



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



Département Sciences de la matière

N° de série :.....

Mémoire de fin d'études

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

Spécialité : physique.

Option: physique des matériaux.

Etude théorique du transport dans les semi-conducteurs

Réalisé par : -*BETTAYEB Dounia*
- *ACHOUR Mabrouka*

Dirigé par : Mr. HEMAME Zoubir

Membres de jury :

Président : LEKMINE Farid

Examineur : BOUROUCHA Azeddine

Promotion 2017

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

قال الله تعالى :

﴿ يَرْفَعُ اللَّهُ الَّذِينَ ءَامَنُوا مِنْكُمْ وَالَّذِينَ أُوتُوا

الْعِلْمَ دَرَجَاتٍ ۗ وَاللَّهُ بِمَا تَعْمَلُونَ خَبِيرٌ ۝۱۱ ﴾

سورة المجادلة



Remerciements

Nous tenons tout d'abord à remercier Dieu le tout puissant et miséricordieux, qui nous a donné la force et la patience d'accomplir ce Modeste travail.

Nous tenons à remercier vivement notre promoteur

Mr HEMAME Zoubir pour l'intéressante documentation qu'il a mise à notre disposition, pour ses conseils précieux et pour toutes les commodités et aisances qu'il nous a apportées durant notre étude et réalisation de ce projet.

Nos remerciements aussi les membres de jury Monsieur Lekmine Farid et Monsieur Bouroucha AZzeddined'avoir accepté d'examiner et d'évaluer notre travail.

Nous exprimons également notre gratitude à tous les professeurs et enseignants qui ont collaboré à notre formation depuis notre premier cycle d'étude jusqu'à la fin de notre cycle universitaire.

Sans omettre bien sûr de remercier profondément tous ceux qui ont contribué de près ou de loin pour la réalisation du présent travail.

Dounia et Mabrouka





Dédicace

Je dédie ce modeste travail aux être qui sont les plus chers à mon cœur, à :

Mon très cher père et ma très chère mère qui m'ont guidé depuis mon enfance vers le chemin de savoir, ce n'est que grâce a leur amour, encouragement et leurs prières que j'ai réalisé mes rêves, que Allah les protège et les garde à mes coté.

A ma chère sœur :NASSIMA,

Et mes chers frères: MOHAMMED, IDRIS et OTHMAN,

Toute ma famille.

Tous mes amis et surtout : AMEL , SALIMA.

Ma très chère amie MEBROUKA.

Toute la promotion 2016.

Dounia

Dédicace

Je dédie ce travail à :

*L'esprit de ma mère, qui est resté pur et mourut sur l'installation et que
vous êtes.*

*Mon père, qui a sacrifié sa vie afin de me voir grandir et réussir dans le
parcours de mon éducation, je voulais que tu sois fière de moi, c'était
mon but.*

Mon frère: YACINE,

Mes sœurs: HAFIDHA ,WAHIBA ,SAMIRA,SAÏDA

Ma famille et mes proches

Mes amies: LAÏLA, HESNA,HAÏET et SAMAH,

*A tous ceux et celles qui ont contribué de près et de loin à l'élaboration de ce
travail.*

Mabrouka

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 Bv, ramenée E_v
N_c	Densité d'états équivalente dans la Bc, ramenée E_c
m_p^*	Masse effective des électrons
m_n^*	Masse effective des trous
n	symbole associé 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 = $1/\text{résistivité } \Omega^{-1}m^{-1}$

Tableaux	Titre	N° de page
Tableau III.1:	Densité électronique et potentiel chimique correspondant au silicium	31

oooooooooooooooooooooooooooo

Table Des Matières

Liste des symboles	I
Liste des figures & des tableaux	II
Table Des Matières	IV
<i>Introduction général</i>	01
<i>Chapitre I: Généralités et Propriétés des Semi-conducteur</i>	
I.1 Introduction	03
I.2 Propriétés des semi-conducteurs	03
I.2.1. Structure des semi-conducteurs	04
I.2.2. Bandes d'énergie	04
<i>i)</i> Semi-conducteur de type n	07
<i>ii)</i> Semi-conducteur de type p	08
I.3 Equation de Boltzmann	08
I.3.1. Fonctions de distribution à l'équilibre	08
I.3.2. Propriétés de la fonction de distribution de Fermi-Dirac	09
I.3.3. Fonction de distribution statistique des porteurs de charge dans les semi-conducteurs	10
I.3.4. Semi-conducteur non dégénéré	11
I.3.5. Semi-conducteur dégénéré	13
I.4 Conclusion	14

Chapitre II: Phénomènes de transport dans les solides

II. 1 Introduction	15
II.2 Équation de boltzmann pour le gaz d'électrons	15
II.2. 1. Approximation semi-classique	15
II.2. 2. Fonction de distribution des électrons d'une bande donnée	16
II.2. 3. Equation de Boltzmann	16
II. 3 Intégrale de collision de l'équation de Boltzmann	17
II. 3. 1. Processus de collision	17
II. 3. 2. Intégrale de collision	17
II. 3. 3 Différents mécanismes de collision	17
a) Diffusion par les impuretés	17
b) Diffusion par les vibrations de réseau	19
II.4 Équilibre détaillé	20
II.4. 1. Diffusion par les impuretés	20
II.4. 2 Diffusion par les vibrations de réseau	20
II.5 Approximation du temps de relaxation	21
II.6 Terme de force de l'équation de Boltzmann	21
II. 7 Différents régimes de transport électronique	22
II.7.1 Transport dans le régime stationnaire	22
II.7.2 Transport dans le régime non-stationnaire	23
II.8 Conclusion	23
 <i>Chapitre III: Élaboration & résultats du modèle cinétique</i>	
III. 1 Introduction	24

III.2 Équation cinétique	24
III.2.1 Équation de Boltzmann	24
III. 2. 2. Développement de l'équation de Boltzmann sur la base des polynômes de Legendre	25
III. 2. 3 Termes de collision	26
III.2. 4.Projection l'équation cinétique	27
III.3 Méthodes numériques	29
III.3.1. Calcul du potentiel chimique à partir de l'intégrale de Fermi	29
III.3.2 Méthode de résolution de l'équation de Boltzmann	31
III.4 Résultats numériques	32
III.4.1. Modèle à une composante	33
III.4. 2. Modèle à deux composantes	34
III.4.3.Effet des interactions électron-phonon optique	39
III.5. Conclusion	40
<i>Conclusion générale</i>	41
Référence bibliographique	
<i>Résumé</i>	

INTRODUCTION
GÉNÉRALE

La plupart des semi-conducteurs qu'utilise l'industrie électronique sont des solides. Ces derniers sont importants à cause de leurs propriétés électriques c'est-à-dire les lois qui gouvernent le mouvement des porteurs de charge libre tels que les électrons et les trous. 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 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.

On présente dans le premier chapitre de ce manuscrit le cadre théorique général utilisé, aux rappels sur les semi-conducteurs. Dans un deuxième chapitre on présente le modèle théorique. Notamment un accent particulier a été mis sur l'équation de Boltzmann qui représente l'outil central utilisé dans ce travail. Le troisième chapitre on présente une partie consacrée 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 et une autre partie consacrée à notre contribution au calcul de la conductivité électrique (ou la mobilité électrique).

Chapitre I

Généralités & Propriétés des Semi Conducteurs

I.1 Introduction :

Ce chapitre est consacré à la présentation des propriétés de semi-conducteurs en mettant en évidence notamment les différences physiques entre ces cristaux et les isolants et les conducteurs.

I.2 Propriétés des semi-conducteurs :

Depuis la découverte de l'électricité, on a observé que certains solides sont de bons conducteurs et que d'autres appelés isolants sont de très mauvais conducteurs. Ce qui caractérise la conduction, c'est la conductivité électrique σ qui est un coefficient de transport de charge que nous définirons de façon détaillée dans le chapitre II. Typiquement la conductivité des métaux (bons conducteurs) est de l'ordre $\sigma_{\text{metaux}} \sim 10^6 \sim 10^8 (\Omega^{-1}m^{-1})$ et celle des isolants de l'ordre de $\sigma_{\text{isolant}} \sim 10^{-8} (\Omega^{-1}m^{-1})$. Entre ces deux limites, certains solides présentent une conductivité électrique qui se situe dans l'intervalle, $10^{-8} \Omega^{-1}m^{-1} \leq \sigma \leq 10^6 \Omega^{-1}m^{-1}$, sont appelés semi-conducteurs. Parmi les semi-conducteurs les plus connus et les plus utilisés on cite par exemple, le silicium (Si), le germanium (Ge) et l'arséniure de gallium (AsGa). Dans le tableau périodique ils appartiennent au 4^{ème} groupe. Le semi-conducteur est spécifié par les propriétés suivantes :

- ✓ Dans un semi-conducteur la conductivité augmente avec la température, un semi-conducteur pur est un isolant à $T = 0 K$.
- ✓ Dans les semi-conducteurs dopés la conductivité électrique dépend fortement de la concentration des porteurs.
- ✓ La conductivité électrique varie aussi par irradiation de la lumière, par injection d'électrons ou par contact avec un métal.
- ✓ La conduction peut s'effectuer par des électrons ou des trous comme cela sera exposé plus bas.

Pour définir les cristaux on définit la notion de bande d'énergie [1-2]. Cette notion permet d'obtenir une relation entre l'énergie et l'impulsion de porteurs de charge dans un solide. A titre d'exemple, pour un électron libre cette relation s'écrit :

$$E = \frac{(\hbar k)^2}{2m} \tag{I.1}$$

où $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ est l'impulsion et m est la masse de l'électron.

Dans les solides on utilise la même approximation :

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

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

I.2.1. Structure des semi-conducteurs :

Le désordre de la structure atomique est la caractéristique principale qui fait distinguer un matériau amorphe d'un matériau cristallin il est d'une signification particulier dans les semi-conducteurs.

Dans un cristal parfait. Les atomes sont ordonnés, le réseau est périodique et l'existence de bandes est prédictible grâce au théorème de Bloch les différent type de défaut que l'on peut rencontrer dans cette structure peuvent crée des états discrets dans la bande interdite.

Dans un solide amorphe, l'ordre atomique à grande disparu mais l'existence d'un ordre local préserve l'existence d'une bande de valence et d'une bande de conduction.

Comme le schématise la figure (I.1), la structure peut-être assez désordonnée avec des liaisons de longueur et d'angle variables. Ce désordre et ces distorsions d'angles entre les liaisons sont de l'apparition queue de bande de conduction et d'une queue de bande de valence dans la bande interdite du matériau [3].

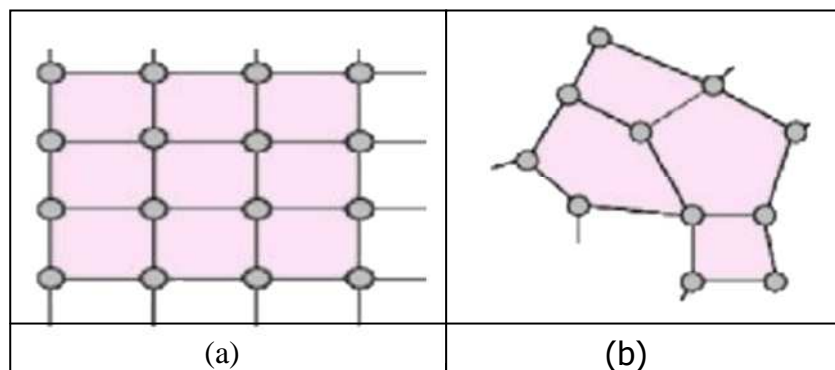


Figure I.1 : Vue schématique de l'arrangement atomique dans un structure (a) cristallin, (b) amorphe.

I.2.2. Bandes d'énergie :

Les bandes dans les solides peuvent être complètement remplies partiellement, ou vides. La bande d'énergie la plus élevée est occupée par les électrons de valence et la bande immédiatement supérieure détermine les propriétés conductrices du solide cristallin. Si la bande contenant les électrons de valence est remplie, elle est dite bande

de valence, et la bande supérieure immédiatement voisine est la bande de conduction. Un bon conducteur possède soit une bande de conduction bien peuplée soit sa bande de valence recouvre la bande supérieure immédiatement voisine. Dans ces cas, il est facile d'élever un électron de valence à un niveau d'énergie plus élevé, et ces électrons peuvent facilement acquérir de l'énergie d'un champ électrique pour participer à la conduction électrique. Dans le cas d'un isolant, la bande de valence est complètement remplie, et le gap jusqu'à la bande de conduction est important. Les électrons ne peuvent pas acquérir de l'énergie d'un champ électrique et ne peuvent pas, par conséquent, participer à la conduction. Certains matériaux ont des bandes de valence complètement remplies, comme un isolant, mais le gap jusqu'à la bande de conduction n'est pas très important. Ces matériaux sont des semi-conducteurs.

Dans le diagramme de bande de la figure (I-2) la distance inter atomique est représentée graphiquement à l'encontre de l'énergie d'électrons. Le diagramme de bande montre que lorsque les atomes du même élément sont infiniment éloignés les uns des autres, ils ont les mêmes niveaux d'énergie. Toutefois, lorsque les atomes sont rapprochés, les électrons de chaque atome s'interagissent, et les niveaux d'énergies discrètes divergentes dans une bande d'énergie autorisée représentée par la partie grise du graphique de la figure (I-2).

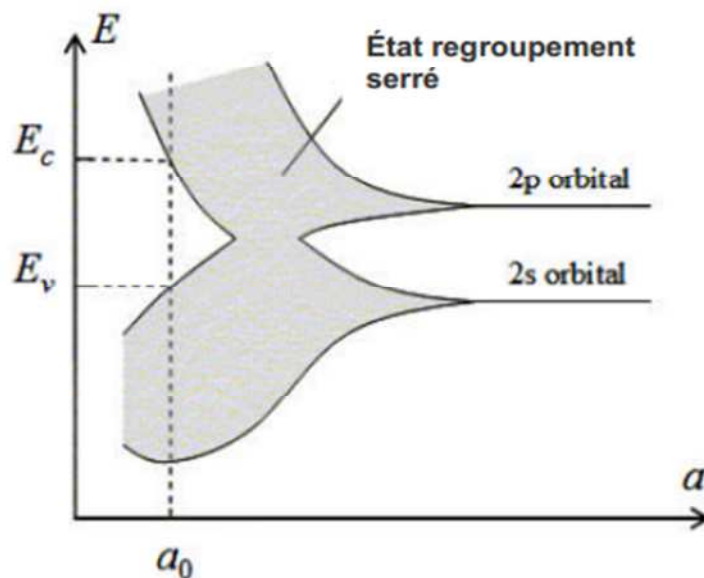


Figure I.2 : Distance inter atomique représentée graphiquement contre l'énergie, pour montrer la formation des bandes d'énergie dans un matériau [4].

Pour définir ces solides semi-conducteurs on donne sur la figure (I-3), le schéma des bandes d'énergie des isolants, des semi-conducteurs et des métaux. Nous pouvons constater que les semi-conducteurs et les isolants présentent une bande d'énergie interdite (appelée aussi gap) entre la bande de valence qui contient les électrons liés et la bande de conduction qui contient les électrons non liés appelés usuellement électrons de conduction. Les métaux de part leur structure présentent une forte population d'électrons de conduction dont la densité est de l'ordre de $n \sim 10^{22} \text{ cm}^{-3}, 10^{23} \text{ cm}^{-3}$. Ces électrons assurent une bonne conduction électrique comme indiqué plus haut. Les isolants ont une bande de conduction vide et un gap d'énergie très important supérieur à 4 eV qui ne permet pas aux électrons de valence de transiter vers la bande de conduction sous l'effet d'une excitation thermique. Les semi-conducteurs ont une population d'électrons de conduction très faible à température ambiante (300 K). Elle est de l'ordre de $n \sim 10^{10} \text{ cm}^{-3}$. Cette densité ne permet pas d'avoir une conductivité électrique suffisante (de l'ordre de $\sigma \sim 10^{-4} \Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$) pour que ces solides soient utilisés dans les circuits électroniques. Typiquement leur gap d'énergie est de l'ordre de l'électronvolt. On prend l'exemple du silicium, qui est un atome quadrivalent. Il est en liaison avec 4 atomes voisins avec des liaisons covalentes, de telle sorte que la couche externe est saturée par 8 électrons. A $T = 0 \text{ K}$, tous les électrons participent à la liaison, et le semi-conducteur se comporte comme un isolant. A $T \neq 0 \text{ K}$ les électrons de valence sont excités thermiquement et ils deviennent quasi-libres en rompant le lien avec la liaison. Il laisse un trou dans la liaison, on a créé ainsi un électron libre et un trou. Dans le cas général la densité des électrons quasi-libres est égale à celle des trous. En réalité il existe deux mécanismes physiques responsables de l'équilibre, d'une part l'ionisation (création d'une paire électron-trou), et d'autre part la recombinaison. Ces semi-conducteurs purs sont aussi appelés semi-conducteurs intrinsèques.

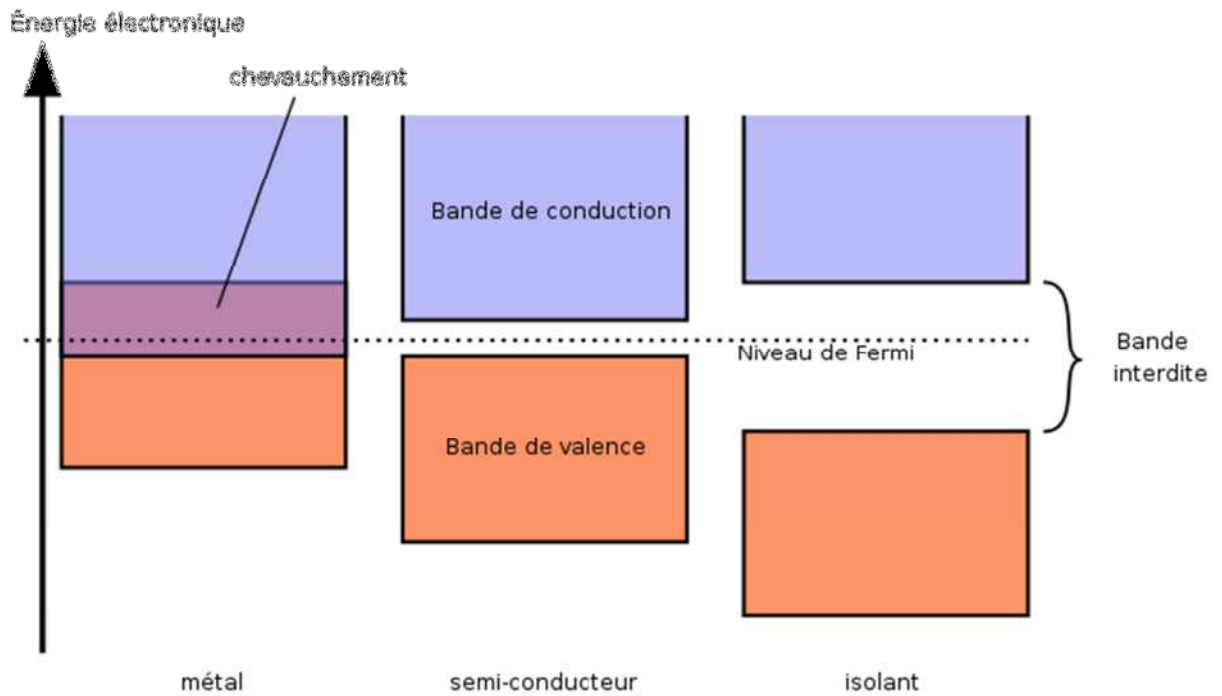


Figure I.3: Schéma théorique des bandes d'énergie des métaux, des semi-conducteurs et des isolants.

Pour transformer ces cristaux semi-conducteurs en bons conducteurs, la méthode utilisée est le dopage par des atomes qui vont peupler la bande de conduction. Suivant le dopage utilisé la densité des électrons de conduction peut varier de $n \sim 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ à $n \sim 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ où plus. Dans ces conditions physiques le semi-conducteur peut être utilisé comme composant électronique. En fait le semi-conducteur peut être dopé n ou p , soit par un apport d'électrons de conduction (dopage n) ou un défaut d'électrons de valence (dopage p) ou un apport de trous. Ces semi-conducteurs dopés sont appelés semi-conducteurs extrinsèques. A titre d'exemple on donne ci-dessous deux cas de semi-conducteurs dopés n et p respectivement.

i) Semi-conducteur de type n :

Les dopants de type -n sont également connus comme donneurs, car ils sont des éléments ou des composés avec cinq électrons de valence ou plus qui donneront un électron après que les quatre autres forment des liaisons covalentes avec le matériau intrinsèque dans lequel ils ont été placés. Au totale la densité des électrons libres est nettement supérieure a celle des trous ($n \gg p$), et les porteur majoritaires sont par conséquent les électrons.

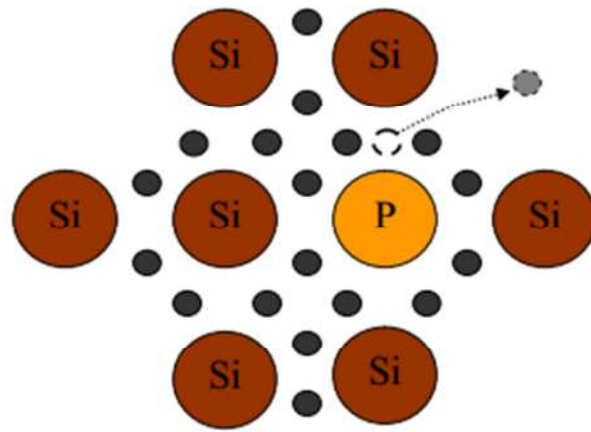


Figure I.4: Dopage d'un monocristal de silicium par un atome de phosphore, dopage donneur de type-n [9], [11].

ii) Semi-conducteur de type p :

Les dopants de type p sont des éléments ou des composés ayant trois ou moins d'électrons de valence et acceptent des électrons, forment des liaisons covalentes avec quatre ou plusieurs de leurs cinq trous. Les matériaux de type-p ont des trous comme porteurs majoritaires et des électrons comme porteurs minoritaires. On dit dans ce cas que la conduction se fait par les trous et que le semi-conducteur est de type p ($p \gg n$).

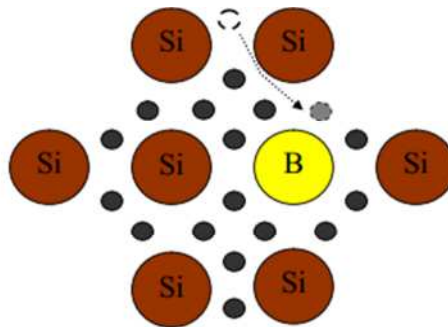


Figure I.5: Dopage d'un monocristal de silicium par un atome de Bore, dopage accepteur de type-P [9], [11].

I.3 Équation de Boltzmann :

I.3.1. Fonctions de distribution à l'équilibre :

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

$$D(\varepsilon) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon}. \quad (\text{I.3})$$

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 :

$$n = \int_0^{\mu_c} D(\varepsilon) d\varepsilon \quad (\text{I.4})$$

Où μ_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 ε , 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 [5] :

$$f_{FD}(\varepsilon) = \left[1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_c}{k_B T} \right) \right]^{-1} \quad (\text{I.5})$$

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

$$n = \int_0^{\infty} D(\varepsilon) f_{FD} d\varepsilon \quad (\text{I.6})$$

I.3.2. Propriétés de la fonction de distribution de Fermi-Dirac :

La fonction $f_{FD}(\varepsilon)$ dépend de la différence d'énergie $\varepsilon - \mu_c$ 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 ε_V . La fonction (I.5) ne peut prendre que des valeurs entre 1 et 0, soit :

$$0 \leq f_{FD}(\varepsilon) \leq 1.$$

En particulier :

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

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

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

A : $T > 0K$, le comportement de $f_{FD}(\varepsilon)$ est semblable mais la croissance de la fonction au voisinage de μ_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.

I.3.3. 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 $\Delta\varepsilon$ au moins supérieure à la largeur de bande interdite ε_g (énergie de gap).

Dans un semi-conducteur ε_g est de l'ordre de l'électronvolt:

$$k_B T \ll \varepsilon_g = \varepsilon_c - \varepsilon_v.$$

Puisque $\mu_c > \varepsilon_v$ et $\mu_c < \varepsilon_c$, pour des valeurs ε dans la bande valence et de conduction l'inégalité :

$$|\varepsilon - \mu_c| \gg 2k_B T \quad (I.7)$$

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

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

La fonction de Fermi-Dirac est donc bien représentée par un facteur de Boltzmann, pour pourvu qu'on s'intéresse à des niveaux 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 ε et $\varepsilon + d\varepsilon$ est la fonction de distribution statistique des trous :

$$f_p(\varepsilon) = 1 - f_n(\varepsilon) = 1 - f_{FD}(\varepsilon) \quad (I.9)$$

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

En particulier, dans la bande de valence sous la condition $\mu_c - \varepsilon \gg k_B T$,

$$f_p(\varepsilon) = 1 - \left[1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_c}{k_B T}\right) \right]^{-1} \approx \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_c}{k_B T}\right) \sim \exp\left(-\frac{|\varepsilon|}{k_B T}\right) \quad (I.10)$$

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

I.3.4. Semi-conducteur non dégénéré :

Un semi-conducteur non dégénéré est tel que son niveau de Fermi est dans la bande d'énergie interdite, relativement éloigné des bords de la bande de valence et de conduction. Pour les états d'énergie occupés par les électrons dans la bande de conduction et par des trous dans la bande de valence, la relation (I.7) est vérifiée.

Pratiquement la probabilité d'occupation par les électrons, d'états de la bande de conduction et pour les trous, d'états de la bande de valence est petite par rapport à 1. La densité de porteurs de charge dans un semi-conducteur non dégénéré est donc petite. Dans cette situation, seul un petit nombre d'états sont occupés par les électrons, au fond de la bande de conduction. Pour cette portion de la bande, une approximation parabolique est acceptable (Eq. I.2). Le cas des trous au sommet de la bande de valence est semblable. A l'aide des masses effectives de densité d'états m_n^* et m_p^* , on écrit respectivement pour les bandes de conduction et de valence :

$$\rho_c(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_n^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E - E_c)^{\frac{1}{2}} \quad E > E_c \quad (\text{I.11})$$

$$\rho_v(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_p^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E_v - E)^{\frac{1}{2}} \quad E < E_c \quad (\text{I.12})$$

Selon (I.6), l'intégrale sur la bande de conduction de la densité d'état $\rho_c(E)$ multipliée par la fonction de distribution $f_n(E)$ donne le nombre volumique d'électrons dans la bande de conduction :

$$n = \int_{E_c}^{\infty} \rho_c(E) f_n(E) dE$$

$$n = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{K_B T}\right) \quad (\text{I.13})$$

Où N_c est la densité d'états effective de la bande de conduction :

$$N_c = \frac{V}{4} \left(\frac{2m_n^* K_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (\text{I.14})$$

De même, la densité de trous dans la bande de valence s'écrit :

$$p = N_v \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{K_B T}\right) \quad (\text{I.15})$$

$$N_v = \frac{V}{4} \left(\frac{2m_p^* K_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (\text{I.16})$$

Les expressions respectivement (I.13) et (I.15) pour les nombres volumiques n et p sont des relations entre les densités et l'énergie du niveau de Fermi E_F qui, à ce stade, n'est pas connue. Les densités d'états effectives N_c et N_v sont des grandeurs qui ne dépendent, à une température T donnée, que des paramètres de bande, à savoir les masses effectives de densité d'états m_n^* et m_p^* .

I.3.5. Semi-conducteur dégénéré :

La fonction de distribution de Fermi-Dirac ne peut pas dans ce cas être approchée par la fonction de Maxwell-Boltzmann. Le gaz de porteurs de charge est alors proche de la dégénérescence. Si la densité des porteurs de charge augmente à tel point que le niveau de Fermi atteint la bande de conduction, l'approximation de la non-dégénérescence n'est plus valable, car l'inégalité (I.13) n'est plus satisfaite et la fonction de distribution de Fermi-Dirac ne peut plus être remplacée par un facteur de Boltzmann dans les intégrales (I.13) et (I.15). Il faut alors effectuer le calcul exact des intégrales de Fermi dans l'expression :

$$n = \int_{E_C}^{\infty} \rho_c(E) f_n(E) dE \quad (\text{I.17})$$

Plusieurs expressions analytiques ont été établies sur la base de tables des intégrales de Fermi. Par exemple, le cas fortement dégénéré où $E_C - E_F < K_B T$ conduit à une approximation de la forme :

$$n = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} N_c \left(\frac{E_F - E_C}{K_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{K_B T}{E_F - E_C} \right)^2 + \dots \right] \quad (\text{I.18})$$

Qui correspond à la forme développée par Sommerfeld pour le gaz d'électrons. Par rapport au semi-conducteur non dégénéré dans lequel les densités des porteurs de charge augmentent exponentiellement en fonction de la température, la dégénérescence produit une croissance de n moins rapide.

Pour un semi-conducteur, en général $E_F - E_C < 0$; c'est le cas non dégénéré standard caractérisé par la croissance exponentielle de la densité de porteurs. Lorsque $E_F - E_C = 0$, le niveau de Fermi coïncide avec le minimum de la bande de conduction et selon l'expression (I.14) $n = N_c$. La densité de porteurs est pratiquement égale à la densité d'état effective de la bande de conduction. La dégénérescence s'accroît avec $E_F - E_C > 0$, lorsque le niveau de Fermi pénètre dans la bande de conduction. Le domaine de dégénérescence d'un semi-conducteur correspond à l'intervalle d'énergie de $\pm 2K_B T$ autour de E_F dans lequel la fonction de distribution de Fermi est sensiblement différente de la fonction de distribution classique. Un ordre de grandeur pour les densités de porteurs conduisant à la dégénérescence est environ $n \sim 10^{19} \text{ cm}^{-3}$.

I.4 Conclusion :

Dans ce chapitre on a rappelé la définition d'un semi-conducteur en se basant sur la théorie des bandes d'énergie. La comparaison avec les métaux et les semi-conducteurs a permis de montrer que ces matériaux remplissent leur bande de conduction avec des excitations thermiques pour les semi-conducteurs intrinsèques et par dopage pour les semi-conducteurs extrinsèques.

Chapitre II

Phénomènes de transport dans les solides

II. 1 Introduction :

L'équation de Boltzmann est au cœur de la théorie semi-classique du transport électronique dans les solides [3-7]. La théorie cinétique des gaz est fondée sur l'équation de Boltzmann. L'écriture d'une équation de Boltzmann pour les électrons dans les solides repose sur le modèle semi-classique dans lequel chaque électron est décrit par sa position \vec{r} , son vecteur d'onde \vec{k} , et son indice de bande n . On s'intéresse à la fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ des électrons dans une bande donnée. Le terme de collision est formulé de manière appropriée par rapport aux différents mécanismes de collision que subissent les électrons dans le semi-conducteur. Les collisions électroniques les plus importantes sont les collisions électron-phonon (c'est-à-dire l'interaction avec les vibrations de réseau) et les collisions électron-impureté. Il est possible dans certains cas de les décrire en utilisant l'approximation du temps de relaxation. A partir de l'équation de transport de Boltzmann, il est possible de calculer les coefficients de transport du gaz d'électrons dans les métaux et les semi-conducteurs. Notons que cette équation ne peut pas en revanche calculer les propriétés de transport des matériaux nanométriques lorsque les effets quantiques deviennent dominants. Dans ce cas on a recours à des formalismes basés sur l'équation de Schrödinger et sur l'équation de Wigner [8-11].

II.2 Équation de Boltzmann pour le gaz d'électrons :

Le gaz d'électrons dans les solides est un gaz quantique. Les états électroniques (états de Bloch) sont repérés par un indice de bande n et par un vecteur d'onde \vec{k} .

II.2. 1. Approximation semi-classique :

Dans le modèle *semi-classique*, un électron est repéré à la fois par sa position \vec{r} , par son vecteur d'onde \vec{k} et par un indice de bande n , et, en présence, de champs électrique et magnétique appliqués $\vec{E}(\vec{r}, t)$ et $\vec{B}(\vec{r}, t)$ l'indice de bande est une constante du mouvement, il n'y a pas de transitions inter bandes. Le mouvement entre deux collisions d'un électron d'une bande donnée est régi par les équations semi-classiques du mouvement.

$$\begin{cases} \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}_k = \frac{1}{\hbar} \nabla_k \epsilon_k \\ \frac{d\hbar\vec{k}}{dt} = q[\vec{E}(\vec{r}, t) + \vec{v}_k \times \vec{B}(\vec{r}, t)] \end{cases} \quad (\text{II.1})$$

Dans ces équations, q désigne la charge de l'électron, et \vec{v}_k et ϵ_k sont respectivement sa vitesse moyenne et son énergie. Ce modèle suppose que les champs extérieurs ne sont pas trop intenses et varient suffisamment lentement dans l'espace et dans le temps.

II.2. 2. Fonction de distribution des électrons d'une bande donnée :

Pour décrire les propriétés de transport, on introduit la fonction de distribution à une particule des électrons dans une bande donnée. Étant donnée la forme des équations(II.1), il convient d'utiliser la fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ qui, outre la position \vec{r} et le temps t a pour argument le vecteur d'onde \vec{k} . La quantité $\frac{2}{(2\pi)^3} f(\vec{r}, \vec{k}, t) d\vec{r} d\vec{k}$ représente le nombre moyen d'électrons qui, à l'instant t , une position dans un élément de volume centré $d\vec{r}$ en \vec{r} et un vecteur d'onde dans un élément de volume $d\vec{k}$ centré en \vec{k} , le facteur 2 prenant en compte les deux orientations de spin. La densité locale des électrons de la bande considérée est donnée par :

$$n(\vec{r}, t) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int f(\vec{r}, \vec{k}, t) d\vec{k} \quad (\text{II.2})$$

II.2. 3. Équation de Boltzmann :

L'équation de Boltzmann pour la fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ est de la forme :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v}_k \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (\text{II.3})$$

où : $\vec{F} = q[\vec{E}(\vec{r}, t) + \vec{v}_k \times \vec{B}(\vec{r}, t)]$ est la force de Lorentz. Comme les électrons sont des fermions, la fonction de distribution d'équilibre global est la fonction de Fermi-Dirac :

$$f_0(\epsilon_k) = \left[1 + \exp \frac{\epsilon_k - \mu}{kT} \right]^{-1} \quad (\text{II.4})$$

où μ_c est l'énergie de Fermi, qui apparaît également en tant que potentiel chimique.

Il est nécessaire de préciser l'expression de l'intégrale de collision $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$ pour les différents types de collisions que peuvent effectuer les électrons, en tenant compte du fait que ceux-ci sont des fermions, donc obéissent à un principe d'exclusion de Pauli.

II. 3 Intégrale de collision de l'équation de Boltzmann :

II. 3. 1. Processus de collision :

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 que les 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.

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.

II. 3. 2. 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.

II. 3. 3 Différents mécanismes de collision :

Il existe plusieurs mécanismes de collision, qui modifient le vecteur d'onde de l'électron (et dans certains cas aussi son énergie), autrement dit qui donnent lieu à une diffusion de l'électron. Ils correspondent à des écarts par rapport à une périodicité parfaite du réseau des ions. Les mécanismes de collision les plus importants sont :

a) 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

Chapitre II : Phénomènes de transport dans les solides

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 $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$, 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 l'approximation de Born de la diffusion. On obtient ainsi l'expression du taux de transition de l'état $|k\rangle$ vers l'état $|k'\rangle$:

$$w_{k',k} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle k' | V_i | k \rangle|^2 \delta(\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_{k'}) \quad (\text{II.5})$$

Dans la formule (II.5), 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 :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \sum_{k'} [w_{k,k'} f_{k'} (1 - f_k) - w_{k',k} f_k (1 - f_{k'})] \quad (\text{II.6})$$

Soit encore

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int [w_{k,k'} f_{k'} (1 - f_k) - w_{k',k} f_k (1 - f_{k'})] dk' \quad (\text{II.7})$$

où V désigne le volume de l'échantillon considéré.

b) 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 indépendants de ceux des autres atomes. Les états de 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 :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \sum_{k',v,v'} [w_{k,k',v,v'} p_{v'} f_{k'} (1 - f_k) - w_{k',k,v',v} p_v f_k (1 - f_{k'})] \quad (\text{II.8})$$

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

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \frac{v}{(2\pi)^3} \int [A_{k,k'} f_{k'} (1 - f_k) - A_{k',k} f_k (1 - f_{k'})] dk' \quad (\text{II.9})$$

Dans la formule (II.8), comme $v' = v \pm 1$, on a :

$$A_{k,k'} = \sum_v [w_{k',k,v+1,v} p_{v'} + w_{k',k,v,v+1} p_{v+1}] \quad (\text{II.10})$$

L'intégrale de collision (II.9) correspondant aux processus de collision électron-phonon est formellement analogue à l'intégrale de collision (II.7) décrivant les collision électron-impureté. Il faut cependant noter que, tandis que dans l'équation (II.7), $w_{k',k}$ est proportionnel à $\delta(\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_{k'})$, il n'en est pas ainsi dans l'équation (II.9), où $A_{k',k}$ 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 intégrales de collision correspondant à chaque processus.

II.4 Équilibre détaillé :

La distribution d'équilibre global $f_0(E)$ est la solution indépendante du temps de l'équation de Boltzmann (II.3). 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.

II.4. 1. Diffusion par les impuretés :

Les collisions électron-impureté sont décrites par l'intégrale de collision (II.7) le principe du l'équilibre détaillé s'écrit donc, dans ce cas :

$$w_{k,k'} f_0(\mathcal{E}_{k'}) [1 - f_0(\mathcal{E}_k)] = w_{k',k} f_0(\mathcal{E}_k) [1 - f_0(\mathcal{E}_{k'})] \quad (\text{II.11})$$

Pour ces collisions, $w_{k',k}$ est nul sauf si $\mathcal{E}_k = \mathcal{E}_{k'}$. Les fonctions de Fermi-Dirac dans l'équation (II.11) disparaissent donc et il vient :

$$w_{k,k'} = w_{k',k} \quad (\text{II.12})$$

On retrouve ainsi la propriété de micro-réversibilité. Elle se vérifie d'ailleurs directement sur la formule (II.5) 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 (II.7), qui devient :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int w_{k',k} (f_{k'} - f_k) dk \quad (\text{II.13})$$

Le principe d'exclusion de Pauli n'a pas d'effet sur les processus de diffusion de ce type. L'expression (II.13) aurait été la même en l'absence de restrictions sur l'occupation de l'état final.

II.4. 2 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 (II.9). Il vient alors :

$$A_{k,k'} f_0(\mathcal{E}_{k'}) [1 - f_0(\mathcal{E}_k)] = A_{k',k} f_0(\mathcal{E}_k) [1 - f_0(\mathcal{E}_{k'})] \quad (\text{II.14})$$

En utilisant le fait qu'à l'équilibre :

$$\frac{P_{v'}}{P_v} = \exp \frac{E_v - E_{v'}}{kT}$$
$$\frac{1-f_0}{f_0} = \exp \frac{\mathcal{E}-\mu}{kT} , \quad (\text{II.15})$$

Chapitre II : Phénomènes de transport dans les solides

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

$$W_{k,k',v,v'} = W_{k',k,v',v} \quad (\text{II.16})$$

Les probabilités de transition par unité de temps sont donc encore symétriques. Cependant, les quantités $\Lambda_{k',k}$ définie par la formule (II.9) ne le sont pas et vérifient l'égalité :

$$\Lambda_{k,k'} = \Lambda_{k',k} \exp \frac{\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k}{KT} \quad (\text{II.17})$$

De sorte que l'intégrale de collision (II.9) 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.

II.5 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 (II.3), on met en œuvre chaque fois que c'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 :

$$f_0(r, \varepsilon_k, t) = \left[\exp \left(\frac{\varepsilon_k - \mu(r,t)}{k_B T(r,t)} \right) + 1 \right]^{-1} \quad (\text{II.18})$$

Dans l'expression (II.18), $T(r,t)$ 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 :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} \simeq -\frac{f - f_0}{\tau} \quad (\text{II.19})$$

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

II.6 Terme de force de l'équation de Boltzmann :

En ce qui concerne le premier membre de l'équation de Boltzmann (II.3), il convient de remarquer que le champ électrique et le champ magnétique agissent sur les porteurs de charge de manière très différente. Le 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 solution de l'équation de Boltzmann sous la forme $f = f_0(\varepsilon_k) + f_1$, où

Chapitre II : Phénomènes de transport dans les solides

$f_1 \ll f_0$ 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 [13], 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 :

$$\nabla_k f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_k} \nabla_k \mathcal{E}_k = \hbar v_k \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_k} \quad (\text{II.20})$$

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_1 :

$$v_k \cdot \left[\frac{\mathcal{E}_k - \mu}{T} \nabla_r T + \nabla_r \mu - qE \right] \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_k} \right) + \frac{q}{\hbar} (v_k \times B) \cdot \nabla_k f_1 = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (\text{II.21})$$

L'équation de transport (II.3), avec la forme (II.20) 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).

II. 7 Différents régimes de transport électronique :

Il existe différents régimes auxquels sont soumis les électrons durant leurs parcours.

II.7.1 Transport dans le régime stationnaire :

Un régime stationnaire est défini dans le cas général comme un processus physique qui est indépendant du temps. Dans la physique des semi-conducteurs, si on prend le cas d'un semi-conducteur de type N soumis à un champ électrique, les électrons sont accélérés et leur énergie va augmenter considérablement avec le champ électrique d'une part, et qui par la suite va être perdue sous l'effet des collisions, ce qui globalement ralentit leur mouvement parallèlement au champ électrique. Le régime stationnaire est défini comme étant le régime où il y a un équilibre entre l'accélération des électrons diffusés vers les vallées supérieures due au champ électrique et le freinage sous l'effet des différents types d'interactions, c'est-à-dire lorsque les électrons ont subi un nombre suffisant d'interactions, pour cela il faut que la distance parcourue soit grande devant le libre parcours moyen. Dans ce cas la vitesse moyenne est non nulle dans la direction du champ électrique et on l'appelle vitesse de dérive, contrairement à

Chapitre II : Phénomènes de transport dans les solides

l'équilibre thermodynamique, les électrons sont animés d'un mouvement brownien d'où la Vitesse moyenne qui en résulte est nulle.

II.7.2 Transport dans le régime non-stationnaire :

Avant d'atteindre le régime stationnaire, c'est-à-dire qu'au tout premier instant de la simulation et en laissant le champ électrique fixe, l'accélération des électrons est très rapide car peu d'interactions ont eu lieu, donc les vitesses électroniques dans cette partie de temps sont supérieures que les vitesses dans le régime stationnaire, il apparaît donc des pics qu'on les nomme les pics de survitesse. Il est donc important de prendre en compte dans cette partie de temps les effets des différents champs électriques sur les vitesses électroniques. Les pics de survitesse commencent à apparaître lorsque le champ électrique atteint le champ critique.

II.8 Conclusion :

Dans ce chapitre on a présentée l'équation de Boltzmann semi-classique. L'état d'équilibre défini par la fonction de distribution de Fermi-Dirac a d'abord été exposé. Ensuite l'opérateur de collisions de Boltzmann a été quantitativement rapporté en considérant les collisions élection-phonon (acoustique et optique) et les collisions électrons-impureté. Enfin le terme de force a été analysé en tenant compte du champ électrique, du champ magnétique et des gradients de température et de potentiel chimique.

Chapitre. III

*Simulation & résultats du
modèle cinétique*

III. 1 Introduction :

A l'équilibre, les porteurs de charge peuplent les bandes d'énergie en suivant une statistique de Fermi-Dirac. En présence d'un champ électrique, cet équilibre est perturbé: les porteurs sont accélérés par le champ électrique selon la relation fondamentale de la dynamique et subissent les interactions dues au réseau cristallin. Nous présentons les résultats numériques obtenus ainsi que leur interprétation. Ces résultats numériques portent sur le calcul de la fonction de distribution, de la conductivité électrique (où la mobilité des électrons) en fonction de la fréquence de collisions et de l'intensité du champ électrique.

III.2 Équation cinétique :

La cinétique des porteurs des charges est décrite par l'équation de Boltzmann semi-classique qui permet de calculer la distribution des porteurs de charges dans l'espace des phases en fonction des forces extérieures appliquées au semi-conducteur (champ électrique dans notre cas).

III.2.1 Equation de Boltzmann :

Dans notre modèle nous retenons seulement les interactions électron-phonon dans les processus collisionnels des électrons dans le réseau. Il est très aisé d'incorporer d'autres interactions dont notamment celles des électrons avec des impuretés existantes dans le réseau. Dans ce cas l'équation de Boltzmann s'écrit [14,19] :

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

où q et m^* sont la charge électrique et la masse effective respectivement des porteurs de charge, \vec{E} et \vec{B} , les champs électrique et magnétique respectivement,

$$\vec{v}_g = \frac{\partial \varepsilon_n(k)}{\partial k}$$

v_g est la vitesse de groupe associée à l'électron et , $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ est la fonction de distribution. Le second membre tient compte des relaxations par les interactions électron-phonon acoustique et optique respectivement. On va à présent rajouter quelques hypothèses supplémentaires [14].

i) Le transport est quasi-statique, soit :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0 \quad (\text{III.2})$$

ii) Le gaz de porteurs de charge est homogène :

$$\frac{\partial f}{\partial \vec{r}} = 0 \quad (\text{III.3})$$

iii) On considère le champ électrique uniforme :

$$\vec{E} = E\vec{u}_x \quad (\text{III.4})$$

et un champ magnétique nul :

$$\vec{B} = 0 \quad (\text{III.5})$$

On remplace les approximations (III.2)-(III.5), dans l'équation (III.1) qui devient :

$$\frac{qE}{m} \frac{\partial f}{\partial v_x} = C_{ac}(f) + C_{op}(f) \quad (\text{III.6})$$

III. 2. 2. Développement de l'équation de Boltzmann sur la base des polynômes de Legendre :

Notre méthode dans ce travail consiste à développer l'équation de Boltzmann sur la base des polynômes de Legendre [20]. Ces polynômes sont appropriés dans la théorie du transport car chaque terme a un sens physique bien précis. Nous donnons ci-après l'expression générale d'un polynôme de Legendre d'ordre n. les quelques premiers polynômes de Legendre. Une symétrie axiale comme c'est le cas dans notre modèle. Nous donnons ci-après les quelques premiers polynômes de Legendre :

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

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

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

$$(1 - \mu^2) \frac{\partial P_l}{\partial \mu} = \frac{(l+1)l}{2l+1} P_{l-1} - \frac{l(l+1)}{2l+1} P_{l+1} \quad (\text{III.8})$$

$$\int_{-1}^{+1} P_l(\mu) P_{l'}(\mu) d\mu = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}, \quad (\text{III.9})$$

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

III. 2. 3 Termes de collision :

Dans le second membre de l'équation (III.6) il apparaît deux termes de collision dont les expressions sont données par [17, 18, 21] :

$$c_{ac}(f) = Av[f(\vec{v}) - f_0(v)] \quad (\text{III.10})$$

$$c_{op} = -B\sqrt{v^2 + \chi} \left[f - \frac{e^{\frac{\theta}{T_0}}}{2} \int f^{(+)} \sin \theta d\theta \right] - B\sqrt{v^2 - \chi/_{+}} \left[e^{\frac{\theta}{T_0}} f(\vec{v}) - \frac{1}{2} \int f^{(-)} \sin \theta d\theta \right] \quad (\text{III.11})$$

où :

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

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

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

Pour le silicium les paramètres physiques sont [17, 18] : $\varepsilon_l = 9eV$ pour le potentiel de déformation, $\varrho = 2330 \text{ kg}/m^3$ 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, $\hbar\omega = 0.063eV$ est l'énergie des phonons optique et $\theta_{ph} = \hbar\omega/k_B$, 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 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:

$$f(\vec{v}) = f(v, \cos \theta) \quad (\text{III.12})$$

Où :

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

En posant :

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

La fonction de distribution développée sur la base de Legendre s'écrit :

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

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

$$\begin{aligned} P_0 &\rightarrow C_{ac} = 0 \\ P_1 &\rightarrow C_{ac} = -Av[f_1(v)P_1 - 0] \\ P_n &\rightarrow C_{ac} = -Avf_n(v)P_n \end{aligned} \quad (\text{III.16})$$

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.

III.2. 4.Projection l'équation cinétique :

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

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

En utilisant les développements :

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

Et :

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

L'équation (III.17) devient :

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

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

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

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

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

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

On remplace les expression (III. 7)et (III. 8) dans l'équation (III.23) obtenant :

$$\frac{\partial}{\partial v_x} f(v, \mu) = \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{l}{2l+1} P_{l-1} + \frac{l+1}{2l+1} P_{l+1} \right) \frac{\partial f_l(v, \mu)}{\partial v} + \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2l+1} [(l+1)l P_{l-1} - l(l+1)P_{l+1}] \frac{f_l(v, \mu)}{v} \quad (\text{III.24})$$

On réarrange cette expression sous la forme:

$$\frac{\partial f(v, \mu)}{\partial v_x} = \sum_{l=0}^{\infty} \left[\frac{l}{2l-1} v^{l-1} \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{f_{l-1}(v, \mu)}{v^{l-1}} \right) + \frac{l+1}{2l+3} \frac{1}{v^{l+2}} \frac{\partial}{\partial v} (v^{l+2} f_{l+1}(v, \mu)) \right] P_l(\mu) \quad (\text{III.25})$$

Finalement on remplace les équations (III. 25) dans l'équation (III. 6) on obtient :

$$\frac{qE}{m} \sum_{l=0}^{\infty} \left[\frac{l}{2l-1} v^{l-1} \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{f_{l-1}(v, \mu)}{v^{l-1}} \right) + \frac{l+1}{2l+3} \frac{1}{v^{l+2}} \frac{\partial}{\partial v} (v^{l+2} f_{l+1}(v, \mu)) \right] P_l(\mu) = C_{ac}(f) + C_{op}(f) \quad (\text{III.26})$$

En posant: $x = \frac{v}{\sqrt{2}v_t} = \frac{v}{\sqrt{2}mv_t}$ où $v_t = \sqrt{\frac{k_B T}{m}}$ est la vitesse thermique l'équation

(III.26) se réécrit sous la forme :

$$\frac{q}{m} E \frac{1}{\sqrt{2}v_t} \left[\frac{l}{2l-1} x^{l-1} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{f_{l-1}(x)}{x^{l-1}} \right) + \frac{l+1}{2l+3} \frac{1}{x^{l+2}} \frac{\partial}{\partial x} (x^{l+2} f_{l+1}(x)) \right] = C_{ac}(f)|_l + C_{op}(f)|_l \quad (\text{III.27})$$

On donne ci-dessous les 3 premières projections :

i) Pour l=0 :

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

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

$$c_{op}(f_0) = -\frac{v_{ac}}{Z} (f_0 - f_{FD}) \quad (\text{III.29})$$

Où :

$$v_{ac} = A v_t \sqrt{2} \quad (\text{III.30})$$

ν_{ac} est la fréquence de collision électron-phonon acoustique, 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. En posant :

$$R = qE/\nu_{ac} m v_t \sqrt{2} \quad (\text{III.31})$$

La projection de l'équation (III.27) sur le polynôme $P_0(\mu)$ s'écrit en :

$$\frac{1}{3} \frac{\partial f_1}{\partial x} + \frac{2}{3} \frac{1}{x} f_1 = \frac{\nu}{Z} (f_0 - f_{FD}) \quad (\text{III.32})$$

ii) Pour $l > 0$, on prend $C_{op}(f_l) = 0$ étant donné que sa contribution est plus faible que celle des phonons acoustiques. Comme :

$$C_{ac}(f_l) = -\frac{1}{R} x f_l,$$

On trouve les équations jusqu'à l'ordre 3 suivantes :

iii) pour $l=1$:

$$\frac{\partial f_0}{\partial x} + \frac{2}{5} \frac{\partial f_2}{\partial x} + \frac{6}{5} \frac{1}{x} f_2 = -\frac{1}{R} x f_1 \quad (\text{III.33})$$

iv) pour $l=2$:

$$\frac{2}{3} \frac{\partial f_2}{\partial x} - \frac{6}{5} \frac{1}{x} f_2 + \frac{3}{7} \frac{\partial f_3}{\partial x} + \frac{12}{7} \frac{1}{x} f_3 = -\frac{1}{R} x f_2 \quad (\text{III.34})$$

v) pour $l=3$:

$$\frac{3}{5} \frac{\partial f_2}{\partial x} + \frac{6}{5} \frac{1}{x} f_1 + \frac{4}{9} \frac{\partial f_4}{\partial x} + \frac{20}{9} \frac{1}{x} f_4 = -\frac{1}{R} x f_3 \quad (\text{III.35})$$

III.3 Méthodes numériques :

III.3.1. Calcul du potentiel chimique à partir de l'intégrale de Fermi :

Dans ce travail nous avons considéré la densité des électrons de conduction comme une donnée du problème. Ceci se justifie par le fait que cette densité électronique est accessible par l'expérience et elle est fixée en général par le taux de dopage du semi-conducteur. Elle varie de quelques ordres de grandeurs, typiquement de 10^9 cm^{-3} à 10^{19} cm^{-3} pour des semi-conducteurs intrinsèques (sans dopage) et extrinsèques (avec dopage). Les propriétés physiques du semi-conducteur changent de façon significative avec le taux de dopage puisque dans cette gamme de densité, le gaz

électronique passe de l'état faiblement dégénéré à l'état dégénéré. Nous avons également fixé la température électronique à la température ambiante ($T = 300K$) en accord avec la température des dispositifs à semi-conducteurs étudiés dans les laboratoires.

En fixant la densité électronique et la température électronique nous avons également fixé indirectement le potentiel chimique du gaz électronique responsable de la conduction dans les semi-conducteurs. En effet la définition de la densité est donnée par l'expression :

$$n = \frac{2}{h^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f_{FD} d^3 p \quad (\text{III.36})$$

où nous rappelons que :

$$f_{FD} = \left[1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_c}{k_B T}\right) \right]^{-1} \quad (\text{III.37})$$

est la fonction de distribution de Fermi-Dirac, h est la constante de Planck, $\vec{p} = m\vec{v} = \hbar\vec{k}$ est l'impulsion, $\varepsilon = p^2 / 2m$ est l'énergie cinétique électronique dans l'approximation parabolique, T est la température, k_B est la constante de Boltzmann, et μ_c est le potentiel chimique. L'intégrale (III.36) peut se réécrire comme une équation de la densité en fonction du potentiel chimique, soit :

$$n(\mu_c) = \frac{8\pi}{h^3} \int_0^{+\infty} \left[1 + \exp\left(\frac{p^2 / 2m - \mu_c}{k_B T}\right) \right]^{-1} p^2 dp \quad (\text{III.38})$$

De cette équation (III.38) il n'est pas possible de calculer analytiquement le potentiel chimique qui est contenu dans l'intégrant d'une intégrale définie. Seule l'approche numérique permet de résoudre cette équation. Pour cela on effectue un test de précision. Si l'erreur relative est inférieure à 10^{-3} , soit :

$$\left| \frac{n_0 - n(\mu_c)}{n_0} \right| < 10^{-3} \quad (\text{III.39})$$

Nous donnons dans le tableau ci-dessous quelques valeurs typiques de densités électroniques et leur potentiel chimique à température ambiante $T=300K$, correspondant

au silicium dont la masse effective électronique est $m \approx 2.91510^{-31} \text{ kg}$. Plus la densité électronique augmente et plus le potentiel chimique augmente. La limite dite classique est donné par $\mu_c \rightarrow -\infty$ et la limite fortement dégénéré est donnée par la limite $\mu_c \rightarrow \infty$. Pour les densités usuelles dans les semi-conducteurs le potentiel chimique reste en général négatif en se rapprochant toutefois des valeurs positives pour les cas très dégénérés. on se rapprochant toutefois des valeurs positives pour les cas très dégénérés.

Densité électronique en cm^{-3}	Potentiel chimique en eV
10^{15}	-0.218
510^{15}	-0.1763
10^{16}	-0.1583
510^{16}	-0.117
10^{17}	-0.098
10^{18}	-0.037
10^{19}	+0.04

Tableau I : Densité électronique et potentiel chimique correspondant au silicium

III.3.2 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 σ (et donc la mobilité de porteurs de charge, $\mu_e = \frac{\sigma}{n|q|}$ 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 :

$$j_x = \sigma E \quad (\text{III.40})$$

$$j_x = nqV_x \quad (\text{III.41})$$

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

$$J_x = \frac{8\pi}{3h^3m} q \int_0^\infty p^3 f_1(p) dp . \quad (\text{III.42})$$

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.

Pour résoudre le système d'équations différentielles (III(32)-III(35)) 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.

III.4 Résultats numériques :

Nous avons considéré deux 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.

III.4.1. 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 [13.20]. 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 :

$$f_1 = -\frac{1}{x} \frac{\partial f_1}{\partial t} - \frac{R}{x} \frac{df_{FD}}{dx}. \quad (\text{III.43})$$

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 :

$$J_x = -\frac{32\pi m (k_B T)^2 R}{3h^3} e \int_0^\infty x^2 \frac{df_{FD}}{dx} dx \quad (\text{III.44})$$

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

$$\sigma = -\frac{32\pi \sqrt{m} (k_B T)^{3/2} e^2}{3\sqrt{2} h^3 v_{ac}} \int_0^\infty x^2 \frac{df_{FD}}{dx} dx \quad (\text{III.45})$$

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, $n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Si on considère la fréquence de collision $\nu_{ac} = A_{ac} \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}$ dont on rappelle l'expression :

$$\nu_{ac} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m} \frac{m^2 \epsilon_{ac}^2 k_B T}{\pi \hbar^4 \rho}} \quad (\text{III.46})$$

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

$$\epsilon_{ac} = 9eV$$

pour la masse volumique du silicium :

$$\rho = 2330 \text{ kg} / \text{m}^3$$

pour le potentiel de déformation et :

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

pour la vitesse longitudinale, on obtient :

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

Cependant nous avons plutôt utilisé dans ce travail une fréquence de collision électron-phonon de l'ordre de $\nu_{ac} \approx 1.210^{12} \text{ s}^{-1}$. 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 $n = 710^9 \text{ cm}^{-3}$, et en ajustant cette valeur à la valeur expérimentale de la conductivité donnée dans la référence [5]. Avec cette fréquence de collision ajustée nous retrouvons la conductivité expérimentale qui vaut $\sigma \approx 3.83 \cdot 10^{-4} \Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$. La conductivité électrique est calculée numériquement par la méthode standard de Simpson.

III.4. 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,

$$\frac{df_1}{dx} = U, \dots, V = \frac{\partial f_0}{\partial t} ; ; ; W = \frac{\partial f_1}{\partial t} \quad (\text{III.47})$$

$$\frac{dU}{dx} = \frac{3}{ZR^2}W - \frac{3}{R} \frac{dV}{dx} - \frac{2U}{x} + \left(\frac{2}{x^2} + 3xR^2/Z \right) f_1 + \frac{3R}{Z} \frac{df_{FD}}{dx} \quad (\text{III.48})$$

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 $\nu_{op} = \nu_{ac}/Z$ 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 eq.III. 32)

$$\nu_{op} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}} \frac{m^2 \epsilon_{op}^2}{2\pi \hbar^2 \rho \hbar \omega \exp(\hbar \omega / k_B T)} \quad (\text{III.49})$$

où les valeurs utilisées sont :

$$\epsilon_{op} = 11.410^{10} \text{ eV} / m,$$

pour la constante de couplage optique et : $\hbar \omega = 0.063 \text{ eV}$,

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

$$Z = \nu_{ac} / \nu_{op} \approx 4.24. \quad (\text{III.50})$$

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.46) et (III.47).

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.

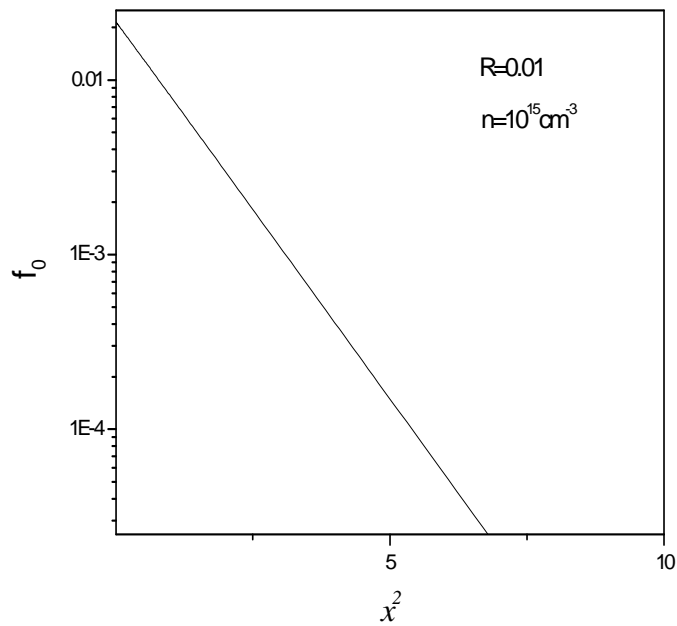


Figure III.1 Composante isotrope de la fonction de distribution f_0 , en fonction du carré de la vitesse adimensionnelle $x = v/\sqrt{2}v_t$.

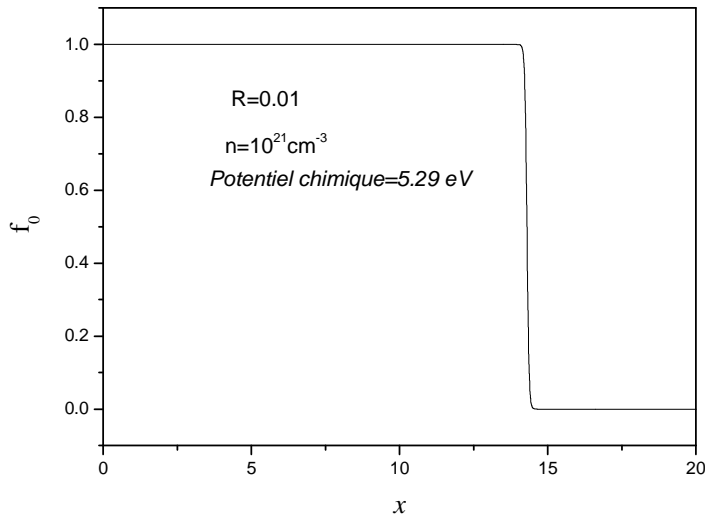


Figure III. 2 : Composante isotrope de la fonction de distribution f_0 en fonction de la vitesse adimensionnelle $x = v/\sqrt{2}v_t$.

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.

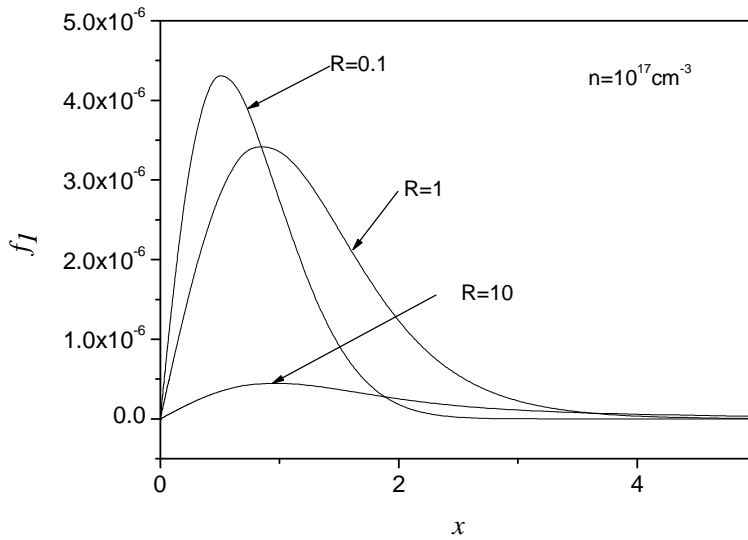


Figure III.3 : Première anisotropie de la fonction de distribution f_1 en fonction de la vitesse adimensionnelle $x = v/\sqrt{2}v_t$.

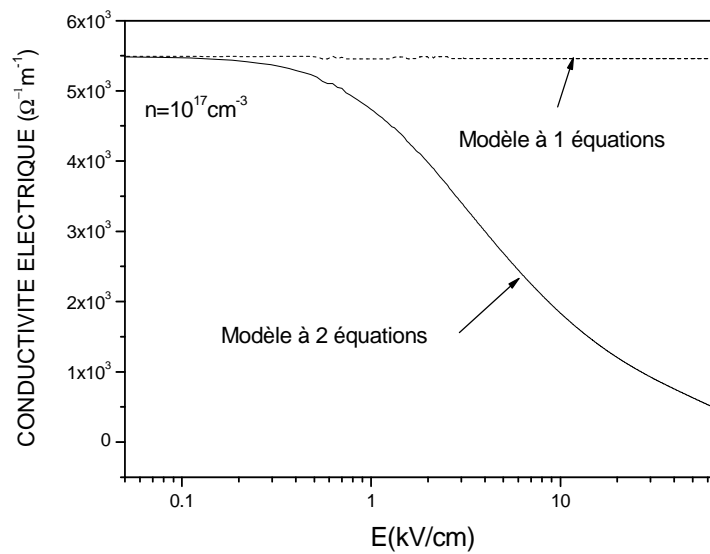


Figure III.4 : Conductivité électrique σ en fonction du champ électrique E

III.4.3.Effet des interactions électron-phonon optique :

Dans cette partie nous étudions le rôle des interactions électron-phonon optique sur le transport des charges dans les semi-conducteurs. Nous rappelons que ces interactions ont été modélisées par un opérateur de relaxation pour simplifier son écriture. En outre ces effets ont été négligés dans les équations qui décrivent les anisotropies. On a estimé que leurs effets dans ce cas sont plus faibles que ceux des interactions électron-phonon acoustique. Concrètement leur rôle peut être modélisé par le paramètre Z qui apparaît dans l'équation isotrope. Nous donnons sur la figure III.5 la conductivité électrique calculée à partir du modèle à 6 équations, en fonction du champ électrique pour deux valeurs du paramètre, Z .

On peut constater que pour des champs électriques faibles la conductivité ne dépend pas de la valeur de Z . Ceci s'explique par le fait que ce paramètre agit dans notre modèle seulement sur la partie isotrope de la fonction de distribution. Pour des champs électriques relativement faibles la fonction de distribution isotrope est quasiment la fonction de distribution de Fermi-Dirac et les collisions électron-phonon optique ne jouent pas un rôle crucial sur sa déformation. Pour des champs électriques d'intensité modéré et fort, l'effet de Z se fait ressentir par une diminution de la conductivité électrique lorsque Z augmente, comme montré sur la figure III.5. Si Z croît alors les collisions électron-phonon optique diminuent d'efficacité. Le rôle du champ électrique devient important et cela conduit donc à une réduction de la conductivité électrique.

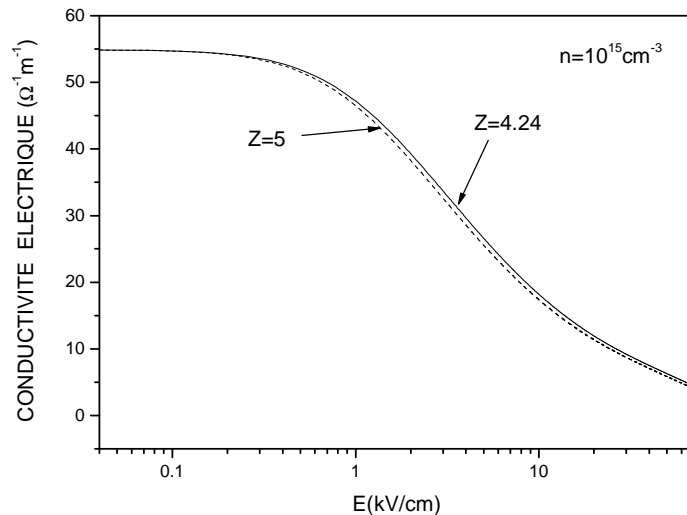


Figure III.5: Conductivité électrique en fonction du champ électrique E pour deux valeurs du paramètre Z

III.5. Conclusion :

Dans ce chapitre on a modélisé le transport dans le semi-conducteur par des équations microscopique obtenues à partir de l'équation de Boltzmann. Les équations (III.32)-(III.35) constituent les équations de base de notre modèle cinétique.

Nous avons proposé un modèle cinétique basé sur l'équation de Boltzmann semi-classique pour calculer la conductivité électrique. Nous avons pris comme exemple le silicium mais nos résultats restent généraux et ils peuvent être appliqués aussi bien à d'autres semi-conducteurs. Nous avons également choisi comme structure de la bande de conduction un profil parabolique le plus étudié dans la littérature. Il serait intéressant d'examiner d'autres profils de bande tels que les profils elliptiques.

Nous avons mis en œuvre deux codes numériques pour résoudre le problème. Le premier consiste à calculer le potentiel chimique des électrons en fixant leur densité. Le deuxième code consiste à résoudre un système d'équations différentielles couplées avec des conditions aux limites à l'aide de la méthode des différences finies.

Le rôle du champ électrique sur la conductivité électrique a été étudié quantitativement. Les effets de dégénérescence ainsi que celui des collisions électron-phonon optique ont aussi fait l'objet d'une étude particulière.

CONCLUSION
GÉNÉRALE

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 à 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 performantes 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 par rapport au champ électrique. Typiquement à partir des intensités du champ électrique au delà du kilovolt par centimètre, les effets non linéaires du champ se font sentir. Ils vont réduire de façon importante la conductivité électrique. Ces résultats ont nécessité de garder deux composantes de la fonction de distribution sur la base des polynômes de Legendre. Ce travail a permis d'ouvrir quelques perspectives théoriques en particulier l'étude d'un

semi-conducteur caractérisé par une bande de conduction ellipsoïdale (Modèle de Kane) ou par 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.

RÉFÉRENCES
BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] W. V. van Roosbroeck, *Bell Syst. Tech. J.* **29**, 560-607 (1950); H. K. Gummel, *IEEE Trans. Electron Devices*, **11**, 455-465 (1964).
- [2] M. S. Lundstrom, *Fundamentals of Carrier Transport*, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, (1990).
- [3] R. L. Liboff, *The Theory of Kinetic Equations*, Wiley and Sons, New York 1969.
- [4] N.W. Ashcroft et N.D. Mermin, *Solid state physics*, Holt. Rinehart, Winston, N.Y.(1976).
- [5] C. Kittel, *Physique de l'état solide*, Dunod (1998).
- [6] C. Hamaguchi, *Basic semiconductor physics*, Springer (2001).
- [7] Peter Y. Yu et M. Cardona, *Fundamentals of semiconductors, Physics and material properties*, Springer (2001).
- [8] G. Timp, J. Bude, K.K. Bourdelle, J. Garno, A. Ghetti, H. Grossmann, M. Green, G.Forsyth, Y. Kim, R. Kleiman, F. Klemens, A. Kornblit, C. Lochstampfor, W. Manseld, S. Moccio, T. Sorsch, D. M. Tennant, W. Timp, and R. Tung, *IEDM Technical Digest* **55**, Electron Devices Society of IEEE, Piscataway NJ (1999).
- [9] P. Bordone, M. Pascoli, R. Brunetti, A. Bertoni, C. Jacoboni, and A. Abramo, *Phys. Rev. B* **59**, 3060 (1999).
- [10] M. V. Fischetti, *Phys. Rev. B* **59**, 4901 (1999).
- [11] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press, New York, NY, 1st edition (1995).
- [12] Ned S. Wingreen, Cristopher J. Stanton, and John W. Wilkins, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1084 (1986).
- [13] S Mesbah, K Bendib-Kalache, A Bendib and J P Matte, *Phys. Scr.* **78**, 025704 (2008) 78.
- [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 (2000).
- [16] S. Smirnov, H. Kosina, S. Nedjalkov, and S. Selberherr, *J. Appl. Phys.* **94**, 5791
-

(2003).

[17] S. Nedjalkov, H. Kosina, S. Selberherr, C. Ringhofer, and D. K. Ferry, *Phys. Rev. B* **70**, 115319 (2004).

[18] S. Smirnov and C. Jungemann, *J. Appl. Phys.* **99**, 063707 (2006).

[19] M. M. Rieger and P. Vogl, *Phys. Rev. B* **48**, 14276 (1993).

[20] M. L. Cohen and J. R. Chelikowsky, *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors*, 2nd edition. Springer, New York, (1989).

[21] S. F. Liotta and H. Struchtrup, *Solid-St. Electron.* **44** 95 (2000).

[22] H. Struchtrup, *Physica A* **275**, 229 (2000).

RÉSUMÉ

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.

ملخص:

في هذا العمل، وضعنا نموذجاً نظرياً على أساس معادلة بولتزمان شبه الكلاسيكية التي تأخذ في الاعتبار نشر الإلكترونات من التوصيل مع الفوتونات الصوتية والضوئية البصرية من الشبكة الكريستالية. خصوصية النموذج هو أن هذه المعادلة وضعت على أساس ليجندر متعدد الحدود. ويؤدي الحل العددي لمعادلة بولتزمان إلى حساب الناقلية الكهربائية كدالة للمجال الكهربائي المطبق على الجهاز، أما الحل العددي لمعادلات النموذج يصل إلى حل نظام المعادلات التفاضلية إلى جانب شروط الحدود.

الكلمات المفتاحية:

معادلة بولتزمان شبه الكلاسيكية، الفونون الصوتي، الفونون البصري، الناقلية الكهربائية.
