

Modèles Mathématiques

2.1. Introduction

Lorsque les dimensions ou la région active d'un composant atteignent l'échelle nanométrique, la représentation corpusculaire de porteurs de charge doit céder le pas à la représentation ondulatoire. Le confinement quantique résultant de la réduction de dimensionnalité du mouvement de porteurs redistribue la structure de bandes et les densités d'états. Ce sont alors les effets quantiques spécifiques de ces nouvelles dimensionnalités.

Dans ce chapitre, on va présenter les modèles mathématiques qui régissent les phénomènes physiques dans de telles structures. Dans ce cas deux phénomènes interviennent dans l'étude de ces structures ; Le phénomène électromagnétique et le phénomène quantique. Ces phénomènes sont décrits tout simplement pour notre cas d'étude, par l'équation de Poisson et l'équation de Schrödinger en tenant compte de quelques hypothèses approximatives.

2.2. L'équation de Poisson

L'équation de Poisson tenant compte de la variation de permittivité dans le cas général s'écrit [25]:

$$\text{div}(\varepsilon \cdot \overrightarrow{\text{grad}}\phi) = -\rho \quad (2-1)$$

où :

ε : Permittivité électrique.

ϕ : Potentiel électrique.

ρ : Densité de charge total développé dans le semiconducteur.

Cette équation exprime la variation du potentiel électrique dans le domaine d'étude.

Au potentiel électrique ϕ est associé d'habitude un champ électrique donné par :

$$\vec{E} = -\vec{\text{grad}}\phi \quad (2-2)$$

L'équation de Poisson dans le cas monodimensionnelle en explicitant le terme ρ de la charge d'espace se simplifie en :

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon(z) \frac{\partial \phi(z)}{\partial z} \right) = -\rho = -e \cdot [N_D^+(z) - N_A^-(z) + p(z) - n(z)] \quad (2-3)$$

tel que :

- e : La charge d'un électron en valeur absolu.
- n : Densité des électrons libres.
- p : Densité des trous libres.
- N_D^+ : Densité de donneurs ionisés exprimée par [37]:

$$N_D^+(z) = \frac{N_D(z)}{1 + 2 \exp\left(\frac{E_F - [U(z) - E_d]}{k_B T}\right)} \quad (2-4)$$

- N_A^- : Densité d'accepteurs ionisés exprimée par [37]:

$$N_A^-(z) = \frac{N_A(z)}{1 + 2 \exp\left(\frac{[U(z) - E_g(z) + E_a] - E_F}{k_B T}\right)} \quad (2-5)$$

Dans les deux équations précédentes N_D et N_A présentent la densité de dopage en atomes donneurs et accepteurs respectivement. E_d et E_a sont les énergies d'ionisation des atomes donneurs et accepteurs mesuré par rapport au bat de la bande de conduction U et au sommet de la bande de valence $U_v = U - E_g$ respectivement. Ici $E_g(z)$ présente le gap à travers les hétérostructures et E_F le niveau de Fermi. K_B et T dénote la constante de Boltzmann et la température en Kelvin respectivement.

La résolution de l'équation de Poisson passe par la connaissance des conditions aux limites. Il existe deux types de conditions :

- *Les conditions de type Dirichlet*

Les conditions de Dirichlet non homogène sont imposées aux contacts tel que la fonction potentielle doit être spécifiée sur les contacts : $\phi = \phi_1$

- *Les conditions de type Newmann*

Les conditions de type Newmann sont imposées aux autres limites de la structure, c'est-à-dire la dérivée normale sur ces limites est nulle : $\left. \frac{\partial \phi}{\partial n} \right| = 0$

\vec{n} : Vecteur normal.

2.3. L'équation de Schrödinger

Dans le cadre de simulation des phénomènes quantiques dans des dispositifs semi-conducteurs, nous sommes amenés à étudier la structure énergétique d'un gaz d'électrons ou de trous confinés dans ces structures. Nous devons donc intégrer l'équation de Schrödinger. Cette équation dans le cas stationnaire s'écrit [26]:

$$[T + U(r)]\psi^\alpha(r) = E_\alpha \psi^\alpha(r) \quad (2-6)$$

tels que :

| | |
|------------------|---|
| T | : Opérateur énergie cinétique |
| $U(r)$ | : Opérateur énergie potentielle |
| $\psi^\alpha(r)$ | : Fonction d'onde à l'état propre α |
| E_α | : Énergie associée à l'état propre α . |

Puisque seulement des états liés sont considérés, des conditions au limites de type Neumann ont été assumés pour l'équation de Schrödinger, c.-à-d., la fonction d'onde et sa dérivée doivent être zéro aux extrémités du système.

Pour résoudre l'équation de poisson et l'équation de Schrödinger, on doit passer par des approximations simplificatrices :

2.3.1. Approximation de la masse effective

Parmi les différences contributions au potentiel que voient les électrons, le potentiel périodique associé aux ions du cristal, c'est-à-dire le potentiel cristallin, joue évidemment un rôle important. Les états propres et les fonctions propres correspondants sont évidemment connus, il s'agit pour les premiers de la bande de conduction et pour les secondes des fonctions de Bloch. On peut alors s'affranchir aisément de ce terme en utilisant l'approximation de la masse effective. L'électron de masse m_0 dans le potentiel cristallin, se comporte comme un électron de masse effective m^* et dont la fonction d'onde de Bloch, cet électron se déplace dans un réseau périodique supposé vide d'ions. En d'autres termes, le potentiel cristallin est représenté par le fait que l'électron a une masse effective m^* différente de la masse m_0 de l'électron libre. La périodicité de structure cristalline entraîne une périodicité de la fonction d'onde associée à l'électron qui doit satisfaire au théorème de Bloch. L'approximation de la masse effective est utilisée avec succès dans l'étude de tous les composants, cependant elle atteint ici une limite de validité dans la mesure où les électrons sont confinés dans une épaisseur de l'ordre de quelques couches atomiques [37].

La version la plus simple de l'approximation de la masse effective consiste à affecter à l'électron la masse effective de la bande de conduction correspondante, supposée isotrope et parabolique. L'opérateur énergie cinétique s'écrit alors

$$T(r) = -\frac{\hbar^2}{2} \operatorname{div} \left(\frac{1}{m^*} \overrightarrow{\operatorname{grad}} \right) \quad (2-7)$$

2.3.2. Energie potentielle des électrons

Dans l'approximation de la masse effective, les fonctions de base étant les fonctions de Bloch, le potentiel cristallin disparaît. Néanmoins la résolution de l'équation de Schrödinger nécessite la connaissance du terme d'énergie potentielle $U(r)$.

L'énergie potentielle $U(r)$ résulte de la contribution de quelque terme et peut s'écrire sous la forme [27] :

$$U(r) = -e\phi(r) - eV_{im} - eV_{xc} + \Delta E_C \quad (2-8)$$

où

| | | |
|--------------|---|---|
| $\phi(r)$ | : | Potentiel électrostatique dû aux atomes de dopage. |
| V_{im} | : | Potentiel image. |
| V_{xc} | : | Potentiel d'échange et de corrélation. |
| ΔE_C | : | Discontinuité de la bande de conduction à l'hétérojonction. |

Le potentiel image résulte de la discontinuité de la structure du constante diélectrique à l'interface entre deux matériaux. Le potentiel d'échange corrélation décrit les interactions entre les électrons et leurs charges images. La contribution de ces deux termes à l'énergie potentielle $U(r)$ est faible, pour cela, nous avons négligé leurs effets afin de simplifier l'étude, alors :

$$U(r) = -e\phi(r) + \Delta E_C \quad (2-9)$$

2.4. Confinement d'électrons et densité d'états

En l'absence de confinement c-à-d le mouvement des électrons est libre dans les trois direction de l'espace, c'est le cas d'un composant massif- la fonction d'onde des électrons est une fonction propre du potentiel cristallin, c'est-à-dire une fonction de Bloch. Les états propres des électrons sont des états de la bande de conduction d'énergie :

$$E(k) = E_C + \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m^*} \quad (2-10)$$

C'est la relation de dispersion 3D donné simplement par une forme parabolique que l'on trace sur la figure (2-1-a). Les états d'énergies sont remplis jusqu'au niveau de Fermi E_F (zone grisée).

A partir de relation précédente en tenant en compte des conditions de bord périodique sur une onde plane, on peut facilement calculer la densité d'états pour plusieurs dimensions 3D, 2D, et 1D.

2.4.1 Densité d'états 3D

En 3D on peut montré que la densité d'états par unité de volume s'exprime

$$g(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - E_C} \quad (2-11)$$

densité d'états que l'on a représenté sur la figure (2-1-b). La concentration électronique s'obtient en intégrant cette quantité multipliée par la probabilité d'occupation du niveau d'énergie E , sur l'ensemble des énergies de E_c à $+\infty$:

$$n_{3D} = \int_{E_c}^{+\infty} g(E)f(E)dE \quad (2-12)$$

où $f(E)$ est la fonction de distribution de Fermi-Dirac donnée par :

$$f(E) = \frac{1}{\left(1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)\right)} \quad (2-13)$$

avec un petit développement mathématique, l'équation (2-11) devient :

$$n_{3D}(z) = 2 \left(\frac{2\pi m_c^* k_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} F_{\frac{1}{2}} \left(\frac{E_F - E_c}{k_B T} \right) \quad (2-14)$$

tel que : $F_{1/2}$ présente l'intégrale de Fermi d'ordre $1/2$ et h la constante de Planck.

2.4.2 Densité d'états 2D

Si maintenant on réduit une dimension, à une valeur proche de la longueur d'onde de De Broglie de l'électron, il faut ajouter un potentiel de confinement dans l'équation de Schrödinger. L'énergie dans la direction de confinement (z) est alors quantifié, et le mouvement se fait librement dans le plans (x,y) orthogonal à cette direction (z). Un tel confinement peut être obtenue dans une hétérojonction par exemple, dans la direction de croissance. L'énergie des électrons est la somme de leurs énergies dans la bande de conduction et de l'énergie de leur mouvement associé à la présence de confinement. Dans ce cas la fonction d'onde d'électrons s'écrit sous la forme du produit d'une onde de Bloch par une fonction enveloppe. La fonction enveloppe et l'énergie additionnelle sont respectivement fonctions propres et valeurs propres de l'équation de Schrödinger dans l'approximation de la masse effective. L'énergie potentielle des électrons n'étant fonction que de la variable z , le mouvement des électrons n'est perturbée que dans la direction z . Il reste libre dans le plan xy . Il en résulte que la fonction enveloppe peut s'écrire sous la forme d'un produit d'une fonction de z par une onde plane dans le plan xy . La fonction d'onde des électrons s'écrit alors :

$$\psi^\alpha(r) = \chi^\alpha(z) e^{ik_x + ik_y} \varphi(r) \quad (2.15)$$

où $\varphi(\mathbf{r})$ est la fonction de Bloch et $\chi^\alpha(z)$ est une solution de l'équation de Schrödinger dans l'approximation de la masse effective :

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^*} \left(\frac{\partial \chi^\alpha(z)}{\partial z} \right) \right) + (E_\alpha - U(z)) \chi^\alpha(z) = 0 \quad (2.16)$$

Les énergies E_α sont les énergies des électrons dans son mouvement dans la direction z . Elles décrivent la quantification des états électroniques dans la direction perpendiculaire du puit quantique. Dans le plan (x,y) , le mouvement de l'électron est libre. Le spectre d'énergie total a donc une composante discrète décrivant la quantification de mouvement dans la direction de confinement et une composante continue liée au mouvement libre dans le plan. On parle alors de sous-bande, voir figure (2-2-c). En prenant l'origine des énergies au bas de la bande de conduction, le spectre d'énergie de l'électron s'écrit :

$$E(k) = E_\alpha + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*} \quad (2-17)$$

où α indexe la sous-bande bidimensionnelle.

Le mouvement de l'électron est donc limité à deux dimension, la densité d'états dans l'espace réciproque par unité de surface est par conséquent donnée, compte tenu de la dégénérescence de spin par :

$$g(k) = \frac{2}{(2\pi)^2} \quad (2-18)$$

Ainsi sur le disque de rayon $k_{//} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, le nombre d'états est donné par :

$$N(k_{//}) = \frac{2}{(2\pi)^2} \pi k_{//}^2 \quad (2-19)$$

soit en explicitant $k_{//}$ en fonction de l'énergie en prenant comme origine des énergies dans chacune des sous-bandes, le bas de sous-bande :

$$N(E) = \frac{2}{(2\pi)^2} \pi \frac{2m^*}{\hbar^2} E \quad (2-20)$$

Ainsi la densité d'états dans l'espace des énergies s'écrit pour une sous-bande :

$$g_{\alpha}(E) = \frac{dN(E)}{dE} = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} = g_0 \quad (2-21)$$

C'est une caractéristique essentielle d'un système à deux dimensions, la densité d'états est constante en fonction de l'énergie. En tenant compte de toutes les sous bandes la densité d'états s'écrit :

$$g(E) = g_0 \sum_{\alpha} H(E - E_{\alpha}) \quad (2-22)$$

où $H(x)$ est la fonction de Heaviside, $H(x) = 0$ pour $x < 0$, $H(x) = 1$ pour $x > 0$. La densité d'états à la forme de marche de hauteur g_0 comme le montre la figure (2-1-d), une marche étant franchie à chaque fois que $E > E_{\alpha}$.

De la même manière que précédemment la population électronique de chaque sous-bande d'énergie à une température T est donnée par :

$$n_{\alpha} = \int_{E_{\alpha}}^{\infty} g_{\alpha}(E) f(E) dE \quad (2-23)$$

où $f(E)$ encore est la fonction de Fermi-Dirac :

$$f(E) = \frac{1}{\left(1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)\right)} \quad (2-24)$$

après intégration, on obtient

$$n_{\alpha} = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} k_B T \ln \left(1 + \exp\left(\frac{E_F - E_{\alpha}}{k_B T}\right) \right) \quad (2-25)$$

la densité total d'électrons est donnée par :

$$n = \sum_{\alpha} n_{\alpha} \quad (2-26)$$

soit

$$n_{\alpha} = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} k_B T \sum_{\alpha} \ln \left(1 + \exp\left(\frac{E_F - E_{\alpha}}{k_B T}\right) \right) \quad (2-27)$$

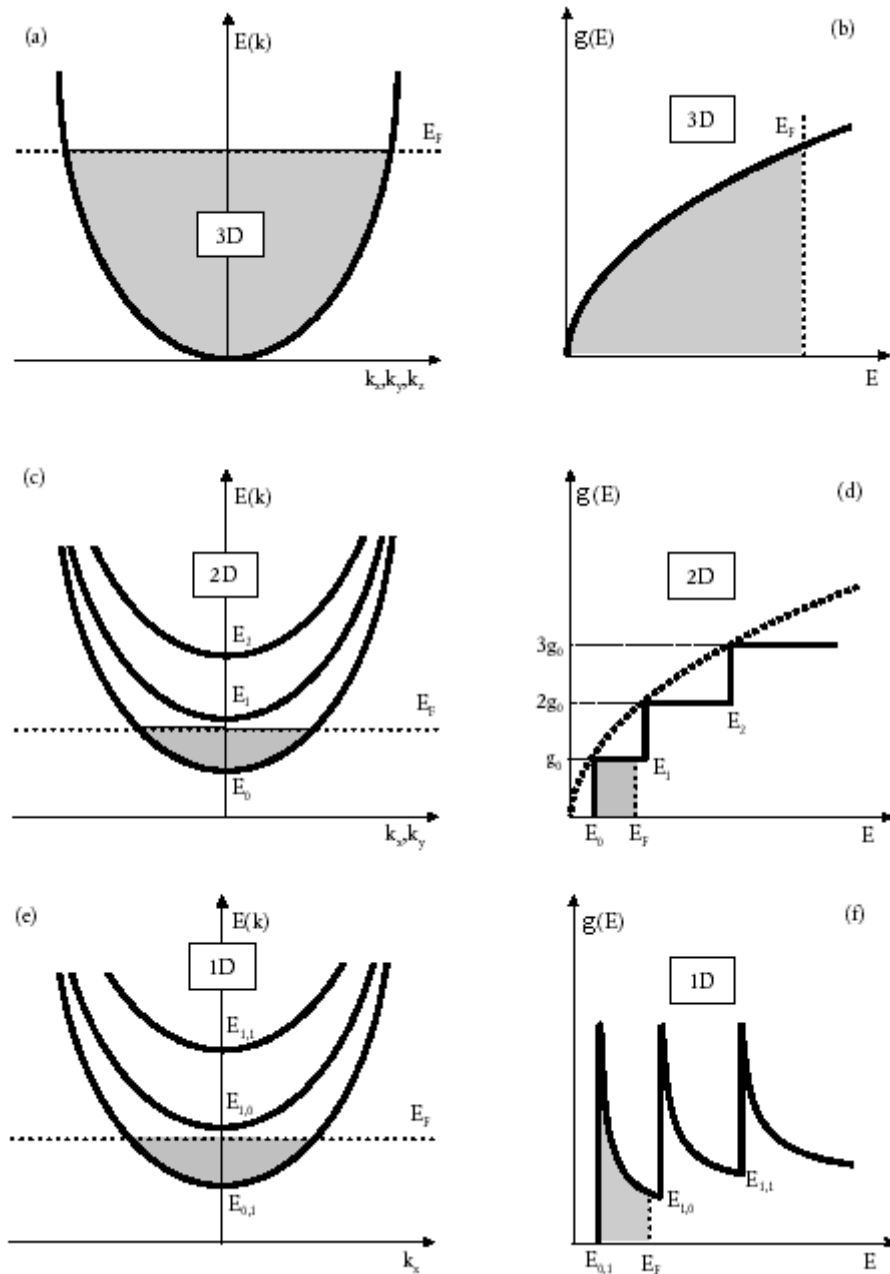


Figure 2-1 Relation de dispersion $E(k)$ et Densité d'états $g(E)$ correspondante, (a) et (b) pour un gaz d'électrons 3D, (c) et (d) pour un gaz 2D, la courbe en pointillés sur le graphe de densité d'états correspond à la densité d'état 3D précédente, (e) et (f) pour un gaz 1D.

En outre, le carré du module de la fonction enveloppe, $|\chi^\alpha(z)|^2$ représente la probabilité de présence, au point d'abscisses z , d'un électron de la sous bande α . il en résulte que dans la mesure où le nombre d'électrons de la sous bande α est n_α , la distribution spatiale de ces électrons s'écrit :

$$n(z) = \sum_{\alpha} n_{\alpha} |\chi^{\alpha}(z)|^2 \quad (2-28)$$

il en résulte que la charge d'électrons libre associée au confinement est donnée par :

$$\rho_n(z) = -e \sum_{\alpha} n_{\alpha} |\chi^{\alpha}(z)|^2 \quad (2-29)$$

où en explicitant n_{α} :

$$\rho_n(z) = -\frac{m^*}{\pi \hbar^2} k_B T \sum_{\alpha} \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_F - E_{\alpha}}{k_B T} \right) \right) |\chi^{\alpha}(z)|^2 \quad (2-30)$$

On constate que la charge d'espace résultante du confinement est reliée à la fonction d'onde électronique. Mais $\chi^{\alpha}(z)$ est une solution de l'équation de Schrödinger, donc fonction de $U(z)$ qui est lui même fonction de la densité de charge.

Remarque : Pour que les effets dû à la quantifications des niveaux E_{α} soient observables, il faut que l'espacement entre les niveaux d'énergies soit suffisamment grand, devant l'énergie thermique $E_{\alpha+1} - E_{\alpha} > k_B T$.

Lorsqu'une seule sous-bande est occupée ($\alpha=0$), on dit que le système est purement bidimensionnel ; dans le cas contraire on dit qu'il est quasi-bidimensionnel.

Si la structure admet des confinements des trous, une formule similaire est obtenue pour la distribution spatiale de celle-ci. Sinon la densité reste de type tridimensionnel est calculé par l'intégrale de Fermi d'ordre $\frac{1}{2}$ via la densité d'états 3D dans la bande de valence.

2.4.3 Densité d'états 1D

Si on réduit encore une dimension, par un potentiel de confinement latéral, la propagation des porteurs ne peut se faire que dans une seule direction, le long d'un canal étroit, et le system devient fil quantique à cause de la réduction de degré de liberté des électrons à une dimension. Par rapport au cas bidimensionnel, les sous-bandes se divisent en séries de sous-bandes unidimensionnelles, avec des énergies de bas de bandes $E_{\alpha,m}$, où le deuxième nombre quantique m réfère à la quantification selon la deuxième direction, selon y par exemple. L'énergies total d'un électrons est alors donné par:

$$E(k) = E_{\alpha,m} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} \quad (2-31)$$

Les sous-bandes unidimensionnelles sont souvent appelées modes transverses par analogies aux modes des ondes électromagnétiques (figure 2-1-e). Les quantités calculées précédemment doivent être passées maintenant par la résolution de l'équation Schrödinger à deux dimensions :

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^*} \frac{\partial \chi^{\alpha,m}(z,y)}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{m^*} \frac{\partial \chi^{\alpha,m}(z,y)}{\partial y} \right) \right] + (E_{\alpha,m} - U(z,y)) \chi^{\alpha,m}(z,y) = 0 \quad (2-32)$$

où encore $\chi^{\alpha,m}$ et la fonction enveloppe mais cette fois-ci à deux dimensions de telle manière que la fonction d'onde d'électron s'écrit :

$$\psi(r) = \chi^{\alpha,m}(z,y) \cdot e^{ik_x^2} \varphi(r) \quad (2-33)$$

La densité d'états dans l'espace des k par unité de longueur du fil est par conséquent donnée, compte tenu de la dégénérescence de spin par :

$$g(k) = \frac{2}{2\pi} \quad (2-34)$$

Ainsi sur la longueur de l'espace des k comprise entre $-k_x$ et $+k_x$, le nombre d'états est donné par :

$$\boxed{\times} \quad (2-35)$$

Soit en explicitant k_x en fonction de l'énergie :

$$N = \frac{2}{\pi\hbar} \sqrt{2m^*(E - E_{\alpha,m})} \quad (2-36)$$

En suivant les mêmes étapes du cas précédente la densité d'états dans ce cas devient :

$$g_{\alpha,m}(E) = \frac{1}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{2m^*}{E - E_{\alpha,m}}} \quad (2-37)$$

C'est une spécifié d'un système à une dimension, la densité d'états présente un maximum et même une singularité, au bas de chaque sous-bande.

La population électronique de chaque sous-bande d'énergie est alors donné par :

$$n_{\alpha,m} = \int_{E_{\alpha,m}}^{\infty} \frac{1}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{2m^*}{(E - E_{\alpha,m})}} \frac{dE}{\left(1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)\right)} \quad (2-38)$$

où

$$n_{\alpha,m} = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2m^* k_B T}{\hbar^2}\right)^{1/2} F_{-1/2}\left(\frac{E_F - E_{\alpha,m}}{k_B T}\right) \quad (2-39)$$

avec $F_{-1/2}$ représente l'intégral de Fermi d'ordre $-1/2$

Ainsi la distribution spatiale d'électron devient :

$$n(x, y) = \sum_{(\alpha,m)=1}^{(\alpha,m)} \left| \chi^{\alpha,m}(x, y) \right|^2 \times \int_{E_k}^{\infty} \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi\hbar \sqrt{E - E_{\alpha,m}} \left[1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)\right]} dE \quad (2-40)$$

Finalement, il en résulte que le calcul des états électroniques doit se faire de manière auto-cohérente, qui sera discuté au chapitre suivant.

2.5. Transport quantique dans les structures de basse dimensionnalité

Cette partie s'attache plus particulièrement aux régimes de transport des électrons, dans des structures de basse dimensionnalité comme dans les diodes tunnel résonantes ou les transistor HEMT, néanmoins elle dépasse le cadre de notre mémoire.

2.5.1 Les régimes de transport

Depuis une vingtaine d'années, la recherche dans le domaine de la physique des semiconducteurs a focalisé ses efforts sur les systèmes de basse dimensionnalité (2D,1D,0D). Dans certains de ces systèmes, le mouvement des électrons est cohérent; autrement dit les électrons se déplacent dans le système sans effectuer de collisions inélastiques, et la fonction d'onde associée à ces particules - qui est une notion quantique - garde alors une phase bien définie. L'aspect ondulatoire des électrons se manifeste alors par des phénomènes

d'interférences quantiques. La physique associée à ces systèmes électroniques de taille intermédiaire entre le monde microscopique et le monde macroscopique est également dénommée physique *mésoscopique*, terme introduit par van Kampen [28] et dont l'étymologie remonte au préfixe latin méso, au milieu. Un système mésoscopique contient environ 10^3 à 10^6 atomes, mais la frontière avec le macroscopique dépend largement du contexte. Ses dimensions peuvent varier de quelques nanomètres à quelques centaines de microns; en fait elles dépendent de longueurs caractéristiques qui sont elles-même fortement dépendantes de la température, des matériaux, des champs électromagnétiques. Ces longueurs sont la longueur d'onde de De Broglie λ_F , le libre parcours moyen électronique l_e et la longueur de cohérence de phase l_φ . Lorsque l'on étudie de systèmes mésoscopiques, la comparaison des dimensions du système avec ces longueurs caractéristiques est déterminante. La définition précise de ces grandeurs va nous permettre de distinguer alors les différents régimes de transport.

2.5.1.1 Grandeurs caractéristiques

* *Longueur d'onde de Fermi* λ_F —. A température nulle, les électrons occupent tous les états de vecteur d'onde \vec{k} tel que $|\vec{k}| \leq k_F$, où k_F est le vecteur d'onde de Fermi. Seuls les électrons qui ont une énergie proche de E_F participent à la conduction. La longueur qui lui correspond, définie par $\lambda_F = 2\pi/k_F$, est donc une longueur caractéristique. C'est la plus petite de toutes, de l'ordre de quelques centaines d'Angstrôm pour des systèmes bidimensionnels à base d'hétérostructures semiconductrices, on rappelle que pour ces systèmes $k_F = \sqrt{2\pi n_{2D}}$ et typiquement $n_{2D} \approx 1-6 \times 10^{11} / \text{cm}^2$. Si on considère un système de dimensions $L_x < L_y < L_z$, λ_F permet de distinguer les différentes dimensionnalités [29]:

0D ($\lambda_F \gg L_{x,y,z}$), 1D ($L_x < \lambda_F \sim L_y \ll L_z$), 2D ($\lambda_F \sim L_x \ll L_{y,z}$), 3D ($\lambda_F \ll L_{x,y,z}$).

* *Libre parcours électronique* l_e —. Un électron qui se déplace dans un cristal subit lors de son mouvement des collisions, sur les impuretés du réseau par exemple ou bien encore dues aux vibrations du réseau (phonons). On peut alors introduire le temps moyen entre deux collisions τ_c . On parle de collisions élastiques lorsque ces dernières ont pour effet de changer le vecteur d'onde (ou moment), tout en conservant l'énergie de la particule. Pour être plus précis, on définit le temps de relaxation τ_e comme étant le temps entre deux collisions qui conduisent à une large déviation du vecteur d'onde, et suivant les systèmes ce temps est plus

ou moins grand devant le temps entre deux collisions τ_c . Les électrons qui participent à la conduction se déplacent à la vitesse de Fermi, ce qui nous permet d'écrire

$$l_e = v_F \tau_e \quad (2-41)$$

Pour les hétérostructures AlGaAs/GaAs, l_e est de l'ordre de 10 μm .

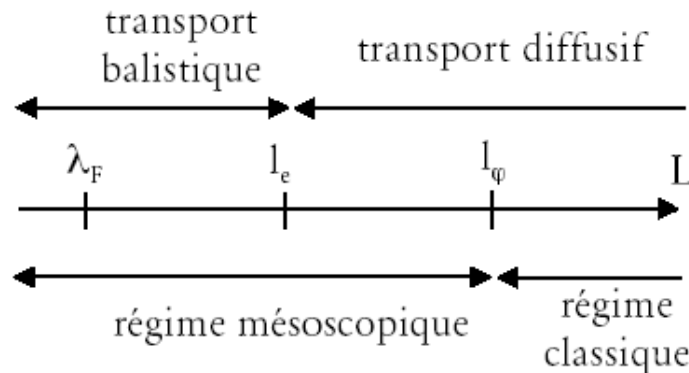


Figure 2-2 Longueurs caractéristiques et régimes de transport correspondant. Ce schéma correspond au cas où $l_\phi > l_e$, à suffisamment basse température, c'est-à-dire pour le cas où le transport est cohérent.

* *Longueur de cohérence de phase l_ϕ* —. De la même manière que précédemment, certaines collisions peuvent conduire à la destruction de la phase de la fonction d'onde électronique. Ces collisions, qui engagent un processus dynamique et changent l'énergie de la particule, sont appelées collisions inélastiques. On définit alors la longueur de cohérence de phase comme la longueur sur laquelle l'électron garde la mémoire de sa phase. Il s'agit donc de la grandeur caractéristique pour les interférences des fonctions d'onde électroniques. l_ϕ augmente avec la température, et dans les systèmes mésoscopiques, celle-ci est supérieure au libre parcours l_e (voir figure 2.2). Si la définition du temps de relaxation de la phase τ_ϕ ne pose pas de problèmes, à savoir le temps moyen entre deux collisions inélastiques, la relation entre l_ϕ et τ_ϕ est plus délicate. Dans le cas où $\tau_\phi \leq \tau_e$, alors on peut utiliser la forme simple :

$$l_\phi = v_F \tau_\phi \quad (2-42)$$

et qui physiquement correspond au cas où les électrons se déplacent en ligne droite entre deux collisions inélastiques. Dans le cas contraire où $\tau_\phi \gg \tau_e$, les électrons effectuent plusieurs

collisions avant de perdre la mémoire de leur phase, et le trajet moyen n'est pas une ligne droite. Il faut alors moyenniser la distance parcourue, en considérant la distribution angulaire aléatoire des directions prises après les collisions [30] et le nombre de trajectoires (τ_ϕ / τ_e) de longueur $v_F \tau_e$ entre ces mêmes collisions. Le résultat donne :

$$l_\phi = \sqrt{\frac{1}{2} v_F^2 \tau_e \tau_\phi} = \sqrt{D \tau_\phi} \quad (2-43)$$

où D est appelé coefficient de diffusion.

2.5.1.2 Les différents régimes de transports

Les considérations précédentes nous permettent maintenant de distinguer différents régimes de transport (figure 2.3). Soit un conducteur plan de dimensions $L \times W$, avec $L > W$. Si l'on considère le cas $l_\phi > L$, les électrons sont alors traités comme des particules cohérentes, les phénomènes d'interférences modifiant fortement le transport dit cohérent. A l'inverse, le régime correspondant à $l_\phi < L$, que nous appellerons classique, et pour lequel les électrons sont des particules purement classiques, à l'image de boules de billard.

* *Transport diffusif classique* —. Dans ce cas, où $l_\phi < L$, le transport se comprend principalement en terme de collisions inélastiques, détruisant toute corrélation, et par conséquent est indépendant de la forme du système. Les propriétés macroscopiques d'un tel système sont définies par la statistique, et décrites par le modèle de Drude [31].

* *Transport balistique* —. Lorsque les dimensions du système sont inférieures au libre parcours moyen $l_\phi > l_e > L, W$, le transport est dit balistique. Les électrons se déplacent librement dans la structure sans qu'aucune collision de quelque sorte que ce soit, inélastique ou élastique, ne se produise, si ce n'est sur les bords de l'échantillon. Les propriétés de transport sont essentiellement gouvernées par la géométrie du système, et le type de collision sur ces bords (spéculaire ou non).

* *Transport mésoscopique diffusif* —. Enfin, on peut distinguer un cas intermédiaire, pour lequel $W < l_e < L < l_\phi$, que nous nommerons mésoscopique diffusif des fois dite quasi-balistique. La trajectoire des électrons est influencée par de nombreuses collisions élastiques sur les centres diffuseurs, et la particule décrit donc un chemin aléatoire. Cependant, la cohérence de phase est toujours conservée. Les effets d'interférences doivent être encore pris

en compte. Ces corrections quantiques à la théorie classique rendent le système sensible à la configuration précise des impuretés [32].

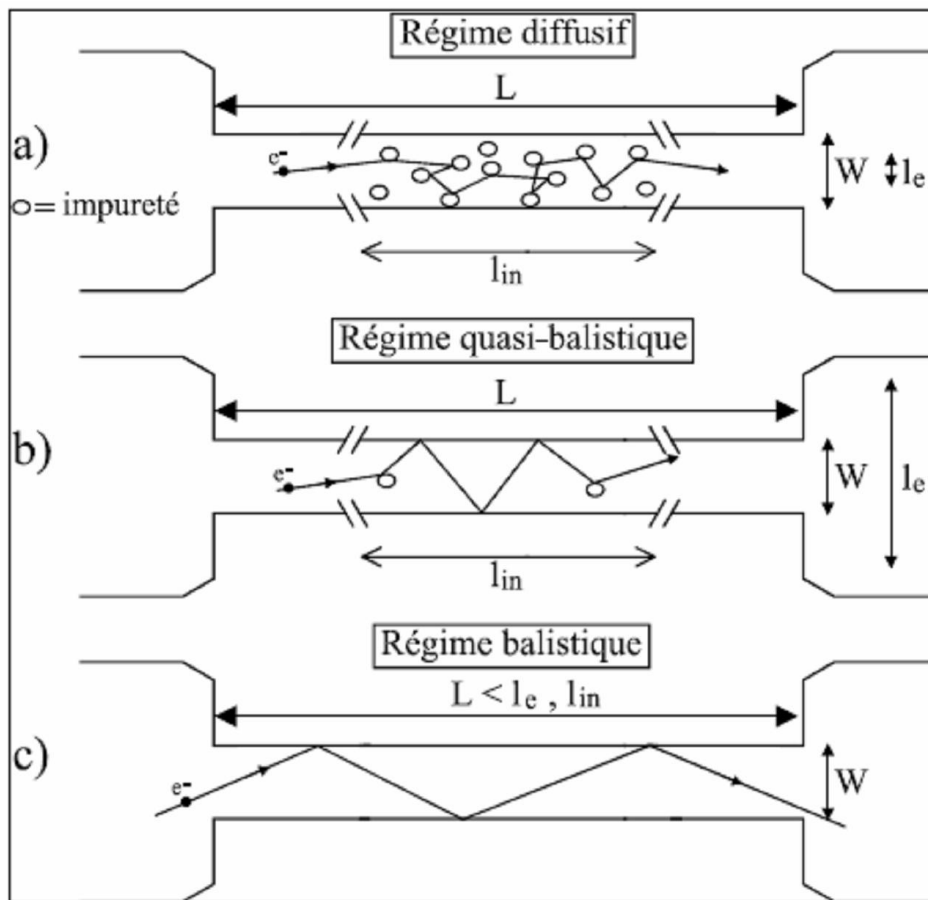


Figure 2-3: Différents régimes de transport: en haut, le régime diffusif, propre aux métaux ou aux semi-conducteurs. Au milieu, un régime intermédiaire, dit quasi-balistique. Enfin, en bas, le régime balistique, auquel nous nous intéresserons. Dans ce cas, l'électron traverse la structure sans être diffusé par des impuretés.

2.5.2 Transport quantique balistique à travers les barrières tunnel

Le formalisme mathématique de transport quantique est trop compliqué. On va exposer ici quelque aspect de la conduction dans une structure présentant deux barrières tunnel pour les électrons à savoir la diode tunnel résonante. Le régime de transport à travers cette structure pour des raisons de simplicité, est considéré comme purement balistique où les porteurs traversent la structure sans subir des collisions. Dans ce cas, le courant de collecteur émetteur d'une diode tunnel est contrôlé par la transmission des porteurs à travers les barrières de la jonction qui peut se faire soit par émission thermoïonique pour les électrons ayant une énergie supérieure au maximum de la barrière, soit par effet tunnel pour les

électrons de plus faibles énergies. Pour cela l'équation de Schrödinger est appropriée pour décrire le transport quantique purement balistique puisque cette équation n'inclue aucun mécanisme de collision, lesquels sont habituellement présents dans les dispositifs semiconducteurs. Des modèles quantiques qui prennent en considération les collisions des électrons avec les impuretés du réseau cristallin ou avec des phonons, sont très difficiles à traiter et encore dans une phase préliminaire [33].

Soit la structure de bande typique à deux barrières de potentiel d'une diode tunnel résonante tel que celui représenté sur la figure 2-4. On suppose que chaque extrémité de la diode est connectée à un réservoir de charge qui est défini comme un ensemble d'électrons qui peut absorber des électrons de n'importe quelle énergie mais qui ne les réémet qu'avec une énergie inférieure ou égale à celle de son potentiel chimique E_F [34], dans notre cas les réservoirs sont tout simplement présentés par deux semiconducteurs dégénérés caractérisés par leur niveaux de Fermi locaux E_F^e et E_F^c . Si on suppose que le dopage est le même dans les deux semiconducteurs de contact, le fait d'appliquer une petite tension V aux bornes de la jonction a comme effet, en premier lieu, de décaler les niveaux de Fermi des contacts d'une énergie eV et de permettre aux électrons de l'un des contacts de trouver des états vides de même énergie dans le second contact.

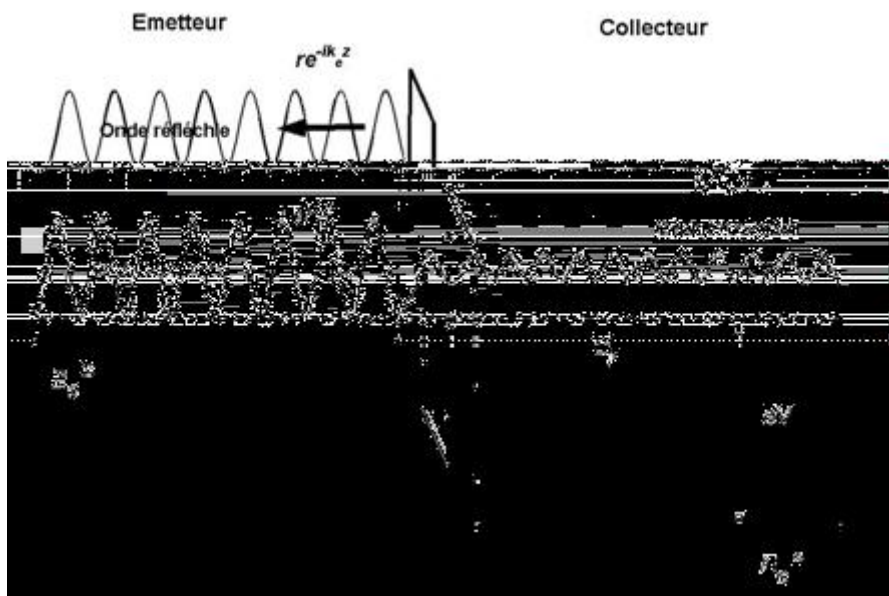


Figure 2-4: Structure schématique de bande d'énergie à deux barrières de potentiel d'une diode tunnel résonante présentant une onde incidente, transmise et réfléchie

Il est possible de décrire l'effet tunnel à l'aide de deux paramètres: les coefficients de réflexion r et de transmission t , qui désignent respectivement la probabilité pour la particule

quantique d'être réfléchi par la barrière de potentiel et d'être transmise à travers celle-ci. Ces deux processus sont les deux seuls possibles, la somme de leur probabilité est donc égale à l'unité: $r + t = 1$.

Considérons un électron de vecteur d'onde \vec{k} dans l'émetteur, il doit traverser la barrière par effet tunnel pour atteindre le collecteur. La structure n'étant pas invariante par translation suivant z , la composante k_z du vecteur d'onde n'est pas conservée par contre, la composante $k_{//} = (k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$ est conservée. Dans l'approximation de la masse effective on peut donc séparer le mouvement de l'électron suivant z de son mouvement dans le plan. Dans l'émetteur, le puit et le collecteur l'électrons se comporte comme une particule libre de masse effective m^* . Dans le plan xy sa fonction d'onde est une fonction plane, son énergie est donné par $E_{//} = \hbar^2 k_{//}^2 / 2m^*$. Dans la direction z son mouvement est régi par l'équation de Schrödinger unidimensionnel:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m^*} \frac{d}{dz} \right) + V(z) \right) \Psi_{E_z}(z) = E_z \Psi_{E_z}(z) \quad (2-44)$$

décrit l'évolution d'un électron de masse m^* , de charge élémentaire e , d'énergie d'injection E_z , exposé à un potentiel électrostatique V . La grandeur essentielle est la fonction d'onde Ψ_{E_z} associée à l'énergie E_z , et telle que $|\Psi_{E_z}(z)|^2 dz$ représente la probabilité de trouver l'électron dans le volume dz autour de z . Les grandeurs macroscopiques, comme la densité des particules et la densité de courant sont obtenue en sommant la probabilité d'effet tunnel sur toute la distribution des électrons dans l'émetteur.

2.5.2.1 Densité d'électrons

La densité d'électrons d'énergie E_z dans l'émetteur est donnée par :

$$n_e(E_z) = \int_0^\infty g(E_{//}) f(E) dE_{//} \quad (2-45)$$

où $f(E)$ est la fonction de Fermi et $g(E_{//})$ la densité d'états bidimensionnelle dans le plan xy . Cette densité d'états est donnée par l'équation (2-21).

$$g(E_{//}) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \quad (2-46)$$

Soit

$$n_e(E_z) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \int_{E_z}^{\infty} \frac{dE_{//}}{1 + \exp\left(\frac{E_z + E_{//} - E_F^e}{k_B T}\right)} \quad (2-47)$$

En explicitant l'intégrale de Fermi on obtient :

$$n_e(E_z) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} k_B T \ln\left(1 + \exp\left(\frac{E_F^e - E_z}{k_B T}\right)\right) \quad (2-48)$$

où E_F^e est l'énergie de Fermi dans l'émetteur.

La probabilité de trouver l'électron d'énergie E_z au point d'abscisse z est donné par $|\Psi(z)|^2$ de sorte que la densité d'électrons :

$$n_e(E_z, z) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} k_B T \ln\left(1 + \exp\left(\frac{E_F^e - E_z}{k_B T}\right)\right) |\Psi(z)|^2 \quad (2-49)$$

La densité totale d'électrons émit par l'émetteur s'écrit alors

$$n_e(E_z, z) = \sum_{E_z > 0} n_e(E_z, z) \quad (2-50)$$

En remplaçant la somme discret par une intégrale sur k_z , et après intégration sur E_z on obtient :

$$n_e(z) = \int_0^{\infty} \frac{1}{2\pi} \frac{dk_z}{dE_z} |\Psi(z)|^2 \left[\frac{m^*}{\pi\hbar^2} k_B T \ln\left(1 + \exp\left(\frac{E_F^e - E_c^e - E_z}{k_B T}\right)\right) \right] dE_z \quad (2-51)$$

où E_c^e est le bas de la bande de conduction dans l'émetteur.

C'est la distribution spatiale d'électrons émis par l'émetteur.

Le même type de développement permet d'obtenir l'expression de densité émise par le collecteur :

$$n_c(z) = \int_0^{\infty} \frac{1}{2\pi} \frac{dk_z}{dE_z} |\Psi(z)|^2 \left[\frac{m^*}{\pi\hbar^2} k_B T \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_F^c - E_c^c - E_z}{k_B T} \right) \right) \right] dE_z \quad (2-52)$$

La densité total s'obtient par la somme de ces deux contribution :

$$n(z) = n_e(z) + n_c(z) \quad (2-53)$$

2.5.2.2 Densité de courant

La loi de variation du coefficient de transmission des électrons à travers la structure en fonction de leur énergie longitudinal E_z , pilote la loi de variation du courant à travers le dipôle en fonction de sa polarisation. Ce courant est obtenu en sommant la probabilité d'effet tunnel sur toute la distribution des électrons dans l'émetteur.

La probabilité de transfert émetteur → collecteur, d'un électron d'énergie E_z , est donné par le coefficient de transmission $t(E_z)$, de sorte que la densité d'électrons transmis est donnée par :

$$n_{et}(E_z) = t(E_z) n_e(E_z) \quad (2-54)$$

Soit en explicitant $n_e(E_z)$

$$n_{et}(E_z) = \frac{m^* k_B T}{\pi\hbar^2} t(E_z) \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_F^e - E_z}{k_B T} \right) \right) \quad (2-55)$$

Le courant transporté par ces électrons s'écrit :

$$J_{e \rightarrow c}(E_z) = n_{et}(E_z) \cdot e \cdot v(E_z) \quad (2-56)$$

où la vitesse suivant z est donnée par :

$$v(E_z) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE_z}{dk_z} \quad (2-57)$$

De sorte que le courant transporter par les électrons d'énergie E_z dans l'émetteur s'écrit

$$J_{e \rightarrow c}(E_z) = \frac{e}{\hbar} n_{et}(E_z) \frac{dE_z}{dk_z} \quad (2-58)$$

Le courant transporté par tous les électrons de l'émetteur s'écrit alors

$$J_{e \rightarrow c} = \frac{e}{\hbar} \sum_{k_z > 0} n_{et}(E_z) \frac{dE_z}{dk_z} \quad (2-59)$$

En remplaçant la somme par une intégrale sur k_z

$$J_{e \rightarrow c} = \frac{e}{2\pi\hbar} \int_{E_c^e}^{\infty} n_{et}(E_z) \frac{dE_z}{dk_z} dk_z \quad (2-60)$$

En intégrant non sur la variable k_z mais sur la variable E_z on obtient :

$$J_{e \rightarrow c} = \frac{e}{2\pi\hbar} \int_{E_c^e}^{\infty} n_{et}(E_z) dE_z \quad (2-61)$$

En explicitant $n_{et}(E_z)$ le courant s'écrit

$$J_{e \rightarrow c} = \frac{em^* k_B T}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} t(E_z) \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_F^e - E_c^e - E_z}{k_B T} \right) \right) dE_z \quad (2-62)$$

Le même type de développement aussi permet d'obtenir l'expression du courant collecteur \rightarrow émetteur

$$J_{e \rightarrow c} = \frac{em^* k_B T}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} t(E_z) \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_F^c - E_c^e - E_z}{k_B T} \right) \right) dE_z \quad (2-63)$$

Le courant résultant est donné par la différence de ces deux courants

$$J_{total} = J_{e \rightarrow c} - J_{c \rightarrow e} \quad (2-64)$$

Donc il reste à déterminer $t(E_z)$. Divers modèles théoriques plus ou moins sophistiqués permettent de calculer le facteur de transmission t à travers une barrière de potentiel. Le plus simple est basé sur l'utilisation de la matrice de transfert [35,36] dans cette méthode l'énergie potentielle est décomposé en des paliers de potentiel sur lesquels la solution de l'équation de Schrödinger est connue.