

THÈSE

En vue de l'obtention du : *DOCTORAT*

Structure de Recherche : Architecture et Conception des Systèmes Informatiques
Discipline : Science de L'Ingénieur
Spécialité : Électronique

Présentée et soutenue le : 17/11/2018 par :

Mustapha MAAHOUD

**Phénomènes de Transport Électroniques :
Dans des Couches Minces Métalliques et
Semiconductrices type Silicium-p.**

JURY

Najem HASSANAIN	PES, Université Mohammed V, Faculté des Sciences de Rabat	Président/Rapporteur
Abdelmoumen TABIYAOU	PES, Université Hassan I, Faculté des sciences et techniques de Settat	Rapporteur/Examinateur
Larbi EL ABDELLAOUI	PES, Université Hassan I, Faculté des sciences et techniques de Settat	Rapporteur/Examinateur
Hamid HAMRI	PES, Université Mohammed V, Faculté des Sciences de Rabat	Invité
Lhoussaine MASMOUDI	PES, Université Ibn Tofail, Faculté des Sciences de Kenitra	Directeur de thèse

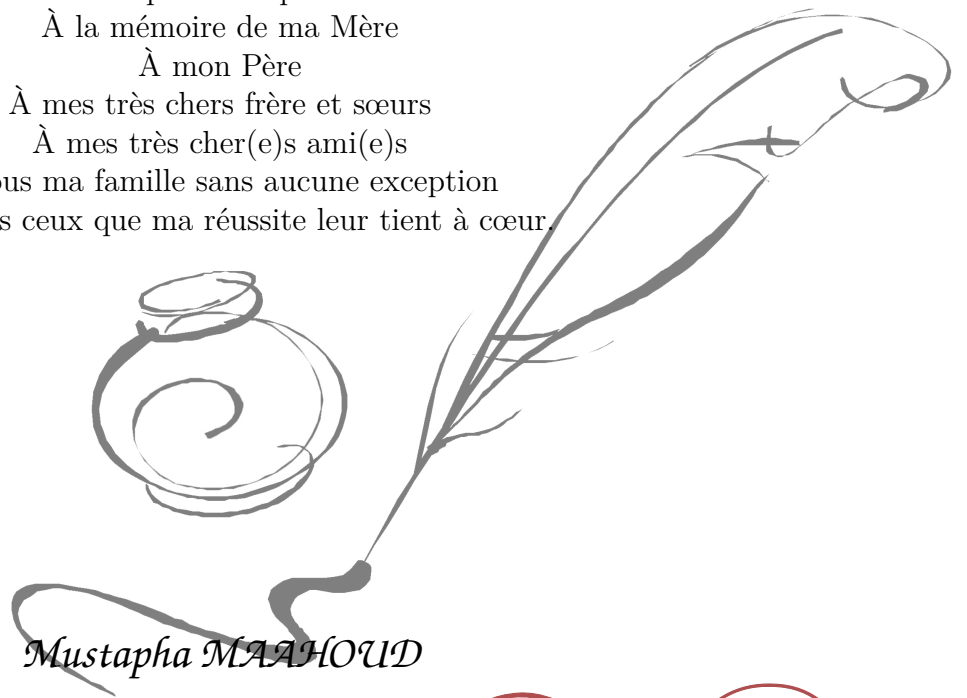
Année Universitaire : 2018/2019



Dedicas



À mes respectueux professeurs
À la mémoire de ma Mère
À mon Père
À mes très chers frère et sœurs
À mes très cher(e)s ami(e)s
À tous ma famille sans aucune exception
Et à tous ceux que ma réussite leur tient à cœur.



Mustapha MAARHOU



Remerciements

Cette thèse de Doctorat a été effectuée au sein du Laboratoire d'Architecture et Conception des Systèmes Informatiques de la Faculté des Sciences de Rabat, dirigé par Monsieur **Lhoussaine MASMOUDI** (PES), Professeur de l'enseignement supérieur à la Faculté des Sciences de Rabat. Je tiens à le remercier chaleureusement pour m'avoir accueilli au ACSIs. Je le remercie également pour son aide, sa disponibilité.

Un grand merci également à mon encadrant Monsieur **Lhoussaine MASMOUDI** (PES), Professeur de l'enseignement supérieur à la Faculté des Sciences de Rabat. Je le remercie pour son aide précieuse, pour la qualité de ses conseils, pour avoir toujours été là pour m'encourager, pour me soutenir, et pour m'avoir permis de reprendre confiance et m'avoir laissé la liberté nécessaire à l'accomplissement de mes travaux.

Ma sincère gratitude va également à Monsieur **Najem HASSANAIN** (PES), professeur à la faculté des sciences de Rabat, qui a accepté la présidence du jury et d'avoir accepté d'être président et rapporteur de ma thèse. Je vous prie d'accepter, Monsieur, l'expression de mon respect et de ma profonde gratitude.

Mes salutations vont également à Monsieur **Abdelmoumen TABIYAOU** (PES), professeur à la Faculté des sciences et techniques Settat, pour avoir accepté d'être rapporteur et Examinateur de ma thèse. Je le remercie également pour son aide, ses discussions, ses encouragements et sa motivation.

Mes remerciements vont également à Monsieur **Larbi EL ABDELLAOUI** (PES), Professeur à la Faculté des sciences et techniques Settat, pour avoir accepté d'être le rapporteur et Examinateur de ma thèse.

Ma sincère gratitude va également à Monsieur **Hamid HAMRI** (PES), Professeur à la Faculté des Sciences de Rabat, pour avoir accepté de faire partie des membres du jury de cette thèse. Je le remercie pour son intérêt et sa responsabilité en tant invité de ce travail. Je vous prie d'agréer, Monsieur, l'expression de mes sentiments distingués.

Resumes

Dans ce travail, nous nous proposons de faire une étude théorique et analytique du phénomène de transport électronique dans des couches minces métalliques, semiconductrices, et fils fins métalliques. Un rappel des différents modèles de conduction à savoir ; le modèle de Fuchs-Sondheimer, Cottey, Mayadas-Shatzkes, et le modèle de Tossier qui s'avèrent nécessaire pour cette étude. Nous donnons les équations approchées de la conductivité électrique et la constante de Hall dans des couches minces et des fils fins métalliques. Les couches minces semiconductrices de type Si-p sont étudiées analytiquement et numériquement, ainsi nous avons déterminé la vitesse et la mobilité des trous en régime transitoire et stationnaire, en fonction de l'épaisseur de la couche, des densités des impuretés et du champ électrique. La méthode de Monte Carlo est utilisée pour les calculs numériques.

Mots-clés : Couche, mince, métal, semiconducteur, fil fin, Hall, impuretés, phonons, parcours, relaxation, Monte Carlo, vitesse de dérive, conductivité, mobilité, résistivité.

Abstract

In this work, we propose to make a theoretical and analytical study of the phenomenon of electronic transport in metallic thin layers, semiconductors, and metallic thin wires. A reminder of the different conduction models, namely the Fuchs-Sondheimer, Cottey, Mayadas-Shatzkes, and Tossler models, is necessary for this study. We give the approximate equations of the electrical conductivity and the Hall constant in thin layers and thin metallic wires. Semiconducting thin layers of the Si-p type are studied analytically and numerically, and the velocity and mobility of holes are determined in transient and stationary regime, as a function of the layers thickness, impurity densities and electric field. The Monte Carlo method is used for the numerical calculations.

Keywords : Layer, Thin, Metal, Semiconductor, Thin wire, Hall, Impurities, Phonons, Path, Relaxation, Monte Carlo, Drift rate, Conductivity, Mobility, Resistivity.

Table des matières

Dédicaces	i
Remerciements	ii
Résumé	iii
Abstract	iv
Table des Matières	ix
Abréviations	xvi
Symboles	xviii
Introduction	1
1 Phénomènes de transport électroniques dans des couches minces métalliques et de deux fils fins coaxiaux métalliques	5
1.1 Différents modèles de conceptions	6
1.1.1 Modèle de Fuchs- Sondheimer	6
1.1.2 Modèle de Cottley	9
1.1.3 Modèle de Namba	11
1.1.4 Modèle de Myadas-Shatzkes	13
1.1.5 Modèle statique unidimensionnel	17
1.1.6 Modèle statique tridimensionnel	19
1.1.7 Rappel de linéarisation des expressions générales de la conductivité électrique	24
1.2 Coefficient de Hall dans les couches minces métalliques	25
1.2.1 Principe d'effet Hall.	26

TABLE DES MATIÈRES

1.2.2	Expression de coefficient de Hall	28
1.3	Modélisation de la conductivité électrique de deux fils fins coaxiaux	30
1.3.1	Préambule	30
1.3.2	Conductivité électrique d'un fil fin métallique	31
1.3.3	Conductivité électrique de deux fils fins coaxiaux	32
1.3.4	Résultats numériques et discussion	35
1.4	Conclusion	38
2	Silicium massif et en couche mince	41
2.1	Introduction	41
2.2	la physique de silicium	42
2.2.1	La cristallographie	42
2.2.2	La structure des bandes de Silicium	43
2.2.3	Diagramme des bandes d'énergie de Silicium	43
2.2.4	Forme de bande de valence et l'énergie du modèle étudiant	45
2.2.5	Les états de Silicium utilisé	46
2.2.6	Dopage de Silicium	47
2.2.7	Vitesse de dérive transitoire du porteur	48
2.2.8	Mobilité des trous	48
2.3	Probabilité des collisions et temps de relaxations	49
2.3.1	Catégories de collisions	49
2.3.2	Effet des phonons acoustique et optique non polaire	50
2.3.3	Effets des impuretés ionisés	51
2.3.4	Effets des joints de grains	52
2.4	Temps de relaxation et le libre parcours moyen	53
2.4.1	Temps de relaxation sur les phonons acoustiques et optiques	53
2.4.2	Temps de relaxation sur les impuretés	53
2.4.3	Temps de relaxation sur les joints de grains	54
2.4.4	Temps de relaxation sur les surfaces externes	54
2.4.5	Temps de collision résultant et le libre parcours résultant	55
2.4.6	Résistivité électrique réduite	55
2.5	Coefficient de Hall dans les couches semiconductrices	57
2.5.1	Rappel sur le coefficient de Hall dans les couches minces métalliques	57

TABLE DES MATIÈRES

2.5.2	Principe d'effet Hall	57
2.5.3	Rappels sur l'effet Hall dans une couche semiconductrice	57
2.5.4	Nouvelle méthode géométrique pour R_H	59
2.6	Conclusion	62
3	La modélisation des Phénomènes de transport électroniques dans les couches minces de Si-p	63
3.1	Introduction	63
3.2	Simulation numérique par la méthode de Monte Carlo	64
3.2.1	Distribution initial des porteurs	64
3.2.2	Vol libre	68
3.2.3	Déterminations de type d'interaction	69
3.2.4	Détermination du vecteur d'état après l'interaction	69
3.3	Organigramme de la simulation numérique	76
3.4	Résultats numériques et discussions	76
3.4.1	Résultats à différents épaisseurs et différents dopages	76
3.4.2	Résultats à l'existence des joints de grains et sans impuretés	80
	Conclusion générale	88
	Bibliographie	91
	Publications	96
	Annexes	98

Liste des tableaux

1.1	Données expérimentales des fils en Au et Ag [50, 51]	37
2.1	Paramètres utilisées pour Si-p	52
3.1	Vitesse stationnaire en fonction de p et du dopage à d= 10 nm et E= 10 kv/cm.	78
3.2	Vitesse de saturation et la mobilité des trous en fonction de l'épaisseur de la couche à p= 0.5 et $E = 10Kv/cm$	87

Table des figures

1.1	Géométrie du modèle de $F - S$	7
1.2	Géométrie du modèle de Cottey.	10
1.3	Géométrie du modèle de Namba.	12
1.4	Géométrie du modèle de M - S	13
1.5	Géométrie du modèle unidimensionnel	18
1.6	Géométrie du modèle tridimensionnel	20
1.7	Représentation géométrique de la trajectoire des électrons soumis aux champs \vec{E} et \vec{B}	27
1.8	Les libres parcours effectifs de la trajectoire des électrons l' suivant OX' et δl suivant (OY')	27
1.9	(a) deux fils fins coaxiaux, fil N°1 de rayon r_1 et de résistivité ρ_{f1} , fil N°2 de rayon r_2 et de résistivité ρ_{f2} , (b) fil équivalent de rayon $r = r_1$ et de résistivité ρ_{f1}	32
1.10	Géométrie du libre parcours moyen de N électrons de conduction dans un double fils fins métalliques soumis au champ \vec{E}	33
1.11	Variation de la conduction électrique réduite en fonction de l'épaisseur réduite k_1 , $s = 1$, et avec $p = 0.75$	36
1.12	Variation de la conduction électrique réduite en fonction de l'épaisseur réduite k_1 , $s = 1$, $p = 0.25$	37
1.13	Variation de la conduction électrique réduite en fonction de l'épaisseur réduite k_1	38
1.14	Variation de la conduction électrique réduite en fonction de l'épaisseur réduite k_1	39
1.15	Conductivité électrique réduite en fonction de l'épaisseur réduite k_1	39

TABLE DES FIGURES

2.1	Maille cubique conventionnelle de la structure diamant d'après N. W. ASH-CROFT et N. D. MERMIN [53]	42
2.2	Orientation spatial des liaisons de valence du Silicium	43
2.3	Structure de bande du silicium [55]	44
2.4	Semi-conducteur type P. a) Diagramme des bandes d'énergie b) Densités d'états énergétique. c) Distributions de Fermi-Dirac d) Densités énergétiques de porteurs (les densités de porteurs n et p correspondent aux surfaces hachurées)[56]	44
2.5	Masse effective en fonction du champ électrique[59]	45
2.6	Arrangement des atomes pour le Si-mono et Si-poly	47
2.7	Ionisation d'un atome de Bore substitutionnel et migration de trou crée [54]	48
3.1	Mouvement d'un porteur en absence du champ électrique	64
3.2	Coordonnées sphériques de \vec{k}_i dans R'	67
3.3	Simulation Monte Carlo d'une trajectoire dans l'espace des vitesses	68
3.4	Détermination du type de collision	69
3.5	Coordonnées sphériques de \vec{k}_i dans $R'(k, \beta_i, \psi_i)$ lié à \vec{E}	71
3.6	Coordonnées sphériques de \vec{k} dans R'	74
3.7	Organigramme de la simulation numérique	75
3.8	Vitesse des trous en régime transitoire en fonction du dopage et du champ électrique	76
3.9	Vitesse des trous en régime transitoire à différentes valeurs de p et à deux dopages différents avec $d = 10nm$ et $E = 10kv/cm$	77
3.10	Vitesse des trous en régime transitoire à différentes valeurs de p et à deux dopages différents avec $d = 10nm$ et $E = 10kv/cm^{-3}$	78
3.11	La mobilité des trous en fonction de l'inverse de l'épaisseur d de la couche Si-p à $p = 0.5$ et $E = 10kv/cm^{-3}$	79
3.12	La résistivité électrique réduite en fonction de l'épaisseur d à différentes valeurs de p. Les courbes représentent l'équation (2.30) et les symboles les valeurs numériques	80
3.13	Les résistivités électriques de Ge et Si-p en fonction de l'inverse de l'épaisseur d de la couche	81

TABLE DES FIGURES

3.14 Vitesse en régime transitoire à différentes valeurs de d . $P=0.5$; $D=10\text{nm}$; $t=0.5$ et $E = 10\text{kv}/\text{cm}$	82
3.15 vitesse Vitesse de dérive à différentes valeurs de p . $D=D=10\text{nm}$; $t=0.5$ et $E = 10\text{kv}/\text{cm}^{-3}$	82
3.16 Résistivité électrique réduite en fonction de l'épaisseur d à différentes valeurs de t ; $p = 0.5$; $D = 10\text{nm}$ et $E = 10\text{kv}/\text{cm}^{-3}$	83
3.17 Résistivité électrique réduite en fonction de l'épaisseur d des différents p ; $t=0.5$ et $D=10\text{nm}$. Les symboles représentant les valeurs numériques et le trait plein l'équation théorique	83
3.18 Vitesse stationnaire en fonction du dopage à $d = 10\text{nm}$; $p = t = 0.5$ et à $E = 10\text{kv}/\text{cm}^{-3}$	85
3.19 Vitesse des trous en régime transitoire en fonction du dopage et différents valeurs de p , pour $t = 0.5$, $d = 20$ et $E = 10\text{kv}/\text{cm}^{-3}$	85
3.20 Vitesse stationnaire en fonction du dopage à $d = 10\text{nm}$; $p = t = 0.5$ et à $E = 10\text{kv}/\text{cm}^{-3}$	86
3.21 Vitesse des trous en régime transitoire en fonction du dopage et différents valeurs de t ; et pour $p = 0.5$ d'une couche d'épaisseur $d=20$ nm avec $E=10\text{kv}/\text{cm}^{-3}$	86

Table d'abréviations

ABBREVIATIONS

<i>Si - p</i>	Silicium de type p
<i>M - S</i>	Mayadas-Shatzkes
<i>F - S</i>	Fuchs- Sondheimer
<i>B - H</i>	Brooks-Herring
<i>Ag/Au</i>	Fil fin coaxiaux d'argent et d'or
<i>l.p.m</i>	Libre parcours moyen
<i>Si - mono</i>	Silicium monocristallin
<i>Si - poly</i>	Silicium polycristallin

Symboles

SYMBOLES

m^*	La masse effective des électrons
p	Coefficient de réflexion spéculaire
t	Coefficient de transmission
σ_f	La conductivité électrique d'une couche mince
d_a	L'épaisseur moyen de la couche mince
d_a	L'épaisseur moyen de la couche mince
ρ	Le coefficient de réflexion
t	Le coefficient de transmission
ε_F	L'énergie des porteurs à la surface de Fermi
r_1	Rayon du fil N°1
r_2	Rayon du fil N°2
R_1	Résistance du fil N°1
R_2	Résistance du fil N°2
L	La longueur des deux fils
n	Le nombre d'électrons libres par unité de volume
λ	Le libre parcours du porteur
λ_0	Le libre parcours moyen des électrons dans l'état massif
λ_g^*	Le libre parcours moyen associé au joints de grains
h	La constante de Planck égale à 6.6210^{-36} Js
\hbar	La constant de Planck réduite : $\hbar^2 = \frac{h}{2\pi}$
μ'	Paramètre dimensionnel
l	Longueur de la couche
w	La largeur du film
R	Résistance
ρ	Résistivité

SYMBOLES

nm	Le nano-mètre unité de mesure des longueurs
\dot{t}	Constante d'intégration
K_B	Constante de Boltzmann
ϵ_0	Constante diélectrique du vide
τ	Le temps de relaxation
v_F	Vitesse de Fermi
ε_F	L'énergie des porteurs à la surface de Fermi
est la conductivité due aux joints de grains et aux phonons D_g	Le diamètre de grain moyen
$V(x)$	Potentiel de Dirac
V	volume du matériau
$V(x, y)$	L'énergie potentielle
m	La masse de la particule
E	La valeur propre de l'énergie
P	La densité de probabilité
λ_0	Le libre parcours moyen des porteurs dans le matériau
B	l'induction magnétique.
Ξ_{op}	Constante pour collisions optiques

SYMBOLES

e	la charge d'électron. électrons dans l'état massif
N_A	La densité d 'accepteurs
λ_g^*	Le libre parcours moyen associé aux joints de grains
λ_i^*	Le libre parcours moyen associé aux impertés
\vec{K}	Vecteur d'état du porteur
T	La température du reseau
T_{op}	Température du phonon optique
r_0	Le rayon de Larmor.
\vec{B}	Champ magnétique
\vec{E}	Champ électrique
J_X	Densité de courant électrique
E_H	Champ de Hall

SYMBOLES

V	Volume du matériau
P_i	La fonction de densité de probabilité des différents
F	La force résultante des forces extérieures appliquées
f	est la fonction de distribution des porteurs de conduction de métal
f_0	Est la fonction de distribution non perturbée
\vec{r}	position de l'électron à l'instant t
ξ	L'énergie de l'électron

Introduction

Les couches minces métalliques et semiconductrices sont utilisées dans un grand nombre d'applications, dans la biochimie (biopuces), la médecine, dans les capteurs. Elles sont utilisées à la réalisation de dispositifs : les têtes de lecture des disques durs (couches magnétiques) des ordinateurs, cellules photovoltaïques [1, 2, 3, 4] et à la fabrication des composants électroniques à base de silicium le plus utilisable (plus de 90 % des composants semiconducteur) et pour les applications micro électroniques [5, 6, 7, 8] telles que les mémoires [9], les dispositifs électroluminescents [10] et optoélectroniques (émetteurs et récepteurs de lumière, ...).

Dès les années 1960, le besoin d'intégrer les fonctions électroniques a conduit à utiliser la technologie des couches minces pour la réalisation des premiers circuits intégrés, et une véritable révolution technologique liée à cette invention dans le secteur d'électronique en donnant la naissance aux circuits intégrés contenant quelques milliers de transistors en 1971 et plus d'un milliard maintenant. Tous ce développement industriel apparaît parce que la physique avait permis de comprendre des propriétés électroniques des semiconducteurs. Actuellement les technologies de circuits intégrés utilisent encore le silicium comme matériau

INTRODUCTION

semiconducteur de base.

Une couche mince d'un matériau donné est un élément de ce matériau, son épaisseur a été fortement réduite, jusqu'à quelques nanomètres (des couches de 10 nm à 100 nm d'épaisseur) [11]. La différence essentielle entre le matériau à l'état massif et à l'état de couche mince est de négliger généralement, les effets des surfaces externes, par contre dans une couche mince, ce sont prépondérants. Évidemment plus que l'épaisseur est faible l'effet de surface sera prépondérante, et lorsque l'épaisseur d'une couche mince dépasse un certain seuil, l'effet d'épaisseur devienne très faible et les propriétés physique s'approchent à celles du cas massif.

La conduction électrique dans les couches minces métalliques a été l'objet d'un nombre important de travaux théoriques [12] depuis que Fuchs [13], a proposé en 1938 une formulation exprimant les conditions aux limites de la fonction de distribution des électrons de conduction, à partir du rapport du libre parcours moyen des électrons et de la dimension transversale d de la couche mince métallique. Des travaux ultérieurs ont été proposés et ont conduit à un modèle plus affiné appelé modèle de Fuchs-Sondheimer [14] en 1952. Ce dernier modèle a permis des interprétations physiques qualitatives de quelques phénomènes physiques, néanmoins son caractère unidimensionnel ne lui permet pas d'interpréter d'autres phénomènes physiques tel que l'effet Hall. On admet alors que les processus de relaxation intervenant lors des réflexions sur les interfaces de la couche mince et lors des collisions internes dans le métal massif sont comparables et que chaque électron subit sur les surfaces des collisions diffuses. Un coefficient de réflexion p a été introduit pour décrire la fraction des électrons subissant la réflexion élastique en arrivant à la surface de la couche mince métallique.

En tenant compte de l'état mécanique de la surface métallique, Namba [15], en 1967 a proposé un modèle de conduction unidimensionnel par extension du modèle de Fuchs. Les expressions proposées sont données sous formes intégrales difficilement exploitables. Ce modèle est une extension du modèle de Fuchs. Pour décrire les phénomènes de diffusion par les surfaces externes, Cottley [16] proposa en 1967 de remplacer la couche mince métallique d'épaisseur d par une superposition infinie de couches minces de même épaisseur, où les interfaces entre couches sont représentées par des plans partiellement réfléchissants parallèles. La proportion des électrons traversant chaque interface sans changement du

INTRODUCTION

vecteur vitesse est égale à p ; coefficient de réflexion initialement introduit par Fuchs-Sondheimer..

En 1977 Tosser et al [17, 18] publient un nouveau modèle appelé modèle statistique pour modeler les phénomènes de transport dans les couches minces.

Les nouvelles expressions simplifiées proposées dans le cadre de ce modèle décrivent les phénomènes de transport dans les couches minces métalliques dans un espace multidimensionnel, ce qui permet d'interpréter des phénomènes physiques, tel que l'effet Hall et rendent compte de la réalité physique de manière satisfaisante. Le temps de relaxation est généralement utilisé pour traduire l'effet des collisions sur les phonons, mais on introduit en général un temps de relaxation effectif pour tenir compte de l'effet des surfaces d'une couche mince, impuretés et des joints de grains.

Le phénomène du transport électronique désigne l'ensemble des propriétés relatives au déplacement des porteurs de charges soient des électrons dans Si-n ou les trous dans Si-p, plusieurs auteurs ont étudié le phénomène de transport dans le silicium de type p, en utilisant différentes méthodes de calcul numérique et des études expérimentales [19, 20, 21, 22, 23]. L'étude nécessite une modélisation microscopique qui n'est autre qu'un outil d'approche mathématique afin d'établir des modèles théoriques qui nous permettant de retracer avec précision, le mouvement des porteurs dans une couche mince semiconductrice [23].

Après une introduction, cette thèse comporte trois chapitres structurés comme suit : Dans le premier chapitre nous rappelons l'expression de la conductivité électrique dans des couches minces métalliques et les modèles utilisés pour modeler les phénomènes de transport dans les couches mince métalliques, nous avons aussi déterminé la conductivité électrique réduite de deux fils coaxiaux soumis à un champ électrique \vec{E} en se basant sur les travaux obtenus à partir de la modélisation d'un fil fin métallique dans les modèles de Dingle et de Tosser en fonction du coefficient de réflexion spéculaire et des diamètres réduits, et de donner les résultats d'application sur des deux fils fins coaxiaux de type Ag/Au. Dans le second chapitre, nous intéressons-nous sur une méthode géométrique utilisée pour déterminer les libres parcours moyens effectifs des électrons et des trous se déplaçant dans un barreau semi conducteur soumis à un champ électrique et magnétique. Puis nous avons

INTRODUCTION

déduit l'expression générale du coefficient de Hall .

Le troisième chapitre a été consacré à l'étude des phénomènes de transport électronique dans des couches minces semiconductrices de type Si-p. A l'aide de la Méthode de Monte Carlo, nous avons calculé, dans ce chapitre, la résistivité réduite, la vitesse de dérive et la mobilité des trous en fonction des paramètres influençant le déplacement des trous.

Chapitre 1

Phénomènes de transport électroniques dans des couches minces métalliques et de deux fils fins coaxiaux métalliques

Préambule

Drude Lorentz et Sommerfeld [25] ont exposé la théorie des électrons libres pour expliquer plusieurs propriétés physiques des métaux, la conductivité électrique a été exprimée par ce modèle pour les métaux massif. Pour étudier les phénomènes de transport dans les couches minces, Fuch a introduit un paramètre phénoménologique p qui représente la fraction des électrons de conduction qui subit une réflexion spéculaire sur les surfaces externes de la couche en conservant la quantité de mouvement.

Puisque la théorie de Fuch est incapable d'expliquer la faible valeur de la conductivité de couches épaisse, par rapport à celle du métal massif, Mayadas-Shatzkes [26] puis Tellier et Tossier ont proposé des modèles qui tient compte à la fois des surfaces externes et les joints de grains en introduisant en plus de paramètre p d'autres paramètres R et t , qui représentent

respectivement le coefficient de réflexion et le coefficient de transmission des porteurs sur les joints de grains.

1.1 Différents modèles de conductions

1.1.1 Modèle de Fuchs- Sondheimer

Les dimensions d'une couche mince métallique d'épaisseur de l'ordre de libre parcours moyen des porteurs, imposent une limitation géométrique aux mouvements des porteurs de conduction. Fuchs [13] élaborera une théorie de la conductivité électrique s'appliquant aux électrons libres pour un matériau à surface de Fermi sphérique basée sur la résolution de l'équation de Boltzmann. Après une dizaine d'année Sondheimer [27] a amélioré cette théorie aux effets galvano magnétiques.

Dans La théorie de F-S, la couche mince est considérée homogène avec des surfaces sont parallèles, et lisses et la probabilité qu'a un électron d'être réfléchi séculairement par l'une des surfaces (lors de sa collision) est p , alors que la fraction restante c'est-à-dire $(1-p)$ est diffusée dans l'espace. Le modèle de Fuch est un modèle unidimensionnel comme indiqué sur la figure (1.1).

Donc on peut écrire la fonction de distribution des électrons sous la forme.

$$f(\vec{v}, \vec{r}') = f_0 + f_1(\vec{v}, z) \quad (1.1)$$

Et l'équation de Boltzmann (Annexe A) aboutie à :

$$\frac{f_1}{\tau_0} + v_z \frac{\partial f_1}{\partial z} = \left(\frac{eE_x}{m^*} \right) \left(\frac{\partial f_0}{\partial v_x} \right) \quad (1.2)$$

Où :

m^* : la masse effective des électrons.

τ_0 : temps de relaxation des électrons dans le métal massif.

La solution générale de l'équation de Boltzmann (Annex A) est :

$$f_1(\vec{v}, z) = \left(\frac{e\tau_0 E_x}{m^*} \right) \left(\frac{\partial f_0}{\partial v_x} \right) \left(1 + f(\vec{v}) \exp \left[-z/\tau_0 v_z \right] \right) \quad (1.3)$$

CHAPITRE 1. PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS DES
COUCHES MINCES MÉTALLIQUES ET DE DEUX FILS FINS COAXIAUX
MÉTALLIQUES

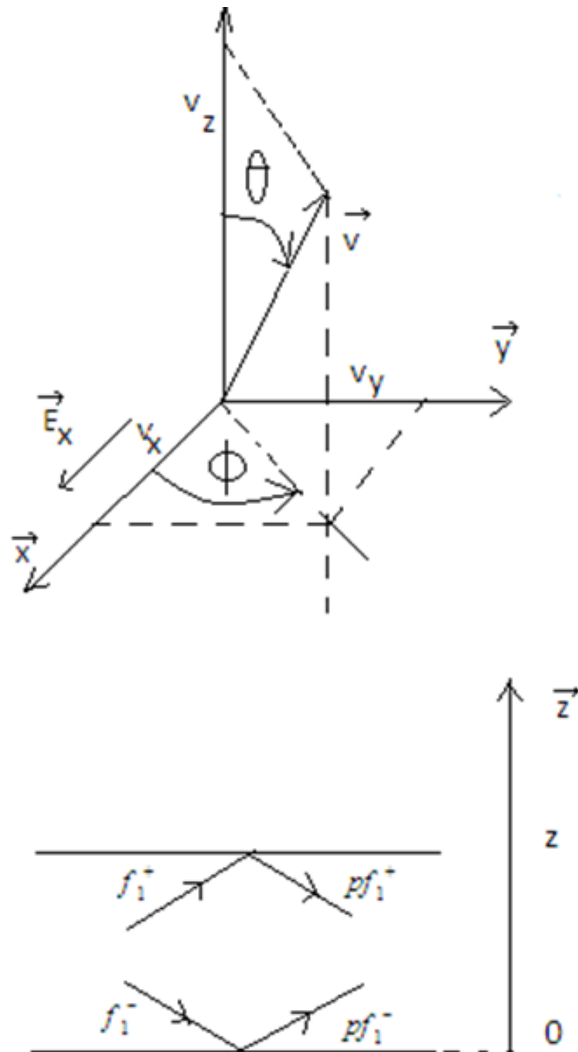


FIGURE 1.1 – Géométrie du modèle de $F - S$

Puisque τ_0 ne dépend pas de coordonnées spéciales, l'analyse de F-S s'applique seulement aux couches minces dans lesquelles la diffusion des électrons est décrite par τ_0 , cette caractéristique suppose aussi l'isotropie de τ_0 .

f_1^+ et f_1^- , sont respectivement les deux valeurs de f_1 lorsque l'électron va vers la surface externe et vers la surface interne, et elles s'écrivent :

CHAPITRE 1. PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS DES
COUCHES MINCES MÉTALLIQUES ET DE DEUX FILS FINS COAXIAUX
MÉTALLIQUES

$$f_1^+(\vec{v}, z) = \left(\frac{e\tau_0 E_x}{m^*} \right) \left(\frac{\partial f_0}{\partial v_x} \right) (1 + \exp[-z/\tau_0 v_z]); v_z \succ 0 \quad (1.4)$$

$$f_1^-(\vec{v}, z) = \left(\left(\frac{e\tau_0 E_x}{m^*} \right) \right) \left(\frac{\partial f_0}{\partial v_x} \right) (1 + \exp[(d-z)/\tau_0 v_z]); v_z \prec 0 \quad (1.5)$$

La densité du courant et la conductivité électrique sont donnée respectivement par :

$$J(z) = -2e \left(\frac{m^*}{h} \right)^3 dv_x dv_y dv_z \quad (1.6)$$

$$\sigma_f = (1/E_x d) \int_0^d J(z) dz \quad (1.7)$$

Le rapport de la conductivité de la couche mince et celle du métal massif est alors [13, 27] :

$$\sigma_f/\sigma_0 = (1 - 3/\theta k + 3/2k) \int_1^\infty \left(1/t^3 - 1/t^5 \right) \exp(-kt) dt \quad (1.8)$$

Où :

t : est une constante d'intégration égale à $1/\cos \theta$.

k : épaisseur réduite égale à. Souvent, pour interpréter les résultats expérimentaux, on utilise des expressions simplifiées de l'équation, c'est-à-dire :

— Pour les couches épaisses on a :

$$\sigma_f/\sigma_0 = (1 - 3/\theta k); k \succ \succ 1 \quad (1.9)$$

— Et pour les couches minces on a :

$$\sigma_f/\sigma_0 = (3k/4) \log \left(\frac{1}{k} \right); k \prec \prec 1 \quad (1.10)$$

Lorsqu'une fraction d'électrons arrivant sur une interface subit la réflexion élastique, Sondheimer a introduit un paramètre phénoménologique p , qui représente le rapport du nombre

CHAPITRE 1. PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS DES
COUCHES MINCES MÉTALLIQUES ET DE DEUX FILS FINS COAXIAUX
MÉTALLIQUES

d'électrons réfléchis sous l'angle θ sur le nombre d'électrons arrivant sur l'interface sous l'incidence θ

On suppose que p constant et en reprenant la méthode de calcul précédente on trouve [27] :

$$\sigma_f/\sigma_0 = (1 - 3/2k) \int_1^\infty \left(\frac{1}{t^3} - \frac{1}{t^5} \right) (1 - \exp(-kt)) (1 - p \exp(-kt)) dt \quad (1.11)$$

$$\sigma_f/\sigma_0 = \sigma_0 [1 - A(k, p)]$$

Les expressions limites de l'équation (1.12) sont donnés par :[13]

— pour $k \gg 1$ on a :

$$\sigma_f/\sigma_0 = (1 - 3/8k)(1 - p) \quad (1.12)$$

— Et pour $k \ll 1$ on a :

$$\sigma_f/\sigma_0 = (3k/4) ((1 + p)/(1 - P)) \log \left(\frac{1}{k} \right) \quad (1.13)$$

— Pour $p = 0$ on trouve que les équations (1.12) et (1.23) sont identiques respectivement aux équations (1.9) et (1.10)

— Et pour $p = 1$ la conductivité électrique de la couche égale à celle du métal massif

1.1.2 Modèle de Cottey

Ce modèle consiste à remplacer la couche mince d'épaisseur d dans la figure (1.2) (a) par une superposition infinie de couches, où les interfaces entre couches sont présentées par des plans partiellement réfléchissants parallèles entres eux figure (1.2) (b).

A la traversée de chaque couche élémentaire le nombre d'électrons contribuant au courant est multiplié par le facteur P et la probabilité pour qu'un électron arrivant sur la surface sous l'angle d'incidence θ , parcoure une distance l sans être diffusé par l'une des faces internes est [28] :

$$P^{\frac{l|\cos \theta|}{d}} = \exp \left[-l \frac{|\cos \theta| \log (1/p)}{d} \right] \quad (1.14)$$

Approximativement, le libre parcours moyen est donné par :

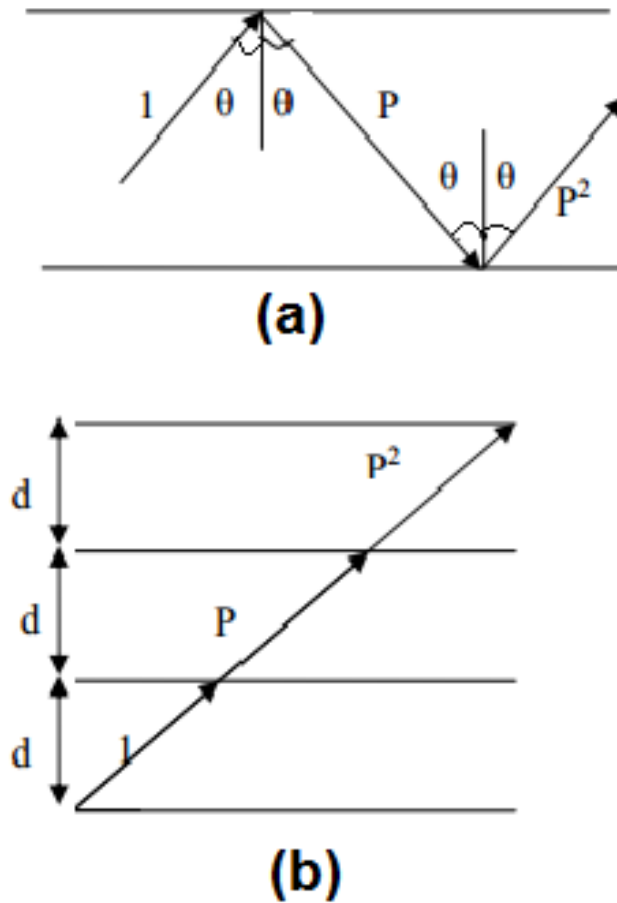


FIGURE 1.2 – Géométrie du modèle de Cottey.

$$\lambda_s(\theta) = d/|\cos \theta| \log(1/p) \quad (1.15)$$

$$\lambda_s(\theta) \approx d/|\cos \theta| (1-p) \quad (1.16)$$

Et le libre parcours total λ_t est donné par :

$$\begin{aligned} 1/\lambda_t(\theta) &= 1/\lambda_0 + 1/\lambda_s(\theta)1/\lambda_t(\theta) \\ &= (1/\lambda_0) [1 + (1-p)\lambda_0 \cos \theta/d] \end{aligned} \quad (1.17)$$

L'équation de transport de Boltzmann, (annexe A), s'écrit sous la forme :

$$(eE_x/m^*) (\partial f_0/\partial v_x) = f_1/\tau_t(\theta) \quad (1.18)$$

$$= v f_1/\lambda_t(\theta) \quad (1.19)$$

Par intégration de l'équation de densité de courant (1.6), on obtient la conductivité électrique réduite est donnée par : [28]

$$\sigma_f/\sigma_0 = C(\mu) = (3\mu/2) (\mu - 0,5 + (1 - \mu^2) \log(1 + 1/\mu)) \quad (1.20)$$

Avec :

$$\begin{aligned} \mu &= (d/2) (\lambda_0 \log(1/p)) \\ &= k/Log(1/p) \end{aligned} \quad (1.21)$$

Où $\mu = k/(1-p)$; $1-p \ll 1$

1.1.3 Modèle de Namba

Le modèle de Namba [29] est une extension du modèle de F-S dont il a supposé que les surfaces externes de la couche mince métallique ne sont pas lisses et les coefficients de réflexion spéculaire sur les deux surfaces de la couche mince sont différents, P sur l'une ($z = d$) et Q sur l'autre ($z = 0$). La distribution de l'épaisseur en fonction de la rugosité de la couche mince métallique, proposée par Namba, s'écrit :

$$d = d_a + h_1 x \quad (1.22)$$

Avec :

$$k_1 = \frac{2\pi}{l} \quad (1.23)$$

CHAPITRE 1. PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS DES
COUCHES MINCES MÉTALLIQUES ET DE DEUX FILS FINS COAXIAUX
MÉTALLIQUES

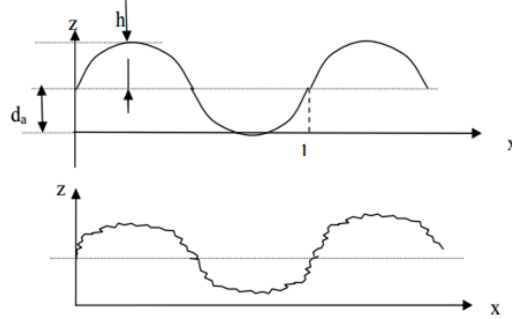


FIGURE 1.3 – Géométrie du modèle de Namba.

d_a : L'épaisseur moyen de la couche mince.

l : Longueur de la couche

La résistance se met sous la forme suivante :

$$R = \int_0^l \frac{\rho(d)}{dw} dx \quad (1.24)$$

Où :

w : La largeur du film et la résistivité moyenne sous la forme :

$$\rho_f(d_a) = \frac{Rwd_a}{l} \quad (1.25)$$

Et d'après les équations (1.23; 1.24 et 1.25) on trouve :

$$\rho_f(d_a) = \frac{d_a}{l} \int_0^l \frac{\rho(d_a + h_1 \sin k_1 x)}{d_a + h_1 \sin k_1 x} dx \quad (1.26)$$

En supposant que la rugosité de surface est uniforme le rapport entre la résistivité du matériau massif et celle du film $\frac{\rho_0}{\rho_f}$, l'inverse du rapport de la conductivité électrique est donnée par :

$$\frac{\rho_0}{\rho_f} = 1 - \frac{3}{4k} \int \frac{(t - t^3)(1 - \exp(-k/-kt-t))}{1 - PQ \exp(-2K/-2Ktt)} (2 - P - Q + (P + Q - 2PQ \exp(-2kt/-2ktt))) dt \quad (1.27)$$

Avec : $k = \frac{d}{\lambda_0}$, $t = \cos \theta$

1.1.4 Modèle de Myadas-Shatzkes

Après les travaux de F-S, M-S [26] ont proposé un modèle qui tient compte aux effets des réflexions des électrons sur les joints de grains pour étudier la conduction électronique dans des couches minces polycristallines.

Dans ce modèle, les frontières des joints de grains sont représentées par deux série de plans parallèles, respectivement orientés perpendiculairement et parallèlement à la direction du champ électrique \vec{E} , et par approximation les électrons sont réfléchis élastiquement par les plans parallèle à \vec{E} . Il suffit donc de calculer la résistivité due aux collision interne et aux réflexions des électrons sur les N plans partiellement réfléchissantes et perpendiculaires \vec{E} et séparés par une distance moyenne D_g qui est évalué de manière statistique et il est considéré comme étant l'écart statique entre les plans réflecteurs. La probabilité pour qu'un

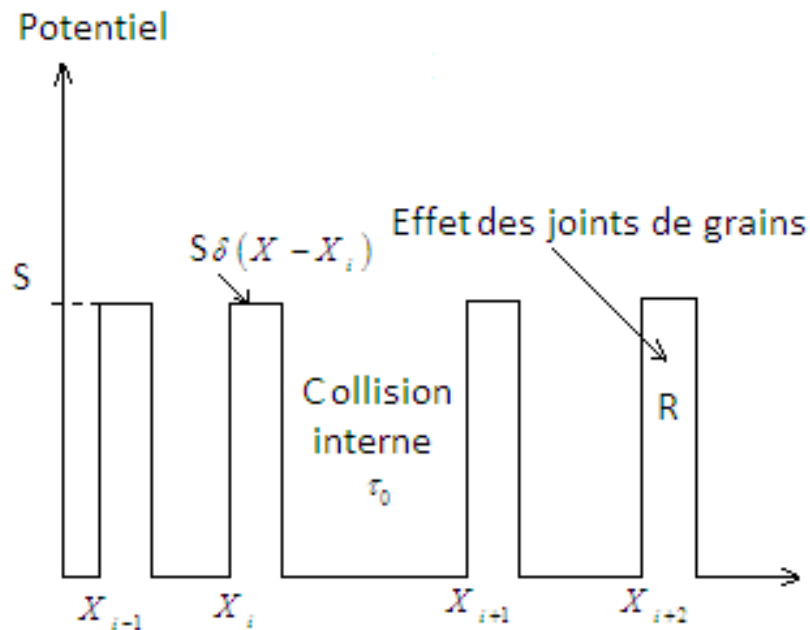


FIGURE 1.4 – Géométrie du modèle de M - S

état électronique K soit transformé en un état électronique K' sous l'effet des collisions sur les joints de grains et si les collisions sont décrites par le temps de relaxations

Dans le cas d'une couche infiniment épaisse l'équation de Boltzmann (annexe A) s'écrit

CHAPITRE 1. PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS DES
COUCHES MINCES MÉTALLIQUES ET DE DEUX FILS FINS COAXIAUX
MÉTALLIQUES

sous la forme suivante :

$$eE_x V_x \left(\frac{\partial f_0}{\partial E'} \right) = \frac{1}{\lambda_0} f_1(K) - \int P(K, K') [f_1(K) - f_1(K')] dK \quad (1.28)$$

Mayadas et Shatzkes [26] ont proposés certaines hypothèses simplificatrices pour calculés La probabilité $P(K, K')$ à partir de l'Hamiltonien de l'électron libre ; ainsi ils sont supposés que l'ensemble des joints de grains perpendiculaires subit à une distribution Gaussienne des plans réflecteurs, et chaque plan est représenté électriquement par un potentiel de Dirac $V(x)$:

$$V(x) = S\delta(x - x_N) \quad (1.29)$$

Où x_N est la position de plan de numéro N le long de l'axe (ox)

En considérant $V(x)$ comme une perturbation de l'Hamiltonien et identifié à la valeur du carré de l'élément de matrice $|\langle K | V(x) | K' \rangle|^2$ moyenné sur l'ensemble de la distribution Gaussienne.

Pour des raisons de commodité, le carré du paramètre S , qui apparaît dans le carré de l'élément de matrice, est écrit sous la forme :

$$S^2 = vK \left(\frac{\hbar^3}{2m^*} \right) \left(\frac{R}{(1-R)} \right) \quad (1.30)$$

Avec :

R : Coefficient de réflexion sur les joints de grains

v : vitesse des porteurs.

La solution générale de l'équation de Boltzmann est :

$$f_1(K) = \tau^* eE_x v_x \frac{\partial f_0}{\partial E'} \quad (1.31)$$

Où v_x est la composante de la vitesse v suivant l'axe (ox) et τ^* est le temps de relaxation associé aux collisions sur le réseau et sur les joints de grains, qui est donné par la formule suivante :

$$\frac{1}{\lambda^*} = \frac{1}{\lambda_0} + 2f'_1(|K_x|) \quad (1.32)$$

Où K_x est la composante du vecteur d'onde \vec{K} suivant (ox) et $f'_1(|K_x|)$ est donnée par :

CHAPITRE 1. PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS DES
COUCHES MINCES MÉTALLIQUES ET DE DEUX FILS FINS COAXIAUX
MÉTALLIQUES

$$f'(|K_x|) = \frac{K}{|K_x|} \frac{\alpha}{2\tau_0} \frac{1 - \exp(-4K_x^2 S^2)}{1 + \exp(-4K_x^2 S^2) - 2 \exp(-K_x^2 S^2) \cos 2K_x D_g} \quad (1.33)$$

Avec :

$$\alpha = (v/v_F) \lambda_0 D_g^{-1} R(1 - R)^{-1} \quad (1.34)$$

où :

v_F : Vitesse de Fermi

D_g : Le diamètre de grain moyen qu'on identifie à l'écart statistique entre les plans réflecteurs distribués selon une loi Gaussienne avec un écart type S . En admettant que :
 $K^2 S^2 \gg 1$

on a :

$$J = -\frac{4\pi e^2}{m^*} \left(\frac{m^*}{h}\right)^3 \left(\frac{2}{m^*}\right)^{3/2} E_x \int_0^\infty \tau_0 E'^{3/2} \frac{\partial f_0}{\partial E} \int_0^\pi \frac{\cos \theta^2 \sin \theta}{1 + \alpha |\cos \theta|^{-1}} dv \quad (1.35)$$

Où E' est l'énergie des porteurs dépendante du vecteur d'onde et d'après Ziman : [25]

$$-\int_0^\infty f(E') \frac{\partial f_0}{\partial E} dE' \simeq f(E'_F) + \frac{1}{6} \left(\frac{\pi B_T T}{\varepsilon_F}\right) \left(\frac{\partial f(E)}{\partial E'^2}\right) f(E') \Big|_{E'=E'_F} \quad (1.36)$$

Avec :

ε_F : L'énergie des porteurs à la surface de Fermi.

B_T : Constante de Boltzman

D'après [27] on a :

$$J_x = \sigma_g E_x \quad (1.37)$$

Où σ_g est la conductivité due aux joints de grains et aux phonons

Supposons que :

$$(\pi B_T T / \varepsilon_F) \ll 1 \quad (1.38)$$

CHAPITRE 1. PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS DES
COUCHES MINCES MÉTALLIQUES ET DE DEUX FILS FINS COAXIAUX
MÉTALLIQUES

Donc :

$$\sigma_g = \sigma_0 f(\alpha) \quad (1.39)$$

Avec :

$$\begin{cases} f(\alpha) = 1 - (3\alpha/2) + 3\alpha^2 - 3\alpha^3 \log\left(1 + 1/\alpha\right) \\ \alpha = \lambda_0 D^{-1} R(1 - R)^{-1} \\ R(1 - R)^{-1} = 2m^* S^2 / (\hbar^3 v_F K_F) \end{cases} \quad (1.40)$$

M-S [26] ont calculé la conductivité électrique totale dans les couches minces métalliques avec la méthode utilisée par Fuchs et Sondheimer [13, 29] en remplaçant le temps de relaxation τ_0 par τ^* donné pour les deux cas : $(\pi B_T T / \varepsilon_F) \ll 1$ et $K^2 S^2 \gg 1$ par :

$$\frac{1}{\tau^*} = \frac{1}{\tau_0} \left(1 + \frac{\alpha K_F}{|K_{Fx}|} \right) \quad (1.41)$$

La conductivité électrique total dans les couches minces métalliques dans le modèle de F-S est :

$$\sigma_f = \sigma_g - \sigma_0 A(K, p, \alpha) \quad (1.42)$$

Avec :

$$A(k, p, \alpha) = \frac{6(1-p)}{k\pi} \int_0^{\pi/2} d\phi \int_1^\infty dt \frac{\cos^2 \phi}{H^2(t, \phi)} \left(\frac{1}{t^3} - \frac{1}{t^5} \right) \frac{1 - \exp[-ktH(t, \Phi)]}{1 - p \exp[-ktH(t, \Phi)]} \quad (1.43)$$

$$H(t, \Phi) = 1 + \frac{\alpha}{\cos \phi \left(1 - \frac{1}{t^2}\right)^{1/2}} \quad (1.44)$$

Où p est le coefficient de réflexion spéculaire et k l'épaisseur réduite.

Pour les couche métalliques polycristallines dont le diamètre moyen des joints de grain, D_g et par conséquent le paramètre α ne dépend pas de l'épaisseur de la couche d , la conductivité électrique de la couche polycristalline s'écrit sous la forme [2] :

$$\sigma_{fp} = \sigma_0 [f(\alpha) - A(K, p, \alpha)] \quad (1.45)$$

Et pour la couche métallique monocristalline elle s'écrit :

$$\sigma_{fm} = \sigma_0 [f(\alpha) - A(K, p, \alpha)] \quad (1.46)$$

1.1.5 Modèle statique unidimensionnel

Dans ce modèle [12] les joints de grains sont assimilés à une disposition statiques régulière des plans réflecteurs perpendiculaires au champs électrique, ils sont décrits par un coefficient de transmission t qui est la proportion d'électrons qui fournissent la même contribution au courant avant et après avoir franchi le joint de grain, et la proportion $(1 - t)$ des électrons correspond à l'ensemble des électrons diffusés dans toutes les directions d'une manière uniforme et qui ne peuvent plus participer à la conduction.

La probabilité P lorsque les électrons traversent une distance L d'une série constituée de N plans réflecteurs est :

$$\begin{aligned} P &= t^N \\ &= \exp(-N \text{Log}(1/t)) \end{aligned} \quad (1.47)$$

Quand le nombre de transmissions spéculaires successives est grand, la probabilité s'écrit :

$$P = \exp(-L/\lambda_g^*) \quad (1.48)$$

Avec :

λ_g^* : est le libre parcours moyen associé au joints de grains.

A partir de la figure (1.5) :

$$L = (|\cos \alpha|)^{-1} \sum_i d_i \quad (1.49)$$

On a aussi :

$$\sum_i d_i = ND \quad (1.50)$$

En combinant les équations (1.48 et 1.50), le libre parcours moyen λ_g^* associé aux collisions sur les joints de grains s'écrit :

$$\lambda_g^* = D \left(|\cos \alpha| \text{Log} \frac{1}{t} \right)^{-1} \quad (1.51)$$

En supposant la validité de la loi de Matthiessen (un temps de relaxation unique peut être défini pour l'ensemble des processus de collisions, supposés superposables), le libre parcours total peut être défini par :

$$\frac{1}{\lambda_g} = \frac{1}{\lambda_0} + \frac{1}{\lambda_g^*} \quad (1.52)$$

CHAPITRE 1. PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS DES
COUCHES MINCES MÉTALLIQUES ET DE DEUX FILS FINS COAXIAUX
MÉTALLIQUES

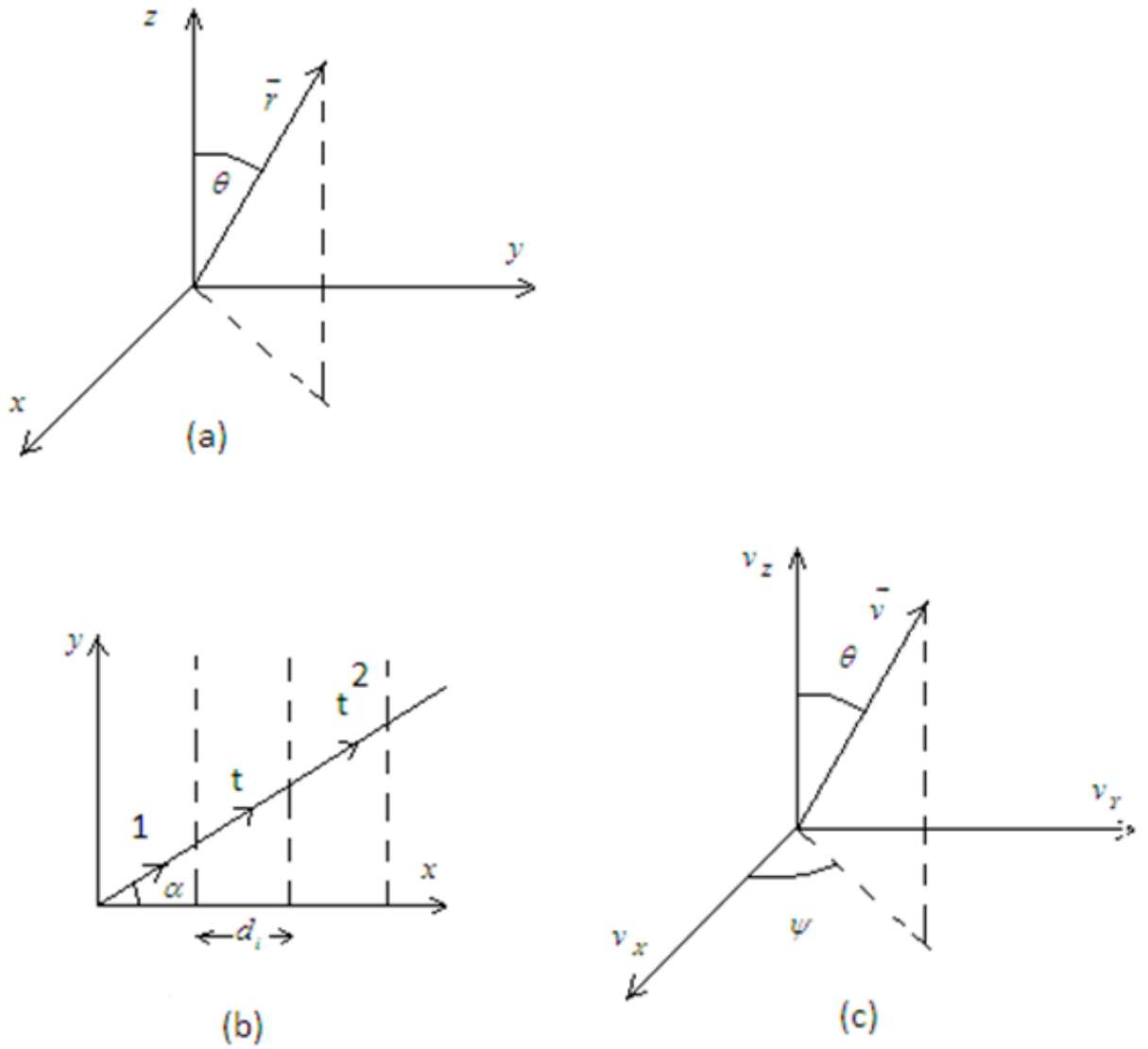


FIGURE 1.5 – Géométrie du modèle unidimensionnel

Ou bien :

$$\lambda_g = \lambda_0 \left(1 + \frac{|\cos \alpha|}{\nu} \right)^{-1} \quad (1.53)$$

Avec :

$$\nu = D \left(\lambda_0 \text{Log} \frac{1}{t} \right)^{-1} \quad (1.54)$$

Où ν est le paramètre de joint de grain.

L'équation de Boltzmann, donnée dans l'annexe s'écrit sous la forme :

$$\frac{eE}{m^*} \frac{\partial f_0}{\partial v_X} = \frac{f_1}{\tau_g} + v_X \frac{\partial f_1}{\partial X} \quad (1.55)$$

Et :

$$\tau_g v = \lambda_g \quad (1.56)$$

La conductivité due aux joints de grains τ_g et aux phonons est alors égale à :

$$\sigma_g = \frac{3}{2} \sigma_0 \int_0^\pi \frac{\cos^2 \alpha \sin \alpha}{1 + \frac{|\cos \alpha|}{\nu}} \quad (1.57)$$

D'où :

$$\frac{\sigma_g}{\sigma_0} = \frac{3}{2} \nu - 3\nu^2 + 3\nu^3 \text{Log} \left(1 + \frac{1}{\nu} \right) \quad (1.58)$$

Cette formule de la conductivité constitue une extension du modèle de Cottrey. Il est d'ailleurs aussi appelé modèle de Cottrey étendu, son caractère unidimensionnel consacre au champ d'application limité; c'est pourquoi un modèle tridimensionnel est nécessaire.

1.1.6 Modèle statique tridimensionnel

En 1979, Pichard et al [30] proposèrent un modèle statique tridimensionnel pour décrire les phénomènes du transport dans les couches minces polycristallines et pour étudier des effets tridimensionnels tels que l'effet Hall...

En admettant que la forme des joints de grains est cubique, et ils sont assimilés par trois séries de plans perpendiculaires respectivement aux axes (OX) , (OY) et (OZ)

La distance moyenne D_g séparant deux plans consécutifs prend la même valeur quelle que soit la direction considérée.

CHAPITRE 1. PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS DES
COUCHES MINCES MÉTALLIQUES ET DE DEUX FILS FINS COAXIAUX
MÉTALLIQUES

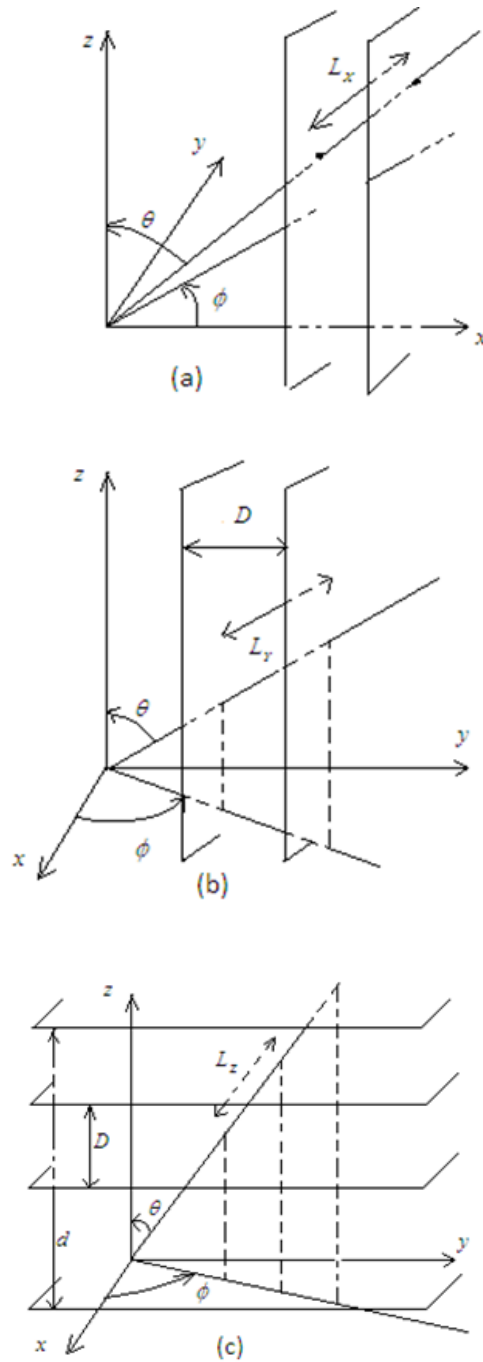


FIGURE 1.6 – Géométrie du modèle tridimensionnel

a-Le libre parcours moyen

L_X , L_Y et L_Z sont des distance séparant deux points successives de la trajectoire de l'électron appartenant aux plans perpendiculaires respectivement aux axes (OX) , (OY) et (OZ) (Figure 1.4) et leurs expressions sont :

$$\begin{cases} L_X = D|\cos \phi|^{-1}|\sin \theta|^{-1} \\ L_Y = D|\sin \phi|^{-1}|\sin \theta|^{-1} \\ L_Z = D|\cos \theta|^{-1} \end{cases} \quad (1.59)$$

La probabilité totale P pour qu'un électron parcoure la distance L sans être diffusé dans le cas où le nombre de transmissions spéculaire successives subies par l'électron sans diffusion est plus grand s écrit sous les deux formes suivantes :

Soit :

$$P = \exp(-L\lambda_g^{*-1}) \quad (1.60)$$

Où λ_g^* est le libre parcours moyen associé à l'effet de joint de grains

Soit :

$$P = t^{N_X+N_Y+N_Z} \quad (1.61)$$

Avec :

t : est la fraction d'électrons transmis à travers les plans réfracteurs avec conservation de vecteur d'onde \vec{K} .

N_X , N_Y et N_Z sont donnés par les formules suivantes :

$$\begin{cases} N_X = LL_X^{-1} \\ N_Y = LL_Y^{-1} \\ N_Z = LL_Z^{-1} \end{cases} \quad (1.62)$$

Et $L^2 = L_X^2 + L_Y^2 + L_Z^2$

À partir des deux formes de la probabilité, on extrait :

$$\exp(-L\lambda_g^{*-1}) = \exp\left[-L(L_X + L_Y + L_Z)\ln\left(\frac{1}{t}\right)\right] \quad (1.63)$$

CHAPITRE 1. PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS DES
COUCHES MINCES MÉTALLIQUES ET DE DEUX FILS FINS COAXIAUX
MÉTALLIQUES

$$\lambda_g^{*-1} \approx D_g^{-1} (\text{Log}1/t) (|\cos \varphi| |\sin \theta| + |\sin \varphi| |\sin \theta| + |\cos \theta|) \quad (1.64)$$

Et d'après l'approximation donnée par [35] :

$$C \approx |\sin \phi| + |\cos \phi| \quad (1.65)$$

$$\approx \pi/4 \approx 1.27 \quad (1.66)$$

On trouve que le libre parcours moyen relatif au seul processus de diffusion aux joints de grains est :

$$\lambda_g^{*-1} \approx D_g^{-1} (\text{Log}1/t) (C^2 + (1 - C) |\cos \theta|) \quad (1.67)$$

Où

$$\lambda_g^{*-1} \approx D^{-1} (\text{Log}1/t) (C + (1 - C) |\sin \theta|) \quad (1.68)$$

Si on considère que les phénomènes de diffusions associés aux phonons, surfaces externes, et les joints des grains donnent des effets indépendants, l'inverse de libre parcours résultant est donné par :

$$\lambda^{-1} = \lambda_0^{-1} + \lambda_g^{*-1} + \lambda_s^{-1} \quad (1.69)$$

Si p est la probabilité pour qu'un électron subisse une diffusion et si d est l'épaisseur de la couche selon la direction (OZ), nous pouvons écrire le libre parcours moyen relatif aux collisions sur les surfaces externes sous la forme :

$$\lambda_s^{-1} = d^{-1} \left(\text{Log} \frac{1}{p} \right) |\cos \theta| \quad (1.70)$$

On remplace λ_s et λ_g par leur expression, le libre parcours moyen total, λ , s'écrit sous la forme suivante :

$$\lambda^{-1} = \lambda_0^{-1} + D^{-1} (\text{Log}1/t) (C^2 + (1 - C) |\cos \theta|) + d^{-1} \left(\text{Log} \frac{1}{p} \right) |\cos \theta| \quad (1.71)$$

Ou bien :

$$\lambda^{-1} = \lambda_0^{-1} \left[1 + D^{-1} (\text{Log}1/t) (C^2 + (1 - C) |\cos \theta|) + \lambda_0 d^{-1} \left(\text{Log} \frac{1}{p} \right) |\cos \theta| \right] \quad (1.72)$$

b- Expression générale de la conductivité électrique

La densité de courant électrique est :

$$J(z) = -2e \left(\frac{m^*}{h} \right)^3 \int \int \int v_x dv_x dv_y dv_z \quad (1.73)$$

Tel que, f_1 est la fonction de déviation déduite de l'équation de Boltzmann (annexe A) et son expression est donné par :

$$f_1 = \frac{eE}{m^*v^2} v_x \lambda \quad (1.74)$$

Avec :

v : la vitesse moyenne des électrons

v_x : est la composante suivant la direction (OX) de la vitesse moyenne des électrons.

E : le champs électriques appliqués à la couche.

λ : le libre parcours total donnée en fonction du temps de relaxation par :

$$\tau = \frac{\lambda}{v} \quad (1.75)$$

La conductivité électrique du métal massif, σ_0 est donné par [32] :

$$\sigma_0 = \frac{8\pi}{3} \frac{m^*v^2\lambda_0}{h^3} \quad (1.76)$$

Et pour la couche mince, on a :

$$\sigma_f = \frac{J}{E} \quad (1.77)$$

En utilisant les deux équations (1.68 et 1.77) la conductivité électrique relative de la couche mince polycristalline, $\frac{\sigma_f}{\sigma_0}$, s écrit sous la forme [33] :

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_0} = \frac{3}{2} b \left(a - \frac{1}{2} + (1 - a^2) \ln \left(1 + \frac{1}{a} \right) \right) \quad (1.78)$$

Où

$$\begin{cases} a = \left(1 + \frac{c^2}{\nu} \right) b; t \succ 0.3 \\ b = \left(\frac{1}{\mu} + \frac{1-c}{\nu} \right)^{-1}; p \succ 0.3 \end{cases} \quad (1.79)$$

Avec :

$$\begin{cases} \nu = D_g \lambda_0^{-1} \left(\ln \frac{1}{t} \right)^{-1} \\ \mu = d \lambda_0^{-1} \left(\ln \frac{1}{p} \right)^{-1} \end{cases} \quad (1.80)$$

CHAPITRE 1. PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS DES
COUCHES MINCES MÉTALLIQUES ET DE DEUX FILS FINS COAXIAUX
MÉTALLIQUES

— Pour la couche polycristalline suffisamment épaisse (effet de surfaces externes est négligeable), σ_f tend vers σ_g qui est la conductivité électrique due aux joints de grains et aux phonons qui s'exprime de l'équation (1.78) quand $\mu \gg 1$ par :

$$\frac{\sigma_g}{\sigma_0} = \frac{3}{2} b_g \left(a_g - \frac{1}{2} + (1 - a_g^2) \ln \left(1 + \frac{1}{a_g} \right) \right) \quad (1.81)$$

Avec :

$$\begin{cases} a_g = \frac{\nu + c^2}{c_1}; c_1 = 1 - c; c = \frac{\pi}{4} \\ b_g = \frac{\nu}{c_1} \end{cases} \quad (1.82)$$

Dans un autre cas limite où les joints de grains sont très épais ($\nu \gg 1$), la conductivité électrique est due uniquement aux effets des phonons et des surfaces externes et son expression s'écrit, du fait que $\nu = a = b$, sous la forme :

$$\frac{\sigma_s}{\sigma_0} = \frac{3}{2} \mu \left(\mu - \frac{1}{2} + (1 - \mu^2) \ln \left(1 + \frac{1}{\mu} \right) \right) \quad (1.83)$$

— Pour la couche monocristalline ou en colonne, il suffit de prendre $b = \left(\frac{1}{\mu} - \frac{c}{\nu} \right)^{-1}$ pour que l'équation (1.78) reste valable [30].

Pour des couches minces pollicristallines à croissances de grain privilégiée dans une direction donnée, Pichard et al [34] ont donné une autre forme d'expression de la résistivité électrique réduite, ils ont remarqué qu'une croissance privilégiée dans une direction donnée n'affecte la conductivité électrique que si elle est relativement marquée et surtout si il se fait suivant la direction du champ électrique

1.1.7 Rappel de linéarisation des expressions générales de la conductivité électrique

Dans le modèle tridimensionnel l'expression de la conductivité électrique réduite est donnée par :

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_0} = A(b_g, a_g) = \frac{3}{2} b_g \left(a_g - \frac{1}{2} + (1 - a_g^2) \ln \left(1 + \frac{1}{a_g} \right) \right) \quad (1.84)$$

Avec :

$$\begin{cases} a = \left(1 + \frac{c^2}{\nu} \right) b \\ b = \left(\frac{1}{\mu} + \frac{c_1}{\nu} \right)^{-1} \end{cases} \quad (1.85)$$

$$\begin{cases} \nu = D_g \lambda_0^{-1} \left(\ln \frac{1}{t} \right)^{-1}; t \succ 0.3 \\ \mu = d \lambda_0^{-1} \left(\ln \frac{1}{p} \right)^{-1}; p \succ 0.3 \end{cases} \quad (1.86)$$

p : coefficient spéculaire des électrons sur les surfaces externes

t : coefficient de transmission sur les joints de grains

D_g : diamètre moyen de grain

d : diamètre de la couche

λ_0 : libre parcours moyen dans le métal massif

1. Pour les couches polycristallines : $c_1 = 1 - c$

2. Pour les couches monocristallines ou en colonnes : $c_1 = -c = -\frac{\pi}{4}$

Si la couche métallique est suffisamment épaisse (les réflexions sur les surfaces externes sont négligeables), σ_f tend vers qui est la conductivité due aux phonons et aux joints de grains, dont l'expression déduite de l'équation (1.84) en prenant est :

$$\frac{\sigma_g}{\sigma_0} = \frac{3}{2} b_g \left(a_g - \frac{1}{2} + (1 - a_g^2) \ln \left(1 + \frac{1}{a_g} \right) \right) \quad (1.87)$$

Avec :

$$\begin{cases} a_g = \frac{\nu + c^2}{c_1} \\ b_g = \frac{\nu}{c_1} \end{cases} \quad (1.88)$$

Dans le cas où les grains sont épais ($\mu \succ \succ 1$), la diffusion des électrons est due aux phonons et aux surfaces externes, l'expression de la conductivité électrique réduite est :

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_0} = A(a_s, b_s) \frac{3}{2} b_s \left(a_s - \frac{1}{2} + (1 - a_s^2) \ln \left(1 + \frac{1}{a_s} \right) \right) \quad (1.89)$$

Avec :

$$a_s = b_s = \mu \quad (1.90)$$

1.2 Coefficient de Hall dans les couches minces métalliques

La détermination du coefficient de Hall dans les couches minces métalliques en tenant compte l'effet des surfaces externes sur les électrons a été faite en 1950 par Sondheimer

[35] en résolvant l'équation de Boltzmann, ensuite, Chambers [36] a utilisé une méthode cinétique pour résoudre le problème de transport dans des couches minces métalliques soumises simultanément à un champ électrique et magnétique.

En 1978 ce coefficient a été calculé par Tellier et al [37] en utilisant un libre parcours moyen des porteurs pour résoudre analytiquement l'équation de Boltzmann. Le rayon de la trajectoire circulaire des électrons déviés est appelé rayon de Larmor et son expression dans un milieu d'extension infinie.

$$r_0 = \frac{m^*v}{eB_Z} \quad (1.91)$$

Où m^* , v et e sont respectivement la masse effective, la vitesse et la valeur absolue de la charge de l'électron.

1.2.1 Principe d'effet Hall.

Une couche mince d'épaisseur d soumise simultanément à un champ électrique longitudinal E_X et à une induction magnétique transversale B_Z ce qui impose sur les porteurs une déviation vers un bord de la couche (Figure 1.7), produisant un gradient de concentration des électrons. le vecteur de la force magnétique est donnée par :

$$\vec{F} = q \vec{v} \times \vec{B} \quad (1.92)$$

On peut décomposer le chemin parcouru par les électrons, l , en deux libres parcours effectifs, l' suivant l'axe OX' et l'' suivant OY' (Figure 1.8), leurs expressions en fonction de r_0 et l sont :

$$l' = r_0 \sin \frac{l}{r_0} \quad (1.93)$$

$$\delta l = r_0 \left(l - \cos \frac{l}{r_0} \right) \quad (1.94)$$

$$P(l = x) = -\frac{l}{\lambda_0} \exp \left(-\frac{l}{\lambda_0} \right) \quad (1.95)$$

λ_0 : est le libre parcours moyen des électrons dans l'état massif.

CHAPITRE 1. PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS DES
COUCHES MINCES MÉTALLIQUES ET DE DEUX FILS FINS COAXIAUX
MÉTALLIQUES

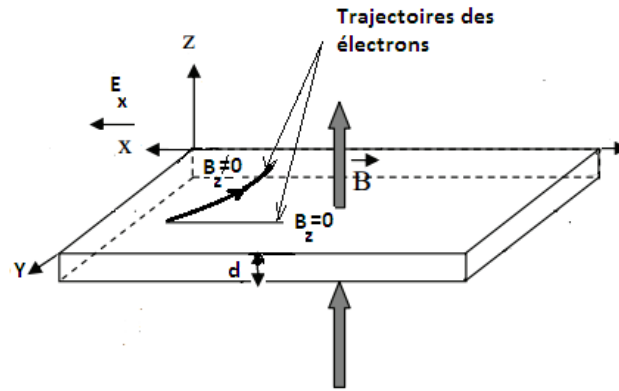


FIGURE 1.7 – Représentation géométrique de la trajectoire des électrons soumis aux champs \vec{E} et \vec{B} .

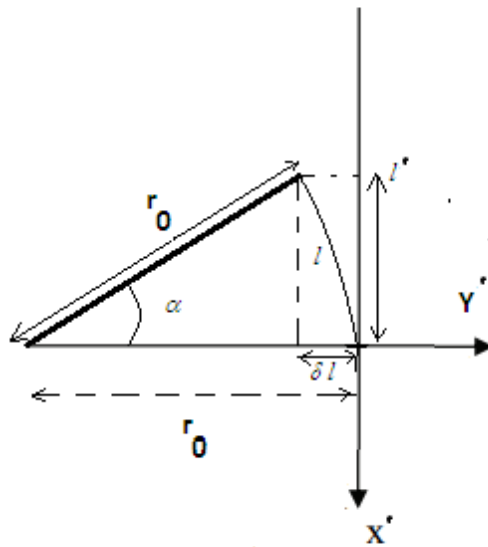


FIGURE 1.8 – Les libes parcours effectifs de la trajectoire des électrons l' suivant OX' et δl suivant (OY')

CHAPITRE 1. PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS DES
COUCHES MINCES MÉTALLIQUES ET DE DEUX FILS FINS COAXIAUX
MÉTALLIQUES

Les valeurs moyennes de l' (\bar{l}') et l ($\bar{\delta l}$) sont respectivement :

$$\bar{l}' = \int_0^\infty \frac{l'}{\lambda_o} \exp -\frac{l'}{\lambda_o} dl' \quad (1.96)$$

$$\bar{\delta l} = \int_0^\infty \frac{\delta l}{\lambda_o} \exp -\frac{\delta l}{\lambda_o} d\delta l_n \quad (1.97)$$

En utilisant les deux équations (1.93 et 1.94) dans les deux expressions des integrales ci-dessus on trouve que :

$$\bar{l}' = \frac{\lambda_0 r_0^2}{r_0^2 + \lambda_0^2} = l_1 \quad (1.98)$$

et

$$\bar{\delta l} = \frac{\lambda_0 r_0}{r_0^2 + \lambda_0^2} = l_2 \quad (1.99)$$

avec :

$$l_1 = \lambda_0 \left(l + \frac{\lambda_0^2}{r_0^2} \right)^{-1} \quad (1.100)$$

et

$$l_2 = r_0 \left(l + \frac{r_0^2}{\lambda_0^2} \right)^{-1} \quad (1.101)$$

1.2.2 Expression de coefficient de Hall

La couche métallique soumise simultanément aux champs E_X et E_Y est traversée par un courant électrique de densité J qui se décompose en J_X suivant OX et OY , qui sont données en fonction de libres parcours moyens effectifs l_1 , l_2 et par les champs électriques E_x et par $E_Y = E_H$ (champs de Hall). Les expressions de ces composantes de densité de courant sont [38] :

$$J_X = \sigma_{fX} E_X - \sigma_{fY} E_Y \quad (1.102)$$

$$J_Y = \sigma_{fY} E_X + \sigma_{fX} E_Y \quad (1.103)$$

Dans le modèle tridimensionnel les conductivités électriques σ_{fX} et σ_{fY} sont données par :

CHAPITRE 1. PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS DES
COUCHES MINCES MÉTALLIQUES ET DE DEUX FILS FINS COAXIAUX
MÉTALLIQUES

$$\sigma_{fX} = \sigma_0 \frac{l_1}{\lambda_0} A(b_1, a_1) \quad (1.104)$$

$$\sigma_{fY} = \sigma_0 \frac{l_2}{\lambda_0} A(b_2, a_2) \quad (1.105)$$

Où :

$$\begin{cases} a_1 = a + \zeta^2 b \\ a_2 = a + \left(\frac{1+\zeta^2}{\zeta} - 1 \right) b \end{cases} \quad (1.106)$$

$$\begin{cases} b_1 = (1 + \zeta^2) b \\ b_2 = \frac{1+\zeta^2}{\zeta} b \end{cases} \quad (1.107)$$

$$\zeta = \frac{\lambda_0}{r_0} \quad (1.108)$$

$$\sigma_0 = \frac{ne^2 \lambda_0}{m^* v} \quad (1.109)$$

Le coefficient de Hall, est donné par [39] :

$$R_{Hf} = \frac{E_Y}{B_Z J_X} \Big|_{J_Y=0} \quad (1.110)$$

A partir des équations (1.78 et 1.103) l'expression de R_{Hf} devient :

$$R_{Hf} = -\frac{1}{B_Z} \frac{\sigma_{fY}}{\sigma_{fX}^2 + \sigma_{fY}^2} \quad (1.111)$$

Pour le métal massif on a :

$$\sigma_{fX} = \sigma_{0X} = \frac{l_1}{\lambda_0} \sigma_0 \quad (1.112)$$

Et

$$\sigma_{fY} = \sigma_{0Y} = \frac{l_2}{\lambda_0} \sigma_0 \quad (1.113)$$

Et la constante de Hall le métal massif est :

$$R_{H0} = -\frac{1}{B_Z} \frac{\sigma_{0Y}}{\sigma_{0X}^2 + \sigma_{0Y}^2} \quad (1.114)$$

En utilisant les équations (1.112 et 1.113) la constante de Hall du métal massif est :

$$R_{H0} = -\frac{1}{ne} \quad (1.115)$$

Le coefficient de Hall réduit des couches minces métalliques, R_{Hf}/R_{H0} en prenant en considération l'effet des joints de grains et l'effet des surfaces externes sur les électrons est de la forme suivant :

$$\frac{R_{Hf}}{R_{H0}} = \left(1 + \frac{1}{\zeta^2}\right) A(b_2, a_2) \left(\frac{1}{\zeta^2} \left[\frac{A(b_1, a_1)}{A(b_2, a_2)}\right]^2 + 1\right)^{-1} \quad (1.116)$$

1.3 Modélisation de la conductivité électrique de deux fils fins coaxiaux

1.3.1 Préambule

La conductivité électrique des fils fins métalliques en présence ou en l'absence d'un champ magnétique a été étudiée la première fois par Andrew [40] et Chambers [35], ils ont utilisé des équations de conduction sous forme d'intégrales difficiles ou même impossibles à résoudre. Puis, Dingle [41] a proposé des expressions de la conductivité électrique en utilisant deux méthodes différentes pour déterminer l'expression de la conductivité électrique.

L'une, basée sur les théories de Fuchs [13], Lovell et Andrew [42], et l'autre, basée sur l'équation de Boltzmann.

Les résultats de cet auteur sont intéressants, mais ils sont valables seulement dans des cas limites. En 1982 Sambles et al. [43] ont proposé un modèle de conduction électronique dans les fils fins métalliques de section circulaire. Ce modèle est basé sur les travaux de Soffer [44] qui utilise un coefficient de réflexion p dépendant de l'angle de réflexion des électrons par la surface du fil et il a supposé que la surface de Fermi est sphérique pour aboutir à l'expression de la conductivité électrique, mais sous forme d'une intégrale difficile aussi à résoudre.

1.3.2 Conductivité électrique d'un fil fin métallique

Tosser et al. [45] ont élaboré une théorie basée sur le libre parcours moyen de Cottey [46] et une autre géométrie algébrique. Ces auteurs ont donné l'expression analytique simple de la conductivité électrique d'un fil fin métallique et son expression est :

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_0} = \frac{3}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin \theta \cos^2 \theta \frac{\lambda_r}{\lambda_0} d\theta \quad (1.117)$$

où :

$$\frac{\lambda_0}{\lambda_f} = 1 + \frac{\lambda_0 |\sin \theta|}{2r |\cos \phi|} \frac{2(1-p)}{(1+p)} \quad (1.118)$$

λ_0 : le libre parcours moyen et des électrons dans le métal massif constituant le fil fin.

σ_0 : la conductivité électrique du métal massif.

ϕ : est l'angle que fait le rayon OA avec la projection de la vitesse du paquet d'électrons sur la base du fil.

Et θ est donné dans la figure suivante : (Figure1.10) En tenant compte des approximations et après l'intégration de l'équation et Tosser et al ont abouti à l'équation suivante [45] :

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_0} \approx 3 \left[-\mu(\mu+c) - \frac{1}{2} - (\mu+c)^2 \times \log \left(1 - \frac{1}{\mu+c} \right) \right] \quad (1.119)$$

Avec :

$$c \approx \frac{4}{\pi}$$

$$\mu = k \frac{1+p}{2(1-p)} c_4$$

$$\text{où : } k = \frac{2r}{\lambda_0} c_4 = 0.9$$

Pour un fil métallique épais ($\mu \gg 1$) l'expression approchée de la conductivité électrique réduite est :

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_0} \approx 1 - \left(c - \frac{3}{4} \right) \frac{1}{\mu} = 1 - 0.5 \frac{1}{\mu} \quad (1.120)$$

Et pour un fil mince métallique épais ($\mu \ll 1$) on a :

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_0} \approx 3\mu \left(-c - \frac{1}{2} - c^2 \log \left(1 - \frac{1}{c} \right) \right) = 2.19\mu \quad (1.121)$$

Dans le modèle de Dingle [41], les expressions de la conductivité électrique d'un fil métallique sont :

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_0} = 1 - \frac{3}{4} \frac{1-p}{k}; k \gg 1 \quad (1.122)$$

Et :

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_0} = k \frac{1+p}{1-p}; k \ll 1 \quad (1.123)$$

1.3.3 Conductivité électrique de deux fils fins coaxiaux

On considère deux fils fins métalliques infiniment longs, coaxiaux, de section circulaire et de diamètre $2r_1$ et $2r_2$ avec : $r_1 \gg r_2$ (Figure 1.9), les fils sont soumis à un champs électrique \vec{E} parallèle à l'axe (oz), les électrons se déplacent dans les deux fils et peuvent passer d'un fil à l'autre .

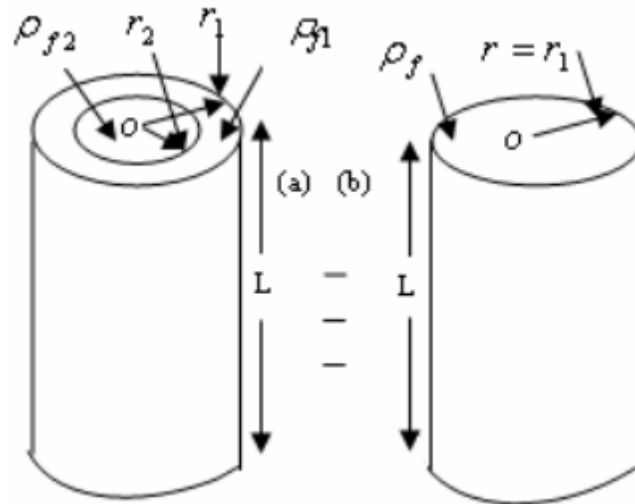


FIGURE 1.9 – (a) deux fils fins coaxiaux, fil N°1 de rayon r_1 et de résistivité ρ_{f1} , fil N°2 de rayon r_2 et de résistivité ρ_{f2} , (b) fil équivalent de rayon $r = r_1$ et de résistivité ρ_{f1}

On suppose que le coefficient de transmission des électrons à l'interface des deux fils égal à 1, dans ce cas la trajectoire d'un paquet de N électrons est donnée sur la figure (1.10). Après le choc avec la surface du fil N°1 au point A, une partie de N électrons est diffusée et elle ne participe plus à la conduction et l'autre (N_p) est réfléchié sous un angle θ avec la surface du fil. p étant le coefficient de réflexion spéculaire.

La résistance électrique équivalente aux deux fils (figure1.9 b) est donnée par la relation

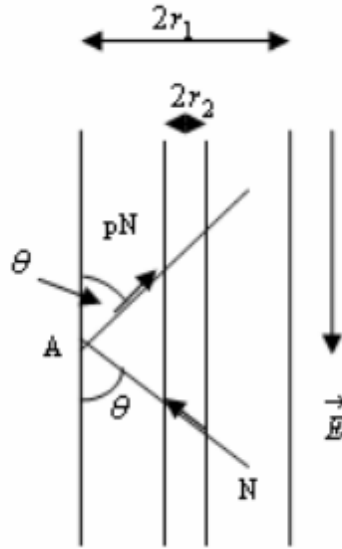


FIGURE 1.10 – Géométrie du libre parcours moyen de N électrons de conduction dans un double fils fins métalliques soumis au champ \vec{E}

suivante :

$$\begin{aligned} \frac{1}{R} &= \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \\ &= \frac{2\pi}{L} \left[r_2^2 \left(\frac{1}{\rho_{f2}} - \frac{1}{\rho_{f1}} \right) + \frac{r_1^2}{\rho_{f1}} \right] \end{aligned} \quad (1.124)$$

Où R_1 est la résistance du fil N°1 et R_2 celle du N°2 et L la longueur des deux fils.

La conductivité électrique équivalente des deux fils, déduite de l'équation (1.125), est donnée par :

$$\sigma_f = \frac{r_1^2}{r_2^2} (\sigma_{f2} - \sigma_{f1}) + \sigma_{f1} \quad (1.125)$$

Avec :

σ_{f2} et σ_{f1} la conductivité électrique respectivement du fil N°1 et du fil N°2.

Dans le modèle des électrons libres [32], la conductivité électrique, σ_0 , du métal massif s'exprime sous la forme :

$$\sigma_0 = \frac{ne^2 \lambda_0}{m^* v_F} \quad (1.126)$$

CHAPITRE 1. PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS DES
COUCHES MINCES MÉTALLIQUES ET DE DEUX FILS FINS COAXIAUX
MÉTALLIQUES

Où :

n est le nombre d'électrons libres par unité de volume, e et m^* représentent respectivement la charge et la masse effective de l'électron, v_F la vitesse de Fermi et λ_0 est le libre parcours moyen des électrons dans le métal massif.

supposons nous que m^* , n , et v_F sont proches pour les deux métaux constituant les deux fils, alors :

$$\frac{\sigma_{01}}{\sigma_{02}} = \frac{\lambda_{01}}{\lambda_{02}} \quad (1.127)$$

En fonction de $m = \frac{r_2}{r_1}$ et les épaisseurs réduites, k_1 et k_2 ($k_1 = \frac{2r_1}{\lambda_{01}}$ et $k_2 = \frac{2r_2}{\lambda_{02}}$) l'équation (1.125) devienne :

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_{01}} = m^2 \left(m \frac{k_1}{k_2} \frac{\sigma_{f2}}{\sigma_{02}} - \frac{\sigma_{f1}}{\sigma_{01}} \right) + \frac{\sigma_{f1}}{\sigma_{01}} \quad (1.128)$$

$$= m^3 \frac{k_1}{k_2} \frac{\sigma_{f2}}{\sigma_{02}} - (m^2 - 1) \frac{\sigma_{f1}}{\sigma_{01}} \quad (1.129)$$

Cette équation représente l'expression générale de la conductivité électrique de deux fils coaxiaux. Elle peut s'écrire en tenant compte des expressions de σ_{f1} et σ_{f2} dans le modèle de Tosser et al [45]

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_0} = m^3 \frac{k_1}{k_2} 3\mu_2 \left[-(\mu_2 + c) - \frac{1}{2} - (\mu_2 + c)^2 \times \log \left(1 - \frac{1}{\mu_2 + c} \right) \right] \quad (1.130)$$

Ou bien en fonction des expressions approchées des conductivités réduites :

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_{01}} = m^3 \frac{k_1}{k_2} \left(1 - 0.5 \frac{1}{\mu_2} \right) - (m^2 - 1) \left(1 - 0.5 \frac{1}{\mu_1} \right) \text{ si } \mu \gg 1 \quad (1.131)$$

Et pour $\mu \ll 1$ on a :

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_{01}} = m^3 \frac{k_1}{k_2} (2.19\mu_2) - (m^2 - 1) 2.19\mu_1 \text{ si } \mu \ll 1 \quad (1.132)$$

Dans le modèle de Dingle [41] la conductivité électrique de deux fils coaxiaux, de l'équation (1.119) , se présente comme suit :

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_{01}} = m^3 \frac{k_1}{k_2} \left(1 - \frac{3}{4} \frac{1-p}{k_2} \right) - (m^2 - 1) \left(1 - \frac{3}{4} \frac{1-p}{k_1} \right) \text{ si } k_{12} \gg 1 \quad (1.133)$$

CHAPITRE 1. PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS DES
COUCHES MINCES MÉTALLIQUES ET DE DEUX FILS FINS COAXIAUX
MÉTALLIQUES

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_{01}} = m^3 k_1 \frac{1+p}{1-p} - (m^2 - 1) k_1 \frac{1+p}{1-p} \text{ si } k_{12} \ll 1 \quad (1.134)$$

L'expression de la conductivité électrique réduite peut être également déterminée en utilisant un libre parcours moyen apparent. Cette méthode est bien détaillée dans la thèse de troisième cycle de Fertahi [47], puis reprise par Messaadi et al. [48] pour déterminer le coefficient de température de résistivité de deux fils coaxiaux. Cette expression est la suivante :

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_{01}} = \frac{3\mu'}{1 - m + k_2/k_1} \left[-(\mu' + c) - \frac{1}{2} - (\mu' + c)^2 \times \text{Log} \left(1 - \frac{1}{\mu' + c} \right) \right] \quad (1.135)$$

Avec : μ' est un paramètre dimensionnel défini par :

$$\mu' = K_1 \left[1 - m + \frac{k_2}{k_1} \right] \frac{1 + ps^2}{2(1 - ps^2)} \quad (1.136)$$

Où s est le coefficient de transmission des électrons du fil N°1 vers le fil N°2 ou l'inverse.

1.3.4 Résultats numériques et discussion

L'expression générale de la conductivité électrique de deux fils coaxiaux donnée par l'équation (1.130) devient égale à l'équation (1.119) dans le cas où $r_1 = r_2$ (un seul fil). Sur la figure (1.3.4) nous avons reporté les valeurs numériques de $\frac{\sigma_f}{\sigma_{01}}$ de doubles fils fins métalliques en fonction de k_1 , pour différentes valeurs de k_2 de m et à $p=0,75$. Ces valeurs numériques sont déduites de l'équation (1.130) et de l'équation (1.135) pour les travaux de Messaadi et al [48]. Nous constatons que les deux équations coïncident pour les faibles valeurs de k_1 et diffèrent de 6% en moyenne pour les fortes valeurs de k_1 . Cet écart provient sans doute des expressions du libre parcours moyen apparent et du coefficient spéculaire apparent, utilisées par ces auteurs [48]. Ces expressions sont valables plutôt pour les doubles couches parallélépipédiques [49] que pour deux fils coaxiaux. Les figures (1.3.4) et (1.12) montrent que l'écart entre les deux équations (1.128 et 1.135) [48] ne dépend pas de p , m , k_2 , $\frac{\lambda_{01}}{\lambda_{02}}$ et par contre il dépend de k_1 .

Nous avons calculé les valeurs numériques de $\frac{\sigma_f}{\sigma_{01}}$ à partir de l'équation (1.119) du modèle de Dingle pour les fortes valeurs de k_1 , $m = 0.5$ et $\frac{\lambda_{01}}{\lambda_{02}} = \frac{1}{2}$. Les résultats sont représentés sur la figure (1.13) pour $p = 0.25$ et $p = 0.75$.

CHAPITRE 1. PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS DES
COUCHES MINCES MÉTALLIQUES ET DE DEUX FILS FINS COAXIAUX
MÉTALLIQUES

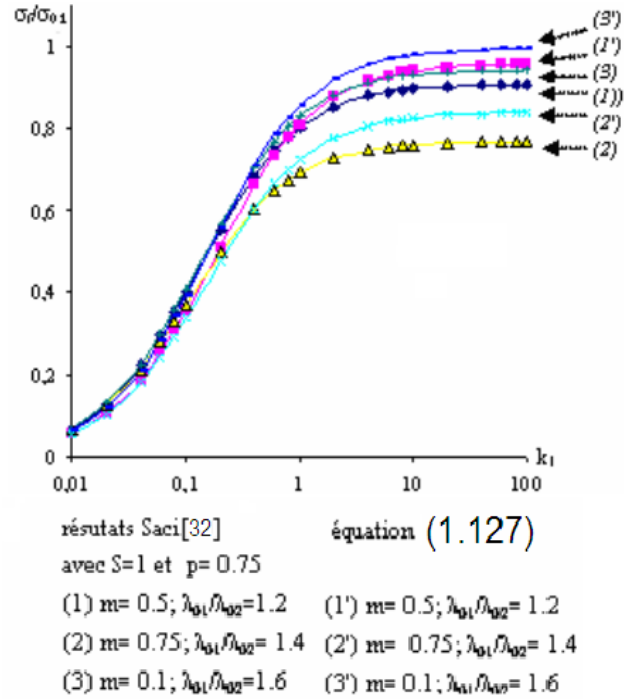


FIGURE 1.11 – Variation de la conduction électrique réduite en fonction de l'épaisseur réduite k_1 , $s = 1$, et avec $p = 0.75$

Sur la même figure (1.13), nous avons représenté les valeurs de la conductivité réduite déduite de l'équation (1.130). Nous remarquons que les différentes courbes qui représentent le même phénomène coïncident.

Sur la figure(1.3.4) , nous avons représenté la conductivité électrique réduite d'un fil fin et de doubles fils coaxiaux. Nous remarquons que ces courbes ont la même allure, comme dans le cas de la double couche et des couches parallélépipédiques [49]. Les libres parcours moyens λ_0 et les résistivités ρ_0 de l'argent et de l'or en massif sont donnés dans le tableau tableau (1.1). La résistivité ρ_{fc} donnée dans le même tableau représente la résistivité due aux phonons et à la surface externe du fil N 1 obtenue à partir des points expérimentaux en utilisant la loi Matthiesen :

$$\rho_f = \rho_0 + \rho_s + \rho_g \tag{1.137}$$

avec : $\rho_{fc} = \rho_f + \rho_g$

CHAPITRE 1. PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS DES
COUCHES MINCES MÉTALLIQUES ET DE DEUX FILS FINS COAXIAUX
MÉTALLIQUES

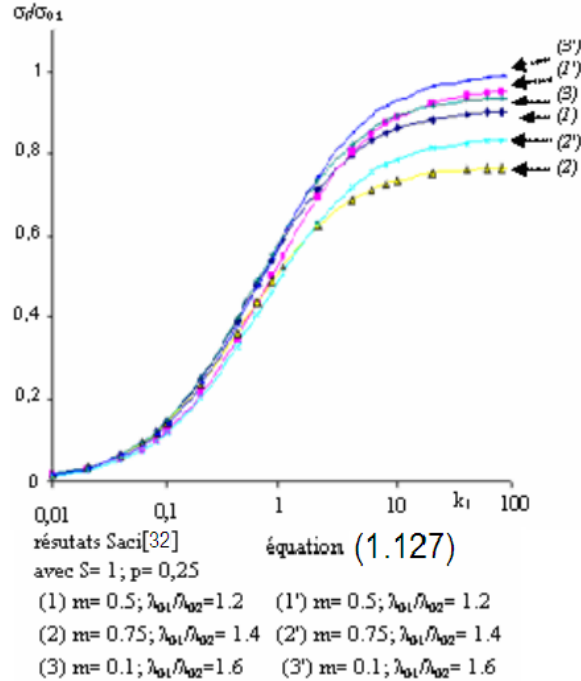


FIGURE 1.12 – Variation de la conduction électrique réduite en fonction de l'épaisseur réduite k_1 , $s = 1$, $p = 0.25$

où : ρ_s et ρ_g représentent les résistivités respectivement dues à la surface externe et aux joints des grains

Métal	λ_0 (nm)	ρ_0 ($\mu\Omega cm$)	ρ_g ($\mu\Omega cm$)	ρ_{fc} ($\mu\Omega cm$)
Au[50]	40	2.2	1.7	3.46
Ag[51]	38	1.6	0.73	2.19

TABLE 1.1 – Données expérimentales des fils en Au et Ag [50, 51]

A partir des données du tableau (1.1) et de l'équation (1.130), nous avons calculé les valeurs numériques de la conductivité électrique réduite, $\frac{\sigma_f}{\sigma_{01}}$ en fonction de $k_1 = \frac{2r_1}{\lambda_{01}}$ est de σ_f la conductivité des deux fils Ag/Au et σ_{01} la conductivité électrique de l'or massif. Ces résultats sont représentés sur la figure(1.15).

Sur la même figure nous avons représenté en triangle les conductivités réduites corrigées des doubles fils Ag/Au données par l'expérience [50, 51]. Nous remarquons, d'après la figure

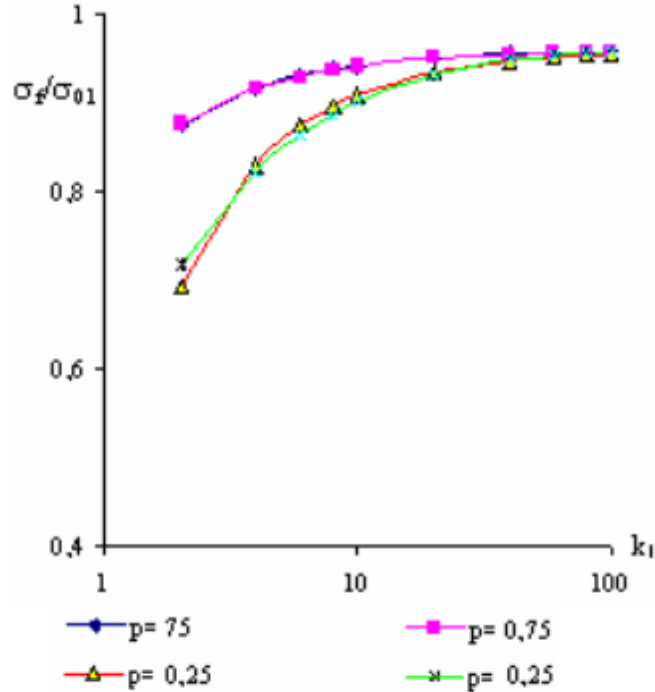


FIGURE 1.13 – Variation de la conduction électrique réduite en fonction de l'épaisseur réduite k_1 .

(1.15), que la courbe théorique (1.130) et les points expérimentaux sont en bon accord, à condition de prendre le coefficient de réflexion spéculaire p égal à 0,33. L'équation (1.130) représente l'expression générale de la conductivité électrique de deux fils coaxiaux. Si le diamètre du fil N°1 est égal au diamètre du fil N°2.

1.4 Conclusion

Dans un premier temps nous avons rappelé dans ce travail des modèles utilisés et l'expression de coefficient de Hall pour l'étude des phénomènes de transport dans des couches minces métalliques sur lesquels nous s'appuyons aussi dans notre étude pour les couches minces semiconductrices. Dans un deuxième temps nous avons donné l'expression de la conductivité électrique réduite de deux fils métalliques coaxiaux dans deux modèles différents en fonction des diamètres des fils et du coefficient de réflexion spéculaire p . Les résultats numériques sont calculés et comparés avec ceux donnés dans la littérature qu'elles soient théoriques

CHAPITRE 1. PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS DES
COUCHES MINCES MÉTALLIQUES ET DE DEUX FILS FINS COAXIAUX
MÉTALLIQUES

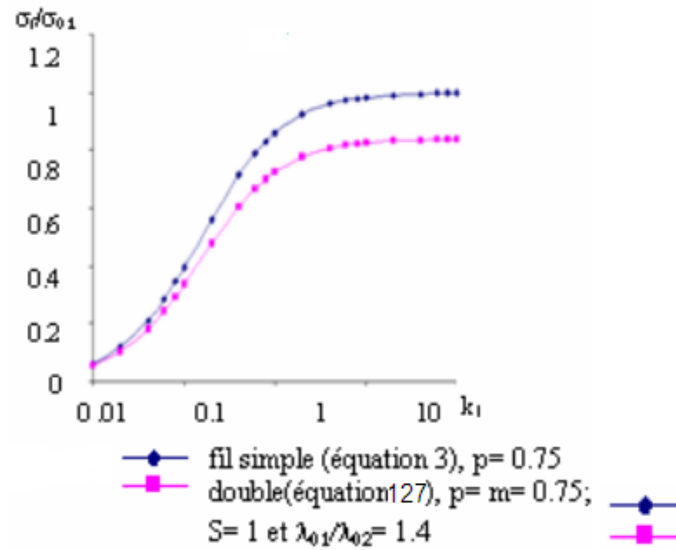


FIGURE 1.14 – Variation de la conduction électrique réduite en fonction de l'épaisseur réduite k_1

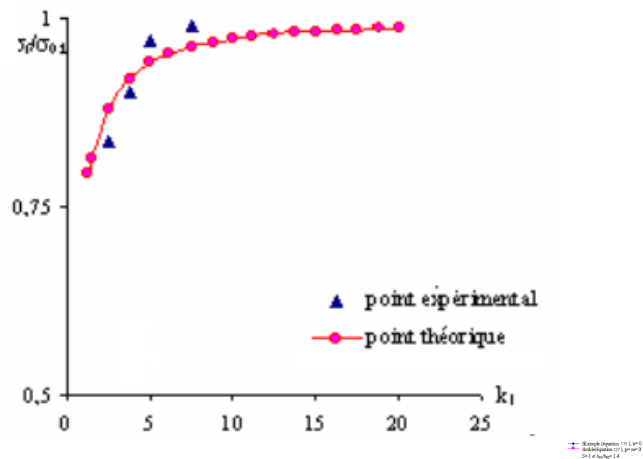


FIGURE 1.15 – Conductivité électrique réduite en fonction de l'épaisseur réduite k_1

ou expérimentaux. Un bon accord est obtenu dans l'ensemble. L'allure des courbes qui représentent la conductivité électrique réduite de deux fils coaxiaux est identique à celle des fils fins métalliques comme dans le cas des couches parallélépipédiques. Cette théorie sera

CHAPITRE 1. PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS DES
COUCHES MINCES MÉTALLIQUES ET DE DEUX FILS FINS COAXIAUX
MÉTALLIQUES

reprise en tenant compte des joints de grains pour modéliser des cylindres polycristallins en silicium qui ont une application en microélectronique.

Chapitre 2

Silicium massif et en couche mince

2.1 Introduction

Les chercheurs John Bardeen, William Shockley et Walter Brattain ont inventé le premier transistor en 1947, ils ont utilisés les propriétés semi-conductrices du germanium, ils ont eu le prix Nobel de physique en 1956. Toutefois, le germanium est remplacé par le silicium. C'est l'élément le plus abondant dans l'univers après le carbone (peut près de 25%) ; il est présent à la surface de notre planète sous forme de composés : les oxydes de silicium comme le quartz ou la cristobalite, et les silicates comme les feldspaths, les micas. Parmi ces composés, l'homme a été utilisé la première fois la silice (le sable, SiO_2) dans les matériaux de construction. Le silicium fut découvert en 1824 par Jöns Jacob J.J. Berzelius à Stockholm, en Suède, lorsqu'il arriva à isoler l'espèce chimique [\[52\]](#).

2.2 la physique de silicium

2.2.1 La cristallographie

Le silicium est le 14^e élément de la classification périodique, il appartient à la 4^e colonne (groupe B) il possède de ce fait quatre électrons périphériques sur la couche M.

Les atomes occupent les nœuds des deux réseaux cubiques à face centrées décalés l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale du cube. Elle peut être décrite comme étant formée de 2 structures cubiques faces centrées déplacées l'une par rapport à l'autre par $(1/4, 1/4, 1/4)$ le long de la diagonale principale. La position de l'origine de la seconde structure. Le diamant cristallise dans cette structure, mais aussi le Silicium.

La maille élémentaire de Si est celle de réseau cubique faces centrées ; c'est le rhomboèdre de la (Figure 2.1) :

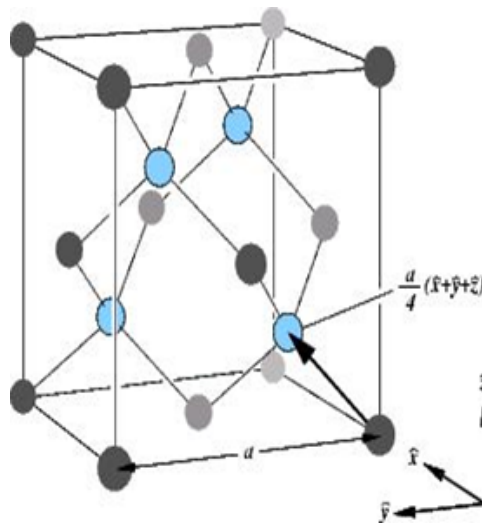


FIGURE 2.1 – Maille cubique conventionnelle de la structure diamant d'après N. W. ASHCROFT et N. D. MERMIN [53]

Chaque atome de Silicium engage ses électrons dans 4 liaisons de valence avec les 4 atomes voisins c'est pour cela ce cristal est dite covalent (structure diamant). Ces liaisons sont orientées dans l'espace en position tétraédrique ; c'est à dire suivant les axes de symétrie ternaire d'un tétraèdre régulier dont l'atome considéré occupe le centre et ces plus proche voisins occupe les sommets ces liaisons font entre elles des angles de $109^{\circ}28'$ (Figure 2.2)

[54]

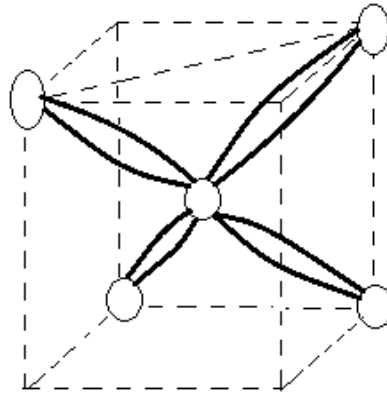


FIGURE 2.2 – Orientation spatial des liaisons de valence du Silicium

2.2.2 La structure des bandes de Silicium

Le minimum de la bande de conduction est situé sur l'axe Δ , en $k \neq 0$, ce qui en fait un semi-conducteur à gap indirect.

La structure de Silicium est (cfc) avec un paramètre de maille de 0,5430710 nm (Figure 2.3).

Pour les bandes d'énergie dans le silicium Le maximum de la bande de valence a lieu au vecteur d'onde (vecteur de BLOCH) ou se rencontrent deux bandes dégénérées avec des courbures différentes. Les six minima de la bande de conduction dans la première zone de BRILLOUIN sont situés dans les directions $[100]$. La troisième bande, située à seulement 0,044 eV en dessous du maximum de la bande de valence, peut être une source significative de porteurs à température ambiante ($k_B T = 0,025$ eV).

2.2.3 Diagramme des bandes d'énergie de Silicium

La figure (2.4) donne graphiquement le bilan électronique pour un semi-conducteur dopé P.



FIGURE 2.3 – Structure de bande du silicium [55]

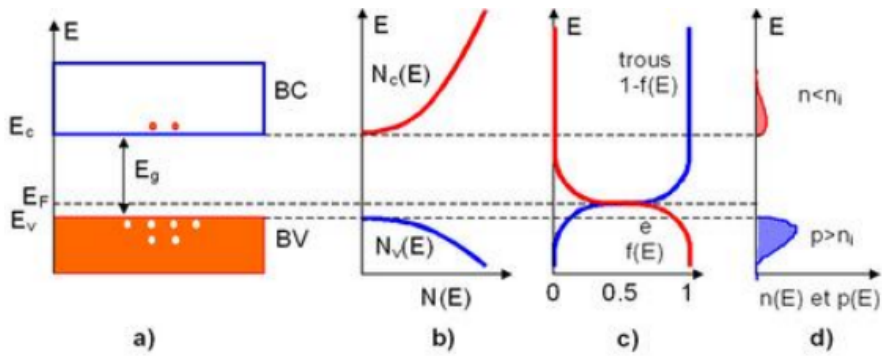


FIGURE 2.4 – Semi-conducteur type P. a) Diagramme des bandes d'énergie b) Densités d'états énergétique. c) Distributions de Fermi-Dirac d) Densités énergétiques de porteurs (les densités de porteurs n et p correspondent aux surfaces hachurées)[56]

2.2.4 Forme de bande de valence et l'énergie du modèle étudié

Les formes de bandes de valence de Si de trois sous bande non sphérique non parabolique, données par les relations cubique de Kane[57] .

- Bande des trous lourds
- Bande des trous légers
- Bande dont le sommet est séparé des deux précédentes par l'énergie spin-orbite : $\Delta = 0.035eV$

Nous intéressons dans notre étude sur un modèle simplifier c'est le modèle de la bande sphérique parabolique avec une masse dépendante de l'énergie moyenne à 300 k° on peut compter tenue des relations $\varepsilon(E)$ qui exprime la masse en fonction du champ électrique E . L'énergie en fonction du vecteur d'onde est donnée par : [58]

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*(E)} \quad (2.1)$$

Où : $m^*(E)$:est la masse effective en conftion du champ électrique donnée par la figure(Figure 2.5)

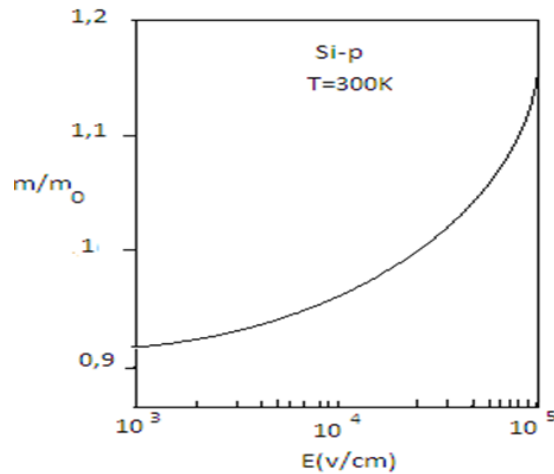


FIGURE 2.5 – Masse effective en fonction du champ électrique[59]

Notons que le passage à des structures nanométriques dont des couches qui ne dépassent pas 5 nm d'épaisseur modifie fortement les propriétés physiques du silicium et les électrons ne se comportent plus de la même façon dans ces nanostructures et la structure de bande du silicium s'en trouve modifiée. C'est le phénomène de confinement quantique.

2.2.5 Les états de Silicium utilisé

a-Le Silicium monocristallin

La réalisation de nombreux dispositifs commence par la production d'une matière monocristalline de grande pureté (99,999999% pour Si). En particulier la fabrication de puces microélectroniques nécessitent des substrats monocristallins semi-conducteurs.

Le grain peut être défini par sa taille et par sa qualité cristalline. Pour des grains dans le Si monocristallin peuvent être en pratique des dislocations et des macles. Les dislocations induisent l'apparition de liaisons pendantes, qui sont électriquement actives. Quant aux macles, si elles se terminent à la surface du grain, elles n'induisent pas de défauts électriquement actifs dans le grain mais peuvent diviser le grain en plusieurs cristallites, par contre si elles se finissent dans le grain, elles provoquent l'apparition de dislocations et donc de liaisons pendantes. La densité de ces défauts va donc déterminer la qualité du grain. En ce qui concerne les cristallites, ce sont leur taille mais surtout leur orientation cristallographique qui les caractérisent.

b-Le Silicium polycristallin

On peut imaginer des structures intermédiaires entre ces deux états extrêmes. En particulier, il peut exister des phases constituées de l'état cristallin et de l'état amorphe, c'est ainsi que l'on définit le Si-poly : ce matériau est constitué de grains monocristallins séparés entre eux par des zones désordonnées et riches en défauts cristallins, que l'on peut assimiler à du silicium amorphe et que l'on nomme joints de grains. Chacun de ces deux composants du Si-poly, grains et joints de grains, possède des caractéristiques propres que nous rappelons brièvement :

1. Les joints de grains dans un matériau polycristallin sont des zones de discontinuité et renferment une très grande densité de défauts cristallins et d'impuretés ils représentent des barrières de potentiel que les électrons doivent surmonter. Si la taille des cristallites diminue le nombre du joint des grains augmente, donc la mobilité des porteurs de charge diminue fortement.
2. les caractéristiques essentielles du joint de grain sont ses dimensions, c'est-à-dire son épaisseur, et également sa densité de défauts

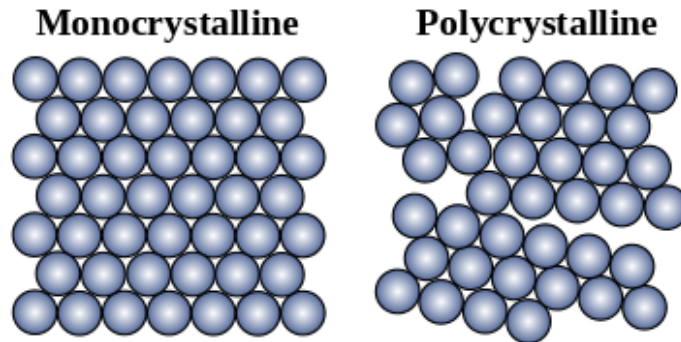


FIGURE 2.6 – Arrangement des atomes pour le Si-mono et Si-poly

2.2.6 Dopage de Silicium

Un semi-conducteur intrinsèque est un semi-conducteur non dopé, s'il contient un nombre inférieur et limité d'impuretés (atomes étrangers) en comparaison avec la quantité de trous et d'électrons générés thermiquement par contre Un semi-conducteur extrinsèque s'il est dopé par des impuretés spécifiques pour avoir des propriétés électriques désirables (qu'on veut).

Le dopage d'un semi-conducteur est effectué par substitution d'un de ses atomes par un atome de valence supérieure ou inférieure. Dans le cas du silicium, si l'atome de substitution possède cinq électrons de valence, un des électrons n'est que faiblement lié au noyau et favorise la conduction par électron. L'atome d'impureté est dit donneur et le semi-conducteur de type n (Phosphore). Inversement, si l'atome d'impureté ne compte que trois électrons de valence, sa liaison avec le réseau du silicium donne naissance à un trou, il est dit accepteur et le semi-conducteur de type p. La conduction se fait ici essentiellement par trous. Les atomes d'impuretés introduisant des niveaux dans la bande interdite, le semi-conducteur est dit extrinsèque.

Les atomes de Bohr B groupe III possèdent trois électrons du périphériques en position substitutionnelle dans le réseau de silicium ils ne peuvent échanger que 3 liaisons de valence

avec 3 des 4 de silicium voisins (Figure 2.7 (a))

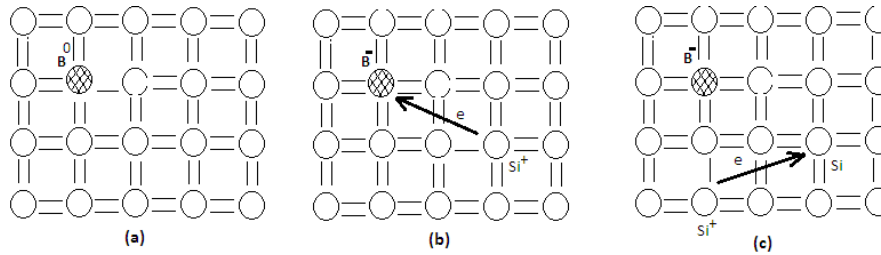


FIGURE 2.7 – Ionisation d’un atome de Bore substitutionnel et migration de trou créé [54]

Un électron de valence d’un atome proche peut être capturé par l’impureté lui permettant d’échanger une quatrième liaison de valence (Figure 2.7 (b))

Le Si dans lequel on a fait diffuser des impuretés de groupe 3 est de type P (semiconducteur par défaut) la conduction est effectuée par des trous positifs, figure (2.7(c))

les impuretés du groupe introduisent des niveaux voisins de la bande de valence, ces niveaux sont ceux d’un trou soumis à l’attraction coulombienne d’un ion B^- .

2.2.7 Vitesse de dérive transitoire du porteur

La vitesse de dérive est donnée par la formule suivante :

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon(k)}{dk} \quad (2.2)$$

2.2.8 Mobilité des trous

La mobilité est une caractéristique très importante du matériau, car elle traduit la capacité qu’ont les porteurs à se déplacer dans le matériau. C’est donc un facteur déterminant pour les dispositifs. Ceci est très important pour des domaines comme l’optoélectronique, ou les télécommunications. D’après la définition de la mobilité, le transport électronique dépend essentiellement de deux paramètres : la masse effective des électrons et la fréquence des interactions avec le réseau cristallin. La vitesse moyenne des électrons résulte de deux interactions antagonistes : l’accélération due au champ électrique et la diffusion par le réseau cristallin. L’action du potentiel cristallin est décrite par les notions de masse effective;

deux effets perturbateurs s'ajoutent de façon ponctuelle à l'action du potentiel cristallin. D'une part, à cause de l'agitation thermique, les atomes vibrent autour de leur position d'équilibre (phonon), d'autre part, il existe des perturbations locales du potentiel cristallin (dopant, alliages, ...) qui sont aussi sources d'autres types d'interactions des porteurs avec le réseau. La mobilité est liée au libre parcours moyen λ des porteurs de charge.

La mobilité est calculée à partir du régime stationnaire de la vitesse moyenne de dérive est :

$$\mu = \frac{v_s(d)}{E} \quad (2.3)$$

2.3 Probabilité des collisions et temps de relaxations

2.3.1 Catégories de collisions

a-Interaction isotrope

Dans ce cas la probabilité de transition est indépendante de l'orientation comme l'interaction du porteur avec les phonons optique non polaire ou bien les acoustiques. Ces interactions conservent l'énergie du porteur avec un changement possible de l'orientation de son vecteur d'onde.

b-Interaction anisotrope

Ici la probabilité de transition est dépendante de l'orientation. Ces interactions sont dues essentiellement aux transitions interbandes qui permettent le transfert des porteurs, d'une vallée à une autre vallée équivalente ou non équivalente. Elles sont accompagnées d'absorption ou d'émission d'un phonon dont la valeur dépend de l'écart d'énergie entre la vallée de départ et la vallée d'arrivée. Une interaction interbande ne peut avoir lieu que si l'énergie après absorption ou émission du phonon, est supérieure à l'énergie du fond de la vallée d'accueil (les énergies étant repérées par rapport au bas de).

2.3.2 Effet des phonons acoustique et optique non polaire

Selon les vibrations des atomes du réseau cristallin, les phonons se distinguent en deux catégories : les phonons optiques, pour lesquels les atomes vibrent en opposition de phase, et les phonons acoustiques (couplage par déformation de potentiel cristallin), où les atomes vibrent en phase. Ces interactions phonon-porteur se font par absorption ou émission de phonons. L'interaction avec les phonons optiques à basse température, le nombre de phonons est faible, l'interaction porteur-phonon est peu probable, et Lorsque la température augmente, les vibrations du réseau augmentent. Ainsi l'interaction avec les phonons optiques devient prépondérante aux hautes températures. Cependant en distingue entre les deux catégories :

a-Collisions avec des phonons acoustiques

La collision d'un porteur avec un phonon acoustique est élastique son énergie $\hbar\omega_q$ en général $\hbar\omega_q \ll K_B T$ tel que T est la température du réseau :

La probabilité de transition par unité de temps d'un état \vec{k} vers un état \vec{k}' est donnée pour l'émission ou absorption d'un phonon acoustique par [Ehrenreich, 1959; Costato, 1973; Ottanani, 1975; jacoboni 1979,] :

$$P_{ac}(\vec{k}; \vec{k}') = \frac{\pi^2 K_B T E_1^2}{h V \rho s^2} \delta(\varepsilon' - \varepsilon) \quad (2.4)$$

Avec :

T : est la température du réseau ε : Energie du porteur après la collision qui ne dépend que de \vec{k} . ε' : Energie du porteur après la collision qui ne dépend que de \vec{k}' .

Les autres paramètres sont donnés dans le tableau.

b-Collision avec des phonons non polaire

La collision du porteur avec le phonon optique non polaire est élastique son énergie est $\hbar\omega_{op}$.

La probabilité de transition optique est :

$$P_{op\pm}(\vec{k}; \vec{k}') = \frac{\Xi_o^2}{8\pi^2 \rho \omega_{op}} (N_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}) \delta(\varepsilon' - \varepsilon \pm \hbar\omega_{op})$$

On pose : $\hbar\omega_{op} = K_B T$ et les autres paramètres sont donnés dans le tableau. Avec :

Ξ_0 : Paramètre du potentiel de déformation pour les collisions avec les phonons optiques, sa valeur dépend du modèle étudié.

N_O : Densité de phonons optiques est équivalent à :

$$1/\exp(T_{op}/T) - 1 \quad (2.5)$$

\pm : Le signe ‘+’ correspond à l’émission d’un phonon et ‘-’ pour l’absorption.

2.3.3 Effets des impuretés ionisés

L’ionisation des impuretés contenues dans le cristal conduit à l’apparition d’un potentiel coulombien qui perturbe la distribution périodique du potentiel cristallin. Ainsi, les porteurs qui passent au voisinage d’une impureté ionisée trouvent leur trajectoire modifiée c’est l’interaction entre le porteur et l’atome ionisée qu’on traite comme une collision (la diffusion Rutherford) qui n’est pas isotrope, ce qui réduit la valeur de la mobilité. Cette interaction a fait l’objet de plusieurs études, le modèle de H. Brooks et C.Herring [60] tient compte des effets de charges d’espaces au niveau de l’expression du potentiel crée par chaque impureté supposée ionisée et il suppose que toutes les impuretés sont ionisées et que les interactions porteur- porteur sont très peu probable. Les collisions avec les impuretés ionisées sont anisotropes et élastiques ces collisions sont prépondérantes à basse température et le temps moyen entre collisions dépend de l’énergie du porteur et de la concentration en impuretés. La probabilité de transition par unité du temps est donnée par le modèle de Brooks-Herring :

$$P_{imp}(\vec{k}; \vec{k}') = \frac{N_i e^4}{\hbar \chi^2} \frac{k^2}{\left. \frac{d\varepsilon}{dk} \right|_k} \frac{\delta(\varepsilon' - \varepsilon) G(\vec{k}; \vec{k}')}{B^2(B^2 + 4k^2)} \quad (2.6)$$

Avec :

$$B^2 = \frac{e^2 N_i}{\chi K_B T}$$

$$\chi = \varepsilon_0 \varepsilon_r$$

N_i : Nombre d’impuretés ionisées (porteurs libres).

ε_0 : Permittivité du vide.

ε_r : Permittivité relative.

$G(\vec{k}; \vec{k}')$: Facteur de chevauchement pris égal 1/2.

Les autres paramètres sont donnés dans le tableau suivant :

. La table 2.1

Paramètres	Valeurs et unités
V : volume du matériau	
ρ : masse volumique	2329 kg /m ³
s : vitesse pondérée du son	6573,3 m /s
h : constante de Planck	6,62 ; 10 ⁻³⁶ js
e : charges de l'électron	1,602 .10 ⁻¹⁹ Cb
T : Température du réseau	300 K
ε_0 : constante diélectrique du vide	1/ (3 π .10 ⁹)
ε_r : constante diélectrique relative du vide du Si	11,7
k_B : constante de Boltzmann	1,38 .10 ⁻²³ MKSA
Ξ_{op} : constante pour collisions optique	5 ev/cm
T_{op} : Température du phonon optique	735 K
N_{op} : Densité du phonon optique	$\frac{1}{\exp(T_{op}/T)-1}$
E_{ac} : constante pour collision acoustiques	6.10 ⁸ ev/cm :

TABLE 2.1 – Paramètres utilisées pour Si-p

2.3.4 Effets des joints de grains

La publication des travaux en 1970 de Mayadas-Shatzkes [26] et Tellier-Tosser[30], permet d'avoir un modèle de qui décrit dû à l'action d'effet des joints des grains sur le phénomène du transport d'électronique dans les couches minces polycristallines, mais le caractère mathématique compliqué des équations obtenues pour exprimer la résistivité électrique ne permet pas de les utiliser de manière commode. Mayadas et Shatzkes, ont utilisé des outils mathématiques qui servent à décrire l'effet des lignes de dislocations dans les semi-conducteurs. En admettant ainsi que les joints de grains perpendiculaires au champ électrique peuvent être représentés par des lignes de dislocations qui s'étendent à travers les couches élémentaires ; la validité de cette hypothèse paraît sujette à caution dans le cas des couches les plus minces car le nombre de couches élémentaires est peu important.

2.4 Temps de relaxation et le libre parcours moyen

2.4.1 Temps de relaxation sur les phonons acoustiques et optiques

Le temps de relaxation sur les phonons acoustiques $\tau_{ac}(\vec{k})$ et Le temps de relaxation sur les phonons optiques $\tau_{op}(\vec{k})$ on peut les calculer à partir des relations équivalentes suivantes en utilisant les coordonnées polaires :

$$\frac{1}{\tau(k, \theta, \phi)} = \frac{V}{8\pi^3} \int P(\vec{k}; \vec{k}') d^3k' \quad (2.7)$$

$$\frac{1}{\tau(k, \theta, \phi)} = \frac{V}{8\pi^3} A_{ac,op} \int \int \int \delta(\varepsilon' - \varepsilon \pm \hbar\omega_q) k'^2 \sin \theta' dk' d\theta' d\phi' \quad (2.8)$$

$$\frac{1}{\tau(k, \theta, \phi)} = \frac{V}{8\pi^3} A_{ac,op} \int \int \int \delta(\varepsilon' - \varepsilon \pm \hbar\omega_q) k'^2 \left| \frac{\partial k'}{\partial \varepsilon'} \right|_{\varepsilon'} \sin \theta' d\varepsilon' d\theta' d\phi' \quad (2.9)$$

$$\frac{1}{\tau(k, \theta, \phi)} = \frac{V}{8\pi^3} A_{ac,op} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} k'^2 \left| \frac{\partial k'}{\partial \varepsilon'} \right|_{\varepsilon'} \sin \theta' d\theta' d\phi' \quad (2.10)$$

Avec :

$$\begin{cases} \varepsilon'(\vec{k}') = \varepsilon(\vec{k}) \pm \hbar\omega_q \\ A_{ac} = \frac{\pi^2 K_B T E_1^2}{h V \rho_s^2} & ; \hbar\omega_q = 0 \\ A_{op} = \frac{\pi \hbar \Xi_0^2}{V K_B \rho T_{op}} (N_O + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}) \end{cases} \quad (2.11)$$

$\left| \frac{\partial k'}{\partial \varepsilon'} \right|_{\varepsilon'}$ calculé numériquement à partir du tableau $\varepsilon(k, \theta, \phi)$ ou bien de $k(\varepsilon, \theta, \phi)$

2.4.2 Temps de relaxation sur les impuretés

Le temps de relaxation sur les impuretés ionisées est donné par :[63]

$$\frac{1}{\tau_{imp}(\vec{k})} = \frac{V}{8\pi^3} \int P_{imp}(\vec{k}; \vec{k}') d^3k' \quad (2.12)$$

$$\frac{1}{\tau_{imp}} = \frac{N_i e^4}{\pi \hbar \chi^2} \frac{k^2}{\frac{d\varepsilon}{dk}|_k} \frac{1}{B^2(B^2 + 4k^2)} \quad (2.13)$$

Avec :

$$B^2 = \frac{e^2 N_i}{\chi K_B T} \text{ et } \chi = \varepsilon_0 \varepsilon_r$$

2.4.3 Temps de relaxation sur les joints de grains

Si on suppose que la diffusion des trous par les joints de grains est isotopique, le libre parcours moyen qui correspond à cette diffusion est donné par [30] :

$$\lambda_g = \frac{D}{A_i} \frac{1}{\ln \frac{1}{t}} \quad (2.14)$$

Avec :

A_i : Le coefficient des joints de grains isotopiques, égal à 1,45.

D : le diamètre moyen des grains.

t : le coefficient statistique de transmission électronique.

En utilisant l'approximation suivante :

$$\hbar k = m^* \frac{\lambda_g}{\tau_g}, \quad (2.15)$$

Où :

λ_g : Libre parcours dû à la diffusion par les joints de grains.

L'inverse du temps de collision sur les joints de grains s'écrit :

$$\frac{1}{\tau_g} = \frac{A_i}{D} \frac{\hbar k}{m^*} \ln \frac{1}{t} \quad (2.16)$$

2.4.4 Temps de relaxation sur les surfaces externes

On a pour les surfaces externes :

$$\hbar k = m^* \frac{\lambda_s}{\tau_s} \quad (2.17)$$

Avec :

λ_s : Libre parcours

τ_s : Temps de relaxation sur les surfaces et d'après l'équation (3.35) on a :

$$\frac{1}{\tau_s} = \frac{\hbar k}{\lambda_s m^*} \quad (2.18)$$

La théorie de Cottey [28] et les simulations numérique. [30]

$$\tau_S = \frac{d}{|\cos \theta| \ln \frac{1}{p}} \quad (2.19)$$

On obtient :

$$\frac{1}{\tau_S} = \frac{\hbar k}{dm^*} |\cos \theta| \ln \frac{1}{p} \quad (2.20)$$

2.4.5 Temps de collision résultant et le libre parcours résultant

Nous supposons que les sources de diffusion des trous sont indépendantes ; dans ce cas le temps de collision résultant, τ_r , s'écrit :

$$\frac{1}{\tau_r} = \frac{1}{\tau_{ac}} + \frac{1}{\tau_{oa}} + \frac{1}{\tau_{oe}} + \frac{1}{\tau_s} + \frac{1}{\tau_g} + \frac{1}{\tau_{imp}} \quad (2.21)$$

Où

$$\frac{1}{\tau_r} = \frac{1}{\tau_0} + \frac{1}{\tau_s} + \frac{1}{\tau_g} \quad (2.22)$$

Avec :

τ_0 : Le temps de collision sur les phonons acoustiques et optiques, a ce temps de collision résultant, τ_r correspond un libre parcours moyen résultant, , tel que :

le libre parcours moyen résultant des trous dans une couche mince en tenant compte des imperés peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\frac{1}{\lambda_r} = \frac{1}{\lambda_{ac}} + \frac{1}{\lambda_{oa}} + \frac{1}{\lambda_{oe}} + \frac{1}{\lambda_s} + \frac{1}{\lambda_g} + \frac{1}{\lambda_{imp}} \quad (2.23)$$

2.4.6 Résistivité électrique réduite

La résistivité électrique réduite d'une couche mince s'écrit [30]

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \frac{\lambda_0}{\lambda_r} \quad (2.24)$$

Où ρ_0 est la résistivité électrique du silicium massif et ρ_f celle de la couche mince.

D'après l'équation :

$$\frac{\rho_f}{\rho_0} = 1 + \frac{\lambda_0}{\lambda_s} + \frac{\lambda_0}{\lambda_g} \quad (2.25)$$

Et elle s'écrit d'après les équations (2.23 et 2.24) et des travaux antérieurs [30, 24, 61]

$$\frac{\rho_f}{\rho_0} = 1 + \frac{0.375}{d} \lambda_0 \ln \frac{1}{p} + \frac{1.45}{D} \lambda_0 \ln \frac{1}{t} \quad (2.26)$$

Ou bien :

$$\frac{\rho_f}{\rho_0} = 1 + 2,1 \frac{1}{\nu} + \frac{3}{8} \frac{1}{\mu} \quad (2.27)$$

Avec :

ν : Paramètre de grain et μ paramètre dimensionnel.

Dans les équations (2.26 et 2.27) , il y a séparation des termes qui représentent les joints de grains et les surfaces externes. Donc l'équation (2.25) peut se mettre sous la forme de la loi de MATHIESSEN [36] :

$$\frac{\rho_f}{\rho_0} = 1 + \frac{\rho_s}{\rho_0} + \frac{\rho_g}{\rho_0} \quad (2.28)$$

Où ρ_g et ρ_s sont respectivement la résistivité électrique due aux joints de grains et aux surfaces externes.

On peut écrire en ajoutant le terme des impuretés :

$$\frac{\rho_f}{\rho_0} = 1 + \frac{\rho_s}{\rho_0} + \frac{\rho_g}{\rho_0} + \frac{\rho_{imp}}{\rho_0} \quad (2.29)$$

Et d'après notre étude on peut écrire en ajoutant le terme des impertés :

$$\frac{\rho}{\rho_0} = 1 + 0.375 \frac{\lambda_0}{d} \ln \frac{1}{p} + \frac{A_{imp}}{d} \quad (2.30)$$

Avec :

$$A_{imp} = f(N_A)$$

2.5 Coefficient de Hall dans les couches semiconductrices

2.5.1 Rappel sur le coefficient de Hall dans les couches minces métalliques

La détermination du coefficient de Hall dans les couches minces métalliques en tenant compte l'effet des surfaces externes sur les électrons a été faite en 1950 par Sondheimer [27] en résolvant l'équation de Boltzmann, ensuite , Chambers [35] a utilisé une méthode cinétique pour résoudre le problème de transport dans des couches minces métalliques soumises simultanément a un champ électrique et magnétique.

En 1978 ce coefficient a été calculé par Tellier et all [30, 64] en utilisant un libre parcours moyen des porteurs pour résoudre analytiquement l'équation de Boltzmann, le rayon de la trajectoire circulaire des électrons déviés est appelé rayon de Larmor et son expression dans un milieu d'extension infinie.

$$r_0 = \frac{m^*v}{eB_Z} \quad (2.31)$$

Où m^* , v et sont respectivement la masse effective, la vitesse et la valeur absolu de la charge de l'électron .

2.5.2 Principe d'effet Hall

Une couche mince d'épaisseur d soumise simultanément à un champ électrique longitudinal E_X et à une induction magnétique transversale B_Z , ce qui impose sur les porteurs une déviation vers un bord de la couche , produisant un gradient de concentration des électrons (voir les figures 1.7 et 1.8 dans le chapitre 1).

2.5.3 Rappels sur l'effet Hall dans une couche semiconductrice

Dans sa théorie sur les effets galvanomagnétiques dans les matériaux conducteurs et semi-conducteurs, Sondheimer [27] a résolu l'équation de Boltzmann dans l'hypothèse d'un

modèle a deux bandes de conduction, il a abouti à la relation :

$$R_{HS} = \frac{1}{e} \frac{\frac{\sigma_n^2}{n} - \frac{\sigma_p^2}{p} + \frac{B^2}{e^2} \sigma_n^2 \sigma_p^2 \frac{n-p}{n^2-p^2}}{(\sigma_n + \sigma_p)^2 + \frac{B^2}{e^2} \sigma_n^2 \sigma_p^2 \frac{(n-p)^2}{n^2 p^2}} \quad (2.32)$$

Avec :

B : l'induction magnétique.

e : la charge d'électron.

σ_n, σ_p : sont respectivement la conductivité électrique des électrons et la conductivité électrique des trous.

Et on aboutit à :

$$R_{HS} = \frac{R_p \sigma_n^2 + R_n \sigma_p^2}{(\sigma_n + \sigma_p)^2} \quad (2.33)$$

avec :

$$R_n = -\frac{1}{ne} \quad (2.34)$$

$$R_p = \frac{1}{pe} \quad (2.35)$$

R_n et R_p : Les coefficients de Hall fictifs relative aux deux types de porteurs

Dans une étude géométrique, Tossier et al. ont associé au libre parcours l des électrons un libre parcours différentiel complémentaire l situé dans une direction perpendiculaire à celle de l et ils ont montrés que la constante de Hall d'un semi-conducteur soumis à un champs électrique et à une induction magnétique faibles ; s'écrit :

$$R_{Hf} = -\frac{\partial \sigma_f}{\partial \lambda_0} \frac{l_2}{B} \frac{1}{\sigma_f^2} \frac{1}{1 + \left(\frac{\partial \sigma_f}{\sigma_f \partial \lambda_0} l_2\right)^2} \quad (2.36)$$

Avec :

$$l_2 = \frac{\lambda_0^2}{r_0} = \frac{\lambda_0^2 e B}{m^* \nu_F} \quad (2.37)$$

Où :

r_0 : le rayon de Larmor.

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

ν_F : la vitesse de Fermi.

e : la valeur absolue de la charge de l'électron.

λ_0 : le libre parcours moyen.

Puisque le champ magnétique B est faible, l'équation réduite à :

$$R_{Hf} \simeq \frac{e \lambda_0^2}{m \nu_F} \frac{\partial \rho_f}{\partial \lambda_0} \quad (2.38)$$

Où ρ_f est la résistivité électrique de la couche. Dans le cas où la couche métallique est épaisse ρ_0 s'écrit [54][8] :

$$\rho_0 = \frac{m}{ne^2\tau_0} \quad (2.39)$$

Dans ce cas, la constante de Hall s'écrit :

$$R_{Hf} = R_{H0} = -\frac{1}{ne} \quad (2.40)$$

Tellier [30] a résolu analytiquement l'équation de transport dans le cas d'une couche mince métallique polycristalline et elle a abouti au résultat suivant :

$$\frac{R_{Hf}}{R_{H0}} = \frac{2}{3} \frac{B}{A^2 + \alpha^2 B^2} \quad (2.41)$$

Avec A et B sous forme d'intégrales données en fonction de paramètre de grain $\alpha = \frac{\lambda_0}{r_0}$. Cette équation est complexe et il nous semble inutilisable pour interpréter les résultats expérimentaux dans le cas des couches semi-conductrices.

2.5.4 Nouvelle méthode géométrique pour R_H

Un échantillon semi-conducteur à section rectangulaire est placé dans un champ magnétique \vec{B} et un champ électrique \vec{E} , comme indiqué sur la figure (1.7) 1. Le champ \vec{E} crée une densité de courant électrique J_X le long du barreau. La déviation de la trajectoire dans la direction y' est causée par le champ magnétique (Figure 1.8) (CH1).

Les électrons s'accumulent sur une face du barreau et un excès d'ions positifs s'établit sur l'autre face jusqu'à ce que le champ électrique transversal (champ de Hall) E_H compense juste la force due au champ magnétique. Donc on peut conclure que le courant qui circule suivant tel que (OX') donne naissance à un autre qui circule suivant (OY') .

$$l' = r_0 \sin \frac{l}{r_0} \quad (2.42)$$

Et

$$\delta l = r_0 \left(1 - \cos \frac{l}{r_0}\right) \quad (2.43)$$

Supposons que la diffusion des électrons par les phonons est décrite par une loi de probabilité exponentielle comme cela se fait généralement [25, 30], la probabilité pour que la longueur parcourue par l'électron soit égale à x est donnée par :

$$P(l = x) = -\frac{1}{\lambda_{0n}} \exp -\frac{l}{\lambda_{0n}} \quad (2.44)$$

λ_{0n} étant le libre parcours moyen des électrons dans le semi-conducteur. Les valeurs moyennes de l' et sont données par :

$$\bar{l}'_n = \int_0^\infty \frac{l'_n}{\lambda_{0n}} \exp -\frac{l'_n}{\lambda_{0n}} dl'_n = \frac{\lambda_{0n} r_{0n}^2}{r_0^2 + \lambda_{0n}^2} = l_{nx} \quad (2.45)$$

$$\overline{\delta l}'_n = \int_0^\infty \frac{\delta l_n}{\lambda_{0n}} \exp -\frac{\delta l_n}{\lambda_{0n}} d\delta l_n = \frac{\lambda_{0n}^2 r_{0n}}{r_0^2 + \lambda_{0n}^2} = l_{ny} \quad (2.46)$$

Ou bien :

$$l_{nx} = \lambda_{0n} \left(1 + \frac{r_{0n}^2}{r_n^2}\right)^{-1} \quad (2.47)$$

$$l_{py} = r_p \left(1 + \frac{r_{0p}^2}{\lambda_{0p}^2}\right)^{-1} \quad (2.48)$$

Le raisonnement est identique pour les trous et on trouve les libres parcours moyens effectifs suivants :

$$l_{px} = r_{op} \left(1 + \frac{\lambda_{0p}^2}{r_{0p}^2}\right)^{-1} \quad (2.49)$$

$$l_{py} = r_p \left(1 + \frac{r_{0p}^2}{\lambda_{0p}^2}\right)^{-1} \quad (2.50)$$

La densité totale du courant J est la somme de celles des électrons et des trous et elle s'écrit :

$$J = J_p + J_n = J_x + J_y = (J_{xp} + J_{yp}) + (J_{xn} + J_{yn}) \quad (2.51)$$

J_X et J_Y les composantes de J respectivement suivant (OX) et (OY) , sont la somme de celles des électrons et des trous et elles s'écrivent :

$$J_x = J_{xn} + J_{xp} = \left[\frac{\partial \sigma_n}{\partial \lambda_{0n}} l_{nx} + \frac{\partial \sigma_p}{\partial \lambda_{0p}} l_{px} \right] E_x + \left[\frac{\partial \sigma_p}{\partial \lambda_{0p}} l_{py} - \frac{\partial \sigma_n}{\partial \lambda_{0n}} l_{ny} \right] E_y \quad (2.52)$$

$$J_y = J_{yn} + J_{yp} = \left[\frac{\partial \sigma_n}{\partial \lambda_{0n}} l_{ny} + \frac{\partial \sigma_p}{\partial \lambda_{0p}} l_{py} \right] E_x + \left[\frac{\partial \sigma_n}{\partial \lambda_{0n}} l_{nx} - \frac{\partial \sigma_p}{\partial \lambda_{0p}} l_{px} \right] E_y \quad (2.53)$$

La constante de Hall $R_H = \frac{E_y}{B} \Big|_{J_y=0}$ est déduite des équations (3.35) et (3.35) :

$$R_H = \frac{1}{B} \frac{\frac{\partial \sigma_p}{\partial \lambda_{0p}} l_{py} - \frac{\partial \sigma_n}{\partial \lambda_{0n}} l_{ny}}{\left(\frac{\partial \sigma_n}{\partial \lambda_{0n}} l_{ny} + \frac{\partial \sigma_p}{\partial \lambda_{0p}} l_{py} \right)^2 + \left(\frac{\partial \sigma_p}{\partial \lambda_{0p}} l_{px} - \frac{\partial \sigma_n}{\partial \lambda_{0n}} l_{nx} \right)^2} \quad (2.54)$$

Les conductivités relatives des électrons se mettent, en tenant compte des expressions de libres parcours moyens effectifs et de r_0 , sous la forme :

$$\frac{\partial \sigma_n}{\partial \lambda_{0n}} l_{ny} = \frac{neB\mu_n^2}{1 + B^2\mu_n^2} \quad (2.55)$$

$$\frac{\partial \sigma_n}{\partial \lambda_{0n}} l_{nx} = \frac{\sigma_n}{1 + B^2\mu_n^2} \quad (2.56)$$

$$\frac{\partial \sigma_p}{\partial \lambda_{0p}} l_{py} = \frac{peB\mu_p^2}{1 + B^2\mu_p^2} \quad (2.57)$$

$$\frac{\partial \sigma_p}{\partial \lambda_{0p}} l_{px} = \frac{\sigma_p}{1 + B^2\mu_p^2} \quad (2.58)$$

Si on porte les équations (2.47, 2.48, 2.49, 2.50) dans l'équation (2.54), R_H s'écrit :

$$R_H = \frac{\frac{peB\mu_p^2}{1+B^2\mu_p^2} - \frac{neB\mu_n^2}{1+B^2\mu_n^2}}{\left(\frac{\sigma_n}{1+B^2\mu_n^2} + \frac{\sigma_p}{1+B^2\mu_p^2} \right)^2 + \left(\frac{peB\mu_p^2}{1+B^2\mu_p^2} - \frac{neB\mu_n^2}{1+B^2\mu_n^2} \right)^2} \quad (2.59)$$

Nous remarquons que dans le cas où B est faible ; $B^2\mu_p^2$ et $B^2\mu_n^2$ sont négligeables devant 1 et l'équation (2.59) devient égale, dans le cas où les électrons sont les seuls à être porteurs de charges électriques, à l'équation habituellement utilisée c'est-à-dire :

$$R_H = -\frac{1}{ne} \quad (2.60)$$

En introduisant les coefficients de Hall fictifs R_n et R_p et en remplaçant la mobilité des porteurs en fonction de la conductivité électrique,

$$R_H = \frac{R_n \sigma_n^2 + R_p \sigma_p^2 + R_n R_p \sigma_n^2 \sigma_p^2 (R_n + R_p) B^2}{(\sigma_n^2 + \sigma_p^2)^2 + \sigma_n^2 \sigma_p^2 (R_n + R_p)^2 B^2} \quad (2.61)$$

Ce résultat est en bon accord avec ceux donnés dans la littérature [30, 65].

2.6 Conclusion

nous avons donné dans une première partie de ce chapitre des notions sur la physique de silicium et les expressions théoriques pour calculer les probabilités de chaque source de diffusion, les libres parcours moyens associés et les temps de relaxation. Puis à l'aide d'une étude géométrique de la trajectoire des électrons et des trous dans un barreau semi-conducteur soumis aux champs électrique et magnétique, nous avons donné les expressions du coefficient de Hall R_H à fort champ et à faible champ magnétique. Ces expressions sont identiques à celles données par Sondheimer, obtenues en faisant la résolution de l'équation de Boltzmann. Cette étude peut être étendue aux couches minces semi-conductrices, il suffit de remplacer dans l'expression de R_H , la conductivité σ_0 par σ_f de la couche mince qui dépend des paramètres dimensionnels μ et de la taille de grain ν .

Chapitre 3

La modélisation des Phénomènes de transport électroniques dans les couches minces de Si-p

3.1 Introduction

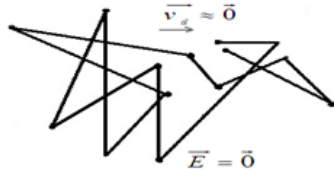
Dès 1944 l'usage intensif des méthodes de Monte Carlo permet de développer systématiquement les techniques de ces méthodes surtout l'évolutions des moyennes de calcul et de l'utiliser dans plusieurs domaines. Ils sont basés sur les lois des probabilités et de les statistiques pour suivre le comportement de chaque porteur dans l'espace des réel et des vecteurs d'onde, dans une couche mince de Si-p soumit a un champ électrique \vec{E} , les échanges avec le réseau cristallin d'énergies et la déviation de sa trajectoire du aux interaction avec les impuretés ,les surfaces externes , et les joints de grains vont modifier les grandeurs physiques de chaque porteur.

Dans ce chapitre on va utiliser le model a une bande sphérique parabolique.

3.2 Simulation numérique par la méthode de Monte Carlo

3.2.1 Distribution initial des porteurs

Avant d'appliquer le champ électrique à la couche de Si-p les perturbations de la périodicité potentielle (dus aux vibrations de réseau, impuretés, joints de grains, défauts) entraînent une modification complète de sa direction de propagation. Dans ce cas le mouvement du porteur est aléatoire à cause de ces interaction considérés comme des collisions traiter par la théorie cinétique des gaz ; le porteur a une analogie d'une molécule gazeuse et il se déplace dans des directions au hasard statiquement est nul (Figure 3.2.1) avec une énergie initial appelé l'énergie d'activation qu'on déterminera.



Séquence : --- vole librecollision

FIGURE 3.1 – Mouvement d'un porteur en absence du champ électrique

a-Densités d'états

A l'instant $t=0$ on considère que les porteurs dans un état d'équilibre thermodynamique. La probabilité de présence d'un porteur i sur un état \vec{k}_i dans une bande est proportionnel a $\exp\left[-\varepsilon_i/K_B T\right]$ et la probabilité $P(\varepsilon_i)d\varepsilon_i$ de tirer un porteur dont l'énergie initiale est comprise entre ε_i et $\varepsilon_i + d\varepsilon_i$ est égal à la probabilité d'occupation d'un état \vec{k}_i multipliée par le nombre d'état possible entre ε_i et $\varepsilon_i + d\varepsilon_i$, ce nombre étant égal au volume copris entre les deux sphères de rayons \vec{k}_i et $\vec{k}_i + d\vec{k}_i$ multiplié par la densité d'état dans espace \vec{k}_i qui vaut $\frac{1}{4\pi^3}$ compte tenu de spin ce qui donne :

$$P(\varepsilon_i)d\varepsilon_i \approx \frac{1}{4\pi^3} 4\pi^2 k_i^2 dk_i \exp\left[-\varepsilon_i/K_B T\right] \quad (3.1)$$

$$= \frac{1}{\pi^2} k_i^2 \frac{1}{\frac{d\varepsilon_i}{dk_i}} \exp \left[-\varepsilon_i / K_B T \right] d\varepsilon_i \quad (3.2)$$

En principe, elle consiste à simuler la trajectoire de chaque porteur pas à pas parmi un grand nombre N pour avoir une bonne estimation des moyennes. En fixant le vecteur d'onde initial $\vec{k}_i(0)$ du porteur de numéro i dans une position initial $\vec{r}_i(0)$ et nous discrétisons le temps en pas réguliers Δt pris suffisamment petit pour que la probabilité de collision soit inférieur à 1 en raison que le porteur subisse a une seule collision ce pendant , et pour supposer que les collision ont lieu uniquement aux instant correspondant aux multiple.

$$\begin{cases} \vec{k}_i(t + \Delta t) = \vec{k}_i(t) + \frac{e\vec{E}}{\hbar} \Delta t \\ \vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \int_t^{t+\Delta t} \vec{v}_i(t') dt' \end{cases} \quad (3.3)$$

Considérons un électron d'énergie ε_i et de vecteur d'onde $\vec{k}_i(t)$ placé en $\vec{r}_i(t)$ sous l'action d'un champ électrique \vec{E} .

Les échange d'énergie avec le réseau cristallin et la déviation de la trajectoire du prteur par les collisions avec les phonons, les surfaces externes, les impuretés et joins du grain on néglige les interactions porteur-porteur .

b-Fonction de répartition

La fonction de répartition caractérise la probabilité pour que l'énergie d'un porteur appartient à $[0; \varepsilon_{\max}]$ est :

$$F(\varepsilon) = \frac{\int_0^\varepsilon P(\varepsilon) d\varepsilon}{\int_0^{\varepsilon_{\max}} P(\varepsilon) d\varepsilon} \quad (3.4)$$

$$= \frac{\int_0^\varepsilon \frac{k^2}{(\partial\varepsilon/\partial k)} \exp \left[-\varepsilon / K_B T \right] d\varepsilon}{\int_0^{\varepsilon_{\max}} \frac{k^2}{(\partial\varepsilon/\partial k)} \exp \left[-\varepsilon / K_B T \right] d\varepsilon} \quad (3.5)$$

Et en utilisant la procédure suivant :

- On discrétise $[0; \varepsilon_{\max}]$ l'intervalle avec un pas $\Delta\varepsilon_{\max}$.
- Ensuite on calcule numériquement l'intégrale du numérateur pour chaque ε_i qu'on garde dans un tableau $F(\varepsilon_i)$ et à la fin on normalise ces probabilités $F(\varepsilon_i)$ en les

divisant par $F(\varepsilon_{\max})$. tire au sort un nombre aléatoire a distribution uniforme sur $[0; 1]$ et l'énergie de porteur i est déterminée on cherchant tel que

Le traitement de chaque pas commence par une phase dite de vol libre ou le porteur n'est soumis qu'à l'action du champ et d'après les lois de la dynamique son état a l'instant t est donné par :

$$P(\varepsilon_i)d\varepsilon_i \approx \frac{1}{4\pi^3}4\pi^2k_i^2dk_i \exp \left[-\varepsilon_i/K_B T \right] \quad (3.6)$$

$$= \frac{1}{\pi^2}k_i^2 \frac{1}{\frac{d\varepsilon_i}{dk_i}} \exp \left[-\varepsilon_i/K_B T \right] d\varepsilon_i \quad (3.7)$$

En principe, elle consiste à simuler la trajectoire de chaque porteur pas à pas parmi un grand nombre N de porteurs pour avoir une bonne estimation des moyennes. En fixant le vecteur d'onde initial $\vec{k}_i(0)$ du porteur de numéro i dans une position initial $\vec{r}_i(0)$ et nous discrétisons le temps en pas réguliers Δt pris suffisamment petit pour que la probabilité de collision pendant soit inférieur à 1 en raison que le porteur subisse a une seule collision ce pendant , et pour supposer que les collision ont lieu uniquement aux instant correspondant aux multiple.

Le calcul numérique de l'intégrale pour chaque ε_i et de la garder dans un tableau des $F(\varepsilon_i)$ ensuite on normalise ses probabilités en les divisant par R_{\max} .

c-Tirage de l'énergie initial du porteur

On tire aléatoirement un variable R compris entr 0 et 1 et on cherche la valeur correspondante dans le tableau des $F(\varepsilon_i)$ et par interpolation l'énergie ε_i initial du porteur i est déterminée.

d-L'état initial du porteur

Le module de vecteur d'onde $|\vec{k}_i|$ du porteur i ne dépend que de ε_i dans le cas de la bande sphérique, en suite on va déterminer l'état initial \vec{k}_i de porteur i par une autre interpolation dans le tableau de $\varepsilon_i(k_i)$.

Le tirage au sort de deux variables R_2 et R_3 qui ont une distribution uniforme sur $[0; 1]$ permet de calculer les angles θ_i et ϕ_i tel que la distribution initial des vitesses est

CHAPITRE 3. LA MODÉLISATION DES PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT
ÉLECTRONIQUES DANS LES COUCHES MINCES DE SI-P

proportionnel à $\sin\theta_i$ et uniforme en ϕ_i on pose donc :

$$R_2 = \frac{\int_0^{\phi_i} d\phi_i}{2\pi} \quad (3.8)$$

$$= \frac{\varphi_i}{2\pi_i} \quad (3.9)$$

Et

$$R_3 = \frac{\int_0^{\theta_i} \sin\theta'_i d\theta'_i}{\int_0^{\pi} \sin\theta'_i d\theta'_i} \quad (3.10)$$

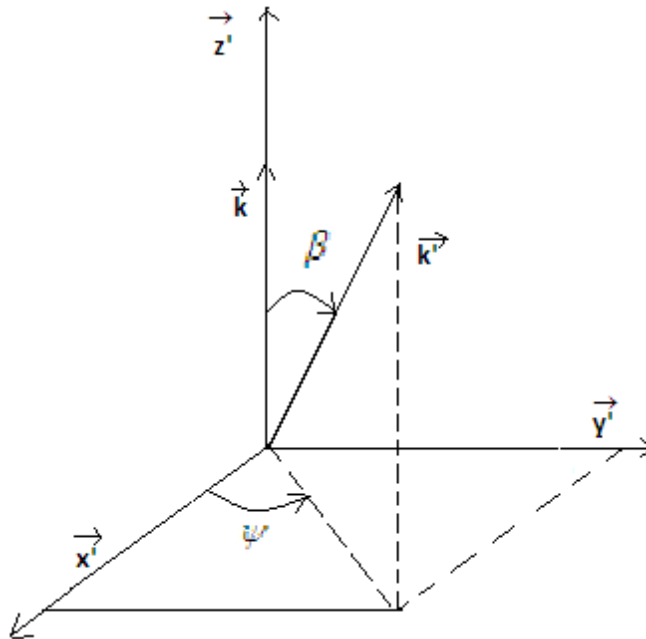
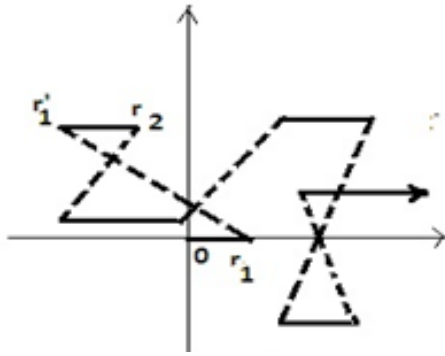


FIGURE 3.2 – Coordonnées sphériques de \vec{k}_i dans R'

3.2.2 Vol libre

On applique un champ électrique sur une couche mince de Si-p et on commence à simuler la trajectoire de porteur en le décomposant par un grand nombre de séquences chaque séquence comprenant deux phase, un vol libre et une collision.



Séquence : - vole librecollision

FIGURE 3.3 – Simulation Monte Carlo d'une trajectoire dans l'espace des vitesses

On tire au sort une variable aléatoire qui détermine la durée du vol libre c'est l'instant où le porteur eu une interaction.

Donc dans la direction du champ on a :

$$\begin{cases} \vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \int_t^{t+\Delta t} \vec{v}_i(t') dt' \\ \varepsilon_i(t + \Delta t) = \varepsilon_i(\vec{k}_i(t + \Delta t)) \\ \vec{k}_i(t + \Delta t) = \vec{k}_i(t) + \frac{q\vec{E}}{\hbar} \end{cases} \quad (3.11)$$

Et dans la direction du champ on a :

$$\begin{aligned} z_i(t + \Delta t) &= z_i(t) + \int_t^{t+\Delta t} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial k_{iz}} dt' \\ &= z_i(t) + \frac{1}{qE} \int_t^{t+\Delta t} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial k_{iz}} dk_{iz} \\ &= z_i(t + t\Delta) + \frac{1}{qE} [\varepsilon_i(t + \Delta t) - \varepsilon_i(t)] \end{aligned} \quad (3.12)$$

3.2.3 Déterminations de type d'interaction

La probabilité qu'un porteur i se trouvant dans l'état $\vec{k}_i(t)$ subisse une interaction de type q pendant Δt est :

$$P_q = \lambda_q(k_i) \Delta t \quad (3.13)$$

Si M est le nombre total de l'interaction possible On a donc :

$$P = \sum_{q=1}^M P_q \quad (3.14)$$

$$= \sum_{q=1}^M \lambda_q(k_i) \Delta t \quad (3.15)$$

On prend Δt de tel que $P \ll 1$.

Le tirage au sort du variable aléatoire r d'une distribution uniforme sur détermine le type d'interaction si le porteur la subit, Le figure suivant explique l'arrangement des probabilités sur des segments et les types des interactions correspondantes.

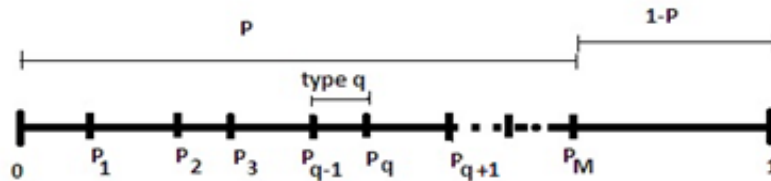


FIGURE 3.4 – Détermination du type de collision

- Si $r > P$ le porteur n'a subi aucune interaction donc dans ce cas l'état de porteur n'est pas modifié.
- Si $r \leq P$ on a une interaction de type q dans le cas où on a $P_{q-1} < r \leq P_q$ et l'état de porteur est modifié

3.2.4 Détermination du vecteur d'état après l'interaction

a. Déterminations de \vec{k}_i

$\vec{k}_i(j)$ L'état de porteur i avant l'interaction et pour déterminer son nouveau état après l'interaction .

On détermine son énergie après l'interaction de type q par :

$$\varepsilon'_i(t) = \varepsilon_i(t) \pm \hbar\omega_q \quad (3.16)$$

Ensuite on calcule $\left| \vec{k}'_i \right|$ qui ne dépend que de $\varepsilon'_i(t + \Delta t)$ puisque on considère une seule bande sphérique. et enfin en calcul les deux angles θ'_i et φ'_i en distinguant entre les deux type de l'interaction q.

b- Détermination des angles θ'_i et β'_i dans le cas de l'interaction isotrope

Dans ce cas la probabilité de transition est indépendante de l'orientation comme l'interaction du porteur avec les phonons optique non polaire ou bien les acoustiques. Donc les deux angles etsont déterminé par la même méthode d'une paragraphe précidante est on a :

$$\begin{cases} R_2 = \frac{\varphi'_i}{2\pi} \\ R_1 = \frac{1 - \cos \theta'_i}{2} \end{cases} \quad (3.17)$$

c- Détermination de θ'_i et φ'_i dans le cas de l'interaction anisotrope

Dans ce cas la probabilité de transition est dépendante de l'orientation.

Soit R' un repère liée à l'état $\vec{k}_i(j)$ et il est construit par une rotation de l'angle θ_i autour et tel que oz' a même direction et sens avec $\vec{k}_i(j)$

(Figure 3.5)

Donc on peut écrire :

$$\left| \vec{k}'_i - \vec{k}_i \right| = k'^2 - 2k'_i k_i \cos \beta_i + k_i^2 \quad (3.18)$$

Puisque la collision avec les impuretés est inélastique et l'étude se fait pour une seule bande sphérique (aussi pour les transitions intrabandes) on a :

$$|\vec{k}'_i| = |\vec{k}_i| \quad (3.19)$$

Alors l'équation (3.18) devienne :

$$\left| \vec{k}'_i - \vec{k}_i \right| = 2k'^2(1 - \cos \beta_i) \quad (3.20)$$

L'interaction avec les impuretés est une interaction anisotrope et la probabilité de transition de l'état $\vec{k}_i(j)$ vers l'état $\vec{k}'_i(j)$ devienne par rapport a R' ;

$$P_{imp}(\vec{k}_i(t); \vec{k}'_i(t + \Delta t)) = A \frac{\delta(\varepsilon' - \varepsilon)}{(|\vec{k}'_i - \vec{k}_i| + B^2)^2} dk'^3 \quad (3.21)$$

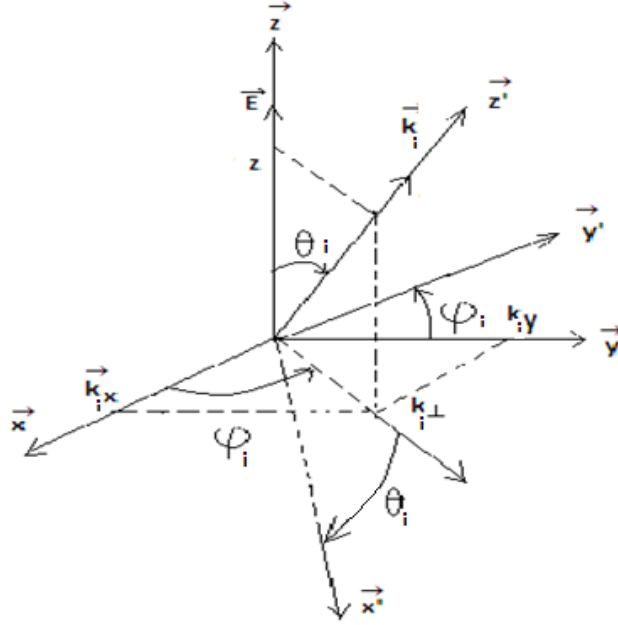


FIGURE 3.5 – Coordonnées sphériques de \vec{k}_i dans $R'(k, \beta_i, \psi_i)$ lié à \vec{E}

avec :

$$A = \frac{2\pi e^4 N_{imp}}{\hbar(\chi)^2}$$

et d'après les équations (3.20 et 3.21) on trouve :

$$P_{imp}(\vec{k}_i(t); \vec{k}_i(t + \Delta t)) = A \frac{\delta(\varepsilon' - \varepsilon)}{(2K^2(1 - \cos \beta_i) + B^2)^2} k^2 \sin \beta_i dk' d\beta_i d\psi (3.22)$$

On pose dans R' :

$$P_{imp}(\vec{k}_i(t); \vec{k}_i(t + \Delta t)) = AH_1(k)H_2(\beta_i)H_3(\psi_i)dk' d\beta_i d\psi (3.23)$$

$$\text{Avec : } \begin{cases} H_1(k) = k^2 \\ H_2(\beta_i) = \frac{\sin \beta_i}{(2K^2(1 - \cos \beta_i) + B^2)^2} \\ H_3(\psi_i) = Cte \end{cases}$$

d- Déterminons des angles ψ_i et β_i

Puisque la distribution est uniforme sur ψ_i on l'a déterminé de la même façon de paragraphe précédent :

$$\psi_i = 2\pi R_2 \quad (3.24)$$

Calculons la fonction de répartition $F(\beta_i)$:

$$F(\beta_i) = \frac{I(\beta_i)}{I(\beta_{i\max})} \quad (3.25)$$

$$= R_3 \quad (3.26)$$

Avec :

$$I(\beta_i) = \int_0^{\beta_i} \frac{\sin \beta'_i}{(2k^2(1 - \cos \beta_i) + B^2)^2} d\beta'_i \quad (3.27)$$

Et :

$$I(\beta_{i\max}) = \int_0^{\pi} \frac{\sin \beta'_i}{(2k^2(1 - \cos \beta_i) + B^2)^2} d\beta'_i \quad (3.28)$$

Et la fonction de répartition devienne :

$$F(\beta_i) = \frac{(4k^2 + B^2)(1 - \cos \beta_i)}{4k^2(1 - \cos \beta_i) + 2B^2} \quad (3.29)$$

D'où :

$$\cos \beta_i = \frac{2(2k^2 + B^2)(1 - R_3) - B^2}{4k^2(1 - R_3) + B^2} \quad (3.30)$$

Pour la variable aléatoire R_3 on peut le remplacer par $(1 - R_3)$ et la formule devienne :

$$\cos \beta_i = \frac{2(2k^2 + B^2)(R_3) - B^2}{4k^2(R_3) + B^2} \quad (3.31)$$

Ce qui permet de déterminer les coordonnées de $\vec{k}_i(t + \Delta t)$ dans le repère R' ce qui nécessite de déterminer ces coordonnées sphérique dans le repère initial R lié au vecteur champ électrique \vec{E} . Le traitement de chaque pas commence par une phase dite de vol libre ou le porteur n'est soumis qu'à l'action du champ pendant Δt et d'après les lois de la dynamique son état a l'instant $(t + \Delta t)$ est donné par :

$$\text{Posons : } \vec{k}' / R' \begin{pmatrix} k \sin \theta' \cos \varphi'_i \\ k \sin \theta' \sin \varphi'_i \\ k \cos \theta' \end{pmatrix} = \vec{k}' / R' \begin{pmatrix} k'_x \\ k'_y \\ k'_z \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

A partir de la figure(3.2.1) on tire les composantes des vecteur \vec{x}' , \vec{y}' et \vec{z}' dans le repère R alors :

$$\vec{x}' / R \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \varphi_i \\ \cos \theta \sin \varphi_i \\ -\sin \theta \end{pmatrix} ; \vec{y}' / R \begin{pmatrix} -\sin \varphi_i \\ \cos \varphi_i \\ 0 \end{pmatrix} ; \vec{z}' / R \begin{pmatrix} \sin \theta_i \cos \varphi_i \\ \sin \theta_i \sin \varphi_i \\ \cos \theta_i \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

Dans le repère R' liée à \vec{k} (Figure 3.5) Avec : $|\vec{k}'| = |\vec{k}|$ on a :

$$0.7\text{ex} \vec{k}' / R' \begin{pmatrix} k \sin \beta_i \cos \psi_i \\ k \sin \beta_i \sin \psi_i \\ k \cos \beta_i \end{pmatrix} \quad (3.34)$$

Utilisant les équations (3.33 et 3.34) et après un calcul simple on aboutit à :

On a aussi dans R (Figure3.6) :

$$0.7\text{ex} \vec{k}' / R \begin{pmatrix} k \sin \theta'_i \cos \varphi'_i \\ k \sin \theta'_i \sin \psi'_i \\ k \cos \theta'_i \end{pmatrix} \quad (3.35)$$

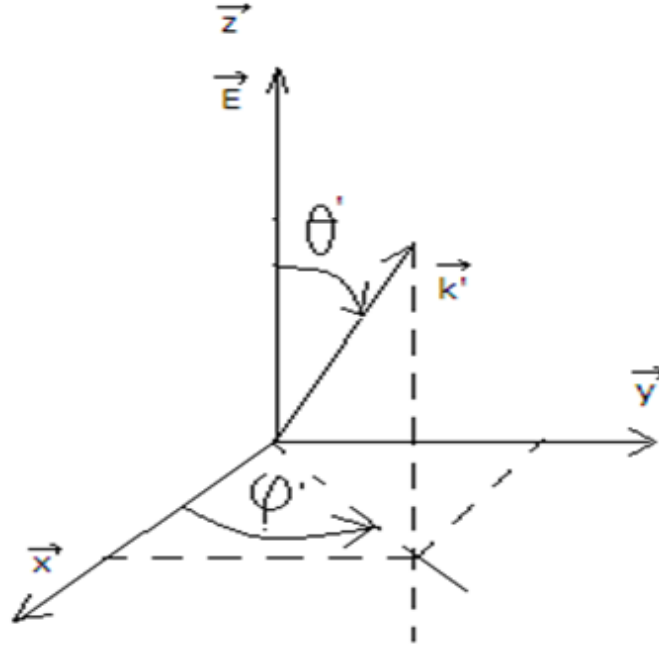


FIGURE 3.6 – Coordonnées sphériques de \vec{k}' dans R'

$$0.7 \text{ex} \vec{k}' / R \begin{pmatrix} k(\cos \varphi_i \sin \beta_i \cos \beta_i - \sin \varphi_i \sin \beta_i \sin \psi_i + \cos \theta_i \cos \varphi_i \sin \beta_i \cos \psi_i) \\ k(\cos \theta_i \sin \varphi_i \sin \beta_i \cos \psi_i + \cos \varphi_i \sin \beta_i \sin \psi_i + \sin \theta_i \sin \varphi_i \cos \beta_i) \\ k(\cos \theta_i \cos \beta_i - \sin \beta_i \cos \psi_i \sin \theta_i) \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

l'équivalence entre les équations (3.35 et 3.36) nous donne :

$$\begin{cases} \cos \theta'_i = \cos \theta_i \cos \beta_i - \sin \theta_i \sin \beta_i \cos \psi_i \\ \sin \theta'_i \cos \varphi'_i = \cos \theta_i \cos \varphi_i \sin \beta_i \cos \psi_i - \sin \varphi_i \sin \beta_i \sin \psi_i + \sin \theta_i \cos \varphi_i \cos \beta_i \\ \sin \theta'_i \sin \varphi'_i = \cos \theta_i \sin \varphi_i \sin \beta_i \cos \psi_i + \cos \varphi_i \sin \beta_i \sin \psi_i + \sin \theta_i \cos \varphi_i \cos \beta_i \end{cases} \quad (3.37)$$

Par le tirage au sort de ψ_i et β_i , et de la connaissance de θ_i et φ_i avant la collision, nous déterminons θ'_i et φ'_i .

CHAPITRE 3. LA MODÉLISATION DES PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS LES COUCHES MINCES DE SI-P

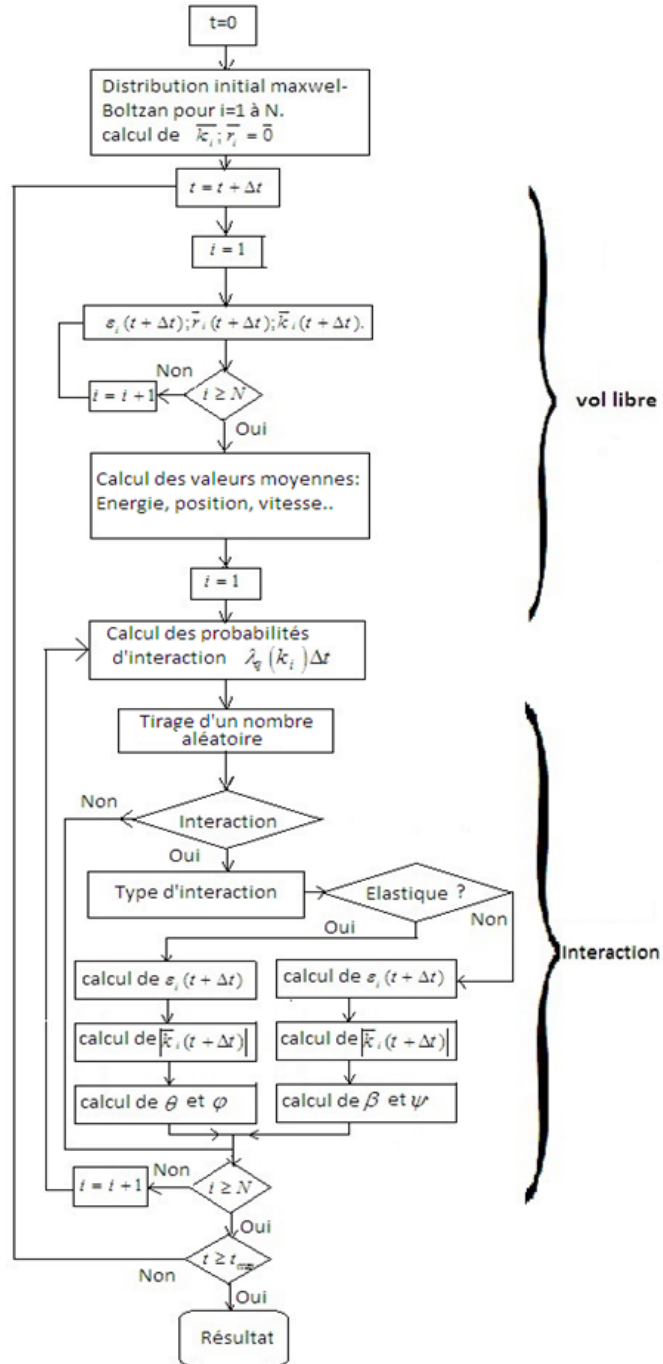


FIGURE 3.7 – Organigramme de la simulation numérique

3.3 Organigramme de la simulation numérique

3.4 Résultats numériques et discussions

3.4.1 Résultats à différents épaisseurs et différents dopages

a-Vitesse de dérive des trous pour une couche épaisse en fonction du dopage et champs électrique

Sur la figure (3.8) et à l'aide de la méthode de Monte Carlo et les expressions précédentes, nous avons calculé les valeurs numériques et représenté la vitesse des trous dans une couche de Si-p en fonction du temps à différents champs électrique à $N_A = 0$ et à $N_A = 10^{23}/m^{-3}$ sans tenir compte des effets des surfaces externes (dans nos calculs nous avons pris l'épaisseur d de la couche très grande). Ces courbes coïncident avec celles données par Nougier et al [17].

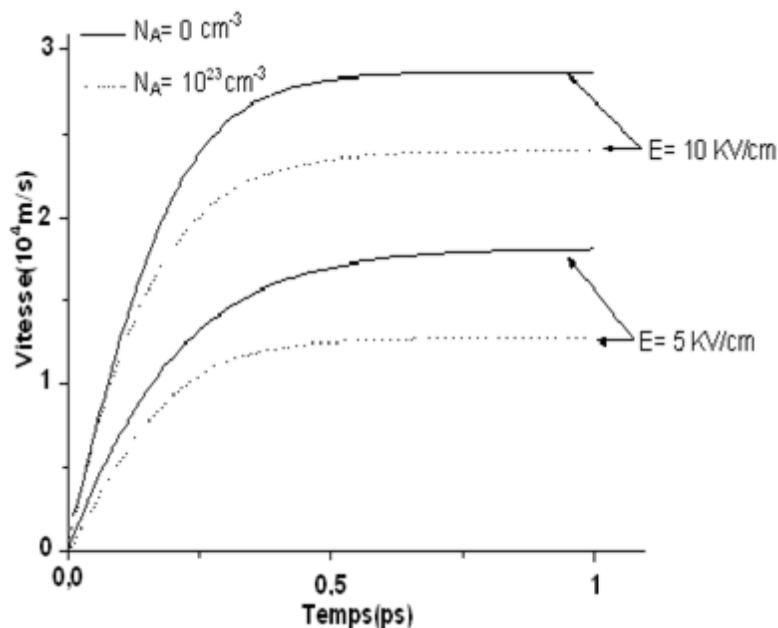


FIGURE 3.8 – Vitesse des trous en régime transitoire en fonction du dopage et du champ électrique

b-Vitesse de dérive en fonction de différentes qualités de surfaces et de dopages

Sur la figure (3.9) nous avons donné la vitesse de dérive des trous en fonction des différents dopages pour une couche Si-P d'épaisseur $d = 10nm$ avec $p = 0.5$ soumise à un champ électrique, la vitesse diminue et régime stationnaire est atteint quand la concentration des accepteurs augmente et pour des faibles dopages l'effet des impuretés sur les vitesses de dérives est faible.

Sur la figure (3.9), nous avons porté $v(t)$ en fonction de t pour la densité d'impureté $N_A = 0$

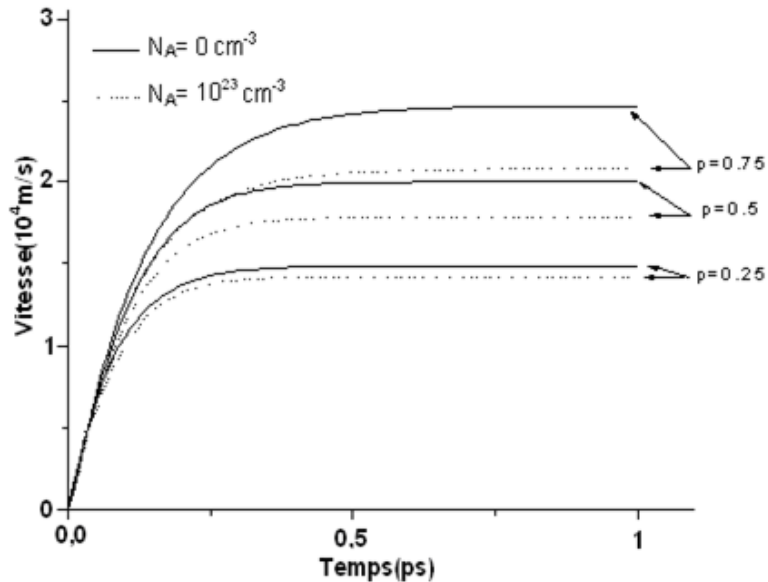


FIGURE 3.9 – Vitesse des trous en régime transitoire à différentes valeurs de p et à deux dopages différents avec $d = 10nm$ et $E = 10kv/cm$

et à $N_A = 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ et à différentes valeurs du coefficient de réflexion spéculaire p . Nous constatons qu'au fur et à mesure que p augmente la vitesse des trous augmente et l'écart entre les valeurs de $v(t)$ avec ou sans impuretés augmente. Les vitesses de saturation en fonction de p et en fonction de dopage sont données dans le tableau (3.1). Nous constatons d'après ce tableau que la vitesse des trous dépend de l'état de la surface de la couche mince caractérisé par le coefficient p et que lorsque p prend des valeurs voisines de 1 la vitesse s'approche de celle du massif [66].

CHAPITRE 3. LA MODÉLISATION DES PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT
ÉLECTRONIQUES DANS LES COUCHES MINCES DE SI-P

p	0.25	0.5	0.75	1
$v_s(10^4 m/s)$ $N_A = 0$	1,48	1.9	2.45	2.86 2.9 [66]
$v_s(10^4 m/s)$ $N_A = 10^{23} cm^{-3}$	1.41	1,78	2.07	2.38 2.4 [66]

TABLE 3.1 – Vitesse stationnaire en fonction de p et du dopage à $d = 10$ nm et $E = 10$ kv/cm.

c- Vitesse de derive à différentes valeurs de d à, $p = 0.5$ et $E = 5KV/cm^{-3}$

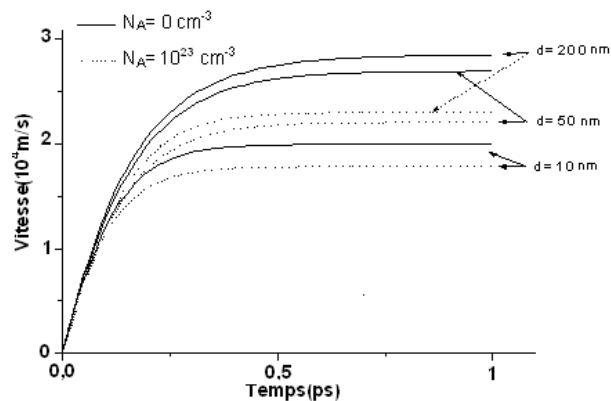


FIGURE 3.10 – Vitesse des trous en régime transitoire à différentes valeurs de p et à deux dopages différents avec $d = 10$ nm et $E = 10$ kv/cm⁻³

La figure(3.10) représente l'évolution de la vitesse moyenne des trous en régime stationnaire et transitoire, à différentes épaisseurs d de la couche à $p = 0.5$, à $N_A = 0/cm^{-3}$ et à $N_A = 10^{23} cm^{-3}$.

d- Mobilité des porteurs

Nous constatons qu'au fur et à mesure que l'épaisseur d de la couche augmente la vitesse augmente et le régime stationnaire est plus long à atteindre. De la figure (3.10) nous

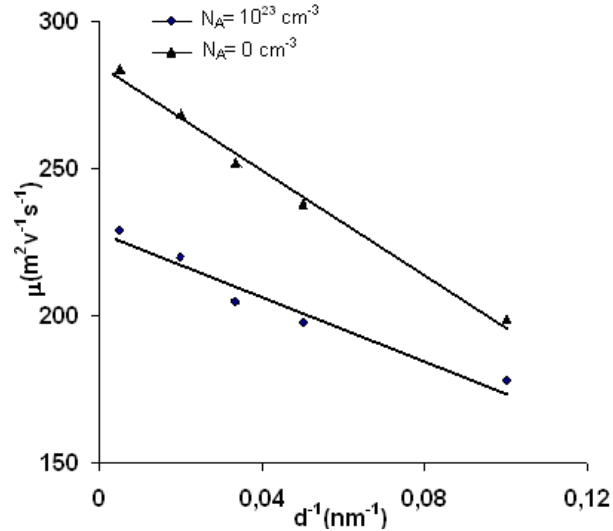


FIGURE 3.11 – La mobilité des trous en fonction de l’inverse de l’épaisseur d de la couche Si-p à $p = 0.5$ et $E = 10 \text{ kv/cm}^{-3}$

avons tiré les valeurs de la vitesse de saturation en fonction de d puis nous avons calculé la mobilité des trous dans la couche mince en fonction de d à partir de l’équation :

$$\mu = \frac{v_s(d)}{E} \quad (3.38)$$

Les valeurs de μ sont regroupées dans le tableau.(3.1)

Sur la figure (3.11), nous avons tracé en fonction d’épaisseur d ; la mobilité des trous à pour deux dopages différents $N_A = 0 \text{ cm}^{-3}$ et à.

e - Résistivité électrique réduite

A partir des vitesses stationnaires du tableau (3.1), nous avons tracé la résistivité électrique réduite ρ/ρ_0 , qui n’est autre que la vitesse réduite (pour des champs électrique faibles), en fonction de l’épaisseur de la couche, à $p = 0.5$, à $N_A = 0 \text{ cm}^{-3}$ et à $N_A = 10^{23} \text{ cm}^{-3}$. Nous avons pris pour les différentes courbes de la figure (3.12) la résistivité ρ_0 du silicium p massif. Nous constatons que les résultats numériques, les points sur la figure (??) et théorique l’équation (2.30), trait plein sur la même sont en bon accord à condition de prendre $A = 12.7$.

Nous remarquons que l’effet des surfaces externes est prépondérant pour les faibles

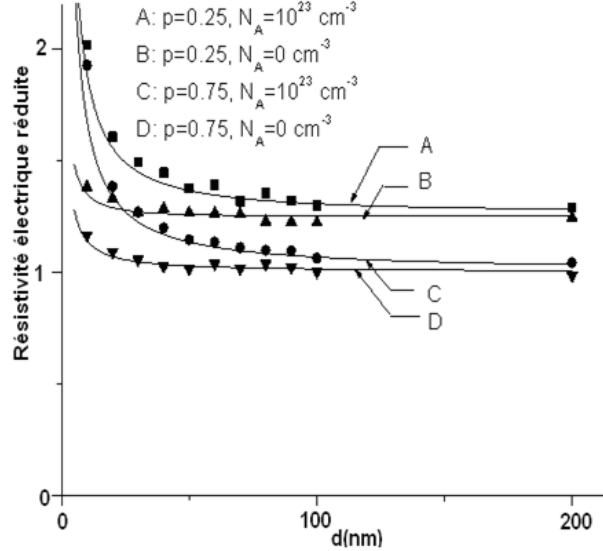


FIGURE 3.12 – La résistivité électrique réduite en fonction de l'épaisseur d à différentes valeurs de p . Les courbes représentent l'équation (2.30) et les symboles les valeurs numériques

épaisseurs et celui des impuretés pour les fortes valeurs de d que la constante A reste valable sauf pour $d < 10 \text{ nm}$ et $E < 2kv/\text{cm}^3$.

Sur la (3.13), nous avons porté la résistivité en fonction de $1/d$ à $p = 0.5$ et $N_A = 10^{23} \text{ cm}^{-3}$. Nous avons pris $\rho_0 = 0.19 \Omega \text{ cm}$. Nous constatons que la résistivité du silicium de type p est inversement proportionnelle à l'épaisseur d comme dans le cas des couches minces métalliques [17, 67] ou semi-conductrices de type GaAs, InSb [68, 69] et Ge [70].

3.4.2 Résultats à l'existence des joints de grains et sans impuretés

a-Vitesse de dérive avec joints de grains en absence des impuretés et en fonction d'épaisseur

Nous avons calculé les valeurs numériques des vitesses moyennes des trous $v(t)$ en régime transitoire à différentes valeurs de d , à $D = 10 \text{ nm}$, à $t = 0,5$ et à $p = 0.5$. Les résultats sont représentés sur la figure (3.14). Les courbes (d_s) représentent les vitesses des porteurs sans effets des joints de grains. La vitesse augmente lorsque l'épaisseur d augmente, jusqu'à devenir égale à celle du silicium massif (V_0) donnée par Nougier et al. Sur la même figure,

CHAPITRE 3. LA MODÉLISATION DES PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT
ÉLECTRONIQUES DANS LES COUCHES MINCES DE SI-P

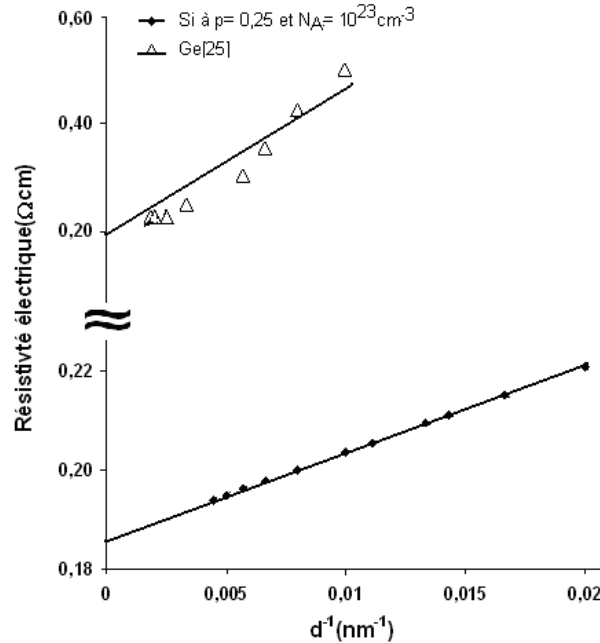


FIGURE 3.13 – Les résistivités électriques de Ge et Si-p en fonction de l'inverse de l'épaisseur d de la couche

nous avons représenté la variation de la vitesse en fonction du temps en tenant compte de la diffusion des porteurs par les surfaces externes et les joints de grains (courbes (d_{sg})). Nous constatons que la vitesse et l'écart entre les courbes ont diminué par rapport aux courbes (d_s).

b-Vitesse de dérive à différentes qualités de surfaces sans dopage en présence des joints des grains

La figure (3.15) représente l'évolution de la vitesse moyenne des trous en régime transitoire, à une épaisseur d de la couche égale à $10nm$, à $D = 10nm$, à $t = 0,5$ et à différentes valeurs du coefficient de réflexion spéculaire p . Nous constatons qu'au fur et à mesure que l'état de la surface de la couche se dégrade (p diminue) la vitesse diminue et le régime stationnaire est atteint plus vite. L'effet des surfaces externes est représenté par les courbes (p_s) et l'effets des surfaces externes et joints de grains par les courbes (p_{sg}).

c-Résistivité électrique réduite en fonction de t et d Nous avons déduit du régime stationnaire les vitesses en régime stationnaire et nous avons tracé la résistivité électrique réduite, qui n'est autre que la vitesse réduite inverse, en fonction de l'épaisseur de la couche, à $p = 0,5$,

CHAPITRE 3. LA MODÉLISATION DES PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT
ÉLECTRONIQUES DANS LES COUCHES MINCES DE SI-P

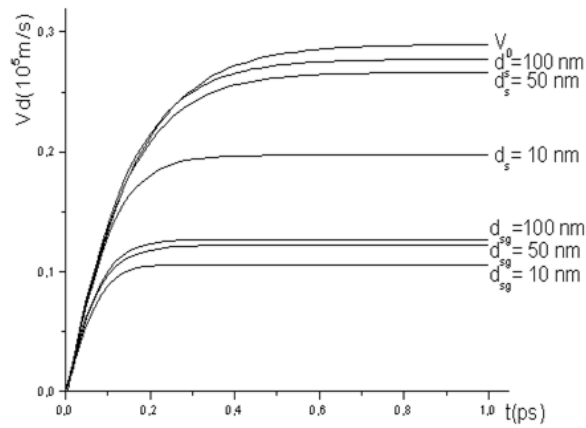


FIGURE 3.14 – Vitesse en régime transitoire à différentes valeurs de d . $P=0.5$; $D=10nm$; $t=0.5$ et $E = 10kv/cm$

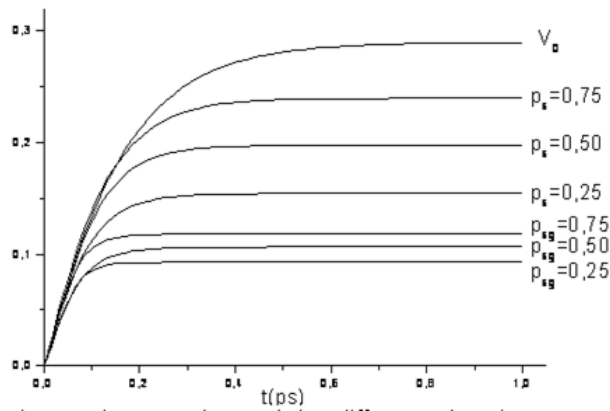


FIGURE 3.15 – vitesse Vitesse de dérive à différentes valeurs de p . $D=10nm$; $t=0.5$ et $E = 10kv/cm^{-3}$

à $D = 10nm$ et à différentes valeurs de t . Les résultats sont présentés sur la figure (3.16). Les courbes représentent l'évolution de la résistivité réduite théorique donnée par l'équation (Equ. bb) où $p = 0,5$, $D = 10nm$ et $\lambda_0 = 13nm$, et les symboles nos valeurs numériques. Cette valeur moyenne λ_0 a été calculée numériquement à partir des valeurs des temps de collisions et des vitesses correspondantes. Cette valeur du libre parcours moyen est inférieure à celle déduite de la mobilité des trous dans le silicium monocristallin, $\mu_p = 458 (cm^2/vs)$,

CHAPITRE 3. LA MODÉLISATION DES PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS LES COUCHES MINCES DE SI-P

c'est-à-dire 23nm , car la présence de joints de grains fait diminuer le libre parcours moyen.

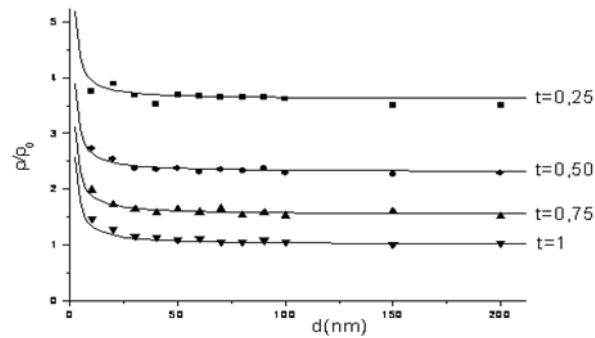


FIGURE 3.16 – Résistivité électrique réduite en fonction de l'épaisseur d à différentes valeurs de t ; $p = 0.5$; $D = 10\text{nm}$ et $E = 10\text{kv}/\text{cm}^{-3}$

d-Résistivité électrique réduite en fonction de p et d

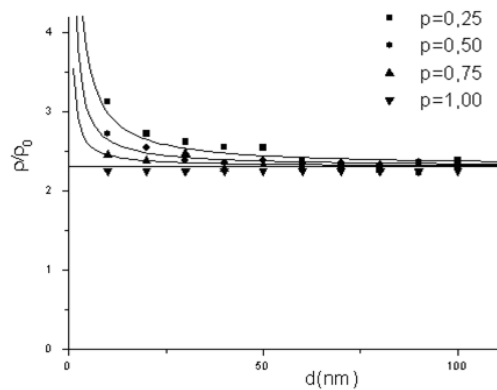


FIGURE 3.17 – Résistivité électrique réduite en fonction de l'épaisseur d des différents p ; $t=0.5$ et $D=10\text{nm}$. Les symboles représentant les valeurs numériques et le trait plein l'équation théorique

Sur la figure (3.17), nous avons porté ρ/ρ_0 en fonction de d , et à différentes valeurs de p . Nous constatons que les résultats théoriques, les courbes des figures (3.16 et 3.17) déduites de l'équation (??), et numériques, les symboles sur les mêmes figures, sont en bon accord et que la résistivité électrique réduite du silicium polycristallin de type p est inversement proportionnelle à l'épaisseur d comme dans le cas des couches minces métalliques [12, 71]

ou semiconductrices de type GaAs, InSb [68, 69] et GaSb[72]. A partir des vitesses de saturations des trous en fonction de l'épaisseur d de la couche, nous avons calculé les valeurs des mobilités correspondantes. Les résultats sont regroupés dans le tableau1. La mobilité de la couche monocristalline est deux fois plus importante que la mobilité des couches minces polycristallines. Ces valeurs de la mobilité ($104 \leq \mu_p \leq 126(\text{cm}^2/\text{vs})$) pour $10 \leq d \leq 100\text{nm}$ sont peu variable avec l'épaisseur d contrairement aux couche monocrtallines et elles sont en bon accord avec celles donnée pour le transistor à base du silicium polycristallin c'est-à-dire $115 \leq \mu_p \leq 250(\text{cm}^2/\text{vs})$ [71, 73].

Résultats à différents épaisseurs avec des joints de grains et impuretés

a-Vitesse de derive des porteurs à l'existence des joints de grains et d'impuretés

Nous avons calculé les valeurs numériques des vitesses moyennes des trous (t) quand le nombre d'accepteurs égale à $N_A = 10^{23}\text{cm}^{-3}$ et dans le cas où la couche n'est pas dopée, pour des différentes valeurs de d , à $D = 10\text{nm}$, $p = 0,5$. Les résultats sont représentés sur la (Figure3.18). Les courbes (lignes)) représentent les vitesses des porteurs sans effets impuretés. La vitesse augmente lorsque l'épaisseur d augmente, jusqu'à devenir égale à celle du silicium massif ($V = 0$) donnée par Nougier et al [17]. Sur la même figure, nous avons représenté la variation de la vitesse en fonction du temps en tenant compte de la diffusion des porteurs par les surfaces externes et les impuretés (courbes en pojnsts). Nous constatons que la vitesse et l'écart entre les courbes ont diminué par rapport aux courbes .

b-Vitesse de dérive d'une couche mince à déférentes qualités de surface avec joins des grains et impuretés

La figure (??) représente l'évolution de la vitesse moyenne des trous en régime transitoire, à une épaisseur d de la couche égale à 20 nm, $t=0.5$, à différentes valeurs du coefficient de réflexion spéculaire p , avec et sans dopage. Nous constatons qu'au fur et à mesure que l'état de la surface de la couche se dégrade (diminue) la vitesse diminue et le régime stationnaire est atteint plus vite. L'effet des impuretés est représenté par les courbes (lignes) et en absances des impuretés par les courbes (points)..

CHAPITRE 3. LA MODÉLISATION DES PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT ÉLECTRONIQUES DANS LES COUCHES MINCES DE SI-P

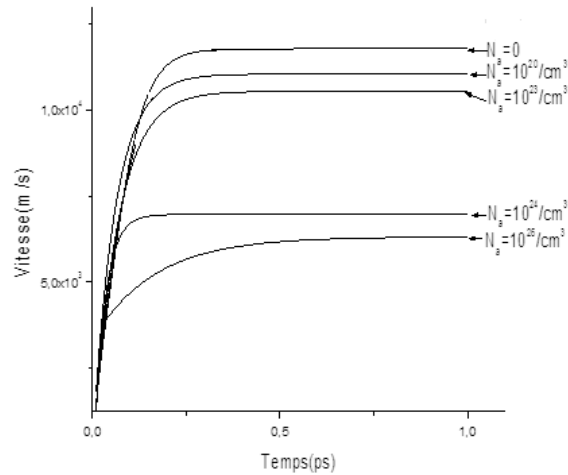


FIGURE 3.18 – Vitesse stationnaire en fonction du dopage à $d = 10\text{nm}$; $p = t = 0.5$ et à $E = 10\text{kv}/\text{cm}^{-3}$

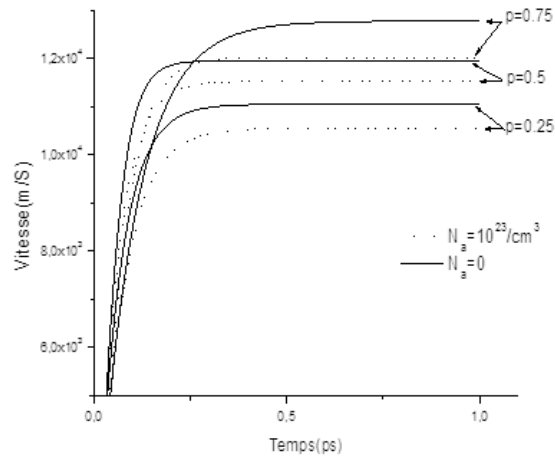


FIGURE 3.19 – Vitesse des trous en régime transitoire en fonction du dopage et différents valeurs de p , pour $t = 0.5$, $d = 20$ et $E = 10\text{kv}/\text{cm}^{-3}$

c-Vitesse de dérive d'une couche mince avec joints des grains et différents dopages

d-Vitesse de dérive d'une couche mince à différents t et impuretés

CHAPITRE 3. LA MODÉLISATION DES PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT
ÉLECTRONIQUES DANS LES COUCHES MINCES DE SI-P

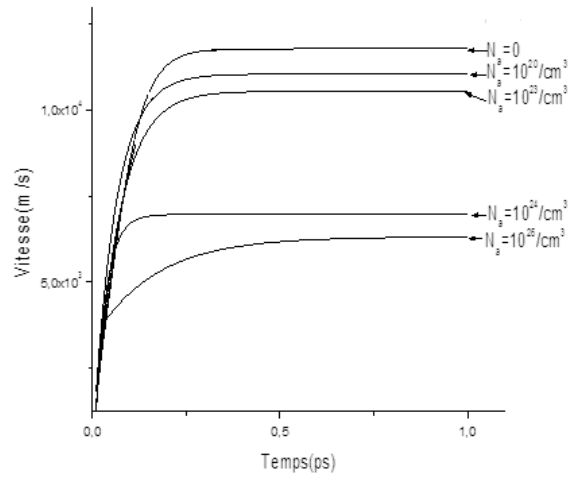


FIGURE 3.20 – Vitesse stationnaire en fonction du dopage à $d = 10\text{nm}$; $p = t = 0.5$ et à $E = 10\text{kv}/\text{cm}^{-3}$

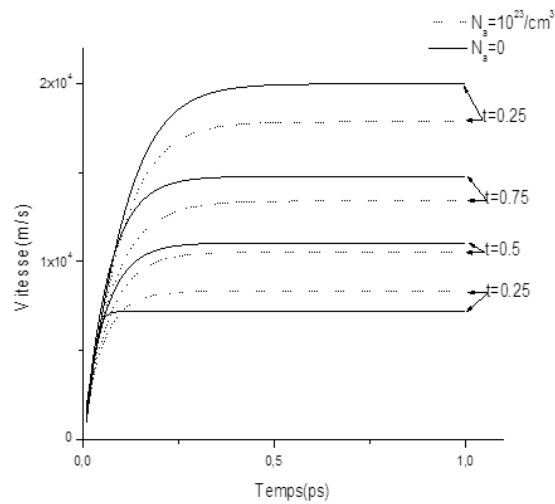


FIGURE 3.21 – Vitesse des trous en régime transitoire en fonction du dopage et différents valeurs de t ; et pour $p = 0.5$ d'une couche d'épaisseur $d=20\text{ nm}$ avec $E=10\text{kv}/\text{cm}^{-3}$

CHAPITRE 3. LA MODÉLISATION DES PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT
ÉLECTRONIQUES DANS LES COUCHES MINCES DE SI-P

d(nm)	10	20	30	50	200	Massif
$v_s(10^4 m/s)$ $N_A = 0 cm^{-3}$	1.99	2.38	2.52	2.69	2.84	2.9 [66]
$v_s(10^4 m/s)$ $N_A = 10^{23} cm^{-3}$	1.78	1.98	2,05	2.20	2.29	2.4 [66]
$\mu = \frac{v_s}{E} (cm^2/Vs)$ $N_A = 0 cm^{-3}$	199	238	252	269	284	290
$\mu = \frac{v_s}{E} (cm^2/Vs)$ $N_A = 10^{23} cm^{-3}$	178	198	205	220	229	240

TABLE 3.2 – Vitesse de saturation et la mobilité des trous en fonction de l'épaisseur de la couche à $p= 0.5$ et $E = 10Kv/cm$.

Conclusion générale

Dans ce travail nous avons rappelé les principaux modèles utilisés pour étudier les phénomènes du transport des électrons dans des couches mince métalliques, tel que la conductivité électrique réduite, la constantes de Hall, et nous avons donné l'expression de la conductivité électrique réduite de deux fils métalliques coaxiaux dans deux modèles différents en fonction des diamètres des fils et du coefficient de réflexion spéculaire p . Les résultats numériques sont calculés et comparés avec ceux donnés dans la littérature qu'elles soient théoriques ou expérimentaux [49, 50, 51]. Un bon accord est obtenu dans l'ensemble. L'allure des courbes qui représentent la conductivité électrique réduite de deux fils coaxiaux est identique à celle des fils fins métalliques comme dans le cas des couches parallélépipédiques. Cette théorie sera reprise en tenant compte des joints de grains pour modéliser des cylindres polycristallins en silicium.

A l'aide d'une étude géométrique de la trajectoire des électrons et des trous dans un barreau semiconducteur soumis aux champs électrique et magnétique, nous avons donné les expressions du coefficient de Hall R_H à fort champ et à faible champ magnétique. Ces expressions sont identiques à celles données par Sondheimer [27], obtenues en faisant la résolution de l'équation de Boltzmann. Cette étude peut être étendue aux couches minces semi-conductrices. Nous avons donné aussi les différents temps de collision caractérisant chaque diffusion des trous dans une couche mince de type Si-p. Puis, à l'aide de la méthode de Monte Carlo, nous avons déterminé la vitesse des trous en régime transitoire et stationnaire à différentes valeurs de l'épaisseur de la couche d , du coefficient

CONCLUSION GENERALE

de réflexion spéculaire p et du nombre d'accepteurs par unité de volume. Par la suite, nous avons montré numériquement et théoriquement que la résistivité électrique de la couche est inversement proportionnelle à l'épaisseur de la couche et que la mobilité des trous augmente lorsque d augmente. Ces résultats sont en bon accord avec les travaux donnés dans la littérature [30, 70, 74, 75]

Nous avons présenté des résultats numériques obtenus en modélisant une couche mince du silicium polycristallin. L'utilisation de la méthode de Monte Carlo, nous a permis de déterminer la vitesse des trous en régime transitoire et stationnaire à différentes valeurs de l'épaisseur de la couche d , du coefficient de réflexion spéculaire p et du coefficient de transmission t sur les joints de grains. Par la suite, nous avons montré numériquement que la résistivité électrique de la couche mince est inversement proportionnelle à l'épaisseur de la couche. Des vitesses de saturation nous avons déduit la mobilité des trous pour des couches cristallines et polycristallines. Les mobilités obtenues sont en bon accord avec les mobilités des trous dans les transistors à base du silicium polycristallin.

Dans ce travail nous avons tenu compte des interactions avec les impuretés en utilisant le modèle de Brooks-Herring dont toutes les impuretés sont considérées ionisées et que les interactions électrons-électron sont négligeables dans le cas d'une couche mince de Si-p pour des différentes qualités de surface, différents épaisseurs et en introduisant des joints de grains dans notre études.

Bibliographie

BIBLIOGRAPHIE

Bibliographie

- [1] M. Ruzinky, V. Saly, E. Aperathitis, Z. Hatzopoulos, *Acta physica Slovaca*, 51(1)(2001) 45-52.
- [2] M. J. Keevers, *Solar Energy Materials and Solar Cells* 65 (2001) 363-368
- [3] T. Matsui, T. Yamazaki, A. Nagatani, K. Kino, H. Takakura, Y. Hamakawa, *Solar Energy Materials and Solar Cells* 65 (2001) 87-93.
- [4] G. Conibeer, M. Green, A.C. Cho, D. König, Y.H. Cho, T. Fangsuwannarak, G. Scardera, E. Pink, Y. Huang, T. Puzzer, S. Huang, D. Song, C. Flynn, S. Park, X. Hao, D. Mansfield. "Silicon quantum dot nanostructures for tandem photovoltaic cells." *Thin Solid Films* 516 (2008) pp 6748-6756
- [5] D. A. Harrison, J. Hu, S. P. Watkins, M. L. W. Thewalt, D. J. S. Beckett and A. J. Spring Thorpe, *Journal of applied physics*, 84 (10) (1998) 5772-5775
- [6] G. Palasantzas, Y. P. Zhao, G. C. Wang, T. M. Lu, J. Barnas and J. Th. M. De Hosson, *Physical Review B*, 61 (16) (2000) 11109-11117.
- [7] M. Städele and K. Hess, *Journal of Applied Physics*, 88 (11) (2000) 6945-6947
- [8] G. Palasantzas, J. Barnas, *Physical Review B*, 56 (12) (1997) 7726-7731
- [9] Zs.J. Horvath, "Semiconductor nanocrystals in dielectrics : Optoelectronic and memory applications of related siliconbased MIS devices." *Current Applied Physics*, 2006
- [10] L. Pavesi, "Routes toward silicon-based lasers." *Materials Today* 8 (2005) pp 18-25
- [11] C. Gao, H. Shen, L. Sun, H. Huang, L. Lu, H. Cai, *Materials Letters*, 64 (2010) 2177-2179
- [12] C. R. Tellier and A. J. Tosser « Size effects in thin metal films », Elsevier-Amsterdam (1982)

BIBLIOGRAPHIE

- [13] Fuchs K, Proc Cambridge Phil Soc, 34 (1938) 100 -108 Elsevier scientific company ; 1982
- [14] Sondheimer E. H. Adv Phys, 1 (1952) 1
- [15] Y. Namba, Jap. J. Appl. Phys, 9(1970)1326-1329
- [16] Cottey P. Helv Phys Acta. 38 (1965) 801
- [17] P. Nougier, S. Tabikh and J. C. Vaissière, Semicond. Sci. Technol., 7 (1992) B351- B353
- [18] S. Messaadi, Thèse de Doctorat (Nancy) ; 1987
- [19] C. Jacoboni and L. Reggiani, Advances in Physics, 28 (4) (1979) 493-553
- [20] L. Reggiani, Proc. 15 th Conf. of Semiconductors, Kyoto (1980)
- [21] C. Jacoboni and L. Reggiani, Rev. Mod. Phys., 55 (1983) 645-705
- [22] ([17])J. P. Nougier, S. Tabikh and J. C. Vaissière, Semicond. Sci. Technol., 7 (1992) B351- B353
- [23] L. Reggiani, J. C. Vaissière, J. P. Nougier, and D. Gasquet, journal de physique, colloque C7, supplément au n10, tome 42, octobre 1981 C7, 357-367
- [24] B. Biad, H. Tijani, A. Hamid, Ann. Chim. Sci. Mat., 29 (5) (2004) 37-44
- [25] J.M.Ziman, Principal of theory of the solids,Cambridge University Press (1964) et Electron and Phonons, Oxford University Press, London (1962)
- [26] A.F.Mayadas, M.Shatzkes, Phys.Rev.B1 (1970)1382-1383
- [27] E .H.SONDHEIMER, Phys .Rev . 80(1950) 401
- [28] A.A.Cottey,Thin Solid Films ,1(1967)297- 307
- [29] Y.Namba, Jpn .J.Appl.Phys.9 (1970)1326
- [30] C.R.TELIER and A.J. TOSSER,"Size effects in thin films".Elsevier-Amsterdam, (1982)
- [31] C.R.Pichard, C.R.TELLIER and A.J.TOSSER,Thin Solid Films,62,(1979) 189
- [32] J.M.Ziman, Electrons and phonons, Oxford University Press, London (1962)chp.VII et IV
- [33] C.R.Pichard ; thèse d'Etat Nancy, (1985)
- [34] C.R.Pichard, C.R.Tellier, L. Ouarnya et A.J.Tosser, le vide,les couches minces, 210(1982)3
- [35] R.G.Chambers, Roc.Roy.Soc.A, 202, (1950) 378-394

BIBLIOGRAPHIE

- [36] A.Mathiessen, Rep.Brit.Ass.32, 286(1862)286
- [37] C.R.Tellier, M.Rabel et A.J.Tosser, J.Phys.F., 8, (1978) 2357s, 1(1982)271-273
- [38] A.J.Tosser,CR.Pichard, M.Lahrichi ,M.Bedda, J.Mat.Sci. Lett.4, (1985) 585
- [39] K.L.Chopra, "Thin Film Phenomina"Mc. Graw-Hill, New York, 1969
- [40] E. R. Andrew, Proc. phys. Soc., A 62 (1949) 77
- [41] R. B. Dingle, Proc. Roy. Soc., A 201(1950) 545
- [42] A. C. B. Lovell, Proc.R. Soc., A.157 (1936) 311
- [43] J. R. Sambles, K. C. Elsom and T. W. Preist, J. Phys., F 12 (1982) 1169-83
- [44] S. B. Soffer, J. Appl. phys.38 (1967) 1710
- [45] A. J. Tosser, S. Messaadi, C. R. Pichard, E.Humbert, J. Mater. sci., 5 (1986) 1175-1177
- [46] A.A. Cottey, Thin Solid Film,1 (1967/68) 297
- [47] L. Fertahi, Thèse de troisième cycle, Rabat (1996)
- [48] S. Messaadi, L. Bennour, H. Medouaer,Physica E 40 (2008) 886-889
- [49] C. R. Pichard, S. Messaadi, A. J. Tosser and C. R. Tellier, J. Mat. Sci. 23 (1988) 189-193
- [50] S. Karim, W. Ensiger, T.W. Cornelius, R. Neumann, Physica E40 (2008) 3173-3178
- [51] E.V. Zaviteav andv A.A. Yushkanov, Russian Microelectronics. 2008, V37 N6, p373-381
- [52] Manuel ROUSSEL. Etude et modélisation de la précipitation de particules de silicium dans des couches de silice nanométriques. Materials Science. Université de Rouen, 2012. French
- [53] N. W. ASHCROFT et N. D. MERMIN – Solid state physics, Saunders College Publishing,1976. Site internet
- [54] A. Vapaille, techniques de l'ingénieur constantes physico-chimiques, V K4, NK720, (1989)
- [55] <http://www.ioffe.rssi.ru/SVA/NSM/Semicond/Si/bandstr.html>
- [56] Francis lévy, Physique et technologie des semi-conducteur, presses Polytechnique et universitaire Romandes (PPUR), Paris, 1994
- [57] Phys. Chem .solids.pergamon press 1956.Vol1,P.82-99

BIBLIOGRAPHIE

- [58] Reggiani, Vaissiere, Noujier, Gasquet .journal de physique Colloque C7 supplément au N10, Tome 42, p 357-367, 1981
- [59] Hlou Laamari Thèse de Doctorat (LANGUIDOC) ; 1985
- [60] H. BROOKS, Advan. Electron-Electron Phys. 7, 85, (1955) C. HERRING, Phys. Rev. 164, 1025, (1967)
- [61] M. Bedda, C. Pichard and A. J. Tosser, J. Mat. Sci., 21 (1986) 1405-1412.
- [62] A. J. Tosser, C. R. Tellier and C. Pichard, J. Mat. Sci. Lett., 16 (1981) 944-948
- [63] M. Ruzinky, V. Saly, E. Aperathitis, Z. Hatzopoulos, Acta physica Slovaca, 51(1)(2001) 45-52
- [64] C. R. Tellier, M. Rabel et A. J. Tosser, J. Phys. F., 8 (1978) 2357s, 1 (1982) 271-273
- [65] E. H. SONDHEIMER, Proc. Roy. Soc, 193(1948) 484-512
- [66] Hlou, K. Amechnoue, J. Diyadi, A. Achachi, M. Samri, J-P. Nougier, J-C. Vaissière, L. Varani, C. Palermo and J-F. Millithaler, Recent Research Developments in Science Technology of Semiconductors, Vol. 2 ISBN 81-7895-137-1, Books 2004
- [67] O. M. Bulashenko and O. V. Kochelap, Sov. Phys. Solid State, 34(1) (1992) 100-103
- [68] V. K. Arora and F. G. Awad, Phys. Rev. B, 23 (4) (1981) 5570-5575
- [69] X. M. Weng, J. Phys. : Condens. Matter, 8 (1996) 6229-6234
- [70] K. L. Chopra, Thin Film Phenomena, Mac Graw-Hill, New York, 1970, p 441
- [71] Y. Kaneko, N. Andoh, and T. Sameshima, IEEE Electron Device letters, V24 N9 (2003) 586-588
- [72] Yingda Dong, Dennis W. Scott, Yun Wei, Arthur C. Gossard, Mark J. Rodwell, Journal of crystal Growth, 256 (2003) 223-229
- [73] Min Yang, Evgeni P. Gusev, Meikei Jeong, Oleg Gluschenkov, Diane C. Boyd, Kevin K. Chan, Paul M. Kozlowski, Christopher P. D'Emic, Raymond M. Sicina, Paul C. Jamison, and Anthony I. Chou, , IEEE Electron Device letters, V24 N5 (2003) 339-341
- [74] O. M. Bulashenko and O. V. Kochelap, Sov. Phys. Solid State, 34(1) (1992) 100-103
- [75] George Palasantzas, Physical review B 71, 205320 (2005) 1-5

Publications

Maahoud M., El-Abdellaoui L., Tijani H., “ Expression of the Hal coefficient of semiconductor”, Phys.chim.news, 36, 131-134,2007

El-Abdellaoui L., **Maahoud M.**, Tijani H., Roussey A. Tossier., “MODELING THE ELECTRICAL CONDUCTIVITY OF TWO THIN COAXIAL METALLIC WIRES”, Phys. Chem. News, 62, 44-49,2011

Conference Paper : **Maahoud M.**, El-Abdellaoui L., Tijani H., “Expression of the Hal coefficient of semiconductor”, Congres International de la Physique des Interactions Rayonnement–Matière PIRM , Marrakech du 5 au 7 Avril 2006

Conference Paper : Biad B.**Maahoud M.**, El-Abdellaoui L., Tijani H.,Communication dans la rencontre thématique et diélectriques et matériaux à Faculté des sciences de Kénitra sous le titre ., “External surfaces and grain bondaries effect on the electrical resistivity of si-p thin films ”,. En 7-8 juin 2007

Conference Paper : Orale M.Maahoud, L. El Abdellaoui, Tijani.H ., “Expression de la constante de Hall dans les semiconducteurs ”,Dans les premières journées méditerranéennes de la physique (JMP1) . la Faculté des Sciences de Tétouan ,24-25-26 Novembre 2005.

Annexes

Annexes

Equation de Boltzmann

Pour une description qualitative des effets principaux de transport la méthode souvent utilisée est celle basée sur l'équation cinétique de Boltzmann qui caractérise la modification de l'état des porteurs provoquée par différentes actions, qui s'écrit sous la forme :

$$\frac{df}{dt} = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} + \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{diff} + \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{ch} \quad (3.39)$$

f : est la fonction de distribution des porteurs de conduction de métal, qui dépend des vecteurs d'onde \vec{K} et de la position \vec{r} de l'électron à l'instant t

$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll}$: représente l'effet des collisions qui provoquent d'incessants transferts de porteurs dans l'espaces des phases

$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{diff}$: rend compte des effets de diffusion.

$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{ch}$: représente l'effet des forces extérieures (champ \vec{E} ou \vec{B}).

En l'absence de toute perturbation on a :

$$f(\vec{K}, \vec{r}, t) = f_0(\vec{K}) \quad (3.40)$$

Où :

f_0 : est la fonction de distribution non perturbée.

Soit \vec{F} la force résultante des forces extérieures appliquées, on a :

$$\vec{F} = \hbar \frac{\partial \vec{K}}{\partial t} \quad (3.41)$$

donc :

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{diff} = -\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f \quad (3.42)$$

avec :

$$\vec{v} = \frac{\partial \vec{r}'}{\partial t} \quad (3.43)$$

on obtient :

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} = - \frac{\partial \vec{K}}{\partial t} \cdot \vec{\nabla}_K f = - \vec{F} \cdot \frac{\vec{\nabla}_K f}{\hbar} \quad (3.44)$$

$$\frac{df}{dt} = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} - \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f - \vec{F} \cdot \frac{\vec{\nabla}_K f}{\hbar} \quad (3.45)$$

$$\frac{df}{dt} = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} \quad (3.46)$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} = - \frac{(f - f_0)}{\tau} = - \frac{f_1}{\tau} \quad (3.47)$$

Avec :

τ : Temps de relaxation caractérisant le retour à l'équilibre, il dépend de l'énergie des porteurs, cette dépendance étant différente selon la nature des collisions, il est généralement différent du temps moyen entre collisions :

L'équation (Équation 3.39) s'écrit :

$$\hbar^{-1} \vec{\nabla}_K f \cdot \vec{F} + \vec{\nabla}_r f \cdot \vec{v} + \frac{f_1}{\tau} = 0 \quad (3.48)$$

En régime permanent

$$\frac{df}{dt} = 0 \quad (3.49)$$

Et l'équation de Boltzmann s'écrit :

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} = \hbar^{-1} \vec{\nabla}_K f \cdot \vec{F} + \vec{\nabla}_r f \cdot \vec{v} \quad (3.50)$$

On a :

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} = - \frac{f(\vec{K}, \vec{r}, t) - f_0(\vec{K})}{\tau} \quad (3.51)$$

$$= - \frac{f_1(\vec{K}, \vec{r}, t)}{\tau} = \frac{\phi}{\tau} \frac{\partial f_0(\vec{K})}{\partial \xi} \quad (3.52)$$

f_1 : Est l'écart par rapport à l'équilibre.

ξ : L'énergie de l'électron.

— **Solution générale de l'équation**

On considère que la déviation par rapport à l'équilibre est faible donc on peut écrire :

$$\nabla_K f \approx \nabla_r f_0 \quad (3.53)$$

Si le système soumit à un gradient de température on a :

$$\nabla_T f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial T} \nabla_r T \quad (3.54)$$

Posons :

$$Q = \frac{\xi - \xi}{K_B T} \quad (3.55)$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial T} = \frac{\partial f_0}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial Q} \frac{\partial Q}{\partial T} \quad (3.56)$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial T} = \frac{\partial f_0}{\partial \xi} K_B \left[-\frac{1}{K_B T} \frac{\partial \xi_F}{\partial T} - \frac{\xi - \xi_F}{K_B T} \right] = -\frac{\partial f_0}{\partial \xi} \left[\frac{\partial \xi_F}{\partial T} + \frac{\xi - \xi_F}{T} \right] \quad (3.57)$$

$$\nabla_r f \approx -\frac{\partial f_0}{\partial \xi} \left[\nabla_r \xi_F + \frac{\xi - \xi_F}{T} \nabla_r T \right] \quad (3.58)$$

La fonction de distribution f étant donnée par l'expression :

$$f = f_0 + f_1 \quad (3.59)$$

$$\text{D'où } \nabla_K f = \frac{\partial f_0}{\partial \xi} \nabla_k \xi + \nabla_k f_1$$

Et puisque on a :

$$\nabla_K f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial \xi} \nabla_k \xi \quad (3.60)$$

L'énergie d'un électron est donnée par :

$$\xi = \frac{p^2}{2m} \quad (3.61)$$

Où m est la masse de l'électron et p sa quantité de mouvement qui s'exprime par :

$$p = \hbar k = mv \quad (3.62)$$

En utilisant :

$$\nabla_k \xi = \frac{\hbar^2 k}{m} \quad (3.63)$$

on tire :

$$\nabla_k f = \hbar v \frac{\partial f_0}{\partial \xi} \quad (3.64)$$

En présence des champs électrique \vec{E} et magnétique \vec{B} on a :

$$\vec{F} = e \left(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B} \right) \quad (3.65)$$

alors :

$$\vec{F} \vec{v} = e \vec{E} \vec{v} \quad (3.66)$$

On pose :

$$\phi = \vec{K} \vec{\phi}_1 \quad (3.67)$$

$\vec{\phi}_1$ ne dépend pas de \vec{K} on obtient à :

$$\vec{\phi}_1 = \frac{\tau \hbar}{m} \left(e \vec{E} - (\xi - \xi_F) \nabla_r \log T \right) + \frac{\tau \hbar}{m} \vec{k} \left(\vec{B} \wedge \nabla_k \phi \right) \quad (3.68)$$

$$\text{Avec } \vec{E}_1 = \vec{E} - \frac{\xi - \xi_F}{e} \nabla_r \log T$$

L'expression de ϕ est sous la forme :

$$\phi = \frac{e \tau \hbar}{m} \frac{\vec{E} - (e \tau / m)^2 \vec{B} (\vec{B} \cdot \vec{E}_1) - (e \tau / m) \vec{B} \wedge \vec{E}_1}{1 + (e \tau / m)^2 B^2} \quad (3.69)$$

Dans le cas particulier où le champ magnétique \vec{B} à même direction que le champ électrique \vec{E} et le gradient de température est nul on trouve avant de remplacer \vec{E}_1 par son expression :

$$\phi = \frac{e \tau \hbar k}{m} \vec{E} \quad (3.70)$$

D'où :

$$f_1 = -\frac{e\tau\hbar k}{m} E \frac{\partial f_0}{\partial \xi} \quad (3.71)$$

Ce qui nous permet de calculer la densité de courant électrique.

Résumé

Dans ce travail, nous nous proposons de faire une étude théorique et analytique du phénomène de transport électronique dans des couches minces métalliques, semiconductrices, et fils fins métalliques. Un rappel des différents modèles de conduction à savoir ; le modèle de Fuchs-Sondheimer, Cottey, Mayadas-Shatzkes, et le modèle de Tossier qui s'avèrent nécessaire pour cette étude. Nous donnons les équations approchées de la conductivité électrique et la constante de Hall dans des couches minces et des fils fins métalliques. Les couches minces semiconductrices de type Si-p sont étudiées analytiquement et numériquement, ainsi nous avons déterminé la vitesse et la mobilité des trous en régime transitoire et stationnaire, en fonction de l'épaisseur de la couche, des densités des impuretés et du champ électrique. La méthode de Monte Carlo est utilisée pour les calculs numériques.

Mots-clés : Couche, mince, métal, semiconducteur, fil fin, Hall, impuretés, phonons, parcours, relaxation, Monte Carlo, vitesse de dérive, conductivité, mobilité, résistivité.

Abstract

In this work, we propose to make a theoretical and analytical study of the phenomenon of electronic transport in metallic thin layers, semiconductors, and metallic thin wires. A reminder of the different conduction models, namely the Fuchs-Sondheimer, Cottey, Mayadas-Shatzkes, and Tossier models, is necessary for this study. We give the approximate equations of the electrical conductivity and the Hall constant in thin layers and thin metallic wires. Semiconducting thin layers of the Si-p type are studied analytically and numerically, and the velocity and mobility of holes are determined in transient and stationary regime, as a function of the layers thickness, impurity densities and electric field. The Monte Carlo method is used for the numerical calculations.

Keywords : Layer, Thin, Metal, Semiconductor, Thin wire, Hall, Impurities, Phonons, Path, Relaxation, Monte Carlo, Drift rate, Conductivity, Mobility, Resistivity.

Année Universitaire : 2018/2019