GENERALE

Ce travail a permis d'ouvrir quelques perspectives théoriques en particulier l'étude d'un semi-conducteur caractérisé par une bande de conduction ellipsoïdale (approximation de Kane) et une bande de conduction complète en 3D. Notre modèle peut aussi être amélioré par la prise en compte rigoureuse de toutes les interactions des électrons de conduction avec le réseau dont notamment des interactions électron-phonon optique exactes et des interactions électron-impureté

Résumé :

Dans ce travail, on a développé un modèle théorique basé sur l'équation de Boltzmann semi-classique qui prend en compte la diffusion des électrons de conduction avec les phonons acoustique et optique du réseau cristallin. La particularité du modèle est que cette équation est développée sur la base de polynôme de Legendre.

La résolution numérique de l'équation de Boltzmann mène au calcul de la conductivité électrique en fonction de champ électrique appliqué au dispositif. La résolution numérique des équations du modèle revient à résoudre un système d'équations différentielles couplées avec des conditions limites.

Mots clés :

L'équation de Boltzmann semi-classique, phonon acoustique, phonon optique, la conductivité électrique.

Abstract :

In this work, we developed a theoretical model based on the semi-classical Boltzmann equation which takes into account the diffusion of the electrons of conduction with the acoustic and optical phonons of the crystal lattice. The peculiarity of the model is that this equation is developed on the basis of Legendre polynomial. The numerical resolution of the Boltzmann equation leads to the calculation of the electrical conductivity as a function of the electric field applied to the device. The numerical resolution of the equations of the model amounts to solving a system of differential equations coupled with boundary conditions.

Keywords:

The semi-classical Boltzmann equation, acoustic phonon, optical phonon, the electrical conductivity.

تلخيص

في هذا العمل وضعنا نموذجا نظريا على اساس معادلة بولتزمان شبه الكلاسيكية التي تأخذ في عين الاعتبار نشر الالكترونات من التوصيل مع الفوتونا الصوتية و الضوئية السمعية من الشبكة الكريستالية خصوصية النموذج هو ان هذه المعادلة وضعت على اساس ليجندر متعدد الحدود ويؤدي الحل العددي لمعادلة بولتزمان الى حساب الناقلية الكهربائية كدالة للمجال الكهربائي المطبق على الجهاز اما الحل العددي لمعادلات النموذج يصل الى حل نظام المعادلات التفاضلية الى جانب شروط الحدود

الكلمات المفتاحية

الناقلية الكهربائية, معادلة بولتزمان شبه الكلاسيكية,

Référence Bibliographique :

- [1] W. V. van Roosbroeck, Bell Syst. Tech. J. **29**, 560-607 (1950); H. K. Gummel,
- [2] Gilles MARTEL, documentation I.D.I.L l'université de rouen, (2003).
- [3] Bernard SAPOVAL. Claudine HERMANN, Copyrigt, Paris, (1990) 117-1131.
- [4] Selvain Reynal et all, école nationale supérieure de l'électronique et de ses applications (2007).
- [5] S. Datta et B. Das, Appel. Phys. Lett, 56 (7) (1990).
- [6] Rachid khilil, Thèse de doctorat, université de Reims Champagne- Ardenne, (2005)
- [7] Francis Lévy, ISBN 2-88074-272-2, EPEL-Ecublens, CH-105 Lausanne, Suisse, (1995).
- [8] (équations de Boltzmane) **THESEDOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE GRENOBLE**(Arrêté ministériel du 30 Mars 1992) de titre :modelisation et simulation tridimensionnelle des composants a semiconducteur de taille submicronique.
- [9] S. F. Liotta and H. Struchtrup, Solid-St. Electron. **44** 95 (2000).
- [10] C. Kittel, *Physique de l'état solide*, Dunod (1998).
- [11] R. L. Liboff, *The Theory of Kinetic Equations*, Wiley and Sons, New York 1969.
- [12] G. Mascali and M. Trovato, Physica A **310**, 121 (2002).
- [13] S Mesbah, K Bendib-Kalache, A Bendib and J P Matte, Phys. Scr. **78**, 025704
- [14] G. Mascali and M. Trovato, Physica A **310**, 121 (2002).
- [15] N. Goldsman, C. Lin, Z. Han, and C. Huang, Superlattices Microstruct. **27**, 159
- [16] M. L. Cohen and J. R. Chelikowsky, *Electronic Structure and Optical*