

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche
Scientifique



Université Djillali Liabès Sidi Bel Abbès
Faculté de Technologie
Département d'électronique

THESE

**Simulation de la conduction dans les dispositifs à
semiconducteurs à durée de vie et à relaxation,
comparaison des caractéristiques I(V)**

Pour obtenir
Le diplôme de Doctorat en sciences
Spécialité : électronique
Option : microélectronique

Presenté Par
M^{me} NOUAR Fadila Souad

devant le jury composé de :

M ^{me} BENAMARA Zineb	Professeur	UDL Sidi-bel-Abbes	Présidente
M ^f AMRANI Mohammed	Professeur	UDL Sidi-bel-Abbes	Encadreur
M ^f DJELLOULI Bouaza	professeur	Université Saida	Examinateur
M ^f SAHNOUNE Mohamed	Professeur	Université Mascara	Examinateur
M ^f ARBOUCHE Omar	Maitre de conférences A	Université Saida	Examinateur
M ^f MANSOURI Seddik	Maitre de conférences A	UDL Sidi-bel-Abbes	Membre invité

Année universitaire 2015/2016



DEDICACES

Je dédie ce modeste travail à :

Mes très chers parents, que je puisse un jour leur rendre qu'un peu de bonheur comparé à celui qu'ils ont pu me procurer, mon cher mari et mes enfants pour tous leur encouragement et leur soutien moral. La chaleur de leur présence m'aurait aidé à surmonter les douleurs des moments les plus pénibles.

Mes beaux parents, ma famille et ma belle famille.

A la mémoire de mon ex encadreur Mme R.Menezla et ma très chère amie T.Abderahim.

Je tiens à exprimer mon amitié et ma gratitude à tous mes proches, amis et collègues.

Merci à toutes et à tous.



REMERCIEMENT

La sollicitude de certaines personnes durant la réalisation de ce travail impose le témoignage de ma profonde gratitude

*Tout d'abord, je remercie **Madame Z.BENAMARA** Professeur à l'université de Sidi Bel Abbés d'avoir accepté de présider ce jury, j'espère que ce travail sera à la hauteur de sa confiance*

*Je tiens à exprimer mon profond respect à Mr **M.Amrani**, professeur à l'université de Sidi Bel Abbés et de le remercier pour ses conseils précieux, qu'il puisse trouver ici l'expression de ma profonde gratitude.*

*Mes remerciements s'adressent aussi au Professeur **S.Mansouri**, ses conseils et son soutien moral m'ont été bénéfiques pour continuer ce travail.*

Mes remerciements les plus sincères s'adressent aux membres de jury

***Mr B. Djellouli**, Professeur à l'université de Saida, **Mr M. Sahnoun**, Professeur à l'université de Mascara, et **Mr O. Arbouche**, maître de conférences à l'université de Saida de m'avoir honoré de leurs présence en acceptant de participer à ce jury*

*Je tiens à remercier vivement Professeur **A.Massoum** pour son aide et ses conseils précieux qui m'ont beaucoup aidé à réaliser ce projet.*

Mes sincères remerciements vont aussi à mes collègues du département d'électrotechnique, comme je salue très respectueusement toute personne m'a aidé de près ou de loin dans ce modeste travail.

LISTE DES TABLEAUX

Chapitre II

MODELES NUMERIQUES

Tableau II-1 : Variables physiques et variables normalisées.....22

Chapitre IV

**SIMULATION 3D DES DIODES PN ET P_vN EN PRESENCE DES
CENTRES PROFONDS**

Tableau IV-1 : Paramètres géométriques de la structure71

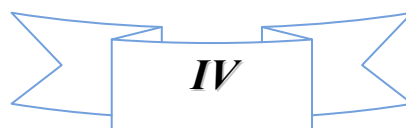
Tableau IV-2 : paramètres physiques, électriques et géométriques de la diode.....72

Tableau IV-3 : Paramètres géométriques de la structure PIN.....88

Chapitre V

**ETUDE COMPARATIVE DES SEMICONDUCTEURS A RELAXATION
ET A DUREE DE VIE**

Tableau V-1 : paramètres physiques de la structure P-v.....99



LISTE DES FIGURES

Chapitre I
FORMULATION DES EQUATIONS PHYSIQUES ET MATHÉMATIQUES

Figure (I-1) : mécanisme de génération- recombinaison de Schokley Read..... 9
Figure (I-2) schéma de bandes du GaAs 13

Chapitre II
MODELES NUMERIQUES

Figure (II-1) maillage à pas variable.....26
Figure (II-2) Organigramme de la méthode de GUMMEL..... 28
Figure (II-3) Organigramme de la méthode de Newton.....32

Chapitre III
DESCRIPTION DU LOGICIEL

Figure (III-1) organigramme d'entrée des données.....52
Figure (III-2) Discrétisation et Détermination des pas de calcul.....53
Figure (III-3) structure utilisée.....54
Figure (III-4) Organigramme de résolution de l'équation de Poisson.....56
Figure (III-5) Organigramme de résolution des équations de continuité.....58
Figure (III-6) Organigramme de résolution par la méthode couplée.....60
Figure (III-7) Représentation géométrique d'un ensemble de nœud de discrétisation.....61

Chapitre IV
SIMULATION 3D DES DIODES PN ET P^vN EN PRESENCE DES CENTRES PROFONDS

Figure (IV-1) Schéma de la structure de test matériau de base GaAs.....68
Figure (IV-2) Diode P⁺(GaAs)–P(GaAs)-N(Semi-IsolantGaAs).....70
Figure (IV-3) Diode P⁺(GaAs)–P(GaAs)-N (Semi-Isolant GaAs).....70

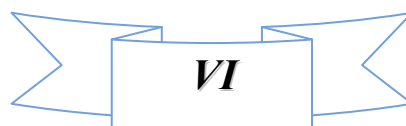


Figure (IV.4) : Profil de dopage dans la structure.....	70
Figure (IV.5) :diagramme de bandes énergétique d'une structure P⁺-P- Semi-islant (N) à l'équilibre thermodynamique (Na=2x10¹⁸ cm⁻³, Na=2x10¹⁶ cm⁻³, Nd=10¹⁴ cm⁻³).....	72
Figure (IV.6) : diagramme de bandes énergétique d'une structure P⁺-P- Semi-islant (N) hors équilibre (Va=0.2 V) avec (Na=2.10¹⁸ cm⁻³, Na=2.10¹⁶ cm⁻³, Nd= 10¹⁴cm⁻³).....	73
Figure (IV.7) : Distribution du potentiel électrostatique de la diode P⁺-P- Semi-islant (N) à l'équilibre thermodynamique avec (Na=2.10¹⁸ cm⁻³, Na=2.10¹⁶ cm⁻³, Nd=10¹⁴ cm⁻³).....	74
Figure (IV.8) : Distribution du champ électrique de la diode P⁺-P- Semi-islant (N) hors équilibre (Va=0.2V) avec (Na=2.10¹⁸ cm⁻³, Na=2.10¹⁶ cm⁻³, Nd=10¹⁴ cm⁻³).....	76
Figure (IV.9): Distribution de la concentration des trous p de la diode P⁺-P- Semi-islant (N) hors équilibre (Va=0.2V) avec (Na=2.10¹⁸ cm⁻³, Na=2.10¹⁶ cm⁻³, Nd= 10¹⁴cm⁻³).....	77
Figure(IV.10) : Distribution de la concentration des électrons n de la diode P⁺-P- Semi-islant (N) hors équilibre (Va=0.2V) avec (Na=2.10¹⁸ cm⁻³, Na=2.10¹⁶ cm⁻³, Nd=2. 10¹² cm⁻³).....	78
Figure (IV.11) : Distribution des concentrations des porteurs n et p hors équilibre de la diode P⁺-P- Semi-islant (N).....	79
Figure (IV.12) : Distribution à l'échelle linéaire des densités de courant Jn et Jp structure P⁺(GaAs)-P(GaAs)-N(Semi isolant GaAs).....	80
Figure (IV.13) : Variation des densités de courants à différentes tensions appliqués (-0.2V, 0.2 V et 1V).....	81
Figure (IV.14) : Caractéristiques simulées I-V à l'échelle linéaire et semi-logarithmique de la structure à l'équilibre et hors équilibre avec (Na=2.10¹⁸ cm⁻³, Na=2.10¹⁶ cm⁻³, Nd=2. 10¹² cm⁻³).....	82
Figure (IV.15) : Variation du potentiel électrostatique à différentes concentrations Du niveau profond NT.....	84
Figure (IV.16) : Variation des concentrations à différentes concentrations Du niveau profond N_T.....	84
Figure (IV.17) : Modèle géométrique d'une diode PIN à base de GaAs.....	88
Figure (IV.18) : Distribution 3D d'une structure P-v-N dans le plan (O,x,y).....	90
Figure (IV.19) : Caractéristiques Simulées courant-tension d'une diode P-v-N	91
Figure (IV-20) : Variation du potentiel électrostatique en fonction de la tension de polarisation.....	92

Chapitre V

ETUDE COMPARATIVE DES SEMICONDUCTEURS A RELAXATION ET A DUREE DE VIE

Figure (V-1) : schéma géométrique de la structure P-v GaAs.....	98
Figure (V-2) : SC à relaxation et à durée de vie à l'équilibre thermodynamique.....	100
Figure (V-3) : profil de distribution des porteurs à l'équilibre thermodynamique.....	101
Figure (V-4) : SC à durée de vie sous polarisation de 10 KT/q	102
Figure (V-5) : SC à relaxation sous polarisation de 10 KT/q	104
Figure (V-6) : profil de distribution du potentiel Pour le semi-conducteur à relaxation et à durée de vie.....	106
Figure (V-7) : profil de distribution de la densité d'électrons libres pour différents tension de polarisation.....	107
Figure (V-8) : profil de distribution de la densité des trous pour un SC à relaxation et à durée de vie.....	108
Figure (V-9) : profil de distribution de la densité des trous pour différents tension de polarisation.....	109
Figure (V-10) : profil de distribution de la densité des électrons libres pour un SC à relaxation et à durée de vie.....	110
Figure (V-11) : Distribution du champ électrique SC à durée de vie et à relaxation à l'équilibre thermodynamique.....	112
Figure (V-12) : Distribution du champ électrique sous une tension de 5 KT/q	112
Figure (V-13) : Distribution du courant pou un semi-conducteur à durée de vie pour une tension de 5 KT/q	114
Figure (V-14) : Distribution du courant pou un semi-conducteur à relaxation pour une tension de 5 KT/q	115
Figure (V-15) : Figure comparative de la courbe $I(v)$ Entre SC à durée de vie et à relaxation.....	116

NOMENCLATURE

D_n et D_p : constantes de diffusion des électrons et des trous.

ϵ : La permittivité diélectrique du semi-conducteur.

ϵ_0 : La permittivité de vide= $8.854.10^{-12}$ F/m.

ϵ_r : La permittivité relative au semi-conducteur.

E : le champ électrique.

E_R : le niveau d'énergie du centre recombinant.

g : taux de génération.

H : constante de planck = $0.414.10^{-12}$ evs

$j_n(x,y)$ et $j_p(x,y)$: vecteurs densités de courant respectifs des électrons et des trous .

K : constante de BOLTZMANN= $86.2.10^{-6}$ EV/K.

KT/q : tension thermodynamique($T=300$ K)= 26.10^{-3} v

μ_n, μ_p : sont respectivement les mobilités électriques des électrons et des trous.

N_r : la densité de centres de recombinaison.

N_R : Concentration du centre recombinant.

n : concentration d'électrons libres.

n_e et p_e : Concentration des porteurs à l'équilibre.

N_D^+ et N_A^- : les densités de donneurs et d'accepteurs ionisés.

n_r : La charge piégée sur un centre profond.

P : concentration des trous libres.

ψ : Le potentiel électrostatique.

q : La charge élémentaire = $1.6.10^{-19}$ C

r : taux de recombinaison.

SC : semiconducteur.

T : température absolue.

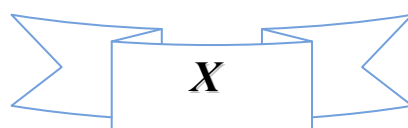
ρ : La densité de charges libres qui s'écrira dans le cas général.

τ : temps de libre parcours moyen

τ_{rd} : Le temps de relaxation diélectrique.

τ_0 :La durée de vie.

Δn et Δp : Concentration des porteurs en excès.



Sommaire

Dédicace.....	I
Remerciement.....	II
Liste des tableaux.....	III
Liste des figures.....	V
Nomenclature.....	IX
Sommaire.....	XI
Introduction générale.....	1

Chapitre I **FORMULATION DES EQUATIONS PHYSIQUES ET** **MATHEMATIQUES**

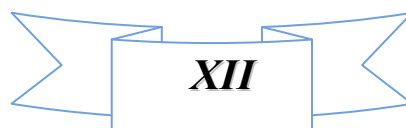
I-1) Introduction	5
I-2) différents types de semiconducteur	6
I-2-1) semiconducteur à durée de vie	6
I-2-2) semi-conducteur à relaxation	6
I-3) La Génération	6
I-4) La Recombinaison.....	6
I-4-1) La recombinaison photonique	7
I-4-2) La recombinaison Auger	7
I-4-3) La recombinaison directe électron -trou	8
I-4-4) La recombinaison assistée par des centres de recombinaison	9
Un centre recombinant	10
Un centre piège	10
I-5) Conduction en présence d'un centre recombinant	10
I-5-1) Régime permanent	12
I-5-2) Durée de vie en présence de recombinaison assistée	13
I-6) Conduction en présence de deux centres profonds	14
I-7) Equations de base des semiconducteurs	16
I-7-1) Equations électrostatiques	16
I-7-2) Equations de transport.....	17
I-7-3) Relation d'Einstein	18
I-7-4) Equations de continuité.....	18
I-8) Représentation tridimensionnelle des équations physiques	19

I-9) Conclusion	19
Références bibliographiques.....	20

Chapitre II

MODELES NUMERIQUES

II-1) Introduction	23
II-2) Normalisation des équations physiques	23
II-3) discrétisation de l'équation de Poisson	24
II-4) discrétisation des équations de continuité	25
II-5) Maillage	26
II-5-1) Maillage à pas constant	27
II-5-2) Maillage à pas variable	27
II-5-2-1) Utilisation du calcul analytique	27
II-5-2-2) Procédure de calcul par une série géométrique	27
II-6) Algorithmes numériques	28
II-6-1) Méthode de Gummel	28
II-6-2) Méthode de Newton - Raphson	30
II-6-2-1) principes	30
II-6-2-2) Algorithme de Newton pour la résolution du système non linéaire $f(x)=0$	31
II-6-2-3) Calcul des éléments de la matrice U	35
II-7) Calcul des grandeurs secondaires	38
II-7-1) Champ électrique	38
II-7-2) Densité de courants	39
II-8) Formulation finale d'équations tridimensionnelles des grandeurs secondaires	45
II-8-1) Le champ électrique	45
II-8-2) Densité de courant	45
II-8-2-1) courant de conduction des électrons j_n	45
II-8-2-2) courant de conduction des trous j_p	46
II-9) Conclusion	48
Références bibliographiques.....	49

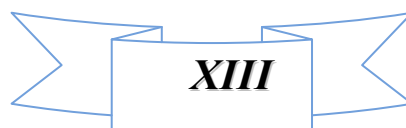


Chapitre III
DESCRIPTION DU LOGICIEL

III-1) Introduction	53
III-2) Description du programme	53
III-2-1) Entrée des données, maillage et conditions aux limites	53
a) Entrée des données	53
b) Maillage.....	54
c) Conditions aux limites	54
C-1) Conditions de Dirichlet	55
C-2) Conditions de Neumann	56
III-2-2) Résolution numérique	56
III-2-2-1) Algorithme de Gummel	56
III-2-2-2) Algorithme de Newton.....	60
1) première étape	60
2) Deuxieme étape	60
2-1) calcul des matrices U et F.....	60
2-1-1) La matrice jacobienne	62
2-1-2) Le vecteur F.....	65
2-1-3) Résolution du système $U\delta=-F$	65
III-3) CONCLUSION.....	65
Références bibliographiques.....	66

Chapitre IV
SIMULATION 3D DES DIODES P_v ET P_{vN}
EN PRESENCE DES CENTRES PROFONDS

IV-1) Introduction	69
IV-2) Structure de test et Paramètres de simulation	69
IV-2-1) Paramètres géométriques de la structure GaAs (P-v).....	71
IV-3) Résultats de simulation et discussion	72
IV-3-1) Diagramme de bandes d'énergie	73
IV-3-2) Variation du potentiel électrostatique ϕ et les concentrations de porteurs mobiles n et p.....	74
1. Potentiel électrostatique et champ électrique	75
2. Concentrations des électrons et des trous	77



3. Densités de courant j_n et j_p	80
4. Caractéristique I-V	82
IV-4) phénomènes de transport de la structure structure P^+-P-N (Semi isolant) GaAs EN présence d'un centre profond :	83
IV-5) Jonction P-v-N	87
IV-5-1) Simulation tridimensionnelle d'une diode P-v-N	88
1) Potentiel et concentration des porteurs :	89
2) Caractéristiques I-V	91
IV-6) Conclusion	93
Références bibliographiques	94

Chapitre V

ETUDE COMPARATIVE DES SEMICONDUCTEURS A RELAXATION ET A DUREE DE VIE

V-1) Introduction	97
V-2) Structures P-v	98
V-3) Résultats de simulation et interprétation	99
V-3-1) Potentiel et concentration des porteurs libres de la structure	99
I) A l'équilibre thermodynamique	99
II) Hors équilibre	102
V-3-2) Grandeurs secondaires	112
V-3-2-1) Champ électrique	112
V-3-2-2) le Courant électrique	113
V-4) Conclusion	118
Références bibliographiques	119
Conclusion générale	121
Annexe A	126
Annexe B	128

INTRODUCTION GENERALE

Introduction générale

Dans l'analyse du transport de charges dans les semi-conducteurs et dans les isolants, Van Roosbroeck et Casey[1] arrivent à la conclusion que le flux de charges peut être principalement de deux types selon que le temps de relaxation diélectrique est plus court ou plus long que la durée de vie des porteurs minoritaires injectés. Si le temps de relaxation diélectrique est plus court que la durée de vie, alors la charge d'espace des porteurs minoritaires injectés est rapidement neutralisée, et une augmentation de la conductivité est observée. C'est un semi-conducteur à durée de vie.

Si, toutefois, la neutralisation de la charge d'espace ne peut pas être atteinte avant que la recombinaison aura lieu, la concentration des porteurs majoritaires diminue jusqu'à une recombinaison nette nulle où l'équilibre thermique local est établi. Ce régime de transport de charge est appelé régime de relaxation. C'est un semi-conducteur à relaxation.

Nous nous intéressons dans ce sujet de recherche qui fait l'objet du présent mémoire de thèse au domaine de la modélisation et de la simulation des composants électroniques, et renforcement du modèle physique par l'intégration des modèles de piégeage permettant ainsi de réaliser une étude comparative entre les semi-conducteurs à relaxation et à durée de vie.

Le développement qu'a poursuivi le domaine de l'électronique et de l'optoélectronique en particulier est dû en grande partie à l'utilisation de nouveaux matériaux dans la fabrication des composants, la physique des solides permet de prédire le comportement de ces nouveaux matériaux pour aboutir à des caractéristiques plus performantes.

Une modélisation uni ou bidimensionnelle est parfois insuffisante pour tenir compte des effets géométriques, influençant nettement le courant et le champ électrique dans les composants à très faibles dimensions. La simulation à trois dimensions est indispensable pour l'étude de dispositifs à faible géométrie de conception.

Nous nous sommes intéressés dans ce sujet de recherche à la Modélisation et la simulation des composants à faible géométrie de conception, permettant de déterminer dans le volume d'une structure, les distributions de potentiel et densités de porteurs libres en fonction d'une polarisation donnée.

Dans le but de créer un outil de simulation plus général, on s'est proposé de renforcer le modèle physique en intégrant l'influence des centres pièges sur le comportement physique et électrique d'une structure sous polarisation. Ensuite, faire une comparaison de comportement électrique entre les semi-conducteurs à durée de vie

Introduction générale

et à relaxation en calculant les grandeurs principales tels que les distributions de potentiel électrostatique et les densités des porteurs libres pour les semi-conducteurs ainsi que les grandeurs secondaires tels que le champ électrique et les densités de courant

Notre programme comprend à l'origine l'algorithme de Gummel et celui de Newton pour la résolution du système couplé d'équations non linéaires aux différentielles partielles relatives au modèle physique. Cependant, et afin de permettre une meilleure convergence et par conséquent une amélioration des temps de calcul 3D souvent prohibitifs, une méthode combinée intégrant à la fois l'algorithme de Newton et celui de Gummel a été mise au point .

Ce travail est divisé en cinq chapitres :

Dans le chapitre I, le modèle physique est présenté en tenant compte d'un ou plusieurs centres pièges. Les différents processus de génération et de recombinaison, sont rappelés, les mécanismes de transport en présence d'un et de deux centres pièges, ainsi que les équations fondamentales découlants du modèle physique proposé.

Deux méthodes de calcul sont exposées dans le chapitre II, La première est représentative de l'algorithme de Gummel, la deuxième est liée à l'algorithme de Newton nécessitant le développement de la matrice jacobienne. Après un petit rappel des équations fondamentales obtenues après discrétisation, les modifications réalisées sur le calcul des éléments de la matrice jacobienne sont illustrées en présence d'un et de deux centres profonds.

Le chapitre III contient la description des principales étapes de calcul caractérisant notre logiciel, et éventuellement les parties concernant les améliorations apportées à ce même programme, l'algorithme de combinaison des deux méthodes de Gummel et de Newton est également présenté.

Dans le quatrième chapitre et afin de valider le modèle physique proposé, nous présentons les résultats obtenus par simulation tridimensionnelle d'une structure Pv et P^+vN^+ à base de GaAs, pour différents modes de polarisation.

Dans le cinquième chapitre nous présentons les résultats à l'équilibre et sous polarisation d'une diode P^+N avec deux types de semi-conducteurs à relaxation et à durée de vie pour pouvoir comparer le comportement physique entre ces deux types de semi-conducteurs.

Enfin, une conclusion globale est donnée comme récapitulatif des principaux résultats obtenus et leur interprétations respectives.

Chapitre I

***FORMULATION DES EQUATIONS
PHYSIQUES ET MATHEMATiques***

I-1) INTRODUCTION :

Les semiconducteurs sont classés en deux catégories selon leur comportement en fonction de la durée de vie des porteurs : les semi-conducteurs à relaxation et les semi-conducteurs à durée de vie.

Une modélisation correcte des structures à base des semiconducteurs III-V, nécessite la prise en compte des centres pièges dans le modèle physique [2] [3].

Dans ce chapitre nous allons présenter les différents processus de génération et recombinaison, les mécanismes de transport en présence d'un et de deux centres pièges, ainsi que les équations fondamentales découlantes du modèle physique proposé.

Lorsqu'il ya dans la bande de conduction ou dans la bande de valence un excès d'électrons libres ou de trous libres par rapport aux concentrations d'équilibre thermique, différents processus tendent à ramener le système vers son état d'équilibre, deux paramètres importants entrent dans ce processus

1) Temps de relaxation :

Le temps de relaxation diélectrique τ_{rd} mesure le temps nécessaire au rétablissement de la neutralité électrique. Il est donné par l'équation :

$$\tau_{rd} = \frac{\epsilon}{e \cdot (n_e \mu_n + p_e \mu_p)} \quad (I - 1)$$

e : charge électrique de l'électron

n_e , p_e : concentrations respectives des électrons et des trous

μ_n , μ_p : sont respectivement les mobilités électriques des électrons et des trous.

2) Durée de vie :

Physiquement, τ_0 la durée de vie représente le temps moyen qu'un porteur excédentaire existe avant de se recombiner, elle est donnée par l'équation :

$$\tau_0 = \frac{\tau_{ne} (p_e + p) + \tau_{pe} (n_e + n)}{n_e + p_e} \quad (I - 2)$$

Ces deux temps caractéristiques permettent de définir les deux catégories de semi-conducteur, semi-conducteur à relaxation et à durée de vie.

I-2) DIFFERENTS TYPES DE SEMICONDUCTEUR [4]:

I-2-1) semiconducteur à durée de vie :

Dans cette catégorie de semiconducteurs, on a :

$$\tau_{rd} \ll \tau_0$$

I-2-2) semi-conducteur à relaxation :

Dans les semiconducteurs à relaxation on a :

$$\tau_{rd} \gg \tau_0$$

I-3) LA GENERATION [1] [2] :

Il en résulte de ce processus la création des porteurs dans le semiconducteur, qui est caractérisée par un paramètre noté (g) mesurant le nombre de porteurs créés par unité de volume et par unité de temps ($\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$).

Ce paramètre résulte de la contribution de deux types de génération de porteurs. Il existe d'une part les générations spontanées des porteurs, dues à l'agitation thermique, que l'on caractérise par un paramètre g_{th} appelé taux de génération thermique, et il existe d'autre part, les générations qui induisent des porteurs résultant :

- 1) d'une excitation optique (G_{opt}) : génération de paires électron-trou par absorption directe ou indirecte de photons.
- 2) d'une irradiation par des particules ionisantes.
- 3) d'un champ électrique intense.
- 4) d'une injection électrique.

I-4) LA RECOMBINAISON [2][3][5]:

Ce processus est caractérisé par un paramètre mesurant le nombre de porteurs qui disparaissent par unité de volume et par unité de temps r ($\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$).

La recombinaison se réalise lorsque l'électron passe de la bande de valence vers la bande de conduction qui s'accompagne de la disparition des paires électrons-trous où la loi de conservation d'énergie est respectée.

Si E' est l'énergie de l'électron et E son énergie après recombinaison on aura

$$E' = E + \Delta E$$

Avec ΔE l'énergie résultante après la recombinaison, à partir de laquelle on peut distinguer le type de recombinaison.

I-4-1) La recombinaison photonique :

Si l'énergie résultante de la recombinaison directe est un quantum radiatif ceci est appelé recombinaison photonique, sinon cette énergie peut être délivrée au réseau accompagnée d'une création de phonons.

I-4-2) La recombinaison Auger :

Par exemple la recombinaison d'une paire électron-trou s'accompagne pour un électron de la bande de conduction par l'absorption d'un rayonnement d'énergie $h\nu = E_g$. Cet électron saute sur un état d'énergie $E_2 = E_1 + h\nu$.

La variation du nombre de porteurs par unité de volume et unité de temps, due aux processus de génération – recombinaison, s'écrit :

$$g' - r' = g + g_{th} - r' \quad (I-3)$$

Le paramètre r' est fonction des processus qui dans le semi-conducteur, régissent la recombinaison des porteurs excédentaires. C'est un paramètre qui est propre au matériau. g est fonction de l'excitation éventuelle du matériau tandis que g_{th} est spécifique au matériau.

On pose :

$$r = r' - g_{th} \quad (I-4)$$

Où r représente le bilan entre les recombinaisons et générations thermiques des porteurs.

Ainsi, la variation des porteurs est définie comme suit

$$\left(\frac{dn}{dt} \right) = g - r.$$

(I-5)

La recombinaison d'un électron avec un trou dans le semiconducteur, peut se produire soit directement par la rencontre de deux particules, soit indirectement par l'intermédiaire d'une impureté qui joue en quelque sorte le rôle d'agent de liaison.

I-4-3) La recombinaison directe électron -trou :

Le nombre de recombinaisons directes électron - trou est proportionnel d'une part au nombre d'électrons et d'autre part au nombre de trous. De plus, le nombre d'électrons qui se recombinent est égal, et pour cause, au nombre de trous qui se recombinent, soit :

$$r'_n = r'_p = r' = k.n.p \quad (\text{I-6})$$

Le taux de recombinaison s'écrit donc :

$$r_n = r_p = r' - g_{th} = k.n.p - g_{th} \quad (\text{I-7})$$

A l'équilibre thermodynamique, c'est à dire en l'absence de toute excitation extérieure, $n=n_o$, $p=p_o$ et $r=0$, ainsi

$$\begin{aligned} r = 0 \Rightarrow k.n_o.p_o - g_{th} = 0 \Rightarrow g_{th} &= k.n_i^2 \\ \Rightarrow r &= k.(np - n_i^2) \end{aligned} \quad (\text{I-8})$$

En régime hors équilibre $n=n_o+\Delta n$, $p=p_o+\Delta p$, et en raison de la neutralité électrique $\Delta n=\Delta p$

On aura ainsi :

$$r = k.[(n_o + \Delta n).(p_o + \Delta p) - n_i^2]$$

$$r = k.(n_o + p_o + \Delta n).\Delta n = k.(n_o + p_o + \Delta p).\Delta p$$

Soit en posant

$$\tau_n = \frac{1}{k.(n_0 + p_0 + \Delta n)} \quad \text{et} \quad \tau_p = \frac{1}{k.(n_0 + p_0 + \Delta p)} \quad (\text{I-9})$$

On aura

$$r = \frac{\Delta n}{\tau_n} = \frac{\Delta p}{\tau_p} \quad (\text{I-10})$$

Avec τ la durée de vie des porteurs dans le semiconducteur, qui ne représente pas un paramètre spécifique car il est fonction de l'excitation Δn et Δp

La durée de vie des porteurs excédentaires n'est pas une constante du matériau car elle dépend de l'excitation extérieure par le terme Δn , elle représente la durée moyenne d'existence d'un électron de conduction

Dans les semiconducteurs à bandes interdites directes, la recombinaison bande à bande est prédominante, de plus elle s'effectue avec l'émission de photons ce qui explique l'utilisation de ce type de matériau pour la réalisation de composants photoémissifs.

La recombinaison directe est un processus rare, pour les semiconducteurs à bandes interdites indirectes (Ge, Si, Gap), les durées de vie qui en découlent s'échelonnent entre 10^{-3} et 10^{-9} s, Ce sont les recombinaisons assistées qui expliquent les valeurs mesurées.

I-4-4) La recombinaison assistée par des centres de recombinaison :

Lorsque le semi-conducteur est peu dopé, les densités de porteurs libres sont faibles de sorte que la probabilité pour qu'un électron et un trou se rencontrent (recombinaison bande à bande) est faible : La présence d'impuretés comme les défauts jouent un rôle important dans le processus de recombinaison car elles peuvent attirer un électron et un trou qui vont se recombiner.

Aux impuretés ou aux défauts du cristal sont associés des niveaux d'énergie situés dans la bande interdite.

Les différents types de transition des porteurs ont lieu entre un de ces niveaux et les bandes de conduction ou de valence. Les probabilités de ces transitions dépendent des différences en énergie entre les bandes et l'énergie du centre. On peut alors distinguer deux types de centres :

♣ Un centre recombinant :

Si le centre qui a capturé un électron présente ensuite une probabilité de capturer un trou, plus grande que celle de réémettre cet électron vers la bande de conduction, ce centre est appelé centre recombinant.

♣ Un centre piège :

Par contre si le centre qui a capturé un électron présente une plus grande probabilité de réémettre cet électron vers la bande de conduction que de capturer un trou, il piège momentanément un électron, ce centre porte alors le nom de centre de pièges à électron (il existe aussi ceux à trou).

I-5) CONDUCTION EN PRESENCE D'UN CENTRE

RECOMBINANT:

Les pièges à électrons, ou à trous, jouent un rôle important sur le courant dans le semiconducteur, dans la mesure où ils diminuent momentanément la densité de porteurs libres, mais ne jouent pas de rôle spécifique dans la recombinaison des porteurs. Nous considérons ici les centres de recombinaison. Le calcul du taux de recombinaison associé à ces centres fait l'objet de la théorie de Schokley Read [2][3][6].

Soit N_r la densité de centres de recombinaison et E_R le niveau d'énergie qu'ils introduisent dans le gap avec deux états de charge, Neutre s'il est vide et négativement chargé s'il est occupé. Entre ce centre et les bandes de conduction et de valence, il existe quatre types de transitions comme il est montré sur la figure suivante :

- 1- Capture d'un électron de la bande de conduction sur le centre recombinant $E_R(R_n)$.
- 2- Capture d'un trou de la bande de valence sur le centre recombinant $E_R(R_p)$.
- 3- Réémission d'un électron capturé sur E_R , dans la bande de conduction (G_n)
- 4- Réémission du trou capturé E_R , dans la bande de valence (G_p)

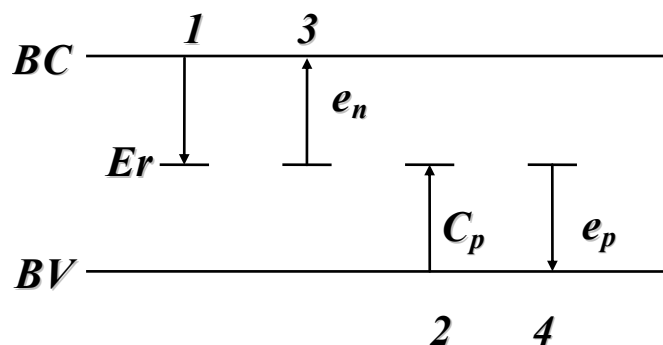


Figure (I-1) mécanisme de génération-recombinaison de Schokley Read

Soit les paramètres suivants :

N_R : Concentration du centre recombinant.

n_r p_r : Concentration des centres négatifs et neutres.

E_R : Niveau d'énergie du centre recombinant.

n et p : Concentration des porteurs libres

n_e et p_e : Concentration des porteurs à l'équilibre

Δn et Δp : Concentration des porteurs en excès.

Les densités des centres occupés (n_{re}), et vides (p_{re}), sont respectivement données par la fonction de fermi, soit :

$$n_{re} = \frac{N_R}{1 + \exp\left(\frac{E_R - E_{Fe}}{K.T}\right)} \quad (I-11)$$

et

$$p_{re} = \frac{N_R}{1 + \exp\left(\frac{E_{Fe} - E_R}{K.T}\right)} \quad (I-12)$$

soit :

$$\frac{p_{re}}{n_{re}} = \exp\left(\frac{E_R - E_{Fe}}{K.T}\right)$$

Dans l'hypothèse d'un semiconducteur non dégénéré, les taux nets de recombinaison d'électrons et de trous sur le centre E_R s'écrivent [7] :

$$\begin{aligned} U_n = R_n - G_n & \Rightarrow U_n = C_n \cdot n \cdot p_r - e_n \cdot n_r \\ U_p = R_p - G_p & \Rightarrow U_p = C_p \cdot p \cdot n_r - e_p \cdot p_r \end{aligned} \quad (I-13)$$

Où C_n, C_p, e_n et e_p sont les coefficients de capture et d'émission des électrons et des trous par le centre.

A l'équilibre thermique ($U_n = U_p = 0$), il en résulte :

$$\frac{e_n}{C_n} = \frac{n_e \cdot p_{re}}{n_{re}} = N_c \cdot \exp \frac{E_c - E_R}{K.T} = n_1$$

$$\frac{e_p}{C_p} = \frac{p_e \cdot n_{re}}{p_{re}} = N_v \cdot \exp \frac{E_R - E_v}{K.T} = p_1$$
(I-14)

Notons que n_1 et p_1 sont les densités d'électrons et de trous respectivement dans la bande de conduction et de valence, lorsque E_F est confondu avec E_R . On aura :

$$U_n = C_n \cdot (n \cdot p_r - n_1 \cdot n_r)$$

$$U_p = C_p \cdot (p \cdot n_r - p_1 \cdot p_r)$$
(I-15)

On obtient ainsi une expression pour U_n et U_p en fonction de n , p .

I-5-1) Régime permanent :

En régime permanent les centres recombinants capturent par seconde autant d'électrons que de trous :

$$\frac{\partial n_r}{\partial t} = U_n - U_p = 0 \quad (\text{I-16})$$

A partir des relations (I-13) on établit les expressions suivantes pour n_r et p_r , tel que :

$$n_r = N_R \cdot \frac{C_n \cdot n + C_p \cdot p_1}{C_n \cdot (n + n_1) + C_p \cdot (p_1 + p)}$$

$$p_r = N_R \cdot \frac{C_p \cdot p + C_n \cdot n_1}{C_n \cdot (n + n_1) + C_p \cdot (p_1 + p)}$$
(I-17)

On introduit en général des durées de vie définies par les relations suivantes :

$$\tau_{ne} = \frac{1}{C_n \cdot N_R}$$

$$\tau_{pe} = \frac{1}{C_p \cdot N_R}$$
(I-18)

On reporte par la suite les valeurs pour n_r et p_r dans U_n (ou U_p) de la relation

(I-13), et on obtient :

$$U = U_n = U_p = \frac{n \cdot p - n_1 \cdot p_1}{\tau_{pe} \cdot (n + n_1) + \tau_{nc} \cdot (p + p_1)} \quad (\text{I-19})$$

U [8] est le taux net de recombinaison pour un mécanisme de Shockley Read. Ce mécanisme est prépondérant pour les semi-conducteurs de type Ge, Si, GaAs tant que les densités de porteurs libres ne sont pas trop élevée ($p \ll 10^{18} \text{ cm}^{-3}$)

I-5-2) Durée de vie en présence de recombinaison assistée [9]

Les centres de recombinaison favorisent la mise en présence d'électrons et de trous, ils influencent fortement la durée de vie de ces porteurs.

Considérons toujours un semiconducteur ayant une densité N_t de centres de recombinaison créant N_t états permis tous à la même énergie E_t située aux environ du milieu de la BI (Modèle Shockley - Hall - Read). La cinétique des centres de recombinaison peut être évaluée, elle mène à l'expression :

$$\tau = D_c \frac{\frac{p + p_1}{A_n} + \frac{n + n_1}{A_p}}{N_t(pn - n_i^2)}$$

Où

avec $n = n_0 + Dc$, $p = p_0 + Dc$

$$n_1 = N_c \cdot \exp - \frac{E_c - E_t}{KT}$$

$$p_1 = N_v \cdot \exp - \frac{E_t - E_v}{KT}$$

Avec :

n_1 (cm^{-3}): densité des électrons qu'il y aurait si le niveau de Fermi était situé au niveau d'énergie des centres de recombinaison : ($E_t = E_F$)

p_1 (cm^{-3}) : densité de trous qu'il y aurait si le niveau de Fermi était situé au niveau d'énergie des centres de recombinaison : ($E_t = E_F$)

A_n : Efficacité des centres de recombinaison pour les électrons ($A_n = S_n v_{thn}$: S_n section de capture des électrons, v_{thn} : vitesse thermique des électrons).

A_p : Efficacité des centres de recombinaison pour les trous ($A_p = S_p v_{thp}$: S_p section de capture des trous, v_{thp} : vitesse thermique des trous).

Dans un semiconducteur N (dopage N_D) en régime de faible injection :

Les conditions : $n_0 = N_D \gg n_1 \cong p_1 \gg D_c \cong p_0$ introduites dans l'expression de la durée de vie donnent :

$$\tau = 1/A_p N_t = 1/(S_p v_{thp} N_t) = \tau_p = \text{durée de vie des porteurs minoritaires positifs.}$$

Dans un semiconducteur P (dopage N_A) en régime de faible injection :

Les conditions : $p_0 = N_A \gg n_1 \cong p_1 \gg D_c \cong n_0$ introduites dans l'expression de la durée de vie donnent :

$$\tau = 1/A_n N_t = 1/(S_n v_{thn} N_t) = \tau_n = \text{durée de vie des porteurs minoritaires négatifs.}$$

I-6) CONDUCTION EN PRESENCE DE DEUX CENTRES

PROFONDS :

C'est le cas du GaAs [10][11][12], semi isolant, dans lequel un centre donneur profond E_T (EL_2) compense un centre accepteur N_A . De nombreux résultats expérimentaux semblent montrer que le mécanisme de recombinaison est contrôlé par un troisième centre appelée centre recombinant E_R [12], situé au voisinage du milieu de la bande interdite comme c'est montré sur le schéma de bande suivant :

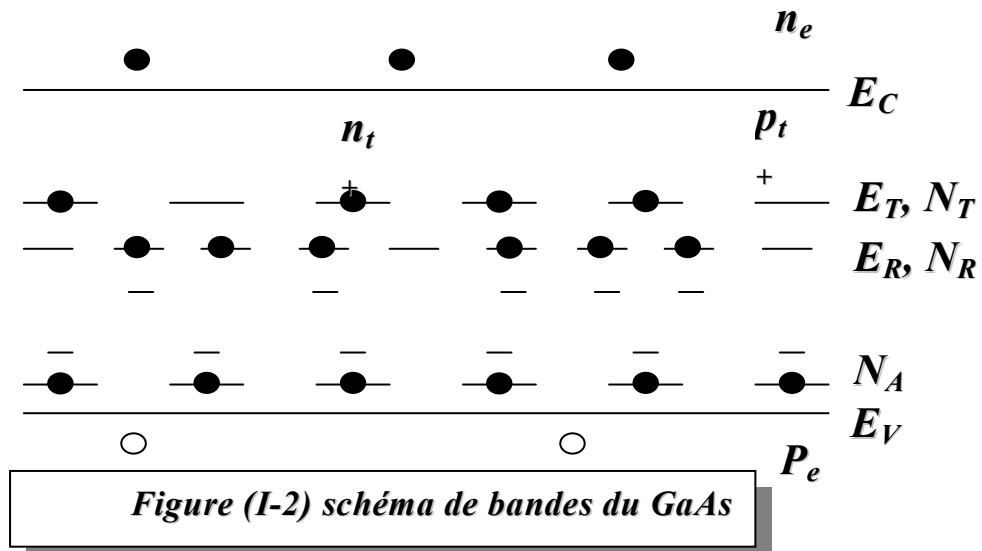


Figure (I-2) schéma de bandes du GaAs

La concentration N_A représente en fait une concentration effective :

$$N_A = N_A - N_D \text{ (Peu profond)}$$

Le système d'équations qui traduit le mécanisme de transport, s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial n}{\partial t} &= \frac{1}{e} \cdot \text{div } \vec{J}_n - U_{nr} - U_{nt} \\
\frac{\partial p}{\partial t} &= -\frac{1}{e} \cdot \text{div } \vec{J}_p - U_{pr} - U_{pt} \\
\frac{\partial n_r}{\partial t} &= U_{nr} - U_{pr} \\
\frac{\partial n_t}{\partial t} &= U_{nt} - U_{pt}
\end{aligned}
\tag{I-20}$$

En supposant un mécanisme d'échange du type Shockley-Read entre les centres profonds N_R (ou N_T) et les bandes, les relations suivantes peuvent être écrites :

$$\begin{aligned}
U_{nr} &= C_n^R [n \cdot p_r - n_{lr} \cdot n_r] \\
U_{nt} &= C_n^T [n \cdot p_t - n_{lt} \cdot n_t] \\
U_{pr} &= C_p^R [p \cdot n_r - p_{lr} \cdot p_r] \\
U_{pt} &= C_p^T [p \cdot n_t - p_{lt} \cdot p_t]
\end{aligned}
\tag{I-21}$$

Dans ces équations, n_r et p_r sont les densités d'électrons et de trous sur le centre recombinant qui est supposé du type accepteur (neutre si le centre est vide et négativement chargé s'il est occupé par un électron). De même, n_t et p_t sont les densités d'électrons et de trous sur le centre profond EL_2 qui est supposé de type donneur.

On a alors :

$$\begin{aligned}
n_r + p_r &= N_R \\
n_t + p_t &= N_T
\end{aligned}
\tag{I-22}$$

Le centre accepteur peu profond est supposé totalement ionisé au voisinage de la température ambiante et on suppose que les concentrations N_r et N_T sont suffisamment faibles pour pouvoir négliger les échanges inter-centres. A l'équilibre thermique ($U=0$), nous avons pour chaque centre, les relations suivantes :

$$n_l = \frac{e_n}{C_n} p_l = \frac{e_p}{C_p}
\tag{I-23}$$

Soit

$$\begin{aligned}
 n_{lr} &= \frac{n_e \cdot p_{re}}{n_{re}} & p_{lr} &= \frac{p_e \cdot n_{re}}{p_{re}} \\
 n_{lt} &= \frac{n_e \cdot p_{te}}{n_{te}} & p_{lt} &= \frac{p_e \cdot n_{te}}{p_{te}}
 \end{aligned}
 \tag{I-24}$$

Nous avons également :

$$\begin{aligned}
 \tau_{nre} &= \frac{1}{C_n^R \cdot N_R} & \tau_{pre} &= \frac{1}{C_p^R \cdot N_R} \\
 \tau_{nte} &= \frac{1}{C_n^T \cdot N_T} & \tau_{pte} &= \frac{1}{C_p^T \cdot N_T}
 \end{aligned}
 \tag{I-25}$$

L'interprétation des phénomènes de conduction nous amène à résoudre les équations de base dont leur résolution est très complexe. Ceci nous a conduit à considérer le semi-conducteur non dégénéré sous température uniforme.

I-7) EQUATIONS DE BASE DES SEMICONDUCTEURS :

I-7-1) Equations électrostatiques :

L'équation de Poisson [3][5][13] permet de relier le potentiel électrostatique ψ à la densité formée par les charges dues aux porteurs libres et aux impuretés (supposées totalement ionisées)

$$\text{div}(\varepsilon \text{grad}\psi) = -\rho \tag{I-26}$$

Pour les semi-conducteurs supposés homogènes, c'est à dire pour une permittivité ε indépendante de la position, on obtient l'équation de Poisson sous la forme :

$$\varepsilon \cdot \text{div}(\text{grad}\psi) = -\rho \tag{I-27}$$

Où $\varepsilon = \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_r$ La permittivité diélectrique du semi-conducteur.

ϵ_0 : La permittivité de vide

ϵ_r : La permittivité relative au semi-conducteur

ρ : La densité de charges libres qui s'écrira dans le cas général :

$$\rho = q.(p - n + N_D^+ - N_A^- - n_r) \quad (\text{I-28})$$

ψ : Le potentiel électrostatique

e : La charge élémentaire $= 1.6.10^{-19}$ C

p et n : les densités de trous libres et d'électrons libres

N_D^+ et N_A^- : les densités de donneurs et d'accepteurs ionisés

n_r : La charge piégée sur un centre profond .Dans le cas où il existe n centres profonds

on remplace n_r par $\sum_{i=1}^n n_{ri}$

I-7-2) Equations de transport:

Les courants d'électrons et de trous sont la somme de leurs composantes de conduction et de diffusion tel que:

$$\vec{j}_n(x, y, z) = q.\mu_n.n(x, y, z).\vec{E} + q.D_n.\vec{\nabla}n(x, y, z) \quad (\text{I-29})$$

$$\vec{j}_p(x, y, z) = q.\mu_p.p(x, y, z).\vec{E} - q.D_p.\vec{\nabla}p(x, y, z)$$

Avec:

$j_n(x,y)$ et $j_p(x,y)$: vecteurs densités de courant respectifs des électrons et des trous

μ_n et μ_p : mobilités des électrons et des trous.

D_n et D_p : constantes de diffusion des électrons et des trous.

I-7-3) Relation d'Einstein :

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{K.T}{q} \quad \text{et} \quad \frac{D_p}{\mu_p} = \frac{K.T}{q} \quad (\text{I-30})$$

Avec :

K : constante de BOLTZMANN

T : température absolue.

μ_n et μ_p : mobilités des électrons et des trous.

D_n et D_p : constantes de diffusion des électrons et des trous.

I-7-4) Equations de continuité:

Les équations de continuité [3][14] expriment la conservation des porteurs dans un élément de volume.

$$\begin{aligned}\frac{\partial n}{\partial t} &= \frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{j}_n - U_n + G_{\text{opt}} \\ \frac{\partial p}{\partial t} &= -\frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{j}_p - U_p + G_{\text{opt}}\end{aligned}\quad (\text{I-31})$$

où U_n et U_p représentent respectivement les taux nets de transfert d'électrons sur le centre E_R en provenance de la bande de conduction, et de trous vers la bande de valence en provenance de E_R .

G_{opt} permet de prendre en compte la génération optique bande à bande.

I-8) REPRESENTATION TRIDIMENSIONNELLE DES EQUATIONS PHYSIQUES [13][15]:

Dans le cas stationnaire et pour l'analyse d'une structure homogène à trois dimensions, les équations de base (Poisson et continuité) prennent la forme suivante :

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{q}{\epsilon} (n - p - \text{dop} - n_r), \\ \frac{1}{q} \left(\frac{\partial j_n}{\partial x} + \frac{\partial j_n}{\partial y} + \frac{\partial j_n}{\partial z} \right) = U \\ \frac{1}{q} \left(\frac{\partial j_p}{\partial x} + \frac{\partial j_p}{\partial y} + \frac{\partial j_p}{\partial z} \right) = -U \end{cases} \quad (\text{I-32})$$

Avec :

$$\begin{aligned} j_n &= q.n.\mu_n \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial y} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) + q.D_n \left(\frac{\partial n}{\partial x} + \frac{\partial n}{\partial y} + \frac{\partial n}{\partial z} \right) \\ j_p &= q.p.\mu_p \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial y} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) - q.D_p \left(\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (I-33)$$

Tel que :

μ_n et μ_p soient indépendantes de la position ainsi que du champ électrique et que la relation d'Einstein reste valable.

I-9) CONCLUSION :

Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressés à décrire les phénomènes qui régissent le comportement des semi-conducteurs en présence de centres profonds, ainsi que leur traduction physique via les équations de base, qui ne peuvent être résolues analytiquement, ainsi un calcul numérique s'impose et devient nécessaire.

Dans le deuxième chapitre nous présenterons les méthodes numériques destinées à la résolution de ces équations.

Références bibliographiques

[1] W. Van Roosbroeck and H. C. Casey, Jr.

Phys. Rev. B 5, 2154 (1972) – Published 15 March 1972

[2] H.Mathieu

Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques

Deuxième édition, Masson 1990

[3] A.Saidane

Physique des semi-conducteurs

Office des publications universitaire (1993)

[4] B.K. Jones, J. Santana and M. McPherson

Ohmic I-V characteristics in semi insulating semiconductor diodes.

Solid State Communications, Vol. 105. No. 9, pp. 547-549, 1998

[5] S. M. Sze

Physics of semiconductor devices

2nd edition, Willey and sous ED new york, (1981).

[6] W.Shokley, W.T.Read

Statics of the recombinaisons of holes and electrons

Physical review vol 67,(september 1952).

[7] R.Ardebili

Etude par simulation numérique du transport dans les semiconducteurs en présence de centres profonds

Centre d'électronique de Montpellier (laboratoire associé au C.N.R.S ;U A 391)

[8] J.C. Manificier

Theoretical and numerical investigations of carriers transport in
N-semi-insulating-N and P-semi-insulating-P diodes – A new approach
Solid-State Electronics 52 (2008) 1162–1169 (2008)

[9] www.polytech-lille.fr/cours-atome-circuit-integre/phys/sc650.htm

[10] R.K.cook

Numerical simulation of hot carrier transport in silicon bipolar transistors.
IEE transaction on electron devices, vol .ED-30, n9 pp1103-1110,september 1983

[11] Y.Moreau, J.c Manificier and H.K.Henisch

Minority carrier injection into relaxation semiconductor
J.Appl.Phys.60 :2904, (1986).

[12] C.S.Rafferty,M.R.Pinto and W.Dutton.

Iterative methods in semiconductors device simulation
IEEE transaction on electron devices, vol .ED-32, n10, pp2018-2027 (october 1985)

[13] R.Menezla

CLAC 3D : programme de résolution tridimensionnelle de l'équation de poisson
Thèse de doctorat, école centrale de Lyon, N 85-05, (1985).

[14] A.Yoshi,M.Tomizawa and K.Yokoyama

Investigation of numerical algorithms in semiconductors device simulation
solid state electronics ,vol.30 n8 pp 813-820 (1987).

[15] J-D Chatelin

Dispositifs of semiconductor
Edition georgi 1979

Chapitre II

MODELES NUMERIQUES

II-1) INTRODUCTION :

Ce deuxième chapitre est destiné à présenter les méthodes numériques utilisées, ainsi que leurs algorithmes respectifs.

Après un petit rappel des équations fondamentales finales obtenues après discrétisation, nous présenterons d'une façon générale l'algorithme de Gummel (ou méthode découplée), et d'une façon plus détaillée l'algorithme de Newton (ou méthode couplée), suivit du calcul des éléments de la matrice jacobienne.

II-2) NORMALISATION DES EQUATIONS PHYSIQUES [1][2]:

Les densités des porteurs n et p varient généralement sur une très grande plage (10^{-3} - 10^{23} cm^{-3}), ce qui rend difficile leur évaluation précise par un calcul numérique sur ordinateur. Un changement de variable bien adapté (normalisation) permet d'améliorer la précision de calcul.

Le tableau suivant donne les unités et les différents paramètres de normalisation que nous avons utilisé :

Variables physiques	Unités	Variables normalisées	Paramètres de normalisation
x, y, z	μm	X, Y, Z	$L_D = \sqrt{\frac{\epsilon \cdot KT}{n_i \cdot q^2}}$
Ψ	Volt	ψ	KT/q
n, p, N_a, N_d, n_1, p_1	cm^{-3}	$N, P, N_A, N_D, N_1,$ P_1	n_i
μ_n, μ_p	$\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	μ_n, μ_p	μ_n
J_n, J_p	A/cm^2	J_n, J_p	$n_i \cdot \mu_n \cdot KT/L_D$
U	$\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$	U	$\frac{\mu_n \cdot KT \cdot n_i}{q \cdot L_D^2}$
τ_n, τ_p	sec	τ_n, τ_p	$\frac{\epsilon}{n_i \cdot \mu_n \cdot q}$

Tableau II-1 Variables physiques et variables normalisées

II-3) DISCRETISATION DE L'EQUATION DE POISSON :

Deux techniques sont utilisés pour la discrétisation des équations aux dérivées partielles, la méthode de différences finis et la deuxième des éléments finis, le choix de l'une ou de l'autre de ces méthodes ne peut pas être justifié mathématiquement, il est basé essentiellement sur la complexité de la géométrie à étudier, quand la structure étudiée est à géométrie non rectangulaire la technique des éléments finis est la mieux adaptée, quand la structure à étudié est à géométrie rectangulaire, sa représentation est une grille rectangulaire et dans ce cas la technique des différences finis est la mieux approprié.

Soit l'équation à discrétiser au point (i,j,l) [3][4] :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial Z^2} = N - P - \text{dop} - n_r \quad (\text{II-1})$$

$$\text{dop} = N_D - N_A$$

La variable ψ est supposé linéaire entre deux points successifs, le nombre de droite de l'équation de poisson permet d'écrire, en utilisant un schéma centré aux différences sur l'axe x :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = \frac{\frac{\partial \psi}{\partial x_{i+\frac{1}{2},j,l}} - \frac{\partial \psi}{\partial x_{i-\frac{1}{2},j,l}}}{x_{i+\frac{1}{2},j,l} - x_{i-\frac{1}{2},j,l}}$$

$$\text{Où } x_{i+\frac{1}{2}} = x_i + \frac{h_i}{2} \quad x_{i-\frac{1}{2}} = x_i - \frac{h_i}{2}$$

Avec

$$\frac{\partial \psi_{i,j,l}}{\partial x_{i+\frac{1}{2}}} = \frac{\psi_{i+1,j,l} - \psi_{i,j,l}}{h_i} \quad \text{et} \quad \frac{\partial \psi_{i,j,l}}{\partial x_{i-\frac{1}{2}}} = \frac{\psi_{i,j,l} - \psi_{i-1,j,l}}{h_{i-1}}$$

$$\text{Avec } h_i = x_{i+1} - x_i$$

Après discrétisation, l'équation de Poisson en version tridimensionnelle s'écrit :

$$\begin{aligned} F_\psi = & A_{i+1,j,l} \cdot (\psi_{i+1,j,l} - \psi_{i,j,l}) + A_{i-1,j,l} \cdot (\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l}) + \\ & A_{i,j+1,l} \cdot (\psi_{i,j+1,l} - \psi_{i,j,l}) + A_{i,j-1,l} \cdot (\psi_{i,j-1,l} - \psi_{i,j,l}) + \\ & A_{i,j,l+1} \cdot (\psi_{i,j,l+1} - \psi_{i,j,l}) + A_{i,j,l-1} \cdot (\psi_{i,j,l-1} - \psi_{i,j,l}) + \rho_{i,j,l} = 0 \end{aligned} \quad (\text{II-2})$$

Où $\rho_{i,j,l}$ désigne la densité de charge, qui

S'exprime en fonction des valeurs des inconnues au point (i, j, l) .

$$-\rho_{i,j,l} = N_{i,j,l} - P_{i,j,l} - (N_D - N_A)_{i,j,l} + n_r \quad (\text{II-3})$$

L'expression de l'équation de Poisson discrétisée s'écrit alors :

$$\begin{aligned} & -\text{coef}_{i,j,l} \cdot \delta\psi_{i,j,l} + A_{i+1,j,l} \cdot \delta\psi_{i+1,j,l} + A_{i-1,j,l} \cdot \delta\psi_{i-1,j,l} + A_{i,j+1,l} \cdot \delta\psi_{i,j+1,l} + A_{i,j-1,l} \cdot \delta\psi_{i,j-1,l} \\ & + A_{i,j,l+1} \cdot \delta\psi_{i,j,l+1} + A_{i,j,l-1} \cdot \delta\psi_{i,j,l-1} = b_{i,j,l} \end{aligned} \quad (\text{II-4})$$

Où les coefficients A et B sont donnés en annexe B.

II-4) DISCRETISATION DES EQUATIONS DE CONTINUTE :

D'après la formule (I-32) on a

$$\begin{cases} \frac{1}{q} \left(\frac{\partial j_n}{\partial x} + \frac{\partial j_n}{\partial y} + \frac{\partial j_n}{\partial z} \right) = U \\ \frac{1}{q} \left(\frac{\partial j_p}{\partial x} + \frac{\partial j_p}{\partial y} + \frac{\partial j_p}{\partial z} \right) = -U \end{cases}$$

Le membre de gauche est évalué par les différences centrées au point (i,j,l) , le nombre de droite de l'équation de continuité représente les termes de génération-recombinaison. Pour le mécanisme, proposé par Schokley-Read considérée ici, l'expression normalisée est :

$$U = \frac{NP - 1}{\tau_{nr}(\mathbf{p} + \mathbf{p}_1) + \tau_{pr}(\mathbf{n} + \mathbf{n}_1)}$$

L'équation (I-32) devient

$$\begin{aligned} F_n = & (j_{n(i+\frac{1}{2}),j,l} - j_{n(i-\frac{1}{2}),j,l}) / \left(\frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{2} \right) + (j_{n(i+\frac{1}{2}),j,l} - j_{n(i,j-\frac{1}{2}),l}) / \left(\frac{y_{j+1} - y_{j-1}}{2} \right) \\ & + (j_{n(i,j,l+\frac{1}{2})} - j_{n(i,j,l-\frac{1}{2})}) / \left(\frac{z_{l+1} - z_{l-1}}{2} \right) - U_{i,j,l} = 0 \end{aligned}$$

$$F_p = (J_{p(i+\frac{1}{2}),j,l} - J_{p(i-\frac{1}{2}),j,l}) / (\frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{2}) + (J_{p(i+\frac{1}{2}),j,l} - J_{p(i,j-\frac{1}{2}),l}) / (\frac{y_{j+1} - y_{j-1}}{2}) \\ + (J_{p(i,j,l+\frac{1}{2})} - J_{p(i,j,l-\frac{1}{2})}) / (\frac{z_{l+1} - z_{l-1}}{2}) - U_{i,j,l} = 0$$

L'équation tridimensionnelle de continuité des électrons sous sa forme discrétisée s'écrit [5][6]:

$$F_n = \mu_n \cdot [\alpha_{i-1,j,l} \cdot N_{i-1,j,l} - (\alpha_{i,j,l} + \alpha_{i-1,j,l} \cdot \exp(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})) \cdot N_{i,j,l} + \alpha_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l}) \cdot N_{i+1,j,l}] \\ \frac{1}{X_{i+1,j,l} - X_{i,j,l}} + \mu_n \cdot [\beta_{i,j,l-1} \cdot N_{i,j,l-1} - (\beta_{i,j,l} + \beta_{i,j,l-1} \cdot \exp(\psi_{i,j,l-1} - \psi_{i,j,l})) \cdot N_{i,j,l} + \beta_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j,l+1}) \cdot N_{i,j,l+1}] \\ \cdot \frac{1}{Y_{i,j,l+1} - Y_{i,j,l}} + \mu_n \cdot [\gamma_{i,j,l-1} \cdot N_{i,j,l-1} - (\gamma_{i,j,l} + \gamma_{i,j,l-1} \cdot \exp(\psi_{i,j,l-1} - \psi_{i,j,l})) \cdot N_{i,j,l} + \gamma_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j,l+1}) \cdot N_{i,j,l+1}] \\ \frac{1}{Z_{i,j,l+1} - Z_{i,j,l}} - \frac{N_{i,j,l} \cdot P_{i,j,l} - 1}{\tau_n \cdot (P_{i,j,l} + P_1) + \tau_p \cdot (N_{i,j,l} + N_1)} = 0 \quad (II-5)$$

Notons qu'il est possible d'obtenir l'équation de continuité des trous (II-6), en remplaçant dans l'équation de continuité des électrons (II-5), N par P, et μ_n par μ_p , tels que :

$$F_p = \mu_p \cdot [-\alpha_{i-1,j,l} \cdot \exp(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l}) \cdot P_{i-1,j,l} + (\alpha_{i-1,j,l} + \alpha_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})) \cdot P_{i,j,l} - \alpha_{i,j,l} \cdot P_{i+1,j,l}] \\ \cdot \frac{1}{X_{i+1,j,l} - X_{i,j,l}} + \mu_p \cdot [-\beta_{i,j,l-1} \cdot \exp(\psi_{i,j,l-1} - \psi_{i,j,l}) \cdot P_{i,j,l-1} + (\beta_{i,j,l-1} + \beta_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j,l+1})) \cdot P_{i,j,l} - \\ \beta_{i,j,l} \cdot P_{i,j,l+1}] \cdot \frac{1}{Y_{i,j,l+1} - Y_{i,j,l}} + \mu_p \cdot [-\gamma_{i,j,l-1} \cdot \exp(\psi_{i,j,l-1} - \psi_{i,j,l}) \cdot P_{i,j,l-1} + (\gamma_{i,j,l-1} + \gamma_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j,l+1})) \\ \cdot P_{i,j,l} - \gamma_{i,j,l} \cdot P_{i,j,l+1}] \cdot \frac{1}{Z_{i,j,l+1} - Z_{i,j,l}} + \frac{N_{i,j,l} \cdot P_{i,j,l} - 1}{\tau_n \cdot (P_{i,j,l} + P_1) + \tau_p \cdot (N_{i,j,l} + N_1)} = 0 \quad (II-6)$$

Où les coefficients $\alpha_{i,j,l}$, $\beta_{i,j,l}$ et $\gamma_{i,j,l}$ sont donnés à la fin de l'annexe B

Après discrétisation, on aboutit à trois systèmes d'équations à 3 inconnues F_ψ , F_n et F_p . En général la recherche de la solution de ce système reste l'étape la plus difficile et la plus délicate.

Rappelons que les principaux algorithmes de résolution numérique sont l'algorithme de Gummel et celui de Newton.

II-5) MAILLAGE :

Dans le souci de résoudre le problème de capacité mémoire, nous avons essayé plusieurs techniques de discrétisation.

II-5-1) Maillage à pas constant [5][6]:

Cette méthode consiste à prendre un pas uniforme dans toute la structure, ce qui nous aide à simplifier les calculs, et donner de bons résultats si les dimensions de la structure sont assez petites. Par contre, si les dimensions sont élevées cela nécessite un nombre élevé de points d'où un temps de calcul important.

II-5-2) Maillage à pas variable :

Cette méthode est la mieux adaptée surtout pour des structures à dimensions relativement grandes. Il existe cependant plusieurs façons de calculer le pas :

II-5-2-1) Utilisation du calcul analytique [7]:

D'après la formule qui exprime le champ électrique, on a :

$$E(X) = -\frac{qN_d}{\epsilon_{sc}}(X - W) = -\frac{d\psi}{dX} \quad (\text{II-7})$$

avec w : la largeur de la zone de charge d'espace

Le pas entre deux nœuds successifs $\Delta\psi_i$ peut être calculé par l'expression :

$$\Delta\psi_i = \psi_i - \psi_{i-1} = \frac{qN_d}{\epsilon_{sc}} \left[w(x_i - x_{i-1}) - \frac{x_i^2 - x_{i-1}^2}{2} \right] \quad (\text{II-8})$$

En calculant donc au préalable w et en fixant le $\Delta\psi$ nous pouvons extraire les pas dans la zone de charge d'espace. En ce qui concerne les parties neutres, nous pouvons soit prendre un pas constant, soit le calculer par une série géométrique.

II-5-2-2) Procédure de calcul par une série géométrique [4] [5]:

Cette méthode permet d'établir à partir de l'application d'un calcul basé sur une série géométrique de raison a , un maillage variable. Ce type de maillage peut être grossier dans les régions neutres et serré dans les régions voisines de l'interface P^+v (Figure II-1).

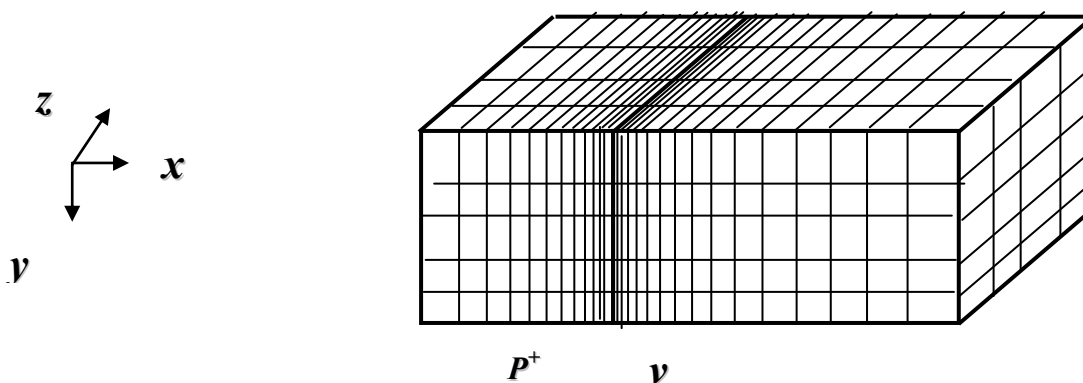


Figure (II-1) maillage à pas variable

II-6) ALGORITHMES NUMERIQUES [8][9] :**II-6-1) Méthode de Gummel :**

Cette méthode développée historiquement par H.K.Gummel pour résoudre les équations de base des semi-conducteurs sur une dimension, et très souvent référencée par la méthode découplée [5] [10] [11].

La méthode de Gummel consiste en une résolution successive des trois systèmes couplés de N équations à N inconnues [12]. Chaque système d'équations est voué à déterminer la valeur d'un seul type d'inconnue. Par exemple l'équation de Poisson fournit les valeurs des potentiels ψ sur la base des concentrations N et P.

Le principe général de la méthode de Gummel est le suivant :

A partir d'une solution initiale estimée (ψ^0, N^0, P^0) , l'équation $F_{\psi}(\psi, N, P) = 0$ d'inconnue ψ est résolue en premier. Les valeurs de ψ ainsi déterminées seront reportées dans les systèmes d'équations F_n et F_p . L'équation $F_n(\psi, N, P) = 0$ est ainsi mise à jour et résolue à son tour pour l'inconnue N. Ce processus de mise à jour et de résolution est répété par alternance pour F_p, F_n, F_{ψ} jusqu'à convergence complète du système. L'algorithme de Gummel est représenté par l'organigramme de la Figure (II-2):

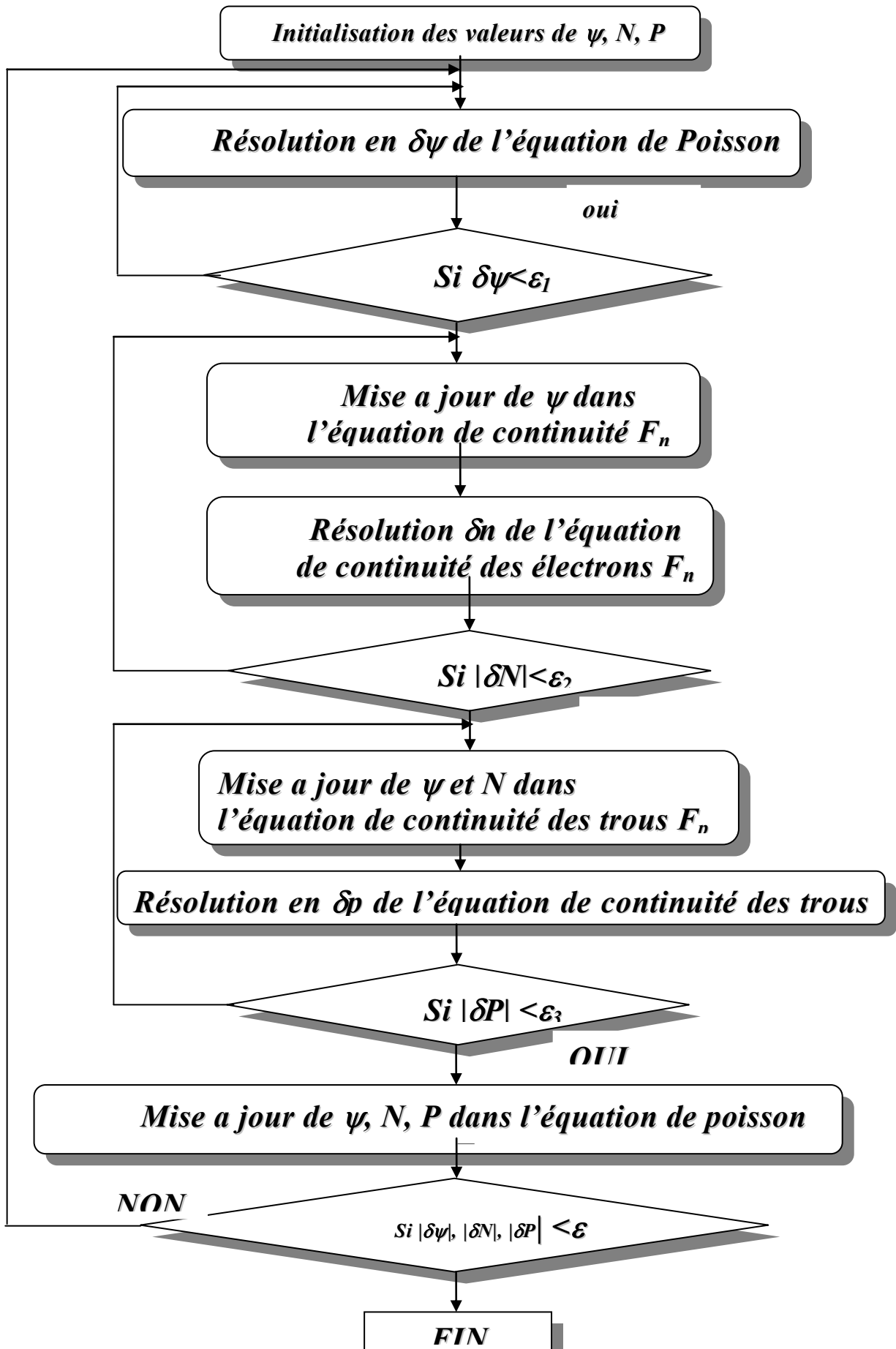


Figure (II-2) Organigramme de la méthode de GUMMEL

II-6-2) Méthode de Newton - Raphson [13] :

La méthode de Newton - Raphson consiste à effectuer à partir d'un point initial (approximation de la solution) un développement en série de Taylor limité d'ordre un, pour chacune des équations du système non linéaire.

La résolution du système linéaire obtenu permet d'aboutir à une nouvelle approximation de la solution.

II-6-2-1) principes [14]:

Notons $\mathbf{X}^* = [x_1^*, x_2^*, x_3^*, \dots, x_n^*]^t$ le vecteur solution du système non linéaire : $f_i(\mathbf{X}) = 0$

Avec $i=1, 2, \dots, n$.

Si chaque fonction f_i est continue et continuellement différentiable, alors par développement en série de Taylor dans le voisinage d'un estimé $\mathbf{X}^{(k)}$ proche de \mathbf{X}^* (obtenu à la K-ième itération), on obtient :

$$f_i(\mathbf{X}^*) = f_i(\mathbf{X}^{(k)} + (\mathbf{X}^* - \mathbf{X}^{(k)})) = f_i(\mathbf{X}^{(k)}) + \sum_{j=1}^n \left. \frac{\partial f_i(\mathbf{X})}{\partial x_j} \right|_{\mathbf{X}=\mathbf{X}^{(k)}} (\mathbf{X}_j^* - \mathbf{X}_j^{(k)}) + \frac{1}{2!} \sum_{j=1}^n \sum_{r=1}^n (\mathbf{X}_j^* - \mathbf{X}_j^{(k)}) (\mathbf{X}_r^* - \mathbf{X}_r^{(k)}) \left. \frac{\partial^2 f_i(\mathbf{X})}{\partial x_j \partial x_r} \right|_{\mathbf{X}=\mathbf{X}^{(k)}} + \dots = 0 \quad (\text{II-9})$$

Pour $i=1, \dots, n$.

Si $\mathbf{X}^{(k)}$ est un estimé proche de \mathbf{X}^* , les éléments $(\mathbf{X}_i^* - \mathbf{X}_i^{(k)})^2$ sont négligeables, ainsi que les termes de degré supérieur. Le système (1) s'écrit donc :

$$\sum_{j=1}^n \left. \frac{\partial f_i(\mathbf{X})}{\partial x_j} \right|_{\mathbf{X}=\mathbf{X}^{(k)}} (\mathbf{x}_j^* - \mathbf{x}_j^{(k)}) = -f_i(\mathbf{X}^{(k)}) \quad (\text{II-10})$$

Définissons la matrice $E^{(k)}$ des dérivées premières telles que :

$$E_{ij}^{(k)} = \left. \frac{\partial f_i(\mathbf{X})}{\partial x_j} \right|_{\mathbf{X}=\mathbf{X}^{(k)}} \quad \begin{array}{l} i = 1, 2, \dots, n \\ j = 1, 2, \dots, n \end{array} \quad (\text{II-11})$$

Le vecteur d'erreur $\Delta X^{(k)}$ par :

$$\Delta X_j^{(k)} = X_j^* - X_j^{(k)} \quad (\text{II-12})$$

Puis le vecteur $F^{(k)}$ par :

$$F_i^{(k)} = -f_i(\mathbf{X}^{(k)}) \quad (\text{II-13})$$

Alors la relation (II-10) s'écrit :

$$E^{(k)} \cdot \Delta X = F^{(k)} \quad (\text{II-14})$$

Dans ce système d'équations linéaires toutes les quantités sont connues hormis les $\Delta X^{(k)}$, les méthodes classiques de résolution des systèmes linéaires sont applicables pour leur détermination [7].

Par ailleurs si $\Delta X^{(k)}$ est un estimé de l'erreur commise en approximant X^* par $X^{(k)}$.

On peut donc obtenir un meilleur estimé $X^{(k+1)}$ de X^* en écrivant :

$$X^{(k+1)} = X^{(k)} + \Delta X^{(k)}$$

Les itérations s'arrêtent lorsque :

$$|X^* - X^{(k)}| \rightarrow 0$$

II-6-2-2) Algorithme de Newton pour la résolution du système non linéaire $f(x)=0$ [7]:

Etant donnés $X^{(0)}$, ε_1 , ε_2 et K_{\max} , respectivement l'estimé initial, les précisions fixées et le nombre d'itérations maximal. L'algorithme de Newton (Figure II-3) peut être résumé comme suit :

1-calculer

$$\left. \begin{aligned} E_{ij} &= \left. \frac{\partial f_i(\mathbf{X})}{\partial x_j} \right|_{\mathbf{X}=\mathbf{X}^{(K)}} \Bigg\} j = 1, n \\ F_i^{(K)} &= -f_i(\mathbf{X}^{(K)}) \Bigg\} i = 1, n \end{aligned} \right\}$$

2-Résoudre le système linéaire :

$$\sum_{j=1}^n E_{ij}^{(K)} \Delta X_j^{(K)} = F_i^{(K)} \Bigg\} i = 1, n$$

3-Déterminer

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(K)} + \lambda^{(K)} \Delta X_i^{(K)} \Bigg\} i = 1, n$$

avec $0 < \lambda < 1$

$$\text{tel que } \|f(\mathbf{X}^{(K+1)})\| < \|f(\mathbf{X}^{(K)})\|$$

4 – Si l'un des tests :

$$|x_i^{(K+1)} - x_i^{(K)}| < \varepsilon_1$$

$$|x_i^{(K+1)} - x_i^{(K)}| / |x_i^{(K+1)}| < \varepsilon_1$$

$$K > K_{\max}$$

Est vérifié, arrêter les itérations.

L'application de la méthode de Newton dans la simulation numérique des dispositifs conduit à résoudre simultanément F_ψ , F_n , F_p . Cela revient à calculer ψ , N , P comme solution d'un système à $3N$ équations, en chaque point du réseau de discrétisation tridimensionnelle. Les trois systèmes d'équations discrétisés (II-2), (II-5), (II-6) sont regroupés en un seul système :

$$\begin{pmatrix} F_\psi(\Psi, N, P) \\ F_n(\Psi, N, P) \\ F_p(\Psi, N, P) \end{pmatrix}$$

L'étape de linéarisation étendue aux trois systèmes F_ψ , F_n , F_p conduit à résoudre le système suivant :

$$\vec{u} \cdot \vec{\delta} = -\vec{F} \tag{II-15}$$

\vec{u} : La matrice jacobienne complète du système

$\vec{\delta}$: Le vecteur correction.

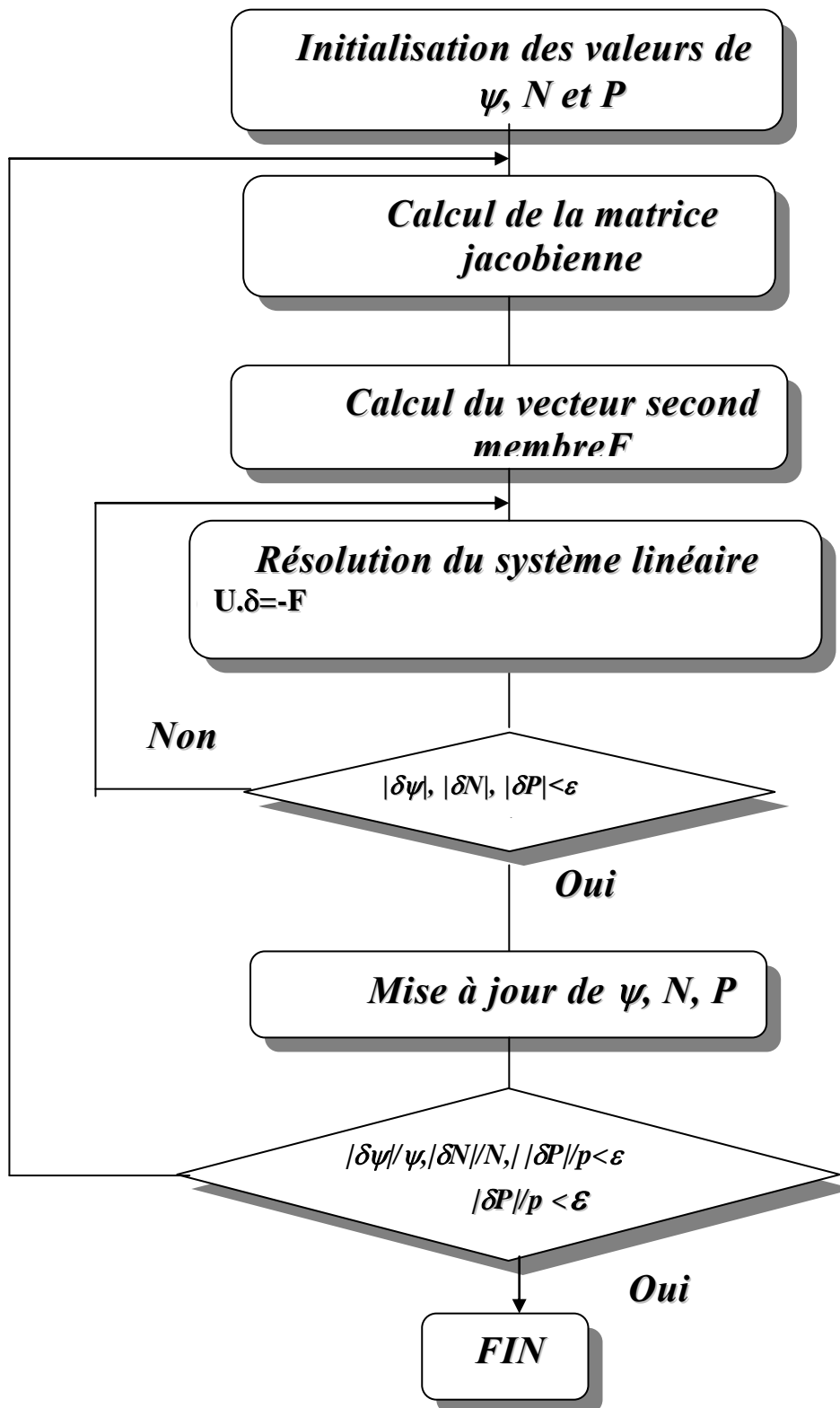


Figure (II-3) Organigramme de la méthode de Newton

La méthode couplée applique le schéma de Newton sur l'ensemble du système des $3N$ équations, qui sont résolues simultanément.

Le domaine d'étude est composé de $m=n_x \cdot n_y \cdot n_z$ points avec :

$$n_x=N_x-1, n_y=N_y-1, n_z=N_z-1.$$

$N=N_x \cdot N_y \cdot N_z$ étant l'ordre de la jacobienne résultante U représentée comme suit :

$$\begin{array}{cccccc}
 & d_1 & d_2 & & d_4 & & d_6 & & \\
 d_3 \begin{array}{l} U_{ijl} \\ U_{i-1jl} \\ 0 \end{array} & & U_{i+1jl} & & 0 & & U_{ij+1l} & & 0 & & U_{ijl+1} \\
 d_5 \begin{array}{l} U_{ij-1l} \\ 0 \end{array} & & & & & & & & & & \\
 d_7 \begin{array}{l} U_{ijl-1} \end{array} & & & & & & & & & &
 \end{array}$$

Chaque élément de la matrice U et du vecteur δ en un nœud quelconque sont de la forme :

$$U = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_\psi}{\partial \psi} & \frac{\partial F_\psi}{\partial N} & \frac{\partial F_\psi}{\partial P} \\ \frac{\partial F_n}{\partial \psi} & \frac{\partial F_n}{\partial N} & \frac{\partial F_n}{\partial P} \\ \frac{\partial F_p}{\partial \psi} & \frac{\partial F_p}{\partial N} & \frac{\partial F_p}{\partial P} \end{pmatrix} \quad \delta = \begin{pmatrix} \delta_\psi \\ \delta_n \\ \delta_p \end{pmatrix}$$

On remarque que la jacobienne U comporte sept diagonales d'éléments non nuls :

- ♣ d_1 correspond aux éléments équivalents à U_{ijl} de nombre égal à \dim (avec $\dim=n_x \cdot n_y \cdot n_z$.)
- ♣ d_2 correspond aux éléments équivalents à U_{i+1jl} de nombre égal à $(\dim-1)$.
- ♣ d_3 correspond aux éléments équivalents à U_{i-1jl} de nombre égal à $(\dim-1)$
- ♣ d_4 correspond aux éléments équivalents à U_{ij+1l} de nombre égal à $(\dim-n_x)$.
- ♣ d_5 correspond aux éléments équivalents à U_{ij-1l} de nombre égal à $(\dim-n_x)$.
- ♣ d_6 correspond aux éléments équivalents à U_{ijl+1} de nombre égal à $(\dim-(n_x \cdot n_y))$.
- ♣ d_7 correspond aux éléments équivalents à U_{ijl-1} de nombre égal à $(\dim-n_x \cdot n_y)$.

II-6-2-3) Calcul des éléments de la matrice U :

a) Existence d'un centre piège :

La forme globale des éléments de jacobienne U est donnée en annexe B [5]. Si nous distinguons les centres pièges (recombinants) des centres donneurs ou accepteurs peu profonds, la charge d'espace associée aux seuls niveaux peu profonds sera considérée comme constante (niveaux totalement ionisés). C'est le cas de la majorité des impuretés choisies pour doper volontairement les semi-conducteurs.

Dans le cas des matériaux III-V semi isolants, les niveaux d'énergie E_T sont en général proches du milieu de la bande interdite. Un centre E_r est partiellement ionisé et son état d'ionisation dépend de l'équilibre entre les taux d'émission et de capture des deux types de porteurs sur ce centre. Si sa densité est importante par rapport aux densités des niveaux donneurs ou accepteurs, il est nécessaire d'en tenir compte dans l'équation de Poisson, ce qui conduit à modifier le deuxième membre de l'équation de Poisson comme suit :

$$-\rho = N - P - (N_D - N_A) + N_t \quad (\text{II-16})$$

Avec :

$$N_t = N_T \cdot \frac{\tau_{pt} \cdot N + \tau_{nt} \cdot P_{1t}}{\tau_{pt} \cdot (N + N_{1t}) + \tau_{nt} \cdot (P + P_{1t})} \quad (\text{II-17})$$

Ce terme n'intervient que dans la première ligne de la sous matrice élément de U, $U_{i,j,1}$.

Dans le cas d'une faible densité de pièges $N_T < 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, on peut considérer le dénominateur constant dans l'expression (II-17), et le calcul de la dérivée prend la forme :

$$U_{ijl}^{1,2} = \frac{\partial F_{ijl}^i}{\partial N_{ijl}} = -1 - N_T \cdot \frac{\tau_{pt}}{\tau_{nt} \cdot (P_{ijl} + P_{1t}) + \tau_{pt} \cdot (N_{ijl} + N_{1t})} \quad (\text{II-18})$$

(Notation conforme aux détails de calcul donnés en annexe B)

Pour une forte densité de piège $N_T > 10^{12} \text{cm}^{-3}$, une telle approche entraîne une oscillation dans la convergence du système. Ce problème ne peut être résolu qu'en faisant un calcul exacte des dérivées. La première ligne de la matrice U_{ijl} est modifiée comme indiqué ci-dessous :

$$U_{ijl}^{1.2} = \frac{\partial F_{\psi}^{ijl}}{\partial N_{ijl}} = -1 - N_T \cdot \tau_{pt} \cdot \frac{\tau_{pt} \cdot N_{lt} + \tau_{nt} \cdot P_{ijl}}{[\tau_{nt} \cdot (P_{ijl} + P_{lt}) + \tau_{pt} \cdot (N_{ijl} + N_{lt})]^2} \quad (\text{II-19})$$

$$U_{ijl}^{1.3} = \frac{\partial F_{\psi}^{ijl}}{\partial P_{ijl}} = 1 - N_T \cdot \tau_{nt} \cdot \frac{\tau_{pt} \cdot N_{ijl} + \tau_{nt} \cdot P_{lt}}{[\tau_{nt} \cdot (P_{ijl} + P_{lt}) + \tau_{pt} \cdot (N_{ijl} + N_{lt})]^2}$$

Nous avons de cette manière pu modéliser des structures présentant des densités N_T, N_R de centres profonds supérieures à 10^{17}cm^{-3} .

b) Existence de plusieurs centres pièges :

La prise en compte de deux centres pièges est nécessaire pour modéliser correctement la plupart des phénomènes de transport dans les structures à base des semi-conducteur III-V.

Il est en effet bien connu que la présence d'un centre profond de densité importante fixe le type de semi-conducteur (P ou N). Un deuxième centre dominant (fortes sections de capture) dans le phénomène de génération- recombinaison, ou un centre donneur profond E_T , compense un centre accepteur N_A , la recombinaison se faisait à travers un troisième centre E_r .

Nous allons supposer qu'il n'y a pas d'échange inter centres entre les deux centres profonds, et on négligera de plus la charge d'espace du centre recombinant.

L'introduction du nouveau centre recombinant affecte seulement les équations de continuité et non pas l'équation de Poisson à cause de sa faible densité comparée à celle du centre profond à pièges. On obtient ainsi les expressions suivantes :

$$\begin{aligned}
F_n = & \mu_n \cdot [\alpha_{i-1,j,l} \cdot N_{i-1,j,l} - (\alpha_{i,j,l} + \alpha_{i-1,j,l} \cdot \exp(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})) N_{i,j,l} + \alpha_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l}) N_{i+1,j,l}] \\
& \frac{1}{X_{i+1,j,l} - X_{i,j,l}} + \mu_n \cdot [\beta_{i,j-1,l} \cdot N_{i,j-1,l} - (\beta_{i,j,l} + \beta_{i,j-1,l} \cdot \exp(\psi_{i,j-1,l} - \psi_{i,j,l})) N_{i,j,l} + \beta_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j+1,l}) N_{i,j+1,l}] \\
& \cdot \frac{1}{Y_{i,j+1,l} - Y_{i,j,l}} + \mu_n \cdot [\gamma_{i,j,l-1} \cdot N_{i,j,l-1} - (\gamma_{i,j,l} + \gamma_{i,j,l-1} \cdot \exp(\psi_{i,j,l-1} - \psi_{i,j,l})) N_{i,j,l} + \gamma_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j,l+1}) N_{i,j,l+1}] \\
& \frac{1}{Z_{i,j,l+1} - Z_{i,j,l}} - \frac{N_{i,j,l} \cdot P_{i,j,l} - 1}{\tau_{nt} \cdot (P_{i,j,l} + P_{lt}) + \tau_p \cdot (N_{i,j,l} + N_{lt})} - \frac{N_{i,j,l} \cdot P_{i,j,l} - 1}{\tau_{nr} \cdot (P_{i,j,l} + P_{lr}) + \tau_{pr} \cdot (N_{i,j,l} + N_{rl})} = 0 \quad (\text{II-20})
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
F_p = & \mu_p \cdot [-\alpha_{i-1,j,l} \cdot \exp(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l}) P_{i-1,j,l} + (\alpha_{i-1,j,l} + \alpha_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})) P_{i,j,l} - \alpha_{i,j,l} \cdot P_{i+1,j,l}] \\
& \cdot \frac{1}{X_{i+1,j,l} - X_{i,j,l}} + \mu_p \cdot [-\beta_{i,j-1,l} \cdot \exp(\psi_{i,j-1,l} - \psi_{i,j,l}) P_{i,j-1,l} + (\beta_{i,j-1,l} + \beta_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j+1,l})) P_{i,j,l} - \\
& \beta_{i,j,l} \cdot P_{i,j+1,l}] \cdot \frac{1}{Y_{i,j+1,l} - Y_{i,j,l}} + \mu_p \cdot [-\gamma_{i,j,l-1} \cdot \exp(\psi_{i,j,l-1} - \psi_{i,j,l}) P_{i,j,l-1} + (\gamma_{i,j,l-1} + \gamma_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j,l+1})) \\
& \cdot P_{i,j,l} - \gamma_{i,j,l} \cdot P_{i,j,l+1}] \cdot \frac{1}{Z_{i,j,l+1} - Z_{i,j,l}} + \frac{N_{i,j,l} \cdot P_{i,j,l} - 1}{\tau_{nt} \cdot (P_{i,j,l} + P_{lt}) + \tau_{pt} \cdot (N_{i,j,l} + N_{lt})} + \frac{N_{i,j,l} \cdot P_{i,j,l} - 1}{\tau_{nr} \cdot (P_{i,j,l} + P_{lr}) + \tau_{pr} \cdot (N_{i,j,l} + N_{rl})} = 0 \quad (\text{II-21})
\end{aligned}$$

ce qui modifiera par la suite les éléments de la matrice $U_{i,j,l}$ comme suit :

$$\begin{aligned}
U_{ijl}^{2,2} = & \frac{\partial F_N}{\partial N_{ijl}} = -\mu_n \cdot (\alpha_{ijl} + \alpha_{i-1,j,l} \cdot \exp(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{ijl})) \cdot \frac{1}{X_{i+1,j,l} - X_{ijl}} - \\
& \mu_n \cdot (\beta_{ijl} + \beta_{i,j-1,l} \cdot \exp(\psi_{i,j-1,l} - \psi_{ijl})) \cdot \frac{1}{Y_{i,j+1,l} - Y_{ijl}} - \\
& \mu_n \cdot (\gamma_{ijl} + \gamma_{i,j,l-1} \cdot \exp(\psi_{i,j,l-1} - \psi_{ijl})) \cdot \frac{1}{Z_{i,j,l+1} - Z_{ijl}} - \frac{P_{ijl}}{\tau_{nt} \cdot (P_{ijl} + P_{lt}) + \tau_{pt} \cdot (N_{ijl} + N_{lt})} \\
& - \frac{P_{ijl}}{\tau_{nr} \cdot (P_{ijl} + P_{lr}) + \tau_{pr} \cdot (N_{ijl} + N_{rl})}
\end{aligned} \quad (\text{II-22})$$

$$U_{ijl}^{2,3} = \frac{\partial F_N}{\partial P_{ijl}} = -\frac{N_{ijl}}{\tau_{nt} \cdot (P_{ijl} + P_{lt}) + \tau_{pt} \cdot (N_{ijl} + N_{lt})} - \frac{N_{ijl}}{\tau_{nr} \cdot (P_{ijl} + P_{lr}) + \tau_{pr} \cdot (N_{ijl} + N_{rl})} \quad (\text{II-23})$$

$$U_{ijl}^{3,2} = \frac{\partial F_p}{\partial N_{ijl}} = \frac{P_{ijl}}{\tau_{nt} \cdot (P_{ijl} + P_{lt}) + \tau_{pt} \cdot (N_{ijl} + N_{lt})} + \frac{P_{ijl}}{\tau_{nr} \cdot (P_{ijl} + P_{lr}) + \tau_{pr} \cdot (N_{ijl} + N_{rl})} \quad (\text{II-24})$$

$$\begin{aligned}
U_{ijl}^{3,3} = \frac{\partial F_p}{\partial P_{ijl}} = & \mu_p \cdot (\alpha_{i-1jl} + \alpha_{ijl} \cdot \exp(\psi_{ijl} - \psi_{i+1jl})) \cdot \frac{1}{X_{i+1jl} - X_{ijl}} + \\
& \mu_p \cdot (\beta_{ij-1l} + \beta_{ijl} \cdot \exp(\psi_{ijl} - \psi_{ij+1l})) \cdot \frac{1}{Y_{ij+1l} - Y_{ijl}} + \\
& \mu_p \cdot (\gamma_{ijl-1} + \gamma_{ijl} \cdot \exp(\psi_{ijl} - \psi_{ijl+1})) \cdot \frac{1}{Z_{ijl+1} - Z_{ijl}} - \\
& \frac{N_{ijl}}{\tau_{nt} \cdot (P_{ijl} + P_{1t}) + \tau_{pt} \cdot (N_{ijl} + N_{1t})} - \frac{N_{ijl}}{\tau_{nr} \cdot (P_{ijl} + P_{1r}) + \tau_{pr} \cdot (N_{ijl} + N_{1r})}
\end{aligned} \tag{II-25}$$

II-7) CALCUL DES GRANDEURS SECONDAIRES :

La résolution numérique de trois systèmes d'équations donne le profil de potentiel et des densités des électrons et trous, L'étude détaillée du comportement électrique des semiconducteurs nécessitent le calcul des grandeurs dépendantes des trois variables principales, tels que le champ électrique, le courant de conduction et le courant d'entraînement.

Dans un intervalle élémentaire $x_{i+1}-x_i$, il est possible de calculer le champ électrique par interpolation linéaire tout en restant dans l'approximation de Gummel.

II-7-1) Champ électrique :

La variable ψ est supposé linéaire entre deux points successifs et puisque on a

$$E_{x\ i,j,l} = -\frac{\partial \psi_{i,j,l}}{\partial x} \tag{II - 26}$$

Au point $i+1/2$ on aura

$$E_{x\ i+\frac{1}{2},j,l} = \frac{\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l}}{x_{i+1} - x_i}$$

Soit à calculer au point (i,j,l) du maillage le champ électrique, le potentiel étant supposé linéaire (approximation de Gummel), dans un intervalle élémentaire $x_{i+1}-x_i$, ce champ au point (i,j,l) est évalué par interpolation linéaire soit

$$E_{x\ i,j,l} = E_{x\ i-\frac{1}{2},j,l} \cdot A_{x\ i,j,l} + E_{x\ i+\frac{1}{2},j,l} \cdot B_{x\ i,j,l} \tag{II-27}$$

Avec :

$$A_{x i,j,l} = \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1} - x_{i-1}} = \frac{h_i}{h_i + h_{i-1}}$$

$$A_{y i,j,l} = \frac{y_{j+1} - y_j}{y_{j+1} - y_{j-1}} = \frac{k_j}{k_j + k_{j-1}}$$

$$A_{z i,j,l} = \frac{z_{l+1} - z_l}{z_{l+1} - z_{l-1}} = \frac{l_l}{l_l + l_{l-1}}$$

$$B_{x i,j,l} = \frac{x_i - x_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} = \frac{h_{i-1}}{h_i + h_{i-1}}$$

$$B_{y i,j,l} = \frac{y_i - y_{i-1}}{y_{i+1} - y_{i-1}} = \frac{k_{j-1}}{k_j + k_{j-1}}$$

$$B_{z i,j,l} = \frac{z_l - z_{l-1}}{z_{l+1} - z_{l-1}} = \frac{l_{l-1}}{l_l + l_{l-1}}$$

Et

$$x_{i+1} - x_i = dx_i = h_i \quad x_i - x_{i-1} = dx_{i-1} = h_{i-1}$$

$$y_{j+1} - y_j = dy_j = k_j \quad y_j - y_{j-1} = dy_{j-1} = k_{j-1}$$

$$z_{l+1} - z_l = dz_l = l_l \quad z_l - z_{l-1} = dz_{l-1} = l_{l-1}$$

II-7-2) Densité de courants :

Pour le calcul de courant on a

$$j_n = -e\mu_n n_{i,j,l} \left(\frac{\partial \psi_{i,j,l}}{\partial x} + \frac{\partial \psi_{i,j,l}}{\partial y} + \frac{\partial \psi_{i,j,l}}{\partial z} \right) + eD_n \left(\frac{\partial n_{i,j,l}}{\partial x} + \frac{\partial n_{i,j,l}}{\partial y} + \frac{\partial n_{i,j,l}}{\partial z} \right) \quad (II - 28)$$

$$j_p = -e\mu_p p_{i,j,l} \left(\frac{\partial \psi_{i,j,l}}{\partial x} + \frac{\partial \psi_{i,j,l}}{\partial y} + \frac{\partial \psi_{i,j,l}}{\partial z} \right) - eD_p \left(\frac{\partial p_{i,j,l}}{\partial x} + \frac{\partial p_{i,j,l}}{\partial y} + \frac{\partial p_{i,j,l}}{\partial z} \right) \quad (II - 29)$$

La démonstration qui va suivre s'effectuera sur le plan x et on appliquera le résultat sur le plan y et z

$$j_{nx} = -e\mu_n n_{i,j,l} \left(\frac{\partial \psi_{i,j,l}}{\partial x} \right) + eD_n \left(\frac{\partial n_{i,j,l}}{\partial x} \right)$$

$$j_{px} = -e\mu_p p_{i,j,l} \left(\frac{\partial \psi_{i,j,l}}{\partial x} \right) - eD_p \left(\frac{\partial p_{i,j,l}}{\partial x} \right)$$

A partir de ces deux équations, il est possible de déduire les concentrations d'électrons et des trous par intégration sur chaque intervalle élémentaire du maillage, pour les électrons nous avons :

$$\frac{\partial n_{i,j,l}}{\partial x} - \frac{e}{kT} \frac{\partial \psi}{\partial x} n = \frac{j_{nx}}{\mu_n kT}$$

Par la méthode d'intégration on trouve :

$$n(x) = u(x) \exp\left(\frac{e\psi}{kT}\right)$$

Avec :

$$u(x) = \int \frac{j_{nx}}{\mu_n} \cdot \exp\left(\frac{-e\psi}{kT}\right) dx$$

En supposant j_{nx} constant dans l'intervalle $[x_i, x_{i+1}]$ on obtient la relation suivante :

$$j_{n\ i+\frac{1}{2},l} = \mu_n kT \cdot \frac{u_{i+1} - u_i}{\int_{x_i}^{x_{i+1}} \exp\left(\frac{-e\psi_{i,j,l}}{kT}\right) dx}$$

Avec :

$$u_{i+1} = n_{i+1,j,l} \cdot \exp\left(\frac{-e\psi_{i+1,j,l}}{kT}\right)$$

$$u_i = n_{i,j,l} \cdot \exp\left(\frac{-e\psi_{i,j,l}}{kT}\right)$$

Le même raisonnement conduit pour le courant des trous, à l'expression :

$$j_{p\ i+\frac{1}{2},l} = \mu_p kT \cdot \frac{s_i - s_{i+1}}{\int_{x_i}^{x_{i+1}} \exp\left(\frac{e\psi_{i,j,l}}{kT}\right) dx}$$

Avec :

$$s_{i+1} = p_{i+1} \cdot \exp\left(\frac{-e\psi_{i+1,j,l}}{kT}\right)$$

$$s_i = p \cdot \exp\left(\frac{-e\psi_{i,j,l}}{kT}\right)$$

Ces formules de courant reposent implicitement sur une distribution de la concentration $n(x)$ et $p(x)$, à l'intérieur de chaque intervalle élémentaire x_{i+1} , x_i , telle que la valeur de chaque courant de conduction j_n et j_p reste constante sur cet intervalle.

Il suffira donc de prendre des points suffisamment proches pour que l'intégration du dénominateur puisse être correctement approché, la qualité de la solution dépend de façon directe du maillage utilisé pour le calcul, un maillage inadapté peut conduire à des instabilités numériques et à une absence de convergence, surtout lorsque des comportements fortement exponentiels sont en jeu.

Pour avoir une meilleure évaluation dans le calcul de l'intégrale du dénominateur, on préfère au lieu de remplacer entre deux points successifs $\exp\left(\frac{e\psi}{kT}\right)$ par $\exp\left(\frac{e\psi}{kT}\right) + 1$ qui impose une contrainte assez forte à savoir $e\psi < kT$, approcher le potentiel par une forme linéaire. Cela, se justifie par le fait que la variation du potentiel $\psi(x)$ est régulière dans l'intervalle élémentaire du maillage, par comparaison avec les variations des concentrations $n(x)$ et $p(x)$, cela revient à considérer le champ électrique constant entre deux points successifs.

On en déduit l'expression de Gummel pour les courants j_n et j_p dans l'intervalle $x_{i+1} - x_i$:

$$\begin{aligned}
 j_{n\ x_{i+\frac{1}{2},j,l}} &= e\mu_n \frac{n_{i+1,j,l} \exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{kT}\right) - n_{i,j,l} (\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{kT}\right) - 1} \cdot \frac{(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{x_{i+1} - x_i} \\
 &= e\mu_n \frac{n_{i+1,j,l} \exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{kT}\right) - n_{i,j,l} + n_{i,j,l} \exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{kT}\right) - n_{i,j,l} \exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{kT}\right)}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{kT}\right) - 1} \cdot \frac{(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{x_{i+1} - x_i} \\
 &= e\mu_n \frac{n_{i,j,l} \left(\exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{kT}\right) - 1 \right) (\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{kT}\right) - 1} \cdot \frac{(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{x_{i+1} - x_i} \\
 &\quad + e\mu_n \frac{(n_{i+1,j,l} - n_{i,j,l}) \exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{kT}\right) (\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{kT}\right) - 1} \cdot \frac{(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{x_{i+1} - x_i}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& j_{nx\ i+\frac{1}{2},j,l} \\
&= e\mu_n \cdot n_{i,j,l} \cdot \frac{(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{x_{i+1} - x_i} \\
&+ e\mu_n \frac{(n_{i+1,j,l} - n_{i,j,l}) \exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{kT}\right)}{x_{i+1} - x_i} \cdot \frac{(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{kT}\right) - 1}
\end{aligned}$$

$$j_{nx\ i-\frac{1}{2},j,l} = e\mu_n \frac{n_{i,j,l} \cdot \exp\left(\frac{e(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right) - n_{i-1,j,l}}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right) - 1} \cdot \frac{(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{x_i - x_{i-1}}$$

$$= e\mu_n \frac{n_{i,j,l} \cdot \exp\left(\frac{e(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right) - n_{i,j,l} + n_{i,j,l} - n_{i-1,j,l}}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right) - 1} \cdot \frac{(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{x_i - x_{i-1}}$$

$$= e\mu_n \frac{n_{i,j,l} \left(\exp\left(\frac{e(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right) - 1\right) + n_{i,j,l} - n_{i-1,j,l}}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right) - 1} \cdot \frac{(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{x_i - x_{i-1}}$$

$$= e\mu_n \left(n_{i,j,l} + \frac{n_{i,j,l} - n_{i-1,j,l}}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right) - 1} \right) \cdot \frac{(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{x_i - x_{i-1}}$$

$$j_{nx\ i-\frac{1}{2},j,l} = e\mu_n n_{i,j,l} \frac{(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{x_i - x_{i-1}} + e\mu_n \frac{n_{i,j,l} - n_{i-1,j,l}}{x_i - x_{i-1}} \cdot \frac{(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right) - 1}$$

$$j_{px\ i+\frac{1}{2},j,l} = e\mu_p \frac{p_{i,j,l} \cdot \exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{kT}\right) - p_{i+1,j,l}}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{kT}\right) - 1} \cdot \frac{(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{x_{i+1} - x_i}$$

$$\begin{aligned}
&= e\mu_p \frac{p_{i,j,l} \exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{kT}\right) - p_{i+1,j,l} + p_{i,j,l} - p_{i,j,l} (\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{kT}\right) - 1} \cdot \frac{(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{x_{i+1} - x_i} \\
&= e\mu_p p_{i,j,l} \frac{\exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{kT}\right) - 1}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{kT}\right) - 1} \cdot \frac{(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{x_{i+1} - x_i} \\
&\quad + e\mu_p \frac{p_{i,j,l} - p_{i+1,j,l}}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{kT}\right) - 1} \cdot \frac{(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{x_{i+1} - x_i} \\
&= e\mu_p p_{i,j,l} \frac{(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{x_{i+1} - x_i} + e\mu_p \frac{p_{i,j,l} - p_{i+1,j,l}}{x_{i+1} - x_i} \frac{(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{kT}\right) - 1} \\
j_{p\ i-\frac{1}{2},j,l} &= e\mu_p \frac{p_{i-1,j,l} \exp\left(\frac{e(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right) - p_{i,j,l} (\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right) - 1} \cdot \frac{(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{x_i - x_{i-1}} \\
&= e\mu_p \frac{p_{i-1,j,l} \exp\left(\frac{e(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right) - p_{i,j,l} + p_{i,j,l} \exp\left(\frac{e(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right) - p_{i,j,l} \exp\left(\frac{e(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right)}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right) - 1} \cdot \frac{(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{x_i - x_{i-1}} \\
&= e\mu_p \frac{p_{i,j,l} \left(\exp\left(\frac{e(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right) - 1\right) (\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right) - 1} \cdot \frac{(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{x_i - x_{i-1}} \\
&\quad + e\mu_p \frac{(p_{i-1,j,l} - p_{i,j,l}) \exp\left(\frac{e(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right) (\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right) - 1} \cdot \frac{(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{x_i - x_{i-1}}
\end{aligned}$$

$$= e\mu_p \cdot p_{i,j,l} \cdot \frac{(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{x_i - x_{i-1}}$$

$$+ e\mu_p \frac{(p_{i-1,j,l} - p_{i,j,l}) \exp\left(\frac{e(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right)}{x_i - x_{i-1}} \cdot \frac{(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right) - 1}$$

Au point (i,j,l) les courants de conduction j_n et j_p sont évalués par interpolation linéaire, ce qui nous permet d'écrire :

$$j_{nx\ i,j,l} = j_{nx\ i+\frac{1}{2},j,l} \cdot A_{x\ i,j,l} + j_{nx\ i-\frac{1}{2},j,l} \cdot B_{x\ i,j,l}$$

$$j_{nx\ i,j,l} = j_{nxe\ i,j,l} + j_{nxd\ i,j,l}$$

Avec

j_{nxe} : Le courant d'entraînement.

j_{nxd} : Le courant de diffusion.

Ainsi on peut déduire l'expression du courant d'entraînement et de diffusion d'électrons sur le plan x :

$$j_{nxd\ i,j,l} = e\mu_n \left(\frac{n_{i,j,l} - n_{i-1,j,l}}{x_i - x_{i-1}} A_{x\ i,j,l} C'_{x\ i-1,j,l} \right. \\ \left. + \frac{n_{i+1,j,l} - n_{i,j,l}}{x_i - x_{i-1}} B_{x\ i,j,l} C'_{x\ i,j,l} \exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{kT}\right) \right)$$

$$j_{jnex\ i,j,l} = e\mu_n \cdot n_{i,j,l} \left(\frac{(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{x_i - x_{i-1}} A_{x\ i,j,l} + \frac{(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{x_i - x_{i-1}} B_{x\ i,j,l} \right) = e\mu_n \cdot n_{i,j,l} E_{x\ i,j,l}$$

Avec :

$$C'_{x\ i,j,l} = \frac{(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{kT}\right) - 1}$$

On va appliquer le même raisonnement pour les trous

On a :

$$j_{px\ i,j,l} = j_{p\ i-\frac{1}{2},j,l} \cdot A_{x\ i,j,l} + j_{p\ i+\frac{1}{2},j,l} \cdot B_{x\ i,j,l}$$

$$j_{px\ i,j,l} = j_{pxe} + j_{pxd}$$

$$j_{pxd\ i,j,l} = e\mu_p \cdot \left(\frac{p_{i,j,l} - p_{i-1,j,l}}{x_i - x_{i-1}} A_{x\ i,j,l} C'_{x\ i-1,j,l} \exp\left(\frac{e(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right) + \frac{p_{i+1,j,l} - p_{i,j,l}}{x_i - x_{i-1}} B_{x\ i,j,l} C'_{x\ i,j,l} \right)$$

$$j_{pex\ i,j,l} = e\mu_p \cdot p_{i,j,l} \left(\frac{(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{x_i - x_{i-1}} A_{x\ i,j,l} + \frac{(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{x_i - x_{i-1}} B_{x\ i,j,l} \right) = e\mu_n \cdot p_{i,j,l} E_{x\ i,j,l}$$

II-8) FORMULATION FINALE D'EQUATIONS

TRIDIMENSIONNELLES DES GRANDEURS SECONDAIRES :

II-8-1) Le champ électrique :

Le champ finale en un point (i,j,l) sera calculé par l'équation :

$$E_{i,j,l} = \sqrt{E_{x\ i,j,l}^2 + E_{y\ i,j,l}^2 + E_{z\ i,j,l}^2} \quad (\text{II-30})$$

avec

$$E_{x\ i,j,l} = \frac{1}{h_i + h_{i-1}} \cdot \left(\frac{h_i}{h_{i-1}} (\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l}) + \frac{h_{i-1}}{h_i} (\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l}) \right)$$

$$E_{y\ i,j,l} = \frac{1}{k_j + k_{j-1}} \cdot \left(\frac{k_j}{k_{j-1}} (\psi_{i,j-1,l} - \psi_{i,j,l}) + \frac{k_{j-1}}{k_j} (\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j+1,l}) \right)$$

$$E_{z\ i,j,l} = \frac{1}{l_l + l_{l-1}} \cdot \left(\frac{l_l}{l_{l-1}} (\psi_{i,j,l-1} - \psi_{i,j,l}) + \frac{l_{l-1}}{l_l} (\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j,l+1}) \right)$$

II-8-2) Densité de courant :

II-8-2-1) courant de conduction des électrons j_n :

On a

$$j_n = \sqrt{j_{nx\ i,j,l}^2 + j_{ny\ i,j,l}^2 + j_{nz\ i,j,l}^2} \quad (\text{II} - 31)$$

Avec :

$$\begin{aligned}
j_{n x i, j, l} = e\mu_n \frac{1}{h_i + h_{i-1}} & \cdot \left(n_{i, j, l} \left((\psi_{i-1, j, l} - \psi_{i, j, l}) \frac{h_i}{h_{i-1}} + (\psi_{i, j, l} - \psi_{i+1, j, l}) \frac{h_{i-1}}{h_i} \right) \right. \\
& + \left((n_{i, j, l} - n_{i-1, j, l}) \frac{h_i}{h_{i-1}} \cdot \frac{(\psi_{i-1, j, l} - \psi_{i, j, l})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i-1, j, l} - \psi_{i, j, l})}{kT}\right) - 1} \right. \quad (II - 32) \\
& + (n_{i+1, j, l} \\
& \left. \left. - n_{i, j, l}) \frac{h_{i-1}}{h_i} \cdot \frac{(\psi_{i, j, l} - \psi_{i+1, j, l})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i, j, l} - \psi_{i+1, j, l})}{kT}\right) - 1} \cdot \exp\left(\frac{e(\psi_{i, j, l} - \psi_{i+1, j, l})}{kT}\right) \right) \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
j_{n y i, j, l} = e\mu_n \frac{1}{k_j + k_{j-1}} & \cdot \left(n_{i, j, l} \left((\psi_{i, j-1, l} - \psi_{i, j, l}) \frac{k_j}{k_{j-1}} + (\psi_{i, j, l} - \psi_{i, j+1, l}) \frac{k_{j-1}}{k_j} \right) \right. \\
& + \left((n_{i, j, l} - n_{i, j-1, l}) \frac{k_j}{k_{j-1}} \cdot \frac{(\psi_{i, j-1, l} - \psi_{i, j, l})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i, j-1, l} - \psi_{i, j, l})}{kT}\right) - 1} \right. \quad (II - 33) \\
& + (n_{i, j+1, l} \\
& \left. \left. - n_{i, j, l}) \frac{k_{j-1}}{k_j} \cdot \frac{(\psi_{i, j, l} - \psi_{i, j+1, l})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i, j, l} - \psi_{i, j+1, l})}{kT}\right) - 1} \cdot \exp\left(\frac{e(\psi_{i, j, l} - \psi_{i, j+1, l})}{kT}\right) \right) \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
j_{n z i,j,l} = e\mu_n \frac{1}{l_l + l_{l-1}} & \cdot \left(n_{i,j,l} \left((\psi_{i,j,l-1} - \psi_{i,j,l}) \frac{l_l}{l_{l-1}} + (\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j,l+1}) \frac{l_{l-1}}{l_l} \right) \right. \\
& + \left((n_{i,j,l} - n_{i,j,l-1}) \frac{l_l}{l_{l-1}} \cdot \frac{(\psi_{i,j,l-1} - \psi_{i,j,l})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l-1} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right) - 1} \right. \\
& + (n_{i,j,l+1} - n_{i,j,l}) \cdot \frac{l_{l-1}}{l_l} \cdot \frac{(\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j,l+1})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j,l+1})}{kT}\right) - 1} \cdot \exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j,l+1})}{kT}\right) \left. \right) \left. \right) \quad (II - 34)
\end{aligned}$$

II-8-2-2) courant de conduction des trous j_p :

On a

$$j_p = \sqrt{j_{p x i,j,l}^2 + j_{p y i,j,l}^2 + j_{p z i,j,l}^2} \quad (II - 35)$$

Avec :

$$\begin{aligned}
j_{p x i,j,l} = e\mu_p \frac{1}{h_i + h_{i-1}} & \cdot \left(p_{i,j,l} \left((\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l}) \frac{h_i}{h_{i-1}} + (\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l}) \frac{h_{i-1}}{h_i} \right) \right. \\
& + \left((p_{i,j,l} - p_{i-1,j,l}) \frac{h_i}{h_{i-1}} \cdot \frac{(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right) - 1} \cdot \exp\left(\frac{e(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l})}{kT}\right) \right. \\
& + (p_{i+1,j,l} - p_{i,j,l}) \frac{h_{i-1}}{h_i} \cdot \frac{(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l})}{kT}\right) - 1} \left. \right) \left. \right) \quad (II - 36)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
j_{pyij,l} = e\mu_p \frac{1}{k_j + k_{j-1}} & \cdot \left(p_{ij,l} \left((\psi_{ij-1,l} - \psi_{ij,l}) \frac{k_j}{k_{j-1}} + (\psi_{ij,l} - \psi_{ij+1,l}) \frac{k_{j-1}}{k_j} \right) \right. \\
& + \left((p_{ij,l} - p_{ij-1,l}) \frac{k_j}{k_{j-1}} \cdot \frac{(\psi_{ij-1,l} - \psi_{ij,l})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{ij-1,l} - \psi_{ij,l})}{kT}\right) - 1} \cdot \exp\left(\frac{e(\psi_{ij-1,l} - \psi_{ij,l})}{kT}\right) \right. \\
& \left. \left. + (p_{ij+1,l} - p_{ij,l}) \frac{k_{j-1}}{k_j} \cdot \frac{(\psi_{ij,l} - \psi_{ij+1,l})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{ij,l} - \psi_{ij+1,l})}{kT}\right) - 1} \right) \right) \quad (II - 37)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
j_{pzij,l} = e\mu_p \frac{1}{l_l + l_{l-1}} & \cdot \left(p_{ij,l} \left((\psi_{ij,l-1} - \psi_{ij,l}) \frac{l_l}{l_{l-1}} + (\psi_{ij,l} - \psi_{ij,l+1}) \frac{l_{l-1}}{l_l} \right) \right. \\
& + \left((p_{ij,l} - p_{ij,l-1}) \frac{l_l}{l_{l-1}} \cdot \frac{(\psi_{ij,l-1} - \psi_{ij,l})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{ij,l-1} - \psi_{ij,l})}{kT}\right) - 1} \cdot \exp\left(\frac{e(\psi_{ij,l-1} - \psi_{ij,l})}{kT}\right) \right. \\
& \left. \left. + (p_{ij,l+1} - p_{ij,l}) \cdot \frac{l_{l-1}}{l_l} \cdot \frac{(\psi_{ij,l} - \psi_{ij,l+1})}{\exp\left(\frac{e(\psi_{ij,l} - \psi_{ij,l+1})}{kT}\right) - 1} \right) \right) \quad (II - 38)
\end{aligned}$$

II-9) CONCLUSION :

Deux principaux algorithmes de calcul ont été exposés dans ce chapitre. Le premier est celui de Gummel (ou méthode découplée), utilisé essentiellement pour les calculs à l'équilibre thermodynamique. Le second de Newton (méthode couplée) [15] est adapté aux simulations de structures à semi-conducteurs à relaxation.

L'introduction des centres pièges dans le modèle physique a entraîné des modifications dans les expressions de Poisson et de continuité, et par la suite dans le calcul des éléments de la matrice jacobienne selon qu'un centre ou deux centres pièges soient considérés.

Références bibliographiques

[1] S.Selberherr

Analysis and simulation of semiconductor Devices
Springer verlag .wien New york, (1983).

[2] Claude Simon

Simulation numérique de la conduction de la conduction électronique dans les dispositifs à semiconducteurs : discrétisation et meilleur auto adaptatif
Thèse de doctorat, université de Rennes1, Rennes,(27 Mars 1990)

[3] R.Menezla

CLAC 3D : programme de résolution tridimensionnelle de l'équation de poisson
Thèse de doctorat, école centrale de Lyon, N 85-05, (1985).

[4] K.Ameur, R.Attou

Simulation dans un espace à trois dimensions de la distribution de potentiel dans une structure à jonction PN
Mémoire d'ingénieur (1994/1995).

[5] M.Khadraoui

Utilisation des méthodes couplés et découplés pour la simulation tridimensionnelle des dispositifs à jonction PN
Thèse de Magister Université de Sidi Bel Abbés 1998

[6] D.Mehal

Simulation et modélisation tridimensionnelles de la photoluminescence dans les semi-conducteurs composés III-V
Thèse de Magister Université de Sidi Bel Abbés

[7] A.Benchiheb

Modélisation d'un transistor bipolaire de puissance.
Thèse de Magister Université de Constantine 1996.

[8] JEAN-PIERRE CORRIOU

Numerical methods and optimization: theory and practice for the engineer
Édition Paris tec et doc, 2010

[9]M.KEMP, C.G TANNOUS , M MEUNIER

Amorphous silicon device simulation by an adapted Gummel method
IEEE transaction on electron devices, Pergamon press, vol 27, n4, pp.319-328, 1987

[10] H.K Gummel

A self consistent iterative schema for one dimensional steady state transistor calculation
IEEE Trans. Electron Devices, ED .11, 455-465 (1964).

[11]A.D Sutherland

On the use of Over relaxation in conjunction with Gummel's algorithm to speed the convergence in two dimensional computer model for MOSFET's
IEEE trans .Electron Devices, Ed-27, pp 1297-1298, (1980)

[12]O E AKCASU

Convergence proprieties of Newton's method for the solution of the semiconductor transport equations and hybrid solution techniques for multidimensional simulation of VLSI devices
Solid state electronics, pergamon press, vol 27 n4,pp349-328 (1987)

[13] A.F.Franz, G.A.Franz, S.Selberherr, C.Ringhofer,P.Marokowich

Finite -boxes generalization of the finite difference method suitable for semiconductor device simulation
IEE transaction electron devices vol Ed-30, n9, pp 1070-1082 (september 1983)

[14] Boumahrat, A.Gourdin

Méthode d'analyse numérique
Réimpression, (1993)

[15] J.C. Manificier

Theoretical and numerical investigations of carriers transport in
N-semi-insulating-N and P-semi-insulating-P diodes – A new approach
Solid-State Electronics 52 (2008) 1162–1169 (2008)

Chapitre III

DESCRIPTION DU LOGICIEL

III-1) INTRODUCTION :

L'étude des semi-conducteurs à faible durée de vie en présence d'un ou plusieurs centres pièges entraîne une complexité dans la description des phénomènes de transport [1][2][3] et par suite une difficulté de mise en œuvre du programme qui les prend en considération. La diminution de la durée de vie entraîne des relations hyperboliques entre les densités d'électrons et celles des trous, ce qui rend la méthode découplée délicate. Cependant son utilisation à l'équilibre thermodynamique reste une étape essentielle, les résultats étant injectés comme valeurs initiales dans la méthode couplée qui est la plus adaptée à l'étude de ces composants sous polarisation. Ainsi une méthode combinée a été conçue alliant l'algorithme de Gummel à celui de Newton.

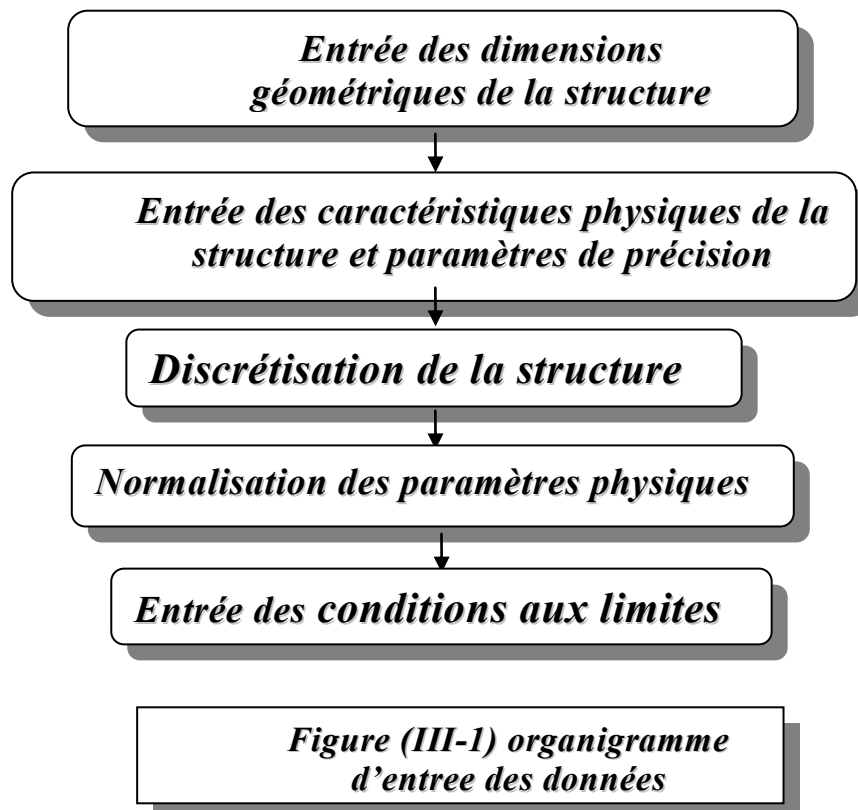
Ce chapitre contient la description des principales étapes de calcul caractérisant notre logiciel.

III-2) DESCRIPTION DU PROGRAMME :

III-2-1) Entrée des données, maillage et conditions aux limites :

a) Entrée des données:

Cette étape comprend les procédures suivantes réunies dans l'organigramme de la figure (III-1).



b) Maillage:

Après que les paramètres géométriques et physiques soient introduits par l'utilisateur, la procédure de maillage est entamée, ce qui représente une étape très délicate puisque les résultats dépendront essentiellement de la discrétisation choisie et du pas utilisé (figure III-2).

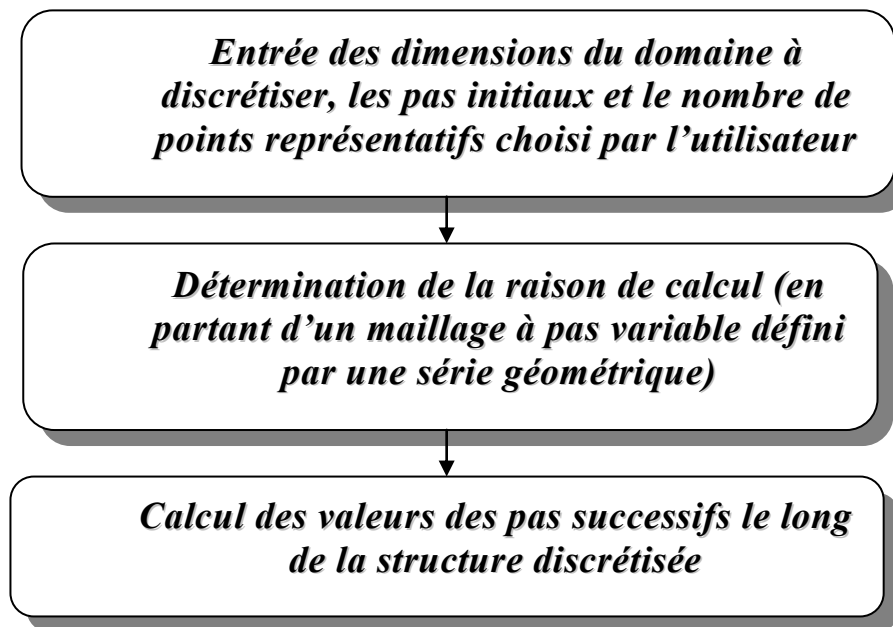


Figure (III-2) Discrétisation et Détermination des pas de calcul

Après l'étape de discrétisation, la normalisation des paramètres utilisés dans le calcul est effectuée. Ceci sert à éviter les écarts importants pouvant surgir entre certaines valeurs ce qui pourrait compromettre les calculs.

c) Conditions aux limites :

D'une manière générale, une équation aux dérivées partielles admet une infinité de solutions. La solution particulière désirée est déterminée à partir de conditions supplémentaires. Ces conditions sont appliquées dans la plus part des cas sur la frontière d'un domaine fermé.

Soit une structure P^+v représentée par le domaine limité de la figure (III-3)

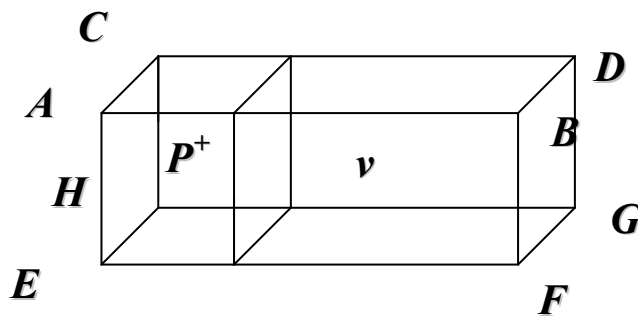


Figure (III-3) structure utilisée

Les deux principales conditions aux limites utilisées dans notre logiciel sont :

C-1) Conditions de Dirichlet :

Les conditions de Dirichlet sont établies comme suit :

Aux contacts, le modèle utilisé est celui du contact ohmique idéal, c'est à dire un contact parfaitement recombinant et qui ne présente pas une zone de charge d'espace. Les conditions seront définies par l'équilibre thermodynamique, tel que

$$n.p = n_i^2 \quad (III-1)$$

Où n_i représente la concentration intrinsèque

Au contact ohmique la valeur de la fonction sera égale à la tension de polarisation, on aura pour le plan ACEH :

$$\begin{aligned}\Psi_{ijl} &= V_a \\ N_{ijl} &= \frac{n_i^2}{N_A}\end{aligned}\quad (\text{III-2})$$

et pour le plan BDFG on aura :

$$\begin{aligned}\Psi_{ijl} &= \log \frac{n_e \cdot N_a}{n_i^2} \\ P_{ijl} &= \frac{n_i^2}{n_e}\end{aligned}\quad (\text{III-3})$$

C-2) Conditions de Neumann :

Les valeurs de la dérivée normale de la fonction sur la frontière.

Ainsi au niveau des frontières où l'on ne connaît pas les valeurs de ψ , n et p , les conditions aux limites sont de type Neumann.

Ceci se traduit mathématiquement, en prenant la dérivée de ψ , n et p par rapport à la variable d'espace nulle à la limite considérée.

$$\frac{\partial \psi}{\partial \vec{m}} = \frac{\partial n}{\partial \vec{m}} = \frac{\partial p}{\partial \vec{m}} = 0 \quad (\text{III-4})$$

\vec{m} est le vecteur orienté suivant la direction spatiale choisie, ces conditions s'appliquent dans le cas de la figure (III-3) sur les plans : (ABEF), (CDHG), (EAGH),

(ABCD)

III-2-2) Résolution numérique :

III-2-2-1) Algorithme de Gummel:

III-2-2-1-1) Résolution de l'équation de Poisson :

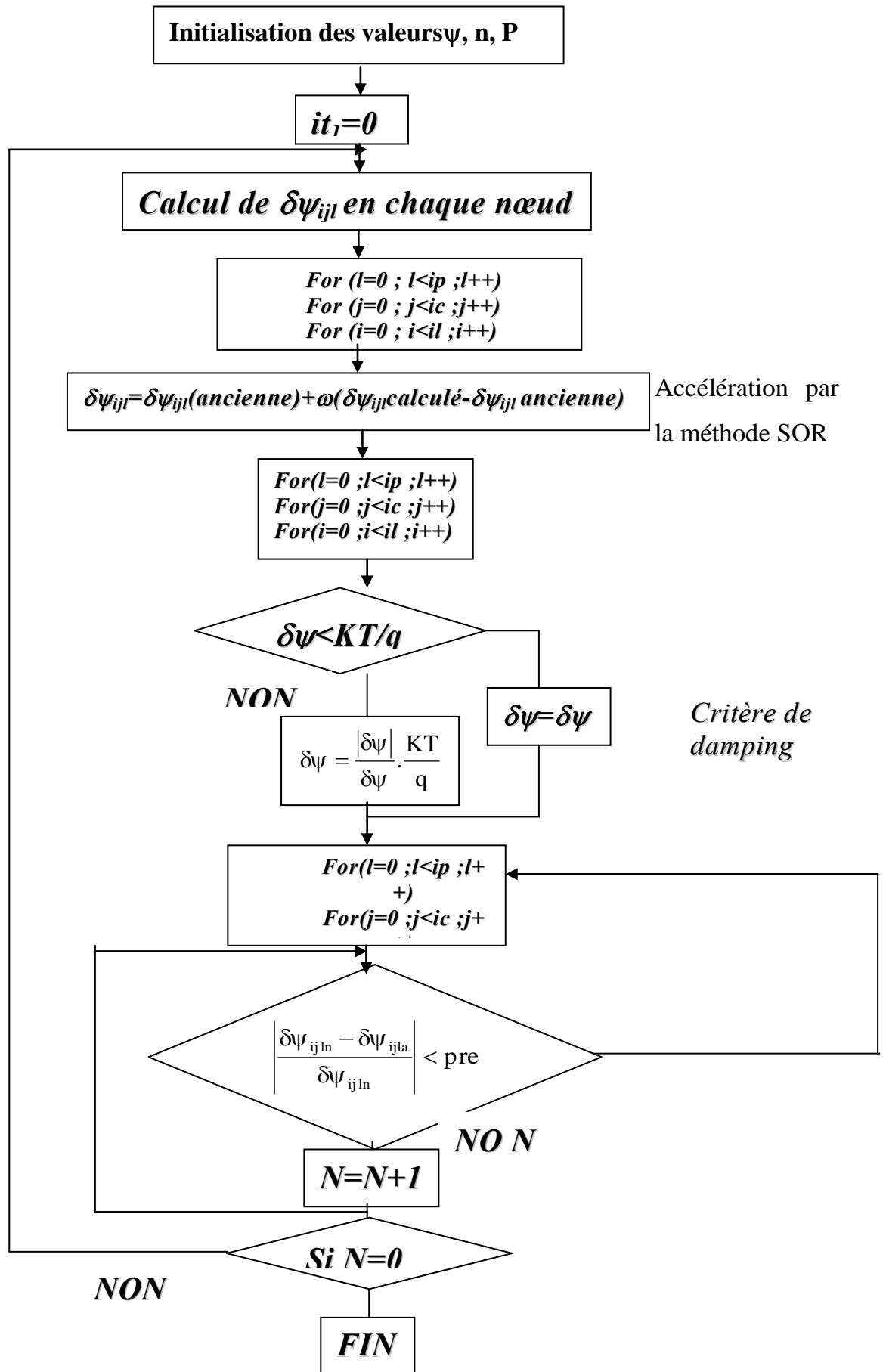


Figure (III-4) Organigramme de résolution de l'équation de Poisson

♣) Description de l'algorithme de résolution de l'équation de Poisson :

Etant donnée le nombre important de points, une méthode de résolution rapide (méthode SOR) a été envisagée.

Cette méthode consiste à :

- 1) initialiser les valeurs des inconnues à une valeur proche de la solution à trouver
- 2) résoudre le système des N équations aux N inconnues par l'expression (toute discrétisation faite):

$$\delta\psi_{ijl} = (A_{i+1,jl}\delta\psi_{i+1,jl} + A_{i-1,jl}\delta\psi_{i-1,jl} + A_{ij+1l}\delta\psi_{ij+1l} + A_{ij-1l}\delta\psi_{ij-1l} + A_{ijl+1}\delta\psi_{ijl+1} + A_{ijl-1}\delta\psi_{ijl-1} - b_{ijl}) / \text{coef}_{ijl} \quad (\text{III-5})$$

Puis :

$$\delta\psi_{ijl} = \delta\psi_{ijl}(\text{ancienne}) + \omega(\delta\psi_{ijl} \text{ calculé} - \delta\psi_{ijl} \text{ ancienne}) \quad (\text{surrelaxation})$$

où :

$\delta\psi_{ijl}$: la nouvelle valeur à calculer au point i, j, l .

$\delta\psi_{ijl}(\text{ancienne})$: ancienne valeur de la fonction $\delta\psi_{ijl}$ au point (i, j, l)

$\delta\psi_{ijl} \text{ calculé}$: valeur de $\delta\psi$ calculée par l'expression (III-5).

ω : Facteur de surrelaxation.

Après tout calcul, nous imposons le critère de Damping qui permet de contrôler les corrections apportées aux variables afin qu'elles soient compatibles avec la stabilité du processus de résolution. Les corrections seront donc limitées à KT/q et nous pourrions ainsi éviter la divergence et par conséquent des valeurs non physiquement valables.

Un test de convergence est enfin effectué pour évaluer le nombre de points faux. En cas de convergence du système linéaire, une mise à jour des variables est effectuée en tenant compte des conditions aux frontières. L'ensemble de ces opérations sont données sur l'organigramme de la figure (III-4).

III-2-2-1-2) Résolution des équations de continuité :

Les deux équations de continuité des électrons et des trous sont considérées linéaires respectivement en N et P. L'algorithme de résolution est donné par l'organigramme suivant :

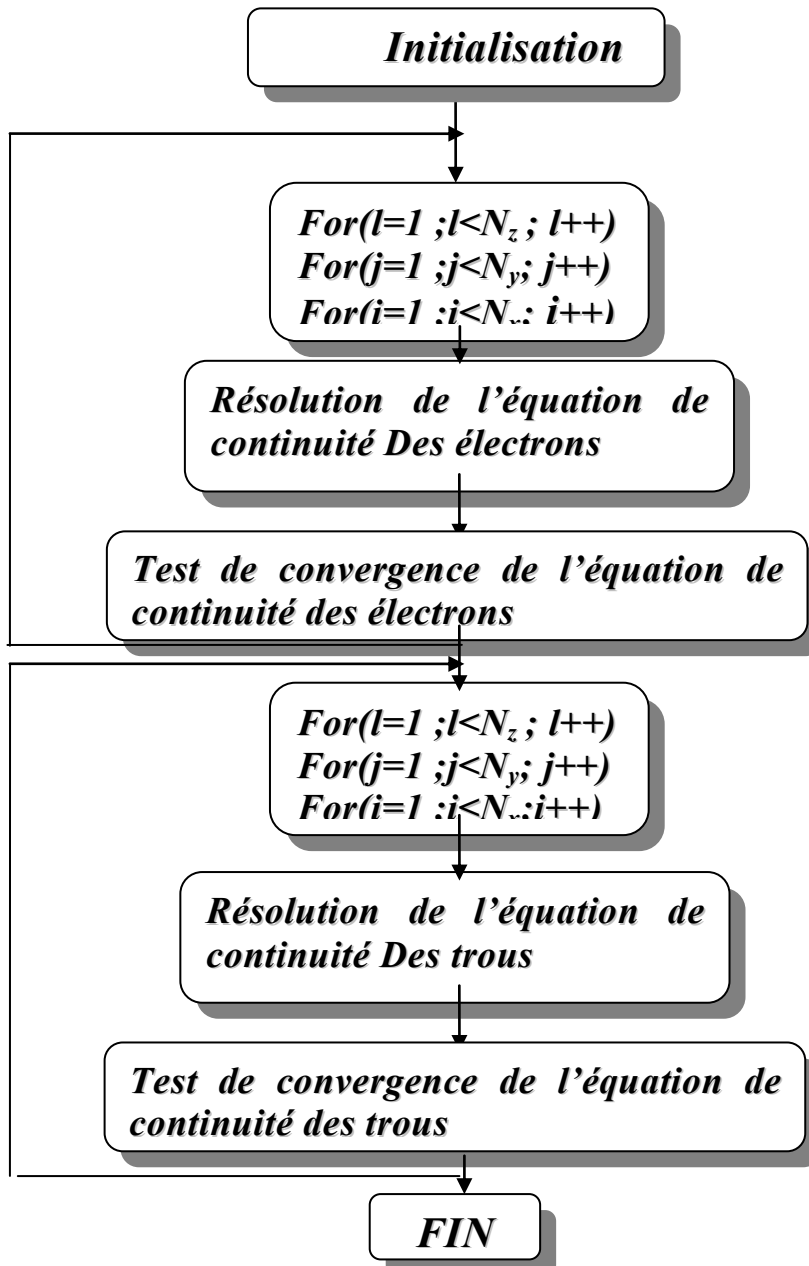


Figure (III-5) Organigramme de résolution des équations de continuité

III-2-2-2) Algorithme de Newton

III-2-2-2-1) Introduction :

L'algorithme de Newton ou méthode couplée [4][5][6] est mieux adapté à la résolution des équations fortement couplées liées à la considération des structures à base des semi-conducteurs à relaxation. Cette méthode est très sensible aux valeurs initiales, et sa convergence dépend essentiellement de ces derniers, ce qui nous a mené à tenir en compte des valeurs calculées à l'équilibre thermodynamique comme valeurs initiales.

En ce qui concerne la tension de polarisation, et pour toujours éviter le problème de divergence, on s'est proposé de polariser la structure utilisée, pas à pas. Ce ci consiste à créer un pas de polarisation et injecter à chaque fois les paramètres calculés précédemment dans une prochaine simulation avec un nouvel incrément du pas de polarisation.

Les principales étapes de cet Algorithme (voir figure III-6) sont les suivantes :

PREMIERE ETAPE :

Les données sont introduites par des fichiers en mode Read, ces fichiers contiennent le nombre de points évalués sur chaque direction, les valeurs du potentiel, des densités de porteurs libres calculées à l'équilibre thermodynamique, et les pas de discrétisation en chaque direction.

DEUXIEME ETAPE :

2-1) calcul des matrices U et F :

Suivant le principe de Newton on doit résoudre le système $U \cdot \delta = -F$ et pour cela on doit d'abord mettre au point la matrice jacobienne et le vecteur de correction (le calcul des éléments de la matrice jacobienne est exposé au chapitre II ainsi qu'en annexe)

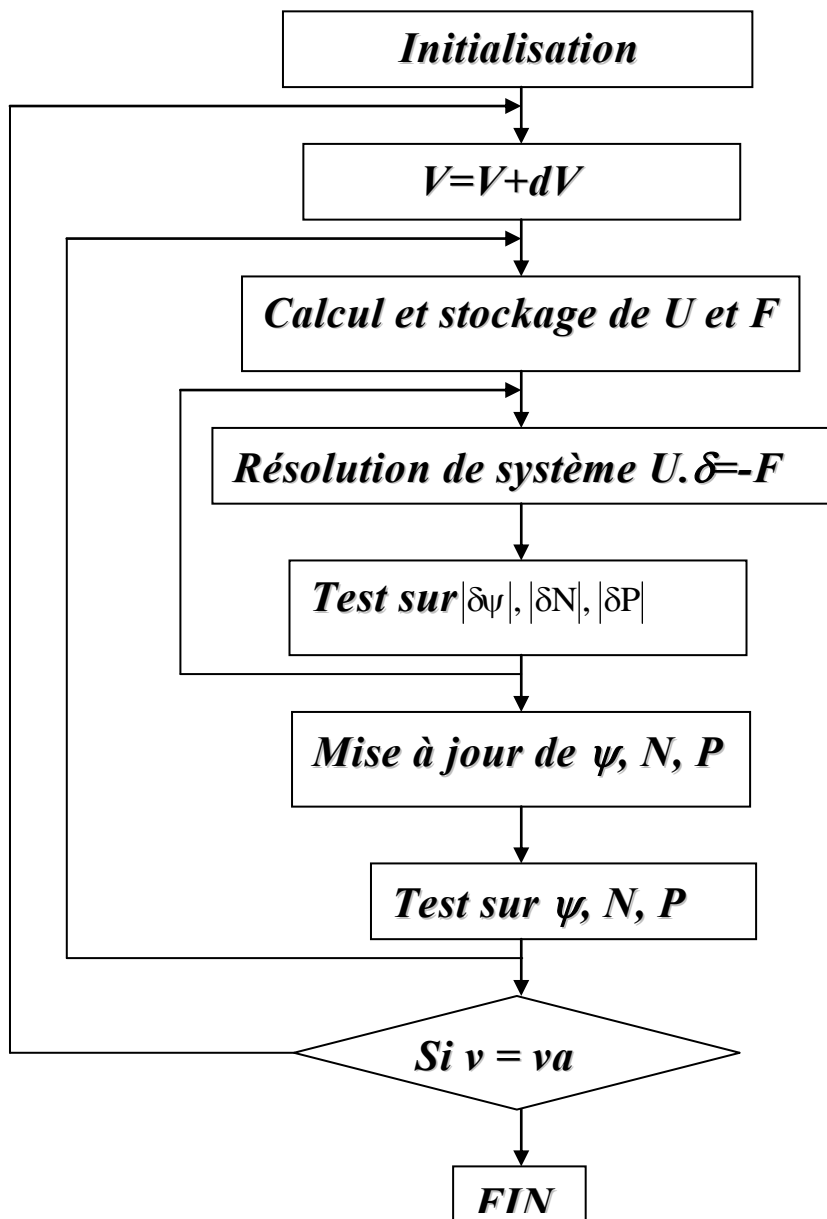


Figure (III-6) Organigramme de résolution par la méthode couplée

2-1-1) La matrice jacobienne [7]:

2-1-1-1) Origine septadiagonale de la jacobienne :

La résolution du système issue de la méthode de Newton [8] se fait en trois dimensions, ce qui signifie que chaque nœud de discrétisation possède six proches voisins (deux voisins selon chaque direction). Ainsi on peut distinguer la matrice jacobienne comme une matrice bande à sept diagonales d'éléments non nuls.

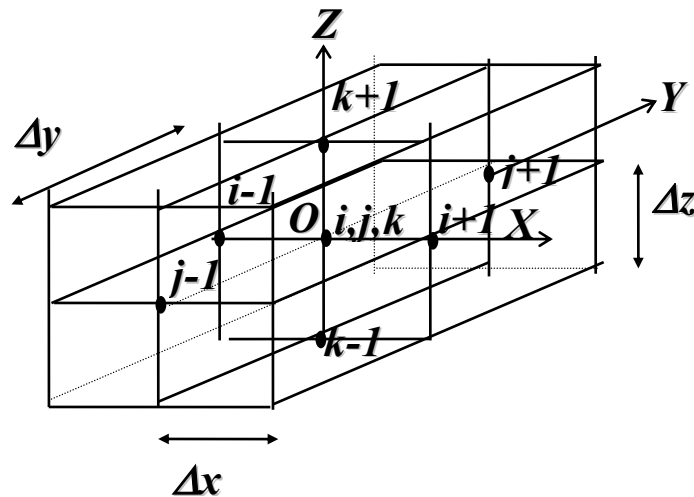


Figure (III-7) Représentation géométrique d'un ensemble de nœud de discrétisation

En tout point de discrétisation, la grandeur physique calculée est déterminée en fonction de la contribution du point lui-même plus celles de ses six proches voisins sur les trois directions de calcul X, Y et Z.

2-1-1-2) méthode de stockage des éléments non nuls de la matrice jacobienne [9]:

Soit M une matrice équivalente à la jacobienne U et d'ordre $n_x \cdot n_y \cdot n_z$. si on note par R un vecteur monodimensionnel et qu'on veuille établir une correspondance entre M et R, de manière à ne stocker dans R que les éléments non nuls de M, Nous aurons :

Concernant les nœuds voisins sur la direction OX, nous pouvons écrire :

$$M[i][j][l] = R[k]$$

$$M[i+1][j][l] = R[k+1]$$

$$M[i-1][j][l] = R[k-1]$$

Passer de l'élément $M[i][j][l]$ à l'élément $M[i][j+1][l]$, revient à parcourir tous les points séparant ces deux éléments qui sont au nombre de n_x pour arriver au point voisin sur la direction perpendiculaire au plan XOZ.

Passer de l'élément $R[i][j][l]$ à l'élément $R[i][j-1][l]$, il faut respecter le même principe mais cette fois en décrémentant de n_x points, tel que :

$$M[i][j+1][l] = R[k+n_x]$$

$$M[i][j-1][l] = R[k-n_x]$$

Passer de l'élément $M[i][j][l]$ à l'élément $M[i][j][l+1]$, nécessite le passage au plan suivant. En d'autre terme, on doit parcourir $n_x \cdot n_y$ points pour atteindre le point voisin sur la direction perpendiculaire au plan XOY.

Passer de l'élément $M[i][j][l]$ à l'élément $M[i][j][l-1]$, revient à suivre la même procédure, mais en décrémentant de $n_x \times n_y$ points, tel que :

$$M[i][j][l+1] = R[k+(n_x \times n_y)]$$

$$M[i][j][l-1] = R[k-(n_x \times n_y)]$$

En récapitulant, Le tableau suivant nous permet de repérer un élément du vecteur R par rapport à son équivalent dans la jacobienne M :

Elément de la matrice jacobienne	Elément du vecteur équivalent
M[i] [j] [l]	R[k]
M[i+1] [j] [l]	R[k+1]
M[i-1] [j] [l]	R[k-1]
M[i] [j+1] [l]	R[k+nx]
M[i] [j-1] [l]	R[k-nx]
M[i] [j] [l+1]	R[k+(nx*ny)]
M[i] [j] [l-1]	R[k-(nx*ny)]

Pour établir la correspondance entre un élément de la matrice M et son équivalent dans le vecteur R, la formule suivante peut être utilisée, tel que :

$$K=(i-1)+((j-1).n_x)+((l-1). n_x.n_y) \tag{III-6}$$

Dans le sens inverse, la position d'un nœud de coordonnées i, j, l se déduit par les expressions suivants :

$$i= \text{modulo}(k/n_x)+1 \tag{III-7}$$

$$L= \text{int}(k/n_x.n_y)+1 \tag{III-8}$$

$$J=(k-(i-1)-((l-1).n_x.n_y)+n_x)/n_x$$

Lors d'un calcul en un nœud en fonction des valeurs aux nœuds voisins, certains points peuvent ne pas nécessiter la contribution des six nœuds voisins classiques. En considérant le vecteur équivalent R, et pour vérifier l'éventuelle contribution des nœuds voisins pour un point donné, les tests suivants peuvent être effectués :

- 1) si $k < \text{dim}-1$ d2 existe,
- 2) si $k-1 \geq 0$ d3 existe,
- 3) si $k < \text{dim}-n_x$ d4 existe,
- 4) si $k-n_x \geq 0$ d5 existe,
- 5) si $k < \text{dim}-(n_x.n_y)$ d6 existe,
- 6) si $k-(n_x.n_y) \geq 0$ d7 existe.

2-1-2) Le vecteur F:

Les éléments du vecteur F second membre représentant chacun un vecteur de trois éléments qui sont la fonction de Poisson et celles de continuité ($-F_\psi, -F_n, -F_p$)

2-1-3) Résolution du système $U\delta=-F$:

Une écriture indicée du système linéaire $U\delta=-F$ est donnée par l'expression suivante :

$$U_{ijl-1} \cdot \delta_{ijl-1} + U_{ij-1l} \cdot \delta_{ij-1l} + U_{i-1jl} \cdot \delta_{i-1jl} + U_{ijl} \cdot \delta_{ijl} + U_{i+1jl} \cdot \delta_{i+1jl} + U_{ij+1l} \cdot \delta_{ij+1l} + U_{ijl+1} \cdot \delta_{ijl+1} = -F_{ijl} \quad (\text{III-9})$$

En remplaçant les coordonnées (i, j, l) par l'indice k nous aurons :

$$d7[k - (n_x \cdot n_y)] \delta[k - (n_x \cdot n_y)] + d6[k] \delta[k + (n_x \cdot n_y)] + d5[k - (n_x)] \delta[k - (n_x)] + d4[k] \delta[k + (n_x)] + d3[k - 1] \delta[k - 1] + d2[k] \delta[k + 1] + d1[k] \delta[k] = -F[k] \quad (\text{III-10})$$

III-3) CONCLUSION:

L'algorithme le mieux adapté à la résolution des équations non linéaires et fortement couplées découlant du modèle physique exposé au chapitre I est celui de Newton. L'algorithme de Gummel [9] intervient essentiellement lors des calculs de simulation à l'équilibre thermodynamique. Ces derniers résultats pouvant être injectés dans

L'algorithme de Newton pour une éventuelle étude de même composant sous polarisation.

La méthode combinée réunissant les deux algorithmes Newton [10] et Gummel permet d'aboutir à des résultats corrects en des temps de convergence satisfaisants.

Afin d'alléger l'encombrement des mémoires au cours des calculs 3D, une méthode originale de stockage d'éléments non nuls a pu être développée, permettant ainsi une exploitation plus souple de la matrice jacobienne U résultant de l'application de l'algorithme de Newton à la résolution de nos systèmes.

Références bibliographiques

[1] R.K.cook

Numerical simulation of hot carrier transport in silicon bipolar transistors.
IEE transaction on electron devices, vol .ED-30, n9 pp1103-1110,september 1983

[2]S.selberherr, C.A.Ringhofer

Implication of analytical investigations about the semiconductors equations on device modeling
IEEE transactions on computer Aided design of ICAS, vol CAD-3 n1,pp52-64 (january 1984)

[3] C.Ringhofer.C.Schmeiser

An approximate Newton method for the solution of the basic SIAM J.Numer
Anal, vol 26, n3, pp507-516 (june 1989)

[4] A.Resfa

Modelisation 3D du claquage par avalanche dans les structures à junction PN à GaAs
semi isolant présentant des centres profonds
These de magister université de sidi bel abbes, 2005

[5] C.S RAFFERTY, M.R PINTO and W.DUTTON

Iterative methods in semiconductors device simulation
IEEE transaction on electron devices, vol ED-32 n°100, pp.2018-2027, (October 1985)

[6] B.BOUABDELLEAH

Simulation numérique de la conduction dans le volume des composants à
semiconducteurs à relaxation
These de doctorat université Djillali liabes sidi bel abbes 2006/2007

[7] M.Khadraoui

Utilisation des méthodes couplés et découplées pour la simulation tridimensionnelle des dispositifs à jonction PN

Thèse de Magister Université de Sidi Bel Abbés 1998

[8] S.Selberherr

Analysis and simulation of semiconductor devices.

Wien, New York: Springer-Verlag; 1984

[9] F.S.NOUAR

Modélisation tridimensionnelle du transport dans une jonction PN en présence de centres profonds

Thèse de magister, Université Djilali liabes, sidi bel Abbés (1999)

[10] J.C. Manificier

Theoretical and numerical investigations of carriers transport in

N-semi-insulating-N and P-semi-insulating-P diodes – A new approach

Solid-State Electronics 52 (2008) 1162–1169 (2008)

Chapitre IV

***SIMULATION 3D DES DIODES
P-v ET P-v-N EN PRESENCE DES
CENTRES PIEGES***

IV-1) INTRODUCTION :

Nos programmes de simulation sont écrits en langage DEV C++ [1] sous Windows version 5, ce dernier offre la possibilité de déclarer des tableaux tridimensionnels de grande taille, et permet une meilleure gestion de l'espace mémoire.

Ils intègrent deux algorithmes de résolution qui sont ceux de Gummel et de Newton. Une combinaison des deux est souvent utilisée lors de nombreuses simulations, afin de réduire le temps de convergence souvent excessifs [2].

Le coté géométrique n'a pratiquement pas été considéré, le fait est que les structures utilisées ne présentent ni dissymétrie ni inhomogénéité nécessitant la considération de l'effet géométrique sur les résultats obtenus.

Le matériau que nous avons choisi étant le GaAs (voir annexe A), nous présenterons en premier lieu la structure de test ainsi que les paramètres de simulation physiques et électriques utilisés. Différents tests de simulation ont été effectués sous équilibre thermodynamique et sous polarisation directe et inverse.

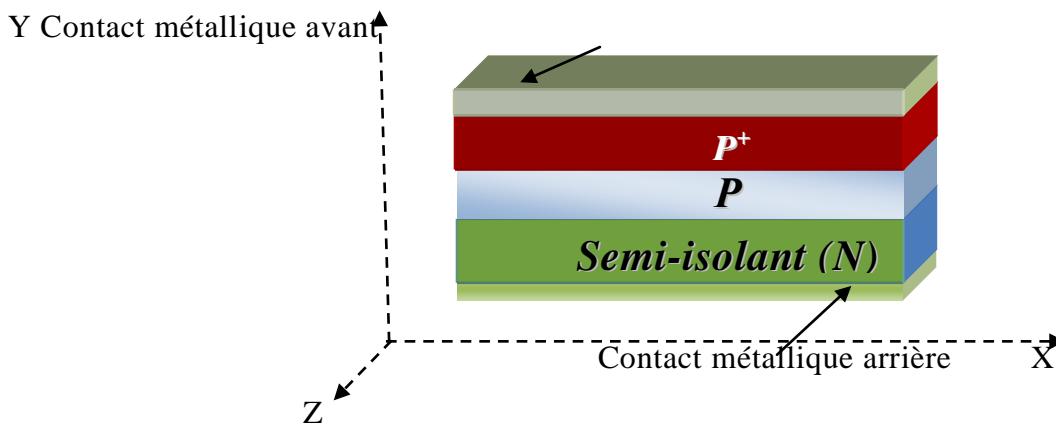
Dans ce chapitre, nous allons utiliser notre programme développé pour étudier le comportement électrique d'une diode polarisée en direct et en inverse. Nous entamons notre étude par un test de simulation sur une jonction P-v, ensuite, nous complétons notre étude sur le phénomène de transport dans une structure P-v-N. Le principe de base de nos programmes de calcul est basé sur la résolution numérique du système d'équations formé par les équations différentielles partielles de Poisson et les deux équations de continuité. Les inconnues du système obtenues permettent donc d'estimer la caractéristique courant – tension I-V de la structure polarisée.

IV-3) STRUCTURE DE TEST ET PARAMETRES DE SIMULATION :

Le semi-isolant (SI) de GaAs a été découvert comme l'un des matériaux de semi-conducteurs les plus intéressants dans le domaine médical, en particulier pour la fabrication des détecteurs de rayonnement utilisés dans l'imagerie numérique de rayons X.

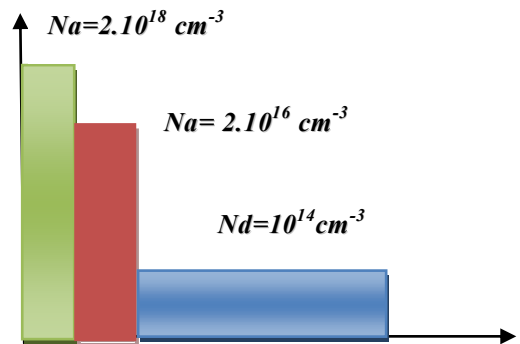
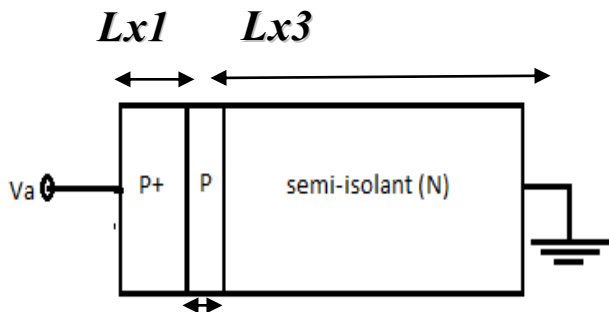
Cela a incité des études intensives pour l'amélioration de la technologie des détecteurs dans le but d'obtenir un bruit plus faible et une meilleure homogénéité des dispositifs monolithiques, à savoir une meilleure homogénéité de fond dans les images de radiographie numérique [3,4].

Les contacts métalliques de détecteurs de rayonnement GaAs sont principalement constitués par une simple barrière de Schottky qui contrôle le courant de fuite à la saturation. Cette technologie est à faible coût, mais elle est sensible à un traitement de surface avant l'évaporation des contacts métalliques. Toutefois, il est impossible d'obtenir la pleine reproductibilité des conditions de surface avant le dépôt de contact. Cela représente une grave source d'imperfections des dispositifs. Une manière possible d'améliorer les performances et l'homogénéité de rayonnement réseaux de détecteurs sur la base du Semi Isolant GaAs est liée à l'amélioration de la technologie du système d'électrodes. Une jonction formée par une électrode P^+ pourra diminuer le courant de fuite ainsi que l'effet de bruit en comparaison avec la technologie à jonction Schottky. McGregor et al. [5] a montré dans son étude les performances améliorées du détecteur de rayonnement avec un semi-isolant (SI) GaAs à hétérojonction développée par épitaxie en phase vapeur organométallique (MOVPE). L'électrode P^+ en GaAs peut être préparé par diverses technologies et diverses impuretés de type p sous la forme de homo-ou à hétérojonction.



**Figure IV.1 : Diode $P^+(GaAs)-P(GaAs)-N$
(Semi-Isolant GaAs).**

Dans notre simulation, et afin que les résultats de simulation seront proches des conditions technologiques d'un dispositif pratique, concret et en même temps sera un échantillon de test pour valider nos résultats de simulation, nous allons considérer comme telle structure : une diode de type P⁺(GaAs)–P(GaAs)-N(SI GaAs) donnée en figure IV.2).



Figure(IV.2) Diode P⁺(GaAs)–P(GaAs)-N (Semi-Isolant GaAs).

Figure (IV.3) Profil de dopage dans la structure

IV-3-1) Paramètres géométriques de la structure GaAs (P-v):

Les dimensions de la cellule solaire suivant l'axe X sont représentées dans le tableau suivant, ce sont des valeurs pratiques obtenues à partir de la référence [6] :

La zone P+	Lx1=250 nm
Zone P	Lx2=80 nm
Zone N	Lx3=5 -200 μm

Tableau IV. 1 Paramètres géométriques de la

Nous résumons l'ensemble des autres grandeurs des paramètres électriques et géométriques relatifs à la structure de test dans le tableau IV-2:

Paramètres physiques :

$$kT=26.10^{-3} \text{ eV.}$$

$$N_c=4.43.10^{17} \text{ cm}^{-3}.$$

$$N_v=8.84.10^{18} \text{ cm}^{-3}.$$

$$\epsilon_r=12.5.$$

$$n_i=2.10^6 \text{ cm}^{-3}.$$

$$E_G=1.432 \text{ eV.}$$

$$\mu_n=4000 \text{ cm}^2/\text{v.s}$$

$$\mu_p=280 \text{ cm}^2/\text{v.s}$$

$$\text{EL2 : } N_t=2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$$

$$n_{1r}=2.1.10^6 \text{ cm}^{-3}$$

$$p_{1r}=1.905.10^6 \text{ cm}^{-3}$$

$$\tau_{nr}=2.7.10^{-9} \text{ s}$$

$$\tau_{pr}=1.5.10^{-6} \text{ s.}$$

Er

$$n_{1r}=4.45.10^5 \text{ cm}^{-3}$$

$$p_{1r}=8.989.10^6 \text{ cm}^{-3}$$

$$\tau_{nr}=10^{-10} \text{ s}$$

$$\tau_{pr}=10^{-10} \text{ s.}$$

$$\text{Dopage de la partie P}^+ \quad N_A = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$$

$$\text{Dopage de la partie v} \quad N_A = 2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$$

Dopage de la partie

$$\text{semi isolante N} \quad N_D = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$$

Paramètres géométriques :

Dimension en largeur

$$Y = 2 \mu\text{m}$$

Dimension en profondeur

$$Z = 2 \mu\text{m}$$

Tableau IV-2 : Paramètres physiques, électriques et géométriques de la diode de test

IV-4) RESULTATS DE SIMULATION ET DISCUSSION :

La résolution numérique du système formé par l'équation du Poisson et les deux équations de continuité donne avec une bonne précision les grandeurs électriques indispensables pour le calcul de la caractéristique courant-tension I-V. Ces grandeurs sont la distribution du potentiel électrostatique $\phi(x,y,z)$, et les porteurs mobiles des électrons $n(x,y,z)$ et trous $p(x,y,z)$ ainsi que les pseudo-niveaux de Fermi $E_{FN}(x,y,z)$ et $E_{FP}(x,y,z)$ etc.

IV-4-1) Diagramme de bandes d'énergie :

Dans les figures IV.4 et IV.5, nous présenterons le résultat de calculs des diagrammes de bandes énergétiques suivant l'axe X de structure P⁺-P- Semi-isolant (N) dans les conditions de l'équilibre thermodynamique et hors équilibre thermodynamique.

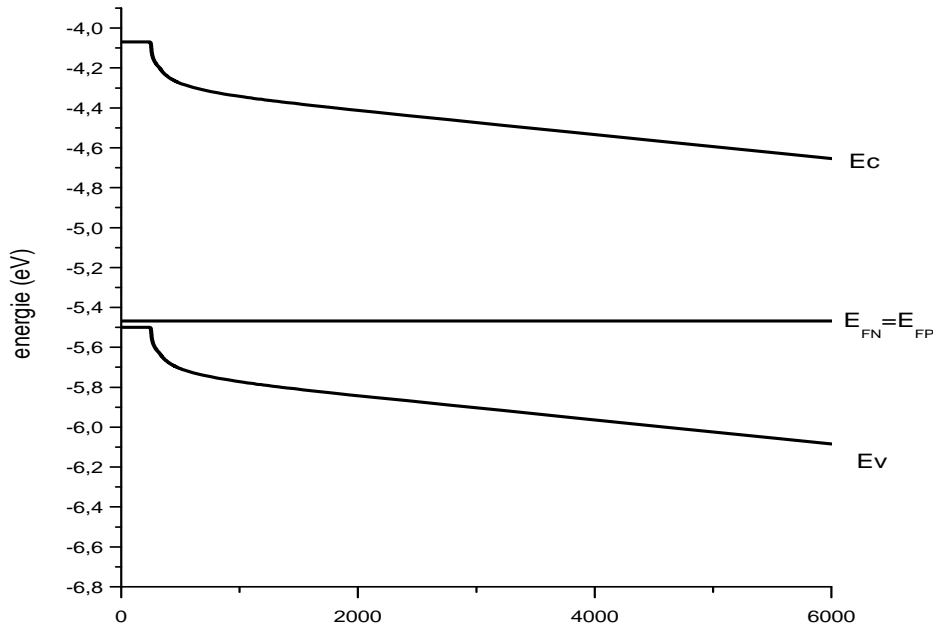


Figure IV.4 diagramme de bandes énergétique d'une structure P⁺-P-Semi-islant (N) à l'équilibre thermodynamique ($N_a=2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $N_a=2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $N_d=10^{14} \text{ cm}^{-3}$, $L_x=6 \mu\text{m}$)

Comme le montre le diagramme de bande énergétique (figure (IV.4)), à l'équilibre thermodynamique dont la tension appliquée est $V_a=0$, nous pouvons vérifier que les pseudo-niveaux de Fermi E_{Fn} et E_{Fp} sont alignés et indépendants de la position X. Ces derniers, sont les résultats de la résolution des deux équations de continuité des électrons et des trous et donc aucun courant ne circule à travers la structure. Le diagramme présenté dans la figure IV.4 est obtenu à partir du potentiel électrostatique, obtenu à son tour, de la résolution de l'équation de Poisson.

Dans les conditions hors équilibre ($V_a=0.2\text{V}$), la distance entre les pseudo-niveaux de Fermi est constante à l'intérieur de la zone de charge d'espace et grâce au champ électrique, une différence de potentiel électrostatique est donc créée entre les frontières de la région de charge d'espace comme le montre la figure IV.5.

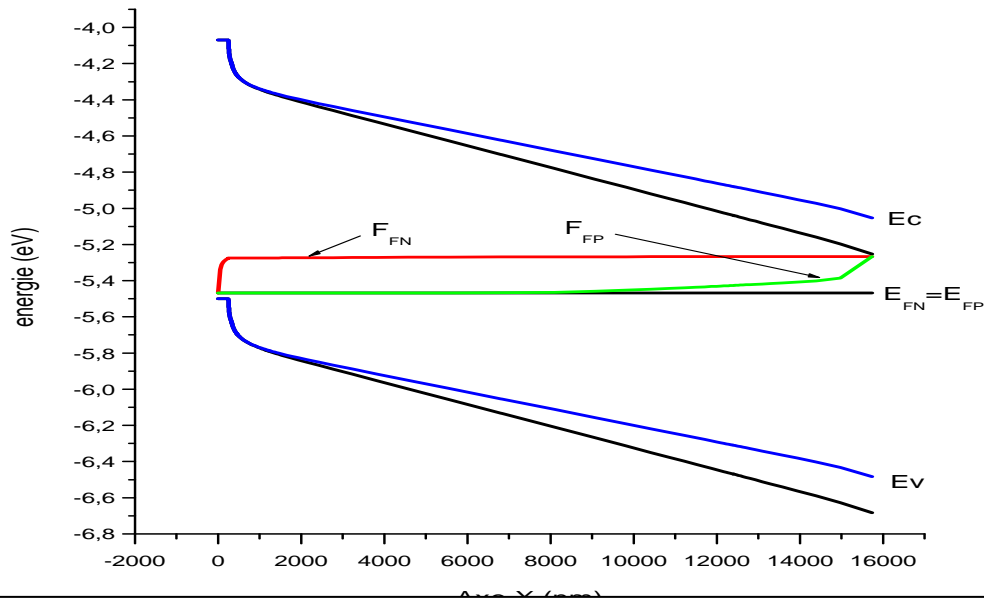


Figure IV.5 diagramme de bandes énergétique d'une structure P⁺-P-Semi-insulant (N) hors équilibre ($V_a=0.2V$) avec ($N_a=2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $N_a=2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $N_d= 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, $L_x=16\mu\text{m}$)

Lorsqu'on polarise la structure avec une tension V_a positive, la largeur de la zone de charge d'espace diminue. Ainsi, la différence entre les pseudo-niveaux de Fermi ou les quasi-niveaux de Fermi dans la zone quasi-neutre est bien égale à la tension de polarisation V_a . Ces entités permettent donc de décrire les densités des porteurs mobiles hors équilibres et donc le niveau de Fermi dans l'équilibre doit être remplacé par les quasi-niveaux de Fermi hors équilibre.

IV-4-2) Variation du potentiel électrostatique φ et les concentrations de porteurs mobiles n et p :

Ces trois paramètres sont donc le résultat de la résolution numérique tridimensionnelle du système formé par l'équation de Poisson et les deux équations de continuité des électrons et des trous, à partir desquels, nous déduisons la caractéristique courant-tension $I(V)$ des dispositifs électroniques. Nous allons donc examiner l'évolution de ces trois paramètres en considérant la jonction structure P⁺-P-Semi-insulant (N).

1) Potentiel électrostatique et champ électrique :

La figure (IV.6) illustre la distribution du potentiel électrostatique 3D de la diode à l'équilibre thermodynamique. Nous pouvons remarquer l'apparition de deux zones de charge d'espace l'une qui est faible qui se crée dans la jonction P⁺P avec une hauteur de barrière faible (de l'ordre de 0.1 V) et l'autre est plus importante, elle se crée dans la jonction P-N(SI) avec une hauteur de barrière (de l'ordre de 1 V).

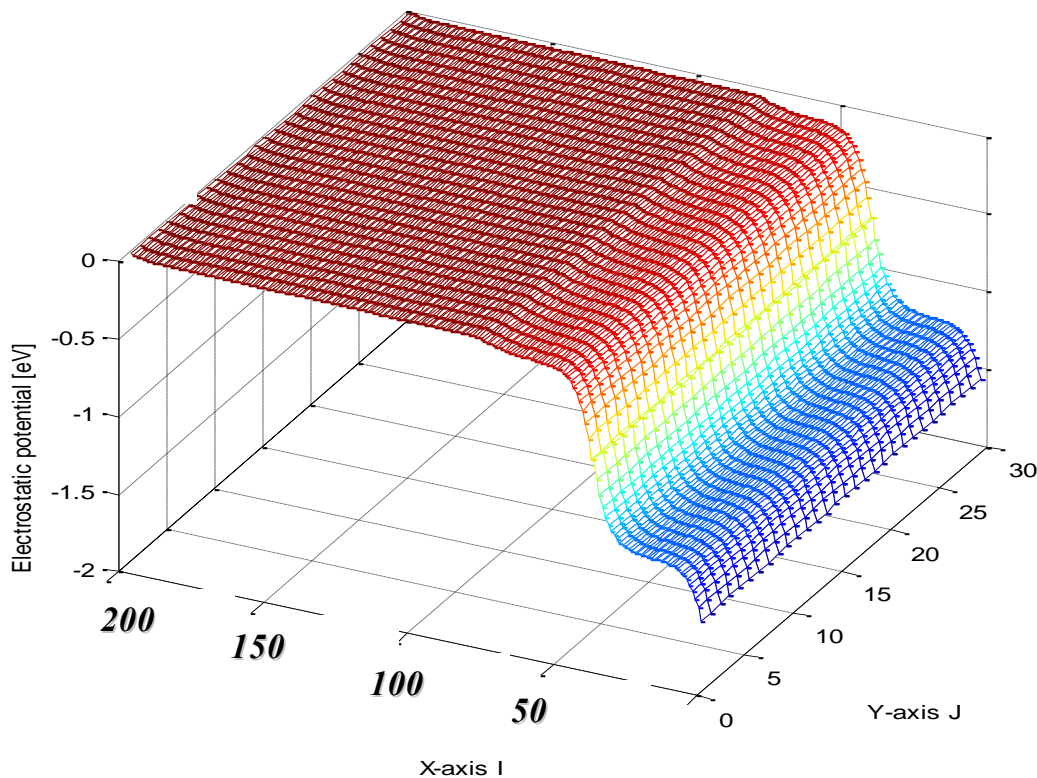


Figure IV.6 : Distribution du potentiel électrostatique de la diode P⁺-P-Semi-inslant (N) à l'équilibre thermodynamique avec ($N_a=2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $N_a=2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $N_d=10^{14} \text{ cm}^{-3}$)

Sachant que le potentiel électrostatique présente une forte variation au niveau des jonctions, le maillage que nous avons adopté dans notre programme de simulation pour cette structure est raffiné à ces zones. En effet, dans le régime électrostatique ces zones s'étendent dans la direction des polarités (direction de X) et selon les gammes de concentration de dopage de la couche et des tensions inverses utilisées dans la simulation afin d'améliorer la précision suivant l'axe des X, nous avons utilisé peu de nœuds dans la direction Z (4 nœuds).

La présence du champ électrique interne à l'intérieur des jonctions P⁺-P et P-Semi-insulant (N) signifie qu'il y a une différence de potentiel électrostatique à travers les régions de charge d'espace. Pour déterminer le profil du champ électrique interne et du potentiel électrostatique dans la jonction p-n, nous utilisons l'approximation d'épuisement qui suppose que la densité de charge ρ est nulle dans les régions quasi-neutres et elle est entièrement déterminée par la concentration de dopants ionisés dans la région de déplétion.

Après avoir calculé le potentiel électrostatique, nous pouvons déduire le champ électrique par la simple équation suivante :

$$E(x, y, z) = \int_{-xp}^{xn} \int_0^{yl} \int_0^{zk} \varphi(x, y, z) dx dy dz \quad (\text{IV-1})$$

La figure IV.7 illustre le résultat de simulation du champ électrique correspondant au potentiel électrostatique donnée en figure IV.6.

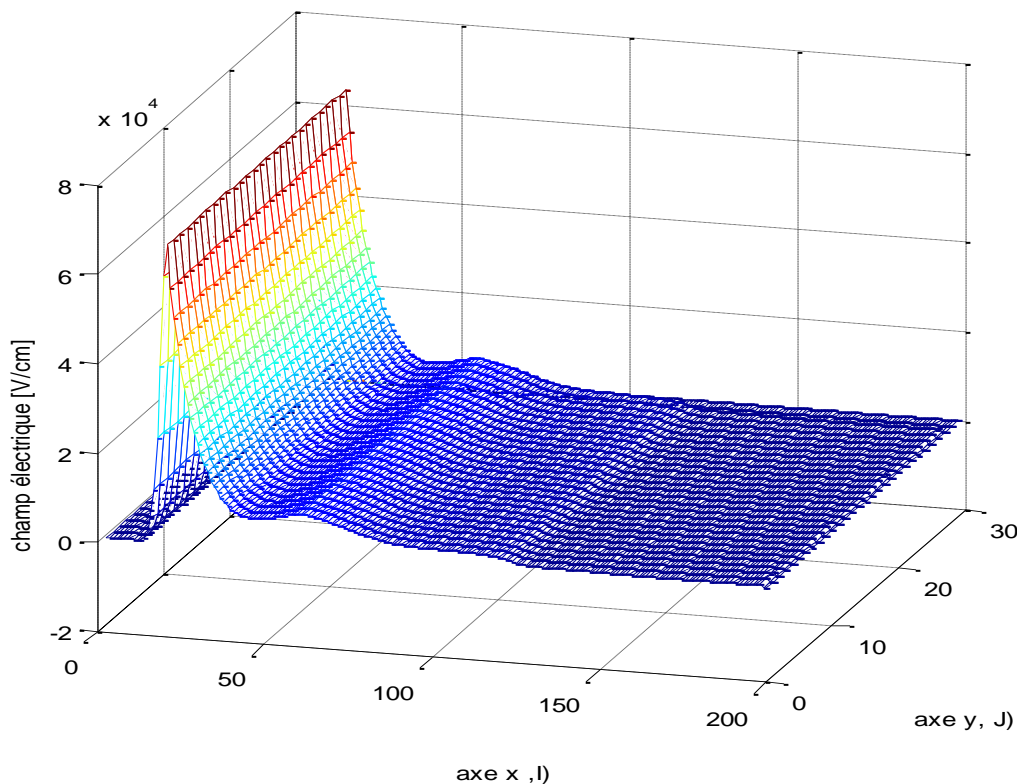


Figure IV.7 : Distribution du champ électrique de la diode P⁺-P- Semi-inslant (N) à l'équilibre thermodynamique avec ($N_a=2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $N_a=2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $N_d=10^{14} \text{ cm}^{-3}$)

2) Concentrations des électrons et des trous :

Le profil de concentration tridimensionnelle des porteurs de charge mobiles n et p dans la jonction étudiée est présenté dans la figure IV.8 et IV.9 Dans la région quasi-neutre P+ la concentration des trous est la même que dans les semi-conducteurs dopés ($N_a=2.10^{18} \text{cm}^{-3}$). Les concentrations de porteurs de charge majoritaires dans la région de charge d'espace diminuent très rapidement. Ce fait, nous permet de supposer que la région de charge d'espace est épuisée de porteurs de charge mobiles et plus particulièrement la région semi isolante N.

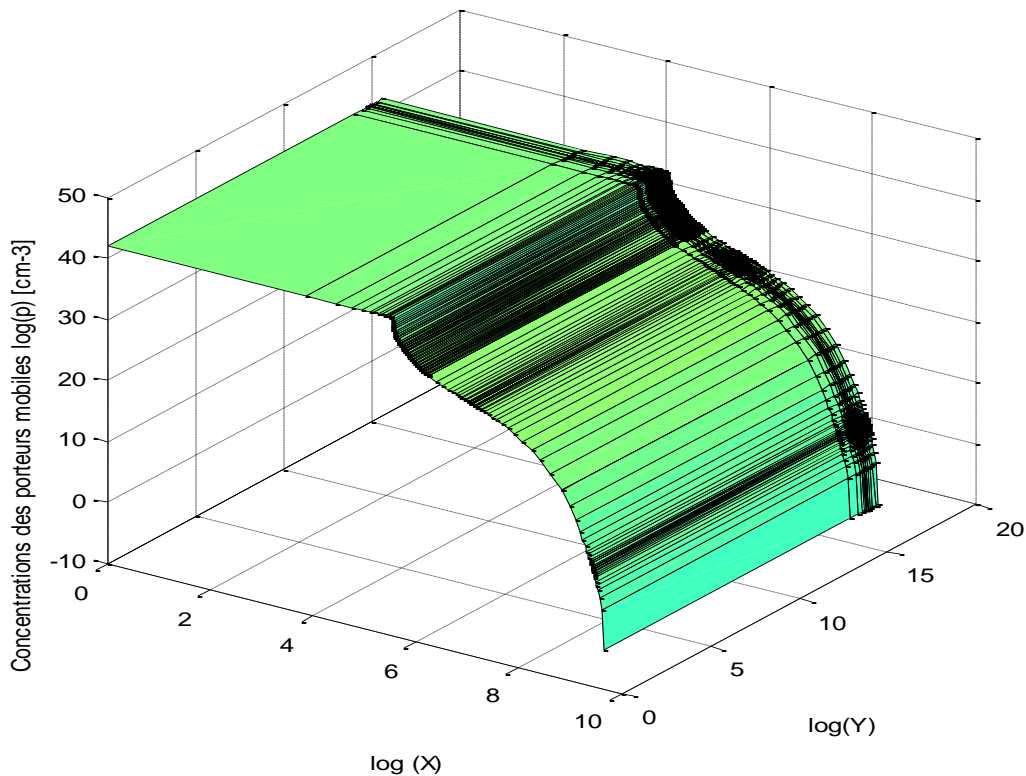


Figure IV.8: Distribution de la concentration des trous p de la diode P⁺-P- Semi-inslant (N) hors équilibre ($V_a=0.2V$) avec ($N_a=2.10^{18} \text{cm}^{-3}$, $N_a=2.10^{16} \text{cm}^{-3}$, $N_d= 10^{14} \text{cm}^{-3}$)

Concernant la distribution des trous (figure IV.9), le même raisonnement peut être appliqué ; les trous qui étaient minoritaire dans la région N deviennent majoritaires dans la région P⁺.

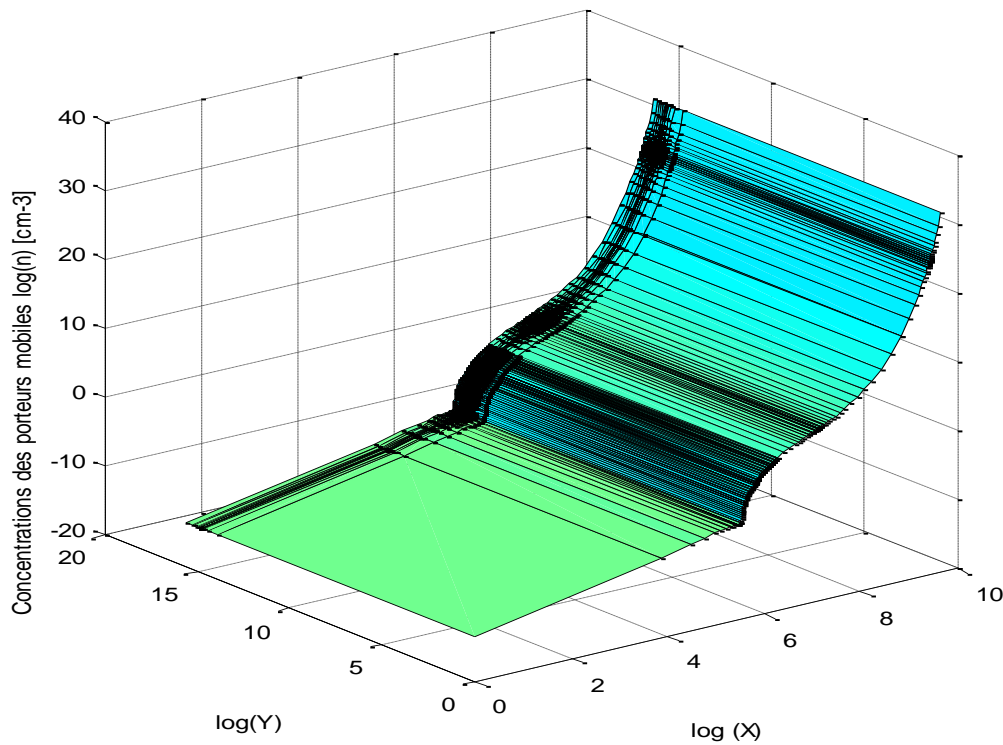


Figure IV.9 : Distribution de la concentration des électrons n de la diode P^+-P- Semi-inslant (N) hors équilibre ($V_a=0.2V$) avec ($N_a=2.10^{18} cm^{-3}$, $N_a=2.10^{16} cm^{-3}$, $N_d=2.10^{12} cm^{-3}$)

Afin de voir les deux effets des concentrations n et p , nous traçons leur variations à 1 D dans une même courbe (Figure IV.10).

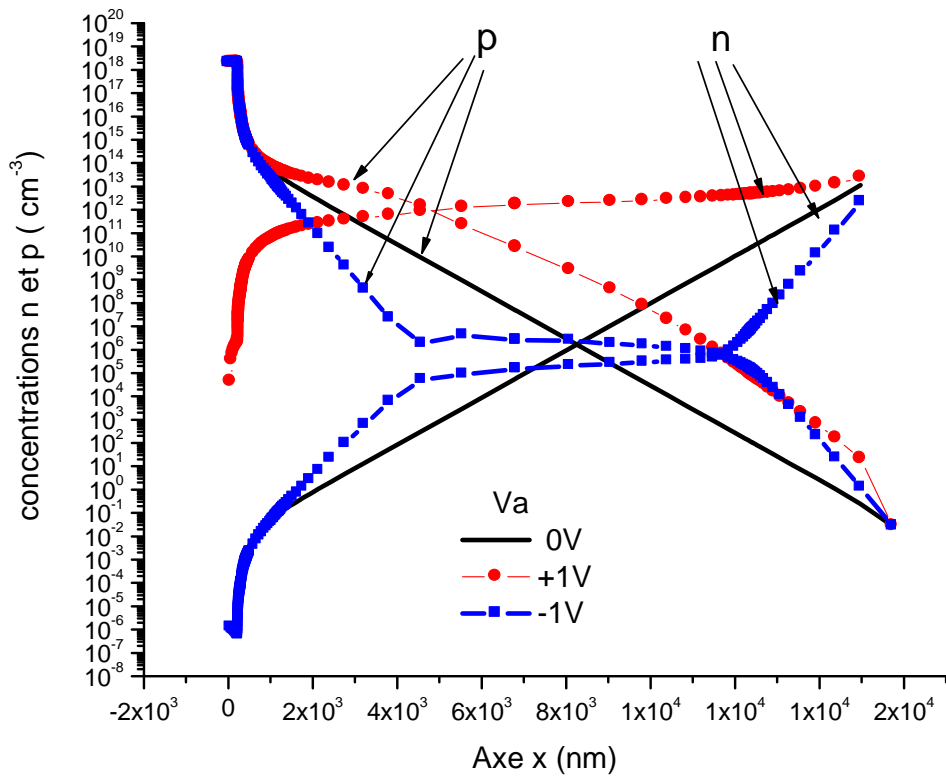


Figure IV.10 Distribution des concentrations des porteurs n et p hors équilibre de la diode P⁺-P- Semi-inslant (N)

Cette figure montre que la concentration de porteurs majoritaires ne change pas de manière significative tandis que la concentration de porteurs minoritaires (électrons dans la région de type p et les trous dans la région de type n) va fortement augmenter.

Sous polarisation inverse les valeurs des concentrations en électrons et en trous subissent une diminution importante par rapport à celles obtenues à l'équilibre thermodynamique. Par contre, sous polarisation direct, le phénomène est inversé.

La concentration des porteurs minoritaires à la frontière de la région de charge d'espace augmente exponentiellement avec une application de tension de polarisation directe suivent la loi de la statistique Maxwell-Boltzmann :

$$np = n_i^2 \exp\left(-\frac{qV}{kT}\right) \tag{IV - 2}$$

Mais il est encore beaucoup plus faible que la concentration des porteurs majoritaires (faible injection de conditions).

3) Densités de courant j_n et j_p :

En utilisant le potentiel électrostatique $\psi(x,y,z)$ et les concentrations des électrons et des trous $n(x,y,z)$ et $p(x,y,z)$, nous pouvons déduire les densités de courant d'électrons et trous j_n et j_p par :

$$j_n = qn\mu_n \left(\frac{\partial\phi}{\partial x} + \frac{\partial\phi}{\partial y} + \frac{\partial\phi}{\partial z} \right) + qD_n \left(\frac{\partial n}{\partial x} + \frac{\partial n}{\partial y} + \frac{\partial n}{\partial z} \right) \quad (IV.3)$$

$$j_p = qp\mu_p \left(\frac{\partial\phi}{\partial x} + \frac{\partial\phi}{\partial y} + \frac{\partial\phi}{\partial z} \right) - qD_p \left(\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial z} \right) \quad (IV.4)$$

Nous avons simulé les densités de courant J_n et J_p de notre structure dans les conditions hors équilibre, le résultat est illustré dans la figure IV.11.

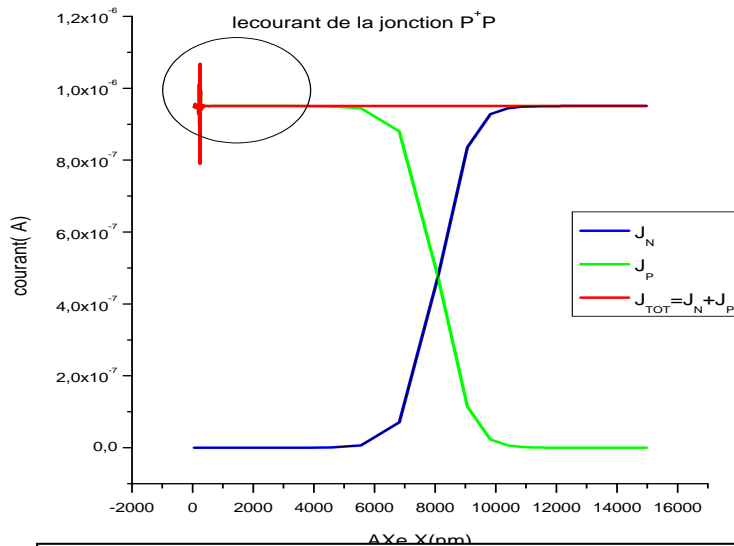


Figure IV.11 Distribution à l'échelle linéaire des densités de courant J_n et J_p structure $P^+(GaAs)-P(GaAs)-N(Semi\ isolant\ GaAs)$

Dans la figure IV.12, nous donnons La variation des densités de courants à différentes tensions appliqués (-1V, 0.2 V et 1V). Etant donné que l'ordre de grandeur des valeurs de courant est très différent, nous avons choisi une échelle semi-logarithmique.

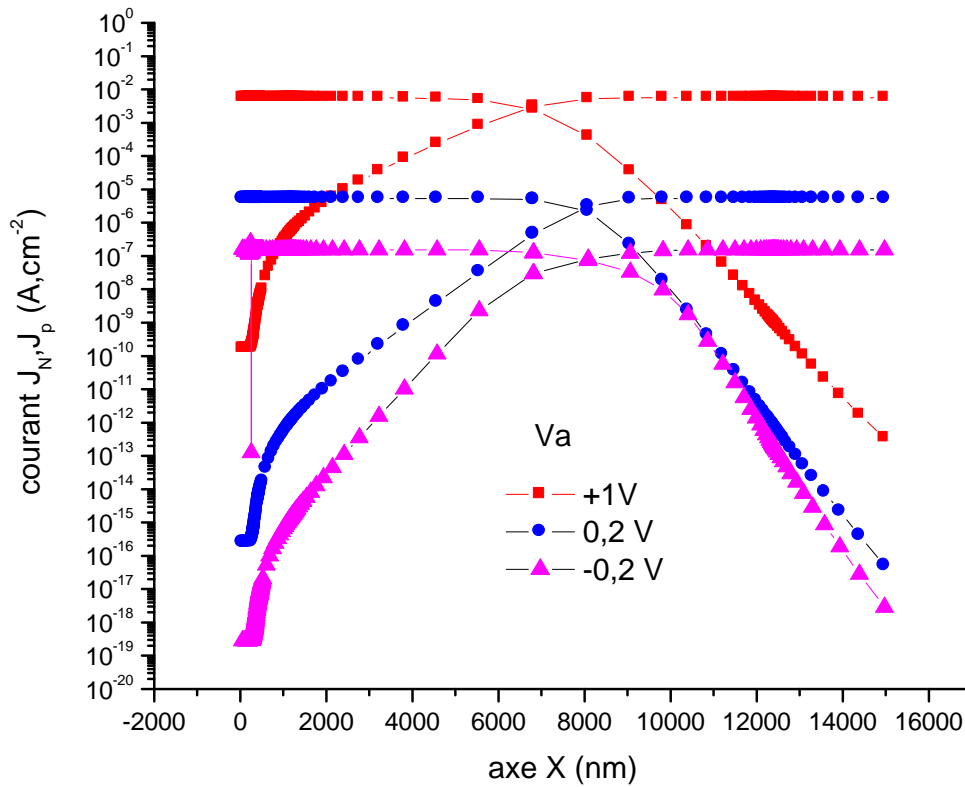


Figure IV.12 : Variation des densités de courants à différentes tensions appliqués (-0.2V, 0.2 V et 1V).

Les deux figures montrent que les trous et les électrons partagent la conduction du courant par leur apparition à partir de l'anode (contact gauche) et de cathode (contact droite) respectivement.

Sous polarisation, les densités de courant suivant l'axe des x sont décrites par les équations suivantes :

$$J_N(x) = \frac{qD_N n_{p0}}{L_N} \left[\exp\left(\frac{qV_a}{kT}\right) - 1 \right] \exp\left(-\frac{x}{L_n}\right) \tag{IV.5}$$

$$J_P(x') = \frac{qD_P p_{n0}}{L_P} \left[\exp\left(\frac{qV_a}{kT}\right) - 1 \right] \exp\left(-\frac{x'}{L_p}\right) \tag{IV.6}$$

Remarquons que dans notre calcul numérique , nous pouvons valider les résultats de courant en vérifiant sur la figure obtenue de Jn et Jp l'approximation de Scharfetter Gummel [7] [8] qui suppose que la somme de courant de trous et d'électrons reste constante le long de la jonction.

4) Caractéristique I-V :

La figure IV.13 représente les caractéristiques simulées des courant-tension de la structure

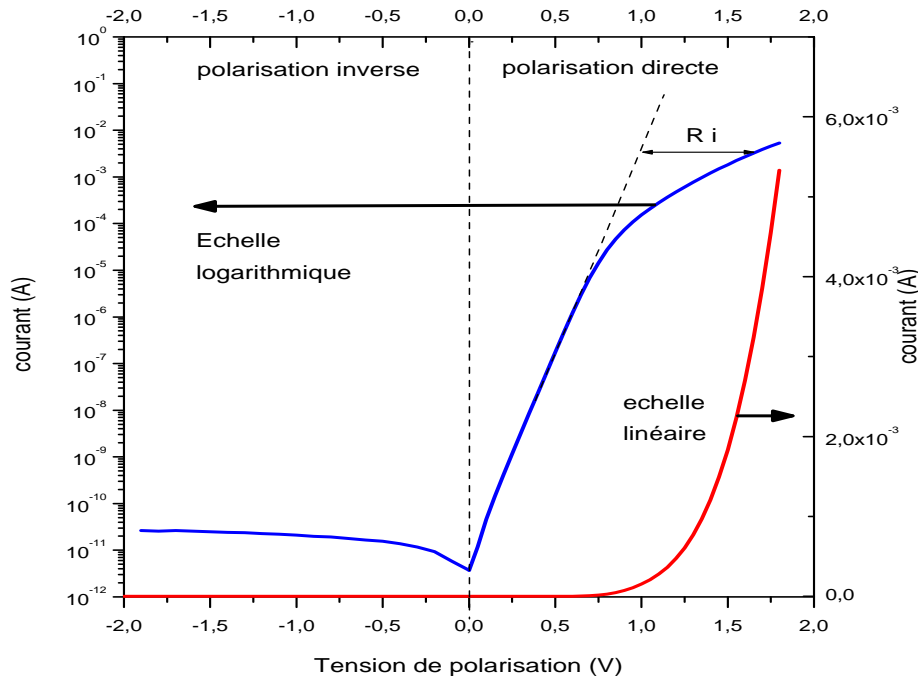


Figure IV.13 : Caractéristiques simulées I-V à l'échelle linéaire et semi-logarithmique de la structure hors équilibre ($N_a=2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $N_a=2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $N_d=10^{14} \text{ cm}^{-3}$)

Cette courbe de la variation de courant en fonction de la tension de polarisation de la structure P+ montre que notre diode P+P-N(Semi-Isolant) se comporte comme une jonction PN redresseuse c'est-à-dire elle conduit le courant en direct et le bloque en inverse.

A l'obscurité, et en l'absence de tension de polarisation, la situation à l'intérieur de la jonction peut être considérée par l'équilibre entre le courant de recombinaison et le courant de génération.

$$J = J_{rec} - J_{gen} = 0 \quad \text{pour } V_a = 0V$$

lorsqu'une faible tension de polarisation directe est appliquée à la jonction, le courant de recombinaison augmente avec le facteur de Boltzmann ($\exp(qV/kT)$) (l'approximation de Boltzmann):

$$J_{rec}(V_a) = J_{rec}(V_a = 0) \exp\left(\frac{qV_a}{kT}\right) \tag{IV. 7}$$

D'autre part, le courant de génération est presque indépendant de la barrière de potentiel à travers la jonction et il est déterminé par la disponibilité des porteurs minoritaires générés thermiquement dans les régions dopées :

IV-5) PHENOMENES DE TRANSPORT DE LA STRUCTURE
STRUCTURE P+-P-N (SEMI ISOLANT) GaAs EN PRESENCE
D'UN CENTRE PROFOND :

Un centre participant à un mécanisme de recombinaison du type Shockley Read et Hall est caractérisé par quatre nouveaux paramètres pouvant varier indépendamment l'un de l'autre n_{it} et p_{it} qui sont fonctions de la position d'énergie du niveau dans la bande et τ_{nt} et τ_{pt} paramètres liés aux sections efficaces de capture pour les électrons et les trous et enfin la densité N_t (cm^{-3}) du centre lui-même. L'analyse des mécanismes de transport peut être faite dans ce cas en considérant qu'un seul type de porteur qui domine le transport de courant en un point donné. La continuité du courant total est bien assurée à travers toute la structure. On passe ainsi d'un courant d'électrons à un courant de trous à travers une zone d'intense recombinaison (front de recombinaison).

Nous présentons par la suite, les résultats de comparaison du comportement électronique de la diode sans et en présence d'un centre profond avec différentes concentrations pour un régime stationnaire (Figure IV.14 et IV.15). Nous allons donc traiter le cas des semi-conducteurs compensés dont la concentration en centres profonds est importante.

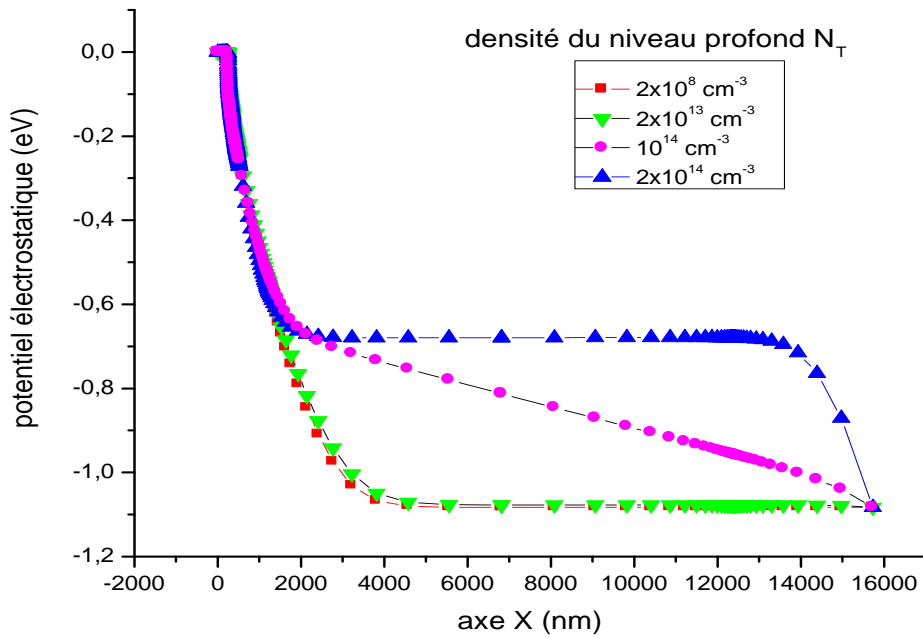


Figure IV.14 Variation du potentiel électrostatique à différentes concentrations Du niveau profond N_T

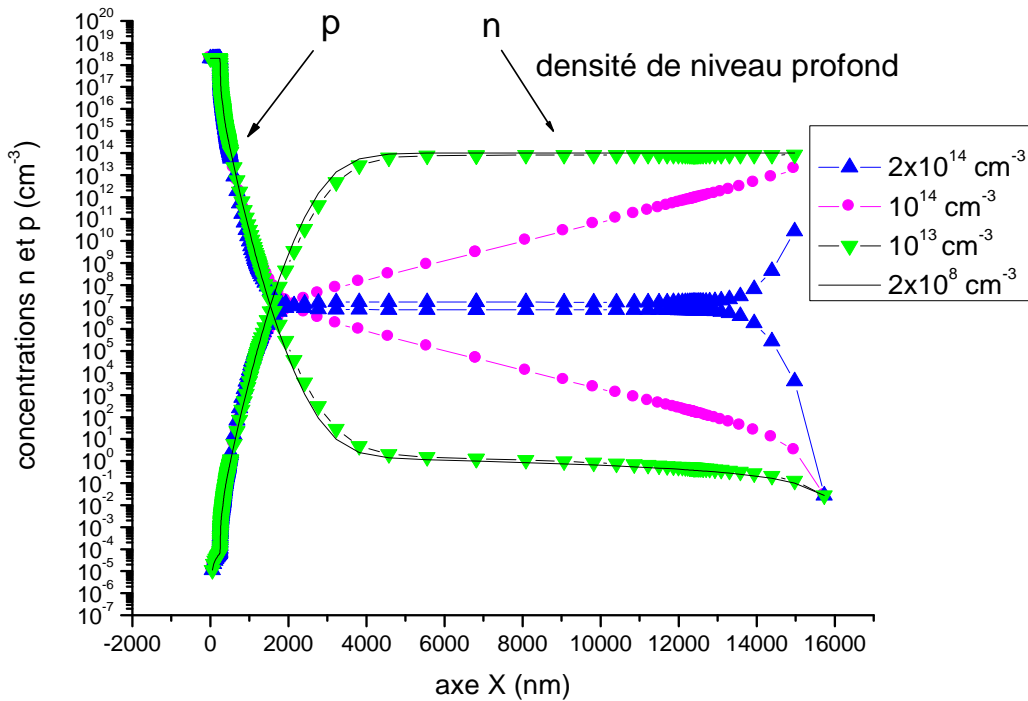


Figure IV.15 Variation des concentrations à différentes concentrations Du niveau profond N_T

Du point de vue analytique le calcul se fait de la manière suivante :

A l'équilibre thermodynamique, loin des zones de charge d'espace, la condition de neutralité électrique s'écrit :

$$n_e + N_A = p_t \tag{IV-8}$$

Avec

$$n_e = N_c \cdot \exp\left(-\frac{E_c - E_{Fe}}{K.T}\right) \quad \text{et} \quad p_t = N_t \cdot \left(1 + \exp\frac{E_{Fe} - E_t}{K.T}\right)^{-1} \tag{IV-9}$$

soit $\frac{n_e^2}{\alpha} + n_e \cdot \left(1 + \frac{N_A}{\alpha}\right) + N_A - N_t = 0$

avec $\alpha = N_c \cdot \exp\left(-\frac{E_c - E_t}{K.T}\right)$

On obtient

$$n_e = -\frac{N_A}{2} + \frac{N_A}{2} \cdot \sqrt{1 + \frac{N_t - N_A}{N_A^2} \cdot 4 \cdot \alpha} \tag{IV-10}$$

Et du fait que :

$$\frac{N_t - N_A}{N_A} \cdot 4 \cdot \frac{\alpha}{N_A} \gg 1$$

On peut écrire :

$$n_e = \left(\frac{N_t}{N_A} - 1\right) \cdot N_c \cdot \exp\left(-\frac{E_c - E_t}{K.T}\right)$$

D'après les courbes IV-15 et la formule (IV-11) on peut conclure que la densité des centres pièges joue un rôle important sur la détermination de la nature du semiconducteur.

La densité de centres profonds ionisés p_t s'écrit dans le cas du modèle Shokley – Read comme suit:

$$p_t = N_t \cdot \frac{\tau_{pt} n_{1t} + \tau_{nt} p}{\tau_{nt} (p + p_{1t}) + \tau_{pt} (n + n_{1t})} \tag{IV-12}$$

La variation de p_t est calculée à partir de la dérivée et on obtient :

$$\Delta p_t = N_t \cdot \frac{\tau_{nt} \cdot (\tau_{nt} \cdot p_{1t} + \tau_{pt} \cdot n) \Delta p - \tau_{pt} \cdot (\tau_{pt} \cdot n_{1t} + \tau_{pt} \cdot p) \Delta n}{(\tau_{nt} \cdot (p + p_{1t}) + \tau_{pt} \cdot (n + n_{1t}))^2} \quad (IV-13)$$

La considération de pièges à trou nous mène à la condition suivante :

$$\frac{\sigma_p}{\sigma_n} = \frac{\tau_{nt}}{\tau_{pt}} \gg 1 \quad (IV-14)$$

Ainsi la relation (IV-13) se réduit à :

$$\Delta p_t = \frac{N_t \cdot p_{1t}}{(p + p_{1t})^2} \cdot \Delta p \quad (IV-15)$$

Le fait que Δp_t est contrôlé par Δp , la charge d'espace aura tendance à devenir plus positive $\Delta p_t \gg \Delta p > 0$, ce qui explique l'augmentation de la densité de trous et par suite la diminution de celles des électrons.

Le calcul de l'épaisseur de la zone de charge d'espace s'effectue en considérant qu'elle s'étend essentiellement dans la région la moins dopée v, où la charge d'espace provient essentiellement des centres profonds ionisés tel que :

$$\rho = q \cdot (N_T - N_A) \quad (IV-16)$$

Ainsi on retrouve :

$$W_{(p^+v)} = \left(\frac{2 \cdot \epsilon \cdot V_d}{q \cdot (N_T - N_A)} \right)^{1/2} \quad (IV-17)$$

L'application d'une polarisation directe a pour conséquence une diminution de la largeur de la zone de charge d'espace, sa variation est essentiellement associée à une variation de l'occupation du centre profond Δp_t . Etant donné que les accepteurs sont totalement ionisés, le deuxième centre recombinant a une influence négligeable sur le stockage des charges à cause de sa faible densité. Il ne peut par conséquent intervenir que dans le processus de recombinaison vu sa grande section de capture découlant des faibles valeurs des durées de vie (τ_{nr} et τ_{pr} allant de 10^{-8} à 10^{-10} s). En effet une augmentation de la densité de trous injectés à travers le contact P^+v entraîne, une

augmentation de Δp_i et par suite un accroissement de la densité des électrons libres (figure (IV-15)) qui s'impose lorsqu'on se rapproche du contact P^+v , ayant pour effet la maintenance de la neutralité globale de la charge d'espace.

Le modèle de Schokley Read supposant une valeur du champ électrique négligeable dans les régions quasi neutres au voisinage du contact P^+v , nous pouvons à priori dire qu'il n'est donc pas suffisant à représenter de manière exacte les mécanismes de transport à travers une jonction P^+v en présence de centres profonds.

IV-6) JONCTION P-v-N

La structure de la diode PIN ou P-v-N est la base de tous composants de puissance. Son étude nous permet de bien connaître la physique et les caractéristiques électriques des composants de l'électronique de puissance. La diode PIN est une diode dans laquelle est interposée, entre ses zones P et N, une zone non dopée, dite intrinsèque (d'où I ou v) avec un contact ohmique. Cette diode, polarisée en inverse, présente une capacité extrêmement faible, une tension de claquage élevée. En revanche, en direct, la présence de la zone I augmente la résistance interne ; celle-ci, dépendante du nombre de porteurs, diminue quand le courant augmente : on a donc une impédance variable, contrôlée par une intensité (continue). Ces diodes sont donc soit utilisées en redressement des fortes tensions, soit en commutation UHF (du fait de leur faible capacité inverse), soit en atténuateur variable (contrôlé par un courant de commande continu).

La structure de la diode PIN est réalisée avec une couche P^+ très dopée par diffusion d'atomes accepteurs dans une couche épitaxie de type N très peu dopée. Cette couche est appelée zone centrale ou historiquement base intrinsèque. L'épitaxie N est réalisée sur un substrat épais très dopé de type P^+ .

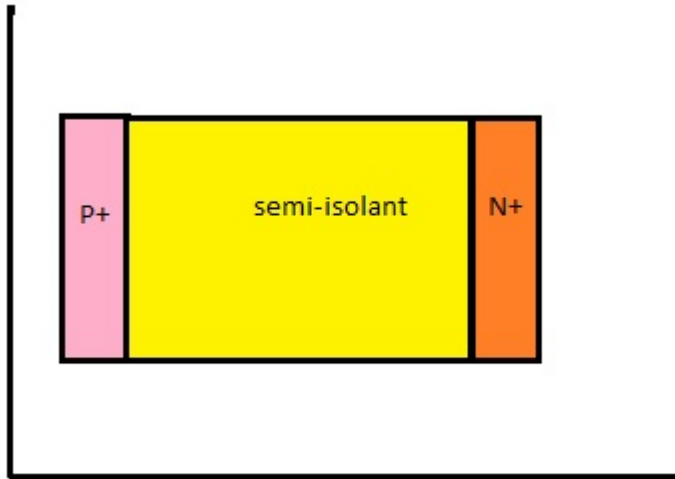


Figure. IV.16 Modèle géométrique d'une diode PIN à base de GaAs.

Les dimensions de la diode PIN suivant l'axe X et leurs profils dopage sont données dans le tableau IV.3 :

Zone P ⁺	$N_a=2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$
Zone I	Variable $n_i : 10^{14} \text{ cm}^{-3}$
Zone N	$N_d=10^{18} \text{ cm}^{-3}$

Tableau IV. 3 Paramètres géométriques de la

Les principaux paramètres caractérisant la structure étudiée ainsi que les constantes nécessaires pour le calcul sont ceux utilisés dans la structure P-v regroupés dans le tableau (IV-2).

IV-6-1) Simulation tridimensionnelle d'une diode P-v-N

Le même programme utilisé précédemment peut être utilisé pour cette structure. Nous commençons notre simulation sur une diode PIN réalisée à base de GaAs [10]. Avant d'entamer le calcul de la caractéristique I-V, nous allons déterminer d'abord certains paramètres dont ils peuvent intervenir dans le courant tels que le potentiel électrostatique, ainsi que les concentrations des porteurs mobiles des électrons et des trous à l'intérieur de la structure polarisée. La zone v est faiblement dopée de type n de

dopage résiduel (variant la concentration intrinsèque jusqu'à 10^{14} cm^{-3}). Ce niveau de dopage est électriquement équivalent au matériau GaAs intrinsèque.

1) **Potentiel et concentration des porteurs :**

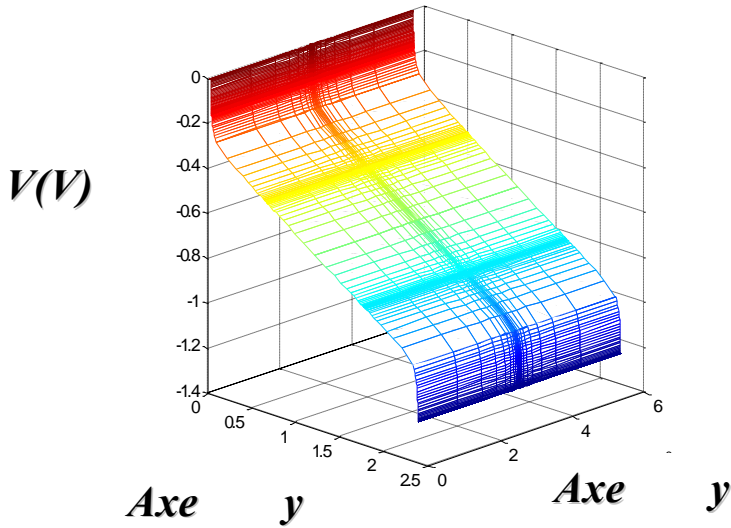
Dans les figures IV-17 (a, b et c) nous présentons les résultats de simulation obtenus par notre logiciel respectivement du potentiel électrique, la concentration des électrons et des trous libres à l'équilibre thermodynamique.

Une zone de charge d'espace se forme à la frontière de la zone P^+ et de la zone N. La zone intrinsèque peut être pas complètement dépletée à 0 V. Il est nécessaire d'appliquer une tension inverse suffisante pour que la zone soit complètement désertée de porteurs.

L'étude du potentiel électrostatique dans les deux diodes montre qu'il existe deux zones de charge d'espace dans la diode au voisinage de chaque jonction. Du fait du très fort niveau de dopage de la zone P^+ et du très faible niveau de dopage résiduel dans la zone I ($N_d \approx 10^{12} \text{ cm}^{-3}$), la ZCE de la jonction P^+N^- s'étend principalement dans la zone intrinsèque.

$$W_{zce} = X_{P^+} + X_{N^-} \approx X_{N^-} \quad (\text{IV.8})$$

Avec X_{P^+} et X_{N^-} . Sont respectivement les longueurs de pénétration de la zone de charge d'espace dans les zones P^+ et N^- .



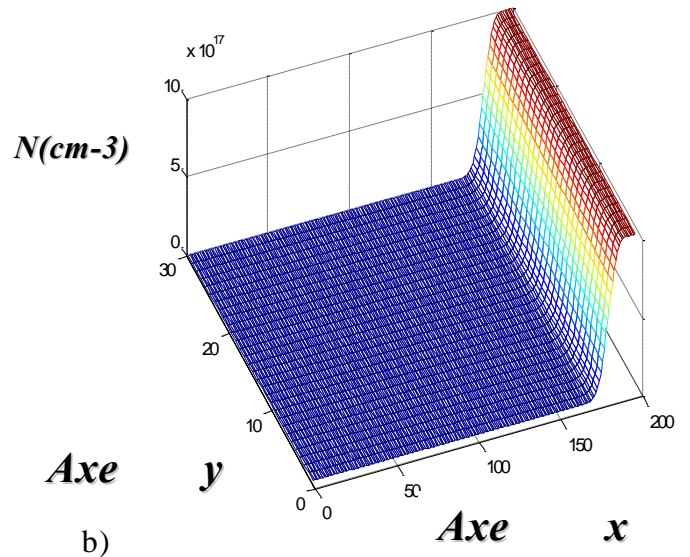
a)

a) Potentiel électrostatique $V(i,j,l)$

b) Concentration $n(i,j,k)$ (cm^{-3})

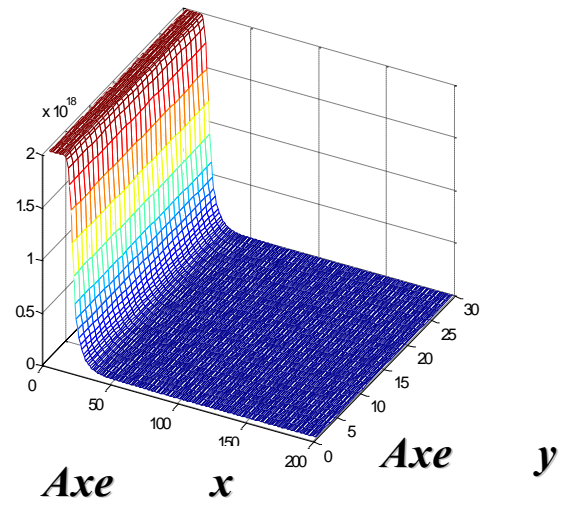
C) Concentration $p(i,j,k)$ (cm^{-3})

Avec une zone intrinsèque $L=0.25\mu\text{m}$



b)

$P(\text{cm}^{-3})$



c)

Figure V.17 Distribution 3D d'une structure P-v-N dans le plan (O,x,y)

Les concentrations des électrons et des trous présentées sur les graphiques (b) et (c) vérifient les variations données par les équations suivantes :

$$n = N_c e^{-(E_c - E_{Fn})/K_B T} \quad (IV - 9)$$

$$p = N_v e^{-(E_{Fp} - E_v)/K_B T} \quad (IV - 10)$$

Au voisinage de la jonction P-SI(N) et de la jonction SI(N)-N, une zone désertée de porteurs libres est apparue, et les trous du matériau P et les électrons du matériau N sont séparés par les barrières de potentiel et ne peuvent se recombiner.

1) Caractéristiques I-V :

Avant de tracer la caractéristique I-V, nous présentons en figure IV.18 la variation du potentiel électrostatique à différentes tensions de polarisation au niveau de la zone intrinsèque.

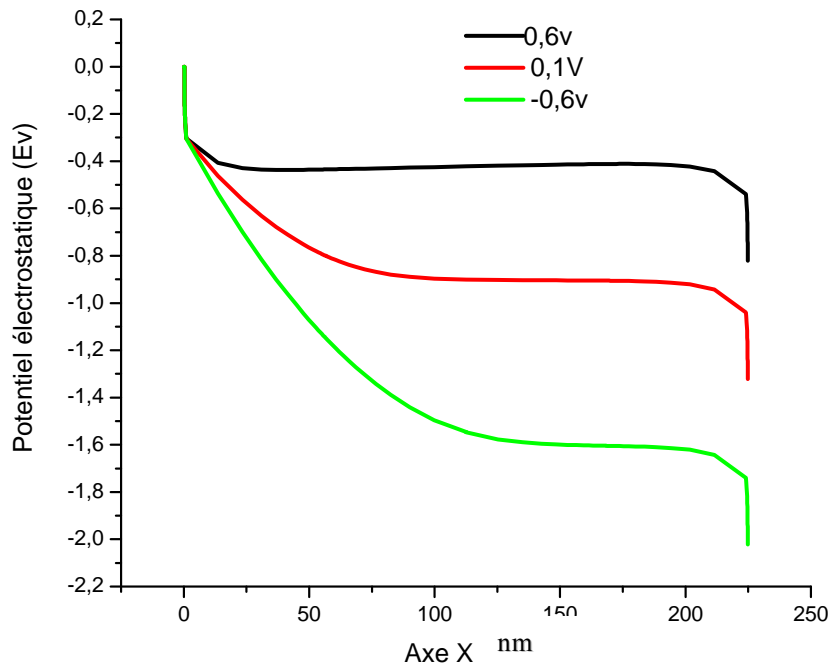


Figure. IV-18 Variation du potentiel électrostatique en fonction de la tension de polarisation

Nous observons que la largeur de la zone de charge d'espace varie proportionnellement avec la tension inverse, et par conséquent, la hauteur de la barrière de potentiel augmente et le courant diminue. Contrairement pour une polarisation inverse, la largeur de la zone de charge d'espace est inversement proportionnelle à la tension directe, ce qui conduit à une diminution de la hauteur de la barrière de potentiel et par conséquent le courant qui traverse la diode augmente.

La figure IV.19 illustre la caractéristique simulée courant-tension d'une diode

P-v-N en prenant la largeur de la couche isolante égale à 25 μ m avec un dopage $N_D=10^{14}\text{cm}^{-3}$.

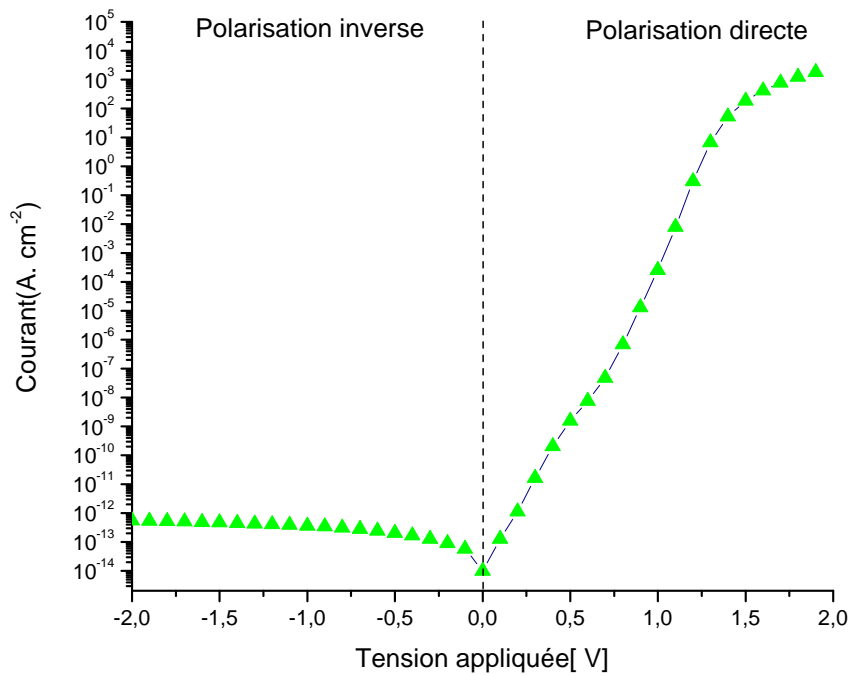


Figure IV.19 : Caractéristique simulée courant-tension d'une diode P-v-N

Cette caractéristique vérifie qu'une diode PIN se comporte comme diode redresseuse, c'est-à-dire, elle est conductrice lorsqu'elle est polarisée en direct et elle est bloquée en polarisation inverse. Une polarisation directe de la jonction consiste à appliquer une tension positive V_a au côté P, ce qui a pour effet de diminuer ces barrières de qV_a . Les valeurs des concentrations de porteurs augmentent, les trous et les électrons peuvent alors diffuser (transport sous l'effet d'un gradient de concentration) respectivement vers les régions N et P et se recombiner au voisinage de la jonction où il y a à la fois des trous et des électrons en excès par rapport à l'équilibre. Contrairement, la polarisation inverse a pour effet d'augmenter l'effet de barrière et le courant qui passe devient négligeable.

IV-4) CONCLUSION :

La validation du modèle de piégeage introduit dans le modèle physique du logiciel SIM 3D s'est effectuée par la simulation d'une diode longue P⁺v et P⁺v N⁺ réalisées à base du matériau GaAs.

L'étude à l'équilibre thermodynamique a permis une première visualisation des distributions de potentiel, les résultats obtenus servant de valeurs initiales pour la simulation (par la méthode de Newton) de la structure P⁺v et P⁺v N⁺ sous polarisation directe et inverse (méthode combinée).

Une optimisation du maillage par l'étude de plusieurs types de discrétisation a permis d'opter pour un maillage irrégulier à pas variable, l'avantage de cette méthode consiste dans l'obtention d'un maillage grossier dans les régions neutres et serré dans les régions voisines de l'interface P⁺v.

Les allures des courbes ainsi que les ordres de grandeurs des différentes concentrations déterminées par le calcul 3D sous polarisation directe et inverse sont physiquement correctes. L'application de plusieurs densités des centres pièges nous a permis de conclure que ces dernières jouent un rôle important sur la détermination de la nature du semiconducteur.

Un résultat typiquement lié à l'existence de pièges dans le semi-conducteur utilisé, a été observé en polarisation inverse de la structure de test, En effet, sous ce type de polarisation les courbes de concentration en électrons libres ont révélé un appauvrissement en électrons dans les zones quasi neutres de la région v faiblement dopée. Cet état est lié à l'existence d'une charge d'espace négative due à la considération de pièges à trou uniquement.

Nous avons validé nos programmes de simulation en vérifiant par la caractéristique I(V) que la diode PIN se comporte comme une diode redresseuse, elle conduit le courant direct et le bloque en inverse.

Références Bibliographiques

[1] Claude Delannoy

C++ for C programmers

Edition Eyrolles, paris 2007

[2] S.Nouar, R.Menezla , N.Taleb, et M.Le Helley

Simulation tridimensionnelle des composants à semi-conducteurs en présence des centres profonds .Programme SIM 3D

Communication accepté à la conférence maghrébine en génie électrique 1999 Constantine.

[3] S.Nouar, R.Menazla, S.Mansouri, et M.Le Helley

Modélisation tridimensionnelle du transport dans les jonctions PN en présence des centres profonds

Communication accepté à la rencontre internationale sur les composants et les systèmes électronique le 17-18 Mai 1999 Sidi Bel Abbés.

[4] S.selberherr, C.A.Ringhofer

Implication of analytical investigations about the semiconductors equations on device modeling

IEEE transactions on computer Aided design of ICAS, vol CAD-3 n1,pp52-64 (january 1984)

[5] R.Ardebili

Etude par simulation numérique du transport dans les semiconducteurs en présence de centres profonds

Centre d'électronique de Montpellier (laboratoire associé au C.N.R.S ;U A 391)

[6] B.K. Jones,* J. Santana and M. McPherson

OHMIC I-V CHARACTERISTICS IN SEMI-INSULATING SEMICONDUCTOR DIODES

Solid State Communications, Vol. 105. No. 9, pp. 547-549, 1998

[7] C.S.Rafferty, M.R.Pinto and W.Dutton.

iterative methods in semiconductors device simulation

IEEE transation on electron devices ,vol .ED-32, n10,pp2018-2027 (october 1985)

[8] W.Shokley, W.T.Read

Statics of the recombinaisons of holes and electrons

Physical review vol 67,(september 1952).

[9] Y.Moreau, J.c Manificier and H.K.Henisch

Minority carrier injection into relaxation semiconductor

J.Appl.Phys.60 :2904, (1986).

[10] J.F Wager and A.J.Mc Camant

GaAs MESFET interface consideration

IEEE trans. Electron devices ,ED 34,pp 1001-1007, (1987)

Chapitre V

***ETUDE COMPARATIVE DES
SEMICONDUCTEURS A
RELAXATION ET A DUREE DE VIE***

V-1) INTRODUCTION :

D'après la terminologie de Van Roosbroeck et Casey [1] les semi conducteurs se divisent en deux catégories les semiconducteurs à relaxation et les semi conducteurs à durée de vie selon que le temps de relaxation diélectrique est plus court ou plus long que la durée de vie des porteurs minoritaires injectés.

Si le temps de relaxation diélectrique est plus court que la durée de vie c'est le cas des semiconducteurs à durée de vie, dans le cas contraire ce sont les semiconducteurs à relaxation.

Pour une valeur τ_0 très supérieure au temps de relaxation diélectrique $\tau_{rd}(\tau_{rd} \ll \tau_0)$, les résultats obtenus peuvent être analysés en utilisant de simple injection et en supposant une durée de vie commune des porteurs en excès qui est constante pour les électrons et les trous à travers la région v ce type de semi-conducteur sera appelé un semi-conducteur à durée de vie .

Dans le cas contraire ou τ_0 est très inférieure au temps de relaxation diélectrique $\tau_{rd}(\tau_{rd} \gg \tau_0)$, les effets de charge d'espace est très importante par tout et les durées de vie des porteurs en excès varient énormément d'un point à un autre le long de la structure. Ce type de semi-conducteur sera appelé semiconducteur à relaxation.

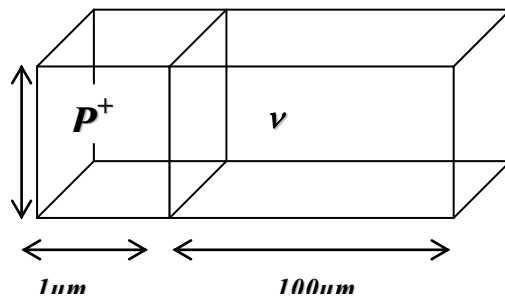
Le profil de distribution du potentiel, la concentration des porteurs libres, ainsi que le champ électrique et les caractéristiques courant- tension sont obtenus par la résolution numérique des équations phénoménologiques de transport pour les des structures semi conductrices du type P^+v à base de GaAs semi-isolant pour lesquelles un centre profond est considéré [2][3][4].

L'algorithme le mieux conforme à la résolution des équations non linéaires aux différences partielles découlant du modèle physique, établi est celui de Newton. Cette méthode cependant, ne converge rapidement que si les valeurs introduites sont convenablement choisies. Nous avons donc adapté une méthode combinée, qui réunit à la fois la méthode de Gummel et celle de Newton, créant ainsi un relais entre les deux algorithmes, permettant à la fin une diminution de temps de calcul et une meilleure convergence.

Nous allons donc nous intéresser à faire les calculs du potentiel, de la densité des électrons et des trous libres pour le semi-conducteur à durée de vie et à relaxation à l'équilibre thermodynamique et sous polarisation pour différentes tensions appliquées.

V-2) STRUCTURE P-N AVEC CENTRES PROFONDS:

Suite aux conclusions tirées au chapitre IV concernant les diodes Pv et PvN et à l'étude expérimentale qui montre que les phénomènes de transport sont accentués dans la jonction P-v. Nous allons d'abord commencer par cette structure pour pouvoir mieux constater la différence de comportement entre les semiconducteurs à relaxation et les semiconducteurs à durée de vie



**Figure V.1 schéma géométrique
des structure P-v GaAs**

La structure de la diode PIN est la base de tous composants de puissance [1]. Son étude va nous permettre de bien connaître la physique et les caractéristiques électriques des composants de puissance. Cependant et afin de mieux valider notre programme de simulation nous allons considérer une partie de la structure PIN qui est la jonction P-v où v est la zone représentant le matériau semi-isolant du GaAs.

La structure à étudier est donc une structure de type P-v où la couche v est légèrement de type N. Nous traitons les comportements opposés des semi-conducteurs à durée de vie et à relaxation par ajustement des paramètres τ_{ne} et τ_{pe} . Nous supposons aussi que les conditions initiales sont telles que les concentrations de porteurs sont fixées à leurs valeurs obtenues à l'équilibre thermodynamique, et nous allons utiliser deux types de conditions aux limites ;

- Dirichlet : elle est conditionnée par la valeur de la tension de polarisation appliquée
- Neumann : elle est appliquée sur les plans inconnus

Nous résumons l'ensemble des grandeurs numériques des paramètres électriques et géométriques relatifs aux deux structures de test dans le tableau suivant :

Paramètres physiques [7]:

$$KT=26.10^{-3} eV, \quad \epsilon_r=12.5 \quad \mu_n=4000 \text{ cm}^2/V, \quad \mu_p=280 \text{ cm}^2/V.s \quad n_i=3.10^8 \text{ cm}^{-3}.$$

$$\text{Zone P : épaisseur } W_p=1\mu\text{m} \quad N_A=3.10^{14} \text{ cm}^{-3}$$

$$\text{Zone n : épaisseur } W_p=100\mu\text{m}$$

$$N_D=1.5.10^{11} \text{ cm}^{-3}$$

$$n_1=3.10^9 \text{ cm}^{-3} \quad p_1=3.10^7 \text{ cm}^{-3}$$

Cas d'un SC à durée de vie

$$\tau_{nt}=\tau_{pt}=10^{-8} \text{ s}$$

Cas d'un SC à relaxation

$$\tau_{nt}=\tau_{pt}=10^{-11} \text{ s}$$

Ces paramètres nous conduisent aux valeurs suivantes pour les temps caractéristiques

Pour la zone n

$$\tau_{rd}=4.810^{-9} \text{ s}$$

$$\text{Cas d'un SC à durée de vie} \quad \tau_0=10^{-6} \text{ s}$$

$$\text{Cas d'un SC à relaxation} \quad \tau_0=10^{-11} \text{ s}$$

Tableau V.1 : paramètres physiques de la structure P-n

V.3) RESULTATS DE SIMULATION ET INTERPRETATION :

V-3-1) Potentiel et concentration des porteurs libres de la structure:

I) A l'équilibre thermodynamique

L'étude à l'équilibre thermodynamique est une étape essentielle pour une première simulation d'une structure de test [7]. Par ailleurs, la sensibilité de la méthode de Newton aux valeurs initiales nous mènera à utiliser les résultats obtenus à l'équilibre thermodynamique comme valeurs initiales. De plus, l'état d'équilibre thermodynamique figure (V-2) peut nous donner une première représentation des distributions de potentiel et de porteurs libres à travers une jonction. Dans ces courbes, nous avons choisi de tracer toutes les courbes en fonction des points i,j,k et non pas de la distance réelle en μm . Ce choix est argumenté par le fait qu'à une distance réelle on ne peut observer le changement de comportement électrique en passant d'un

semi-conducteur à un autre. Ainsi, nous choisissons de prendre 15 points sur la région P^+ , et 135 points sur la région v permettant de donner plus de points à la région de la zone de charge d'espace.

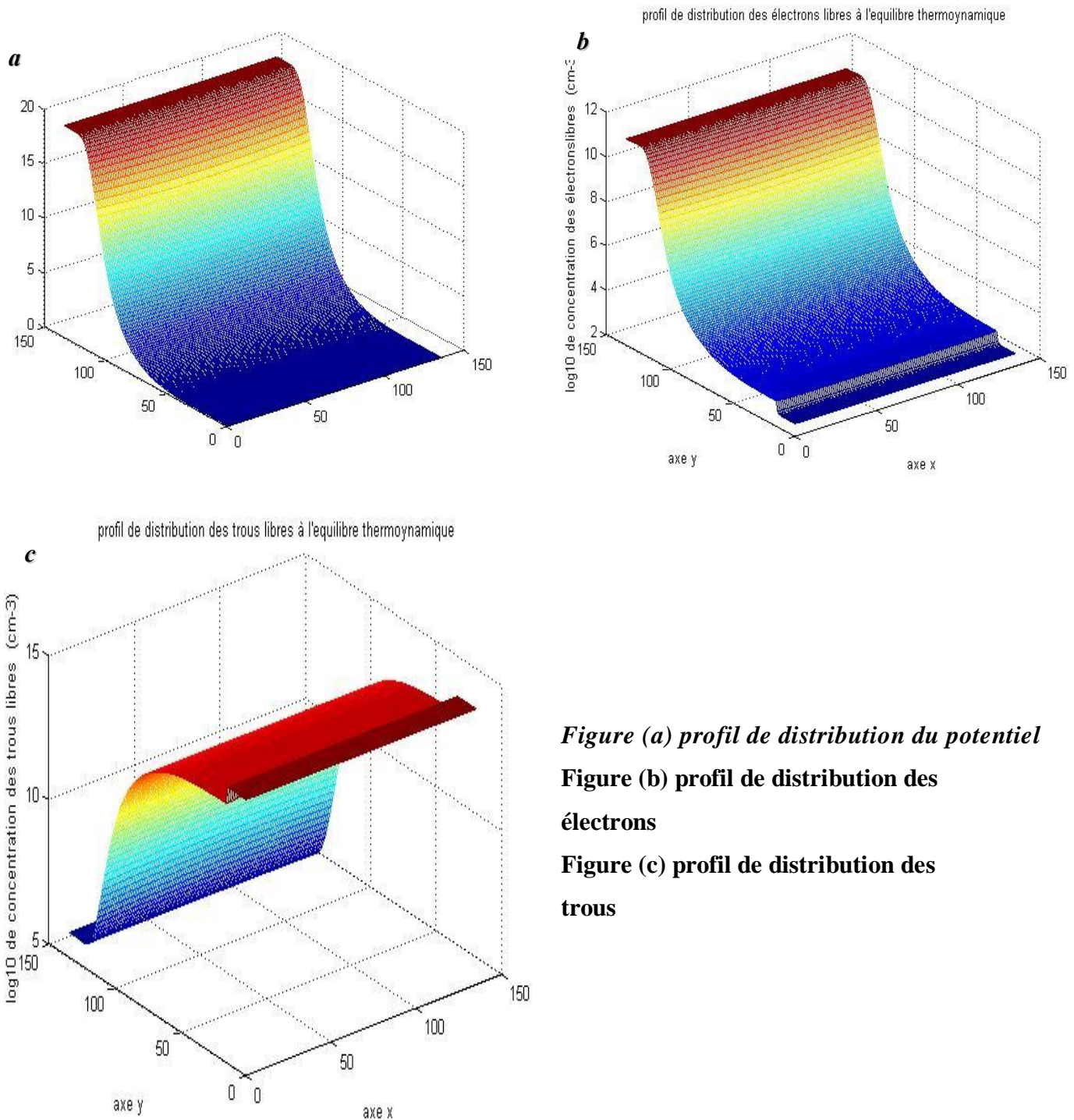


Figure (V-2) SC à relaxation et à durée de vie à l'équilibre thermodynamique

Les résultats de la simulation à l'équilibre thermodynamique sont obtenus par application de l'algorithme de Gummel appelé aussi méthode découplée. Les résultats obtenus pour les semiconducteurs à durée de vie sont identiques à ceux à relaxation et ils sont conformes aux paramètres physiques donnés pour la région p.

$N_A = 3.10^{14} \text{ cm}^{-3}$ et la région n est de type n de concentration $N_d = 1.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$, pour mieux comparer les concentrations n et p, nous représentons ces résultats suivant l'axe x uniquement

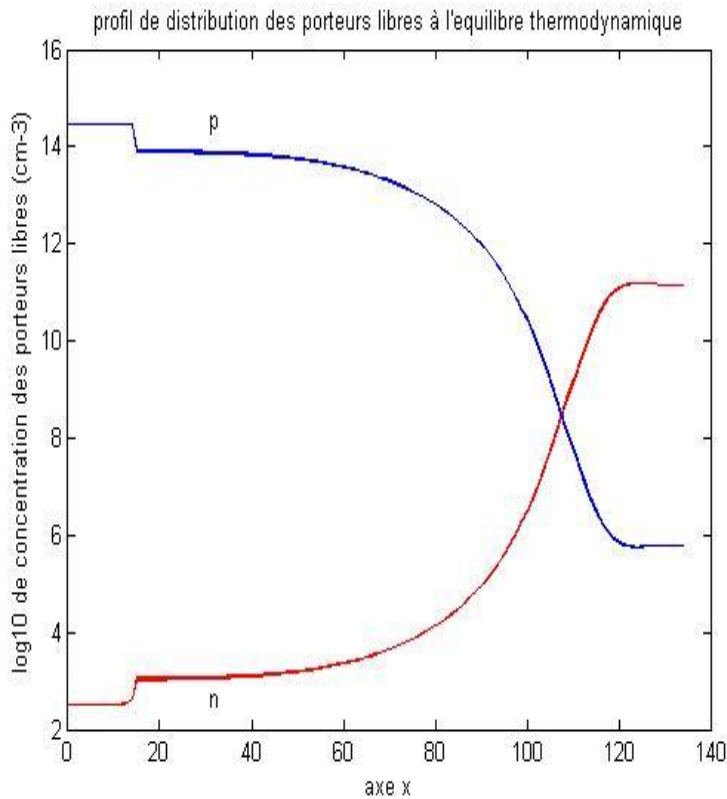


Figure (V-3) profil de distribution des porteurs à l'équilibre

D'après la courbe de la figure, il est visible que la zone de charge d'espace s'étend essentiellement à travers la structure la moins dopée N. Ceci a pour conséquence que le régime de conduction sera contrôlé par un effet de contact P n, où le potentiel de diffusion est de $20 \text{ KT}/q$ conforme au calcul analytique [8] :

$V_d = \log((N_A * N_d)/(n_i * n_i))$, soit, égale à la valeur retrouvée numériquement $V_d = 20.03 \text{ KT}/q$.

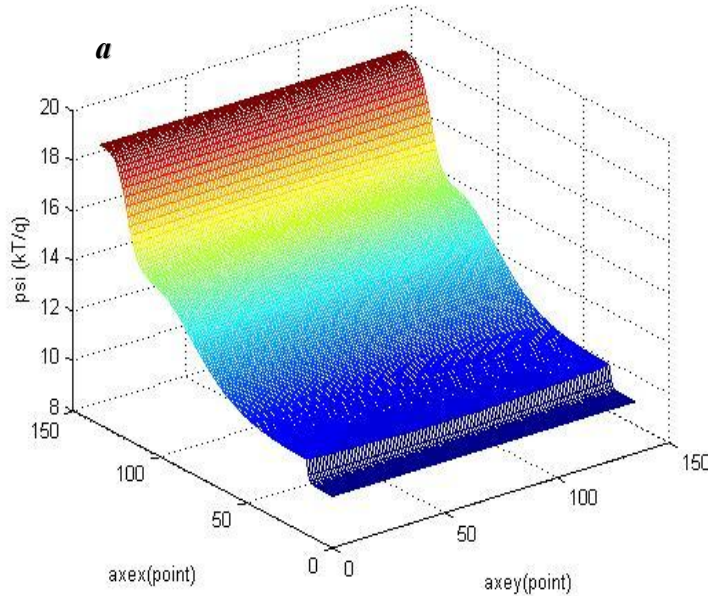
Les allures des courbes ainsi que les ordres de grandeurs des différentes concentrations déterminées par calcul 3D sont physiquement comparables aux calculs analytiques à une dimension.

II) Hors équilibre

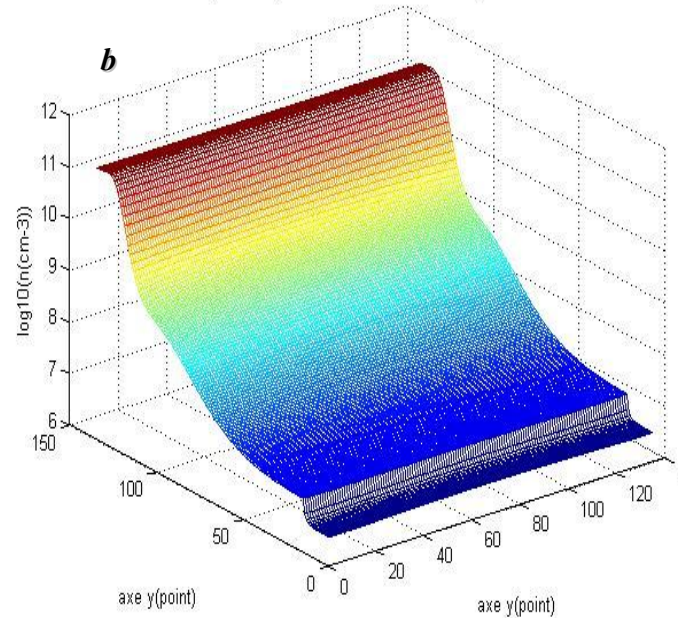
En règle générale, pour une tension pas trop élevée, l'effet de la diffusion peut être négligé à l'intérieur du volume, le comportement sera très différent pour les semiconducteurs à durée de vie ou à relaxation, nous considérons donc séparément ces deux cas :

1) Semiconducteurs à durée de vie

profil du potentiel pour une polarisation directe de $10 \text{ KT}/q$ pour un semi conducteur à durée de vie



profil de distribution des electrons pour une polarisation directe de $10 \text{ KT}/q$ pour un semi conducteur à dur



profil de distribution des trous libres pour une polarisation de $10 \text{ KT}/q$ pour un sc à durée e vie

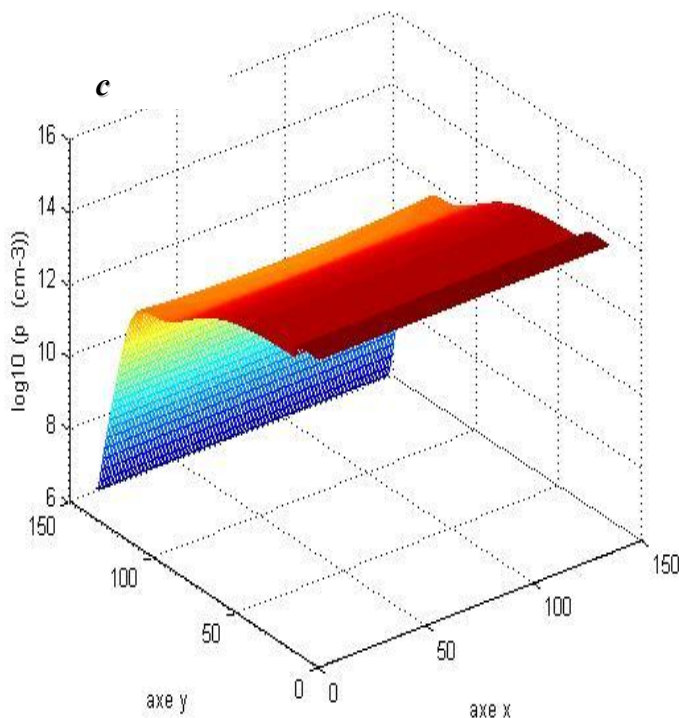


Figure (a) profil de distribution du potentiel

Figure (b) profil de distribution de la densité des électrons

Figure (c) profil de distribution de la densité des trous

Figure (V-4) SC à durée de vie sous polarisation de $10 \text{ KT}/q$

Dans la figure (V-4-a) nous constatons une distribution du potentiel qui prend la valeur de $10KT/q$ coté P^+ et qui commence à augmenter coté v jusqu'à qu'il atteigne la tension de diffusion de $20 KT/q$ à l'extrémité en créant pratiquement une zone de charge d'espace qui s'étend essentiellement sur toute la partie v .

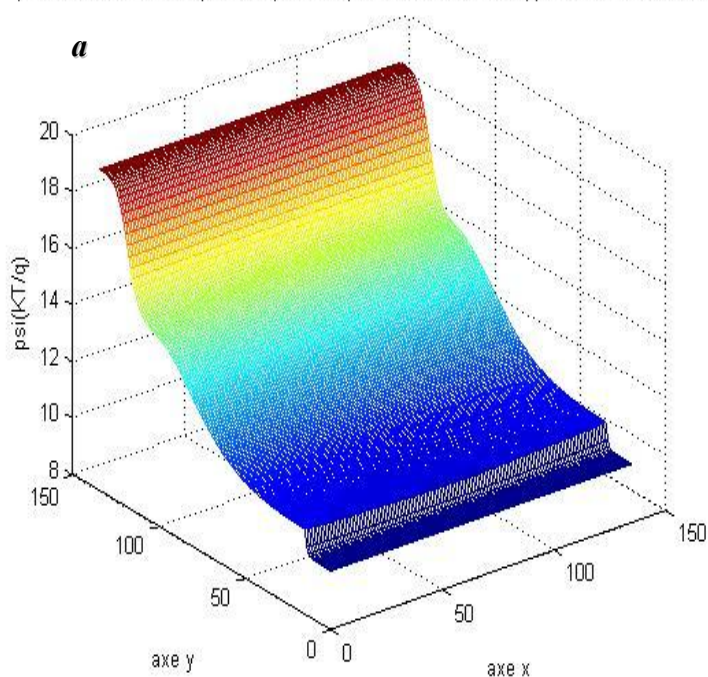
Nous remarquons une augmentation de la densité d'électrons libres sur la figure (V-4-b) à l'extrémité du coté v en fonction de la tension de polarisation avec une large zone de charge d'espace qui s'étend à travers la plupart de la zone la moins dopé v et qui confirme le résultat trouvé sur la figure (V-4-a).

Inversement aux électrons la concentration des trous voir figure (V-4-c) augmente de plus en plus en se rapprochant du coté P^+ , tout en gardant la même allure de la zone de charge d'espace représentée sur les autres courbes, tout en respectant les valeurs de N_d et de N_A à l'extrémité de la zone v et P respectivement.

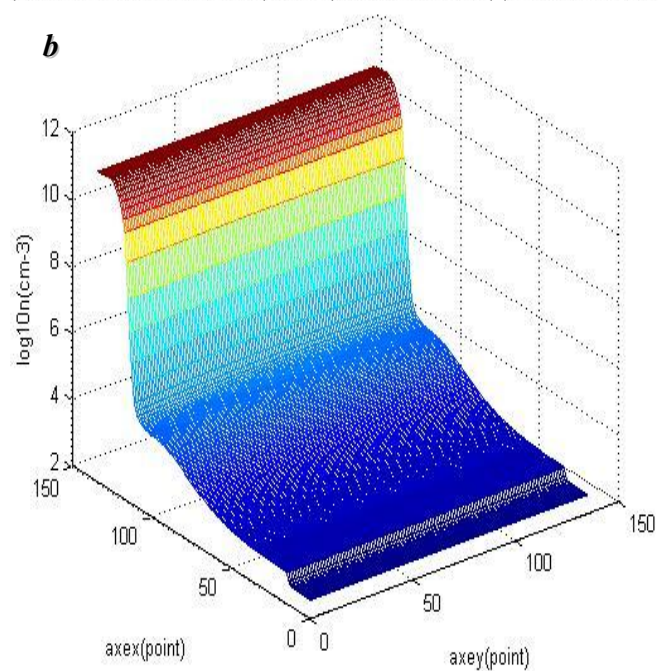
2) Semiconducteurs à relaxation :

Dans le cas extrême où le temps de relaxation diélectrique est très élevée, Les semiconducteurs à relaxation se comportent comme des isolants, il y a toute fois une importante différence dans la concentration des porteurs qui sera très importante.

profil de distribution du potentiel pour une polarisation de $10 \text{ KT}/q$ pour un sc à relaxation



profil de distribution des électrons pour une polarisation de $10 \text{ KT}/q$ pour un SC à relaxation



profil de distribution des trous pour une polarisation de $10 \text{ KT}/q$ pour un SC à relaxation

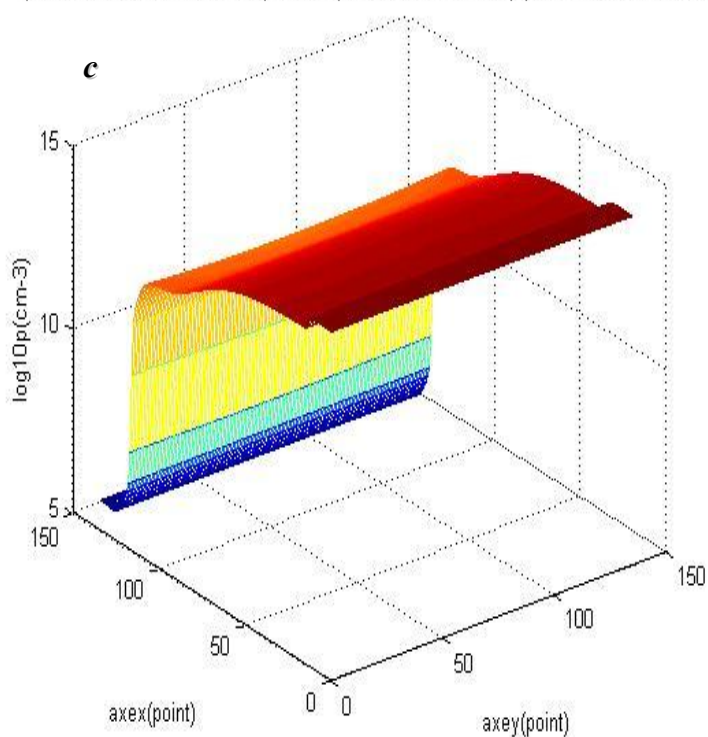


Figure (a) profil de distribution du potentiel

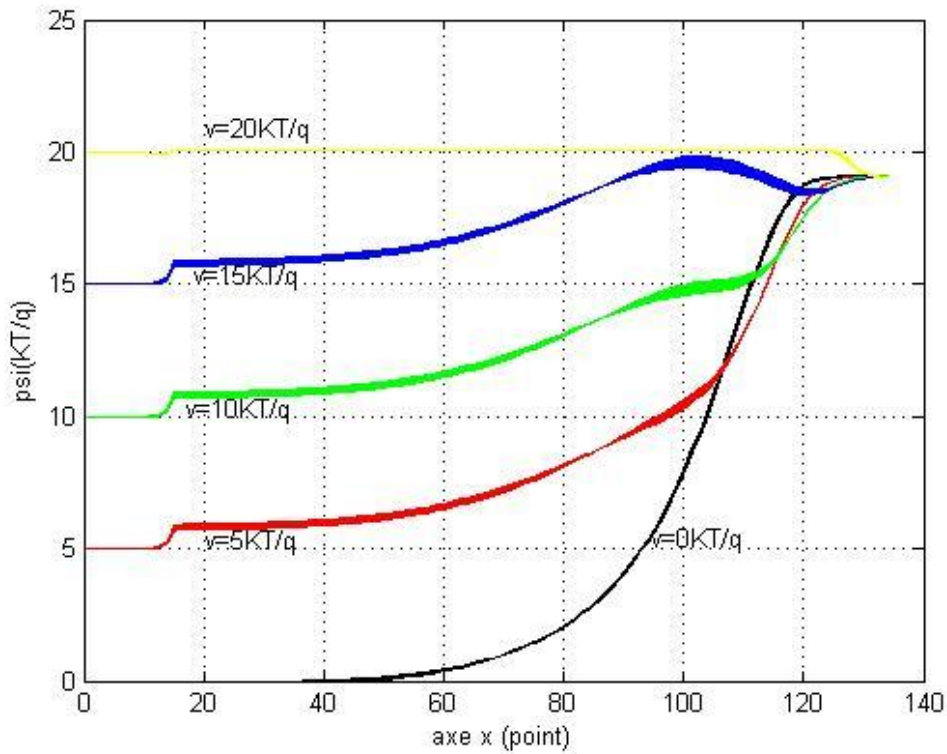
Figure (b) profil de distribution de la densité des électrons

Figure (c) profil de distribution de la densité des trous

Figure (V-5) SC à relaxation sous polarisation de $10 \text{ KT}/a$

Un comportement très opposé est constaté pour les semiconducteurs à relaxation (Figure V-5) puisque il gardait toujours les valeurs d'équilibre thermodynamique aux extrémités et une augmentation légère à travers la structure avec apparition d'un front de recombinaison et une zone de charge d'espace très étroite comparée à celle de la durée de vie. Cette différence de comportement va être appuyée par le calcul du champ et du courant électrique, Pour un semiconducteur à relaxation, la charge d'espace électronique sera injectée dans le volume v , une zone très étroite de recombinaison intense assure la continuité de ces deux courants, électrons venant de la droite et trous venant de la gauche. A l'intérieur du volume, la localisation du front de recombinaison dépend à son tour du rapport des mobilités, sur ce front de recombinaison la durée de vie en excès est très faible elle est de l'ordre de τ_0 . A l'extérieur de ce front, la durée de vie des porteurs en excès n'a pas de valeur constante, elle dépend essentiellement de la densité des porteurs libres. De plus, l'accumulation d'un type de porteurs est associé à la déplétion de l'autre (Δn n'est pas égale à Δp comme dans le cas d'un semiconducteur à durée de vie), le taux net de recombinaison est en générale faible et l'effet de recombinaison peut souvent être négligé.

Dans le souci de pouvoir faire une comparaison entre les différentes courbes de distribution de porteurs libres sous différentes polarisations, et dans l'impossibilité de les tracer dans le même graphe, on a choisi de les tracer sur l'axe des x . Les tracés sont donnés en fonction des points de maillage et non pas par la longueur, la région P^+ est discrétisée sur 15 points et la région N sur 135 points, permettant ainsi de mieux présenter la zone de charge d'espace.



**Figure (V-6) profil de distribution du potentiel
Pour le semi-conducteur à relaxation et à durée**

Pour le semiconducteur à relaxation ou à durée de vie on a obtenu les mêmes profils du potentiel pour différents tensions de polarisation, nous remarquons que les allures des courbes sont correctes, ce qui se justifie par l'apparition de chaque tension appliqué du cote P+, Pour l'extrémité de la partie v toutes les courbes se rejoignent et prennent la valeur de diffusion de valeur $20 KT/q$.

Nous allons par la suite, présenter l'évolution de la concentration des porteurs libres pour les deux types de semiconducteur (voir figure (V-7) et (V-8)).

3) Profil de distribution de la densité d'électrons :

Pour mieux faire la comparaison, nous allons tracer le profil de la densité d'électrons libres pour les deux types de semiconducteurs, semiconducteur à durée de vie avec $\tau_{nt}=\tau_{pt}=10^{-8}s$ est un semiconducteur à relaxation avec $\tau_{nt}=\tau_{pt}=10^{-11}s$ pour plusieurs tension de polarisation

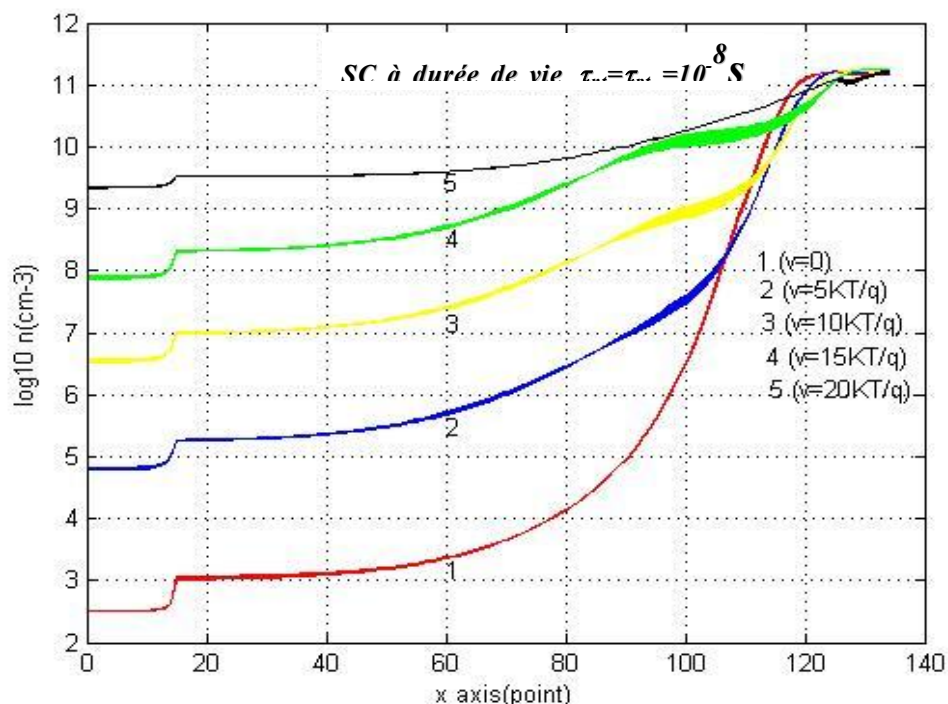
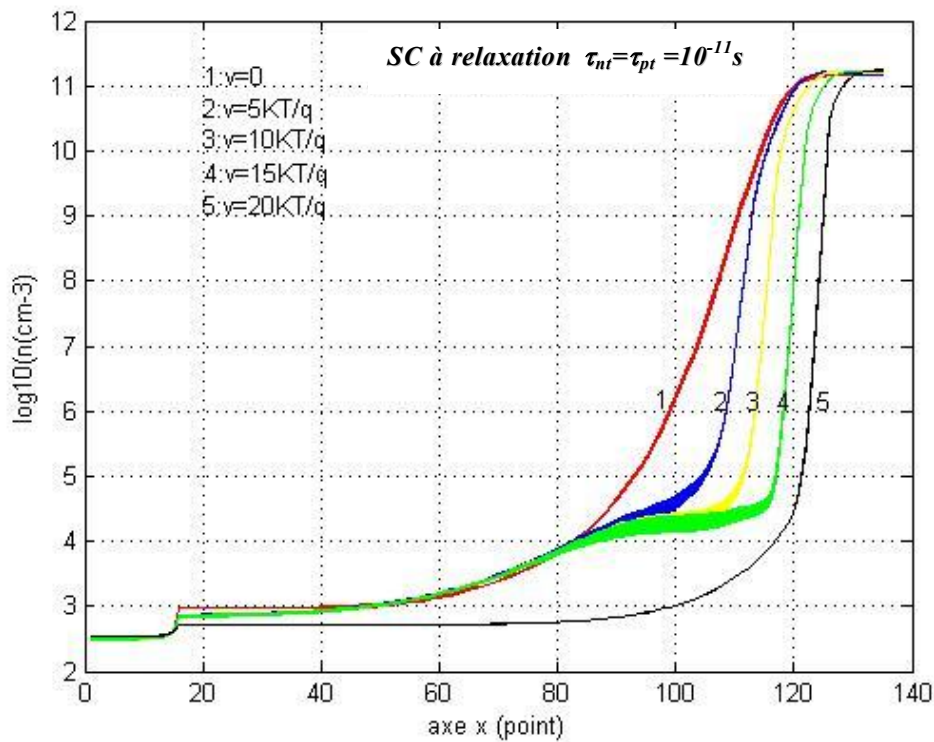


Figure (V-7) profil de distribution de la densité d'électrons libres pour différents tension de polarisation

Pour mieux faire la comparaison, nous traçons le profil de distribution de la densité d'électrons libres pour le semiconducteur à relaxation et à durée de vie dans le même graphe.

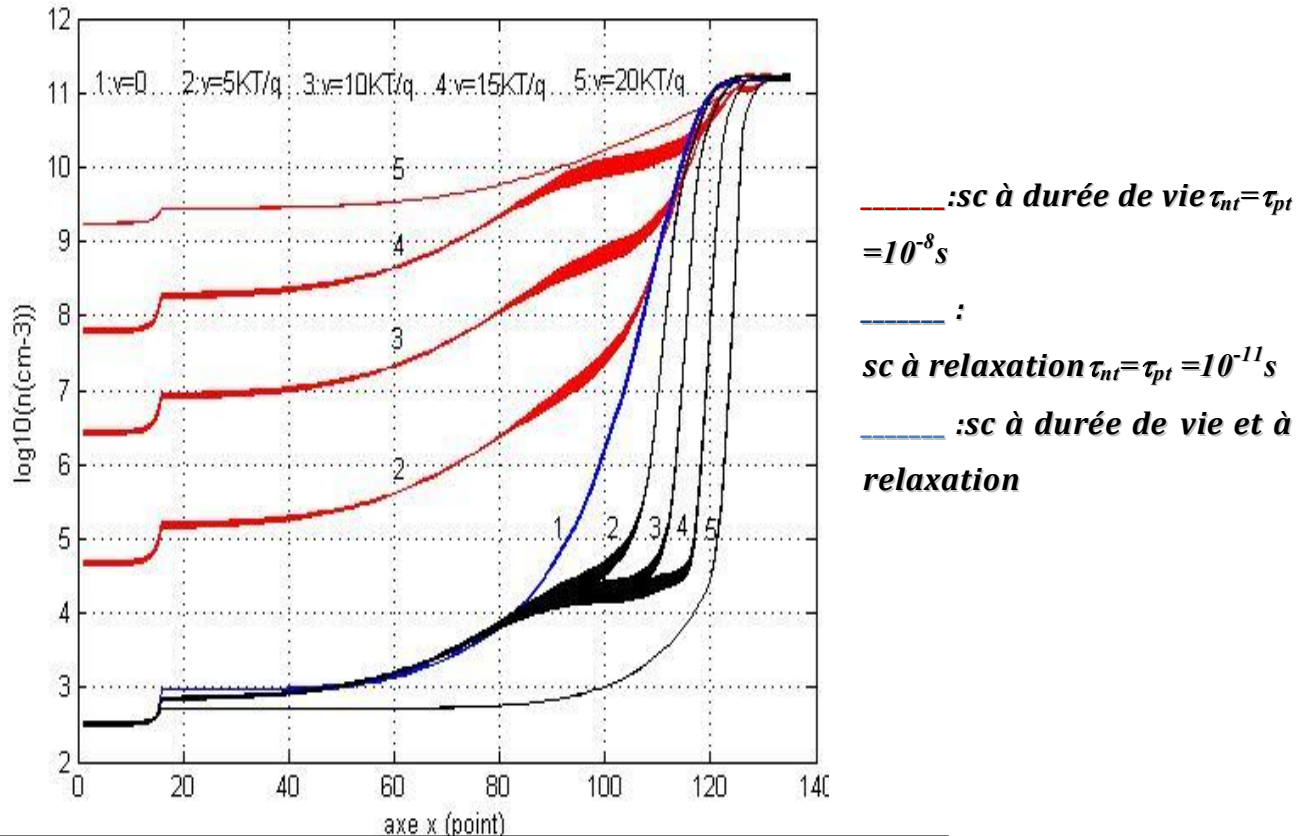


Figure (V-8) profil de distribution de la densité des trous pour un SC à relaxation et à durée de vie

Tous les résultats trouvés sous polarisation sont obtenus par application de l'algorithme de Newton.

Nous remarquons pour un semiconducteur à durée de vie que pour chaque tension de polarisation du cote P+ les valeurs de concentrations augmentent et cela en correspondance avec la tension de polarisation et gardent la valeur du N_d coté v, tandis que pour un semiconducteur à relaxation, ce phénomène disparaît et la structure garde la valeur initiale de la concentration d'électrons libres N cote P+ et v. Nous remarquons la formation d'une zone de charge d'espace très étroite comparée au semiconducteur à durée de vie et par conséquent, l'apparition d'un front de recombinaison.

La structure n'est munie que d'un seul contact injectant. Pour les semiconducteurs à durée de vie sous polarisation on remarque une diminution de la largeur de la zone de charge d'espace par rapport à l'équilibre thermodynamique mais largement plus étendu que celui des semiconducteur à relaxation.

Pour mieux interpréter, il sera plus judicieux de tracer les profils de distribution des trous en choisissant les mêmes valeurs de τ_{nt} et τ_{pt} et sous les mêmes tensions de polarisation (voir figure (V-8))

4) Profil de distribution de la densité des trous:

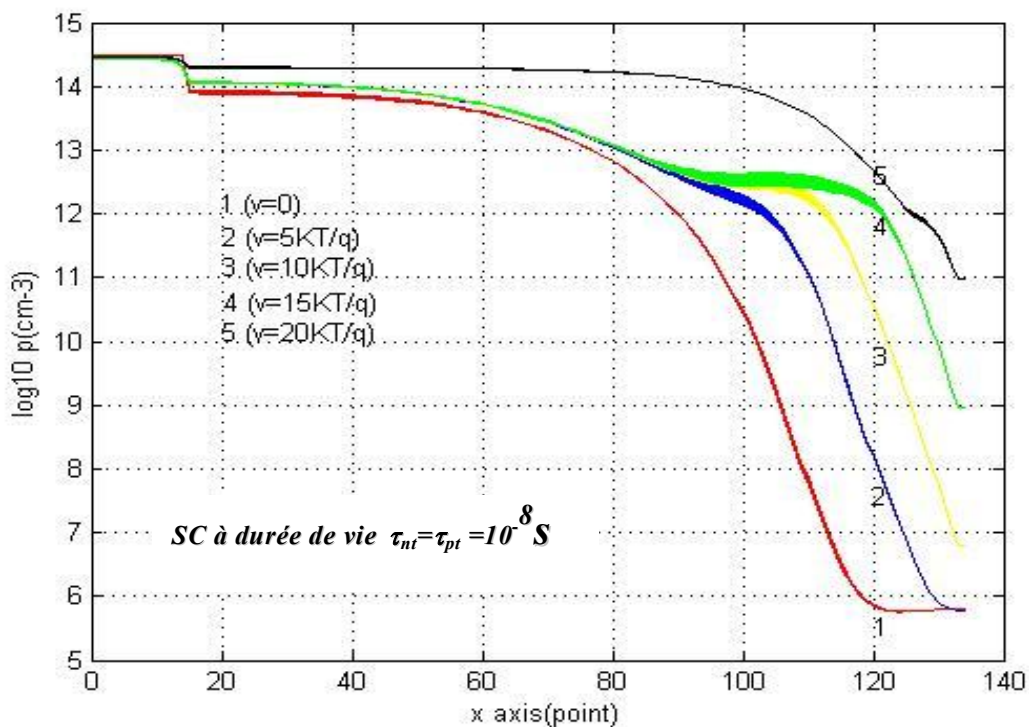
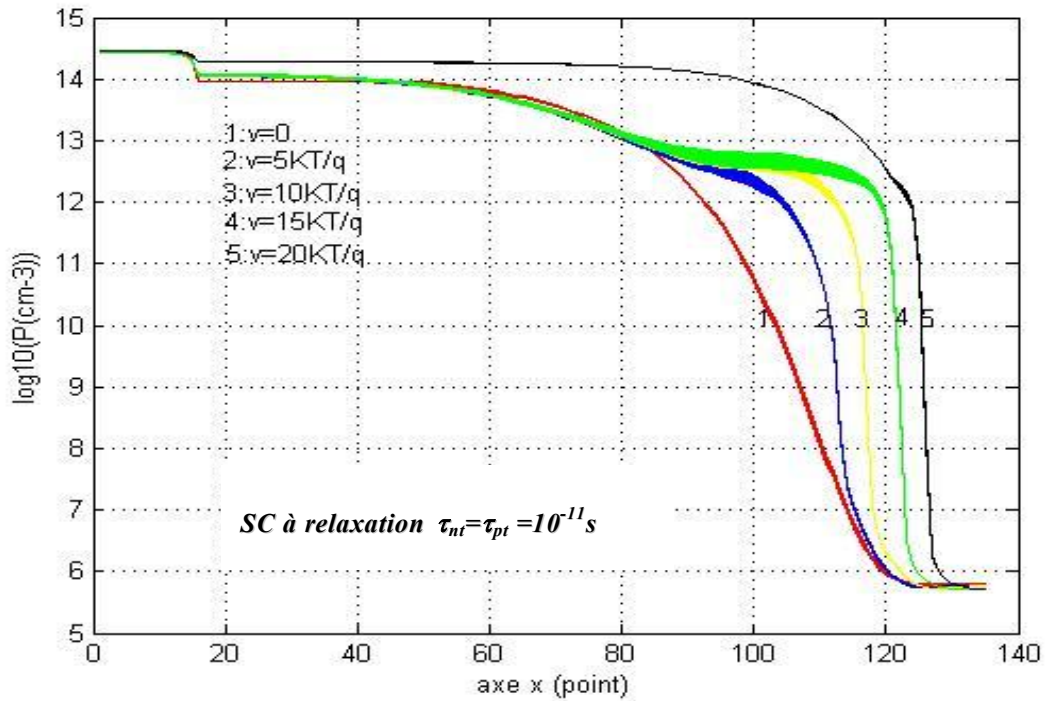


Figure (V-9) profil de distribution de la densité des trous pour différents tension de polarisation

Pour mieux faire la comparaison, nous traçons en figure V-10 le profil de distribution de la densité d'électrons libres pour les semiconducteurs à relaxation et à durée de vie.

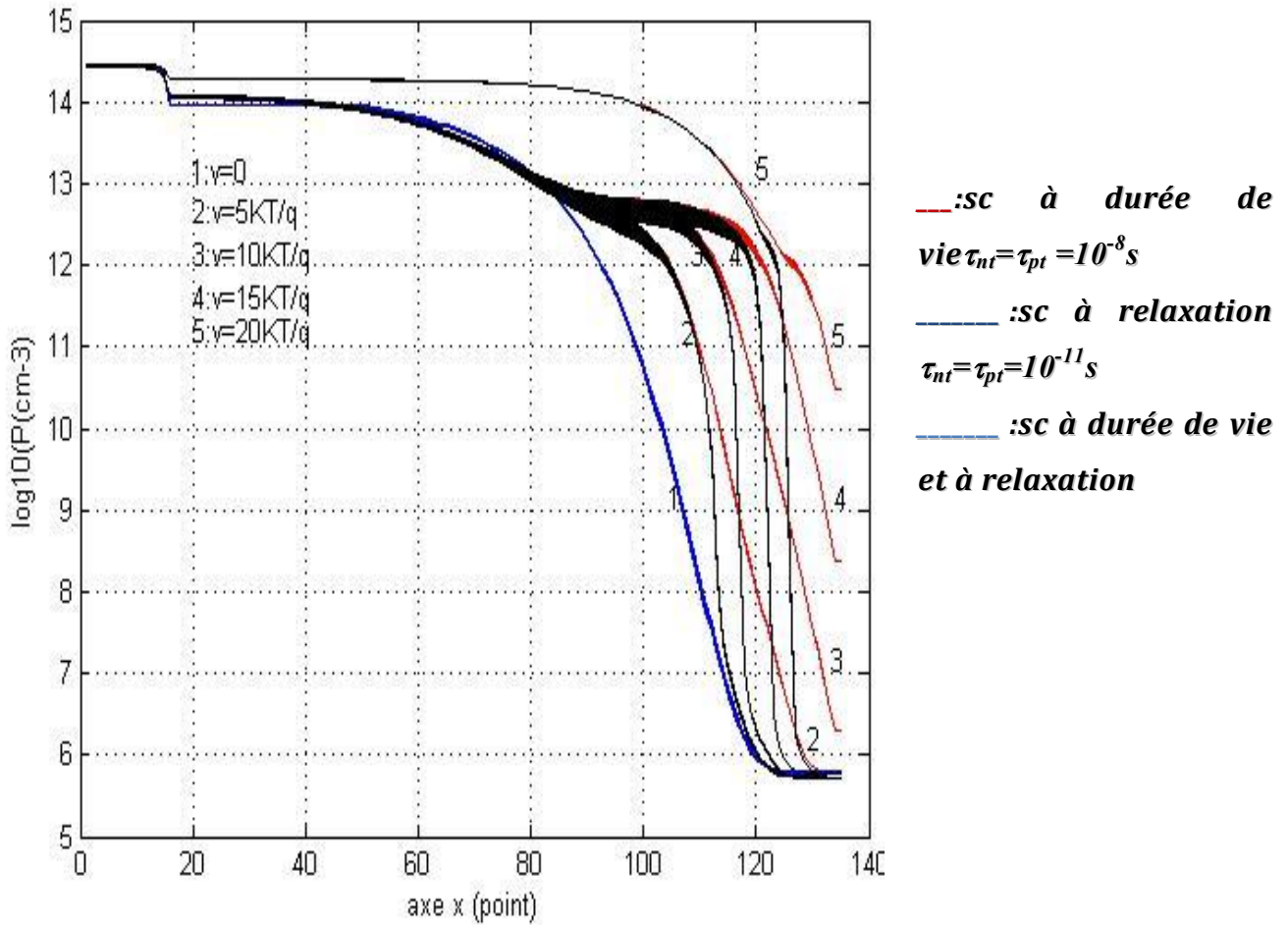


Figure (V-10) profil de distribution de la densité des électrons libres pour un SC à relaxation et à durée de vie

Le tracé des courbes donnant le profil de la distribution des trous a révélé les mêmes constatations faites pour les électrons libres

La contribution à l'extension de la zone de charge d'espace dans la région v provient essentiellement des porteurs libres et des donneurs ionisés, notons que tout le long de la structure pour un SC à durée de vie $\Delta n = \Delta p$, la tendance est vers la neutralisation de la charge d'espace, les valeurs de n et p dans les zones neutres augmentent vérifiant la loi[8]

$$n = n_0 \exp\left(\frac{ev}{KT}\right) \quad \text{et} \quad p = p_0 \exp\left(\frac{ev}{KT}\right) \quad (V - 2)$$

Pour les semiconducteurs à relaxation à faible polarisation, les valeurs de n et p dans les zones neutres garde les mêmes valeurs que celle de l'équilibre

thermodynamique, pour des tensions plus faibles que $20 \frac{KT}{q}$ la conduction est contrôlée par l'effet de contact, comme $\mu_n \gg \mu_p$, le front de recombinaison se produit au voisinage du contact P, à la droite du front de recombinaison on observe une déplétion de trou

Pour la tension de $20 \frac{KT}{q}$, on atteint pratiquement le régime de bandes plates, on constate une augmentation de la densité des électrons et des trous coté P et cote v respectivement.

Pour les semi-conducteurs à relaxation, on remarque un front de recombinaison plus près de la région P, cela est confirmé en traçant les courbes des concentrations des porteurs libres en μm

On comparant les courbes des figures (V-8) avec (V-9) on constate clairement la différence, les semiconducteurs à durée de vie représente un zone de charge d'espace qui s'élargit au long de la structure tandis que celui à relaxation représente un front de recombinaison plus près de la zone P.

Les temps de relaxation et de durée de vie ont une signification précise correspondant à un régime de conduction associé à un faible écart des concentrations des porteurs libres des concentrations des porteurs par rapport à l'équilibre thermodynamique, τ_{rd} est le temps nécessaire à la relaxation en régime transitoire, τ_0 est liée à la durée de vie des porteurs en excès, ce paramètre a été introduit dans l'équation de transport .

Lors de l'étude du transport dans un régime stationnaire, il est souvent plus commode d'introduire des longueurs caractéristiques que d'introduire des temps caractéristiques la longueur de debye L_D et la longueur ambipolaire L_{Da} . Pour un semi-conducteur à durée de vie on aura

$$\frac{\tau_{rd}}{\tau_0} = \frac{\tau_n}{\tau_p} \left(\frac{L_D}{L_{Da}} \right)^2 \ll 1 \quad (V - 3)$$

Pour un semi-conducteur à relaxation on aura

$$\frac{\tau_{rd}}{\tau_0} = \frac{\tau_n}{\tau_p} \left(\frac{L_D}{L_{Da}} \right)^2 \gg 1 \quad (? \text{ ? } ?)$$

Les semi-conducteurs à relaxation satisferont la dernière condition, on aura ainsi $L_D \ll L_{Da}$, dans le cas extrême où le temps de relaxation diélectrique est très élevé, ils se comportent comme des isolants, il y a toutefois une différence importante entre les isolants et les semi-conducteurs à relaxation. Pour un isolant la concentration des porteurs libres est négligeable alors que pour des semi-conducteurs à relaxation la concentration des porteurs libres peut être importante, afin de satisfaire les conditions

(V-3) et (V-4), les valeurs typiques sont réalistes dans un intervalle allant de 10^{-9} à 10^{-12} s [10-12]

V-3-2) Grandeurs secondaires :

V-3-2-1) Champ électrique

Après le calcul du potentiel on peut tirer directement les valeurs et les formes du champ électrique [13]. Les courbes représentées pour le champ électrique sur la figure (V-10) et (V-11) sont tracés en valeur absolue.

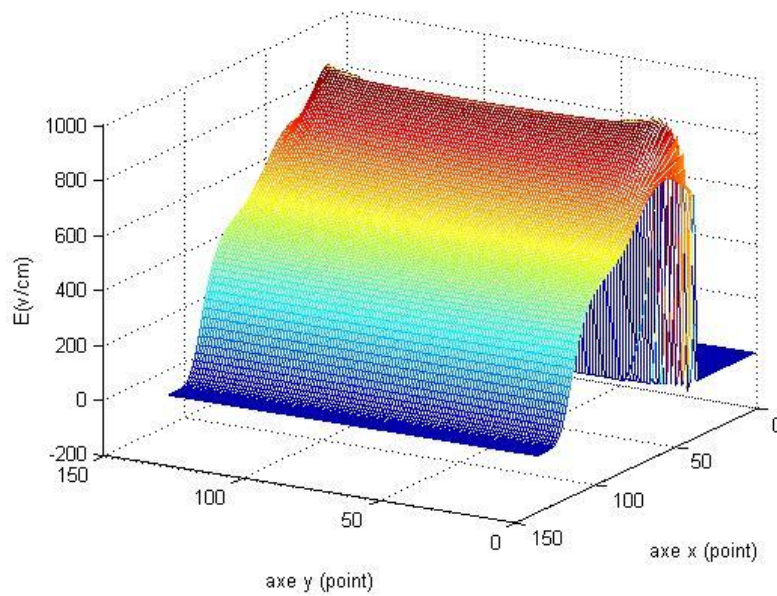


Figure (V-11) Distribution du champ électrique SC à durée de vie et à relaxation à l'équilibre

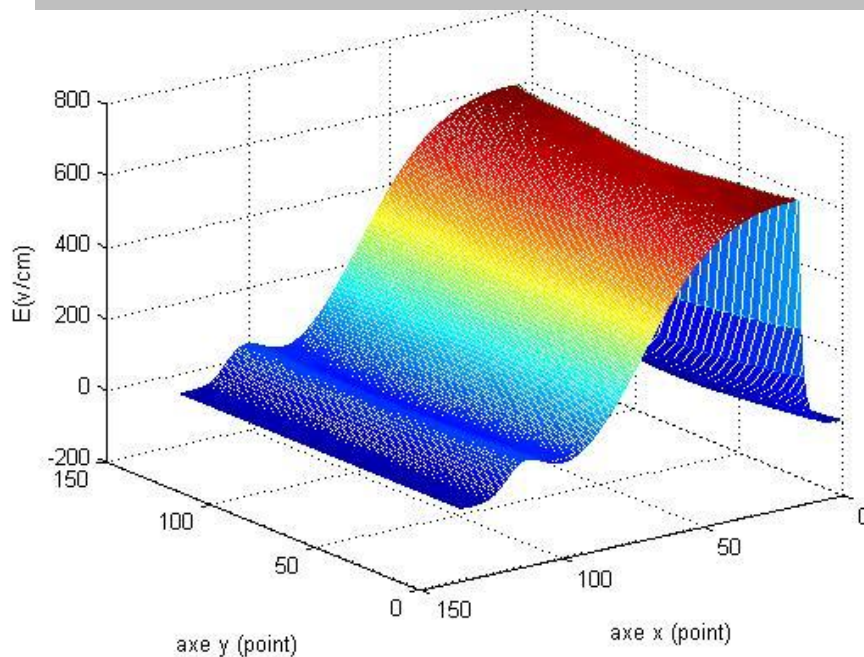


Figure (V-12) Distribution du champ électrique sous une tension de $5KT/q$

A l'équilibre thermodynamique la chute de potentiel à travers la structure est de l'ordre de $20kT/q$. Nous constatons un champ électrique négatif à travers la structure, sous polarisation, le champ électrique $|E|$ est inférieure aux valeurs maximale obtenue pour $V=0$.

Nous retrouvons le même ordre de grandeur du champ électrique pour les différentes valeurs de polarisation des deux types de semiconducteurs, puisque la variation du potentiel est identique.

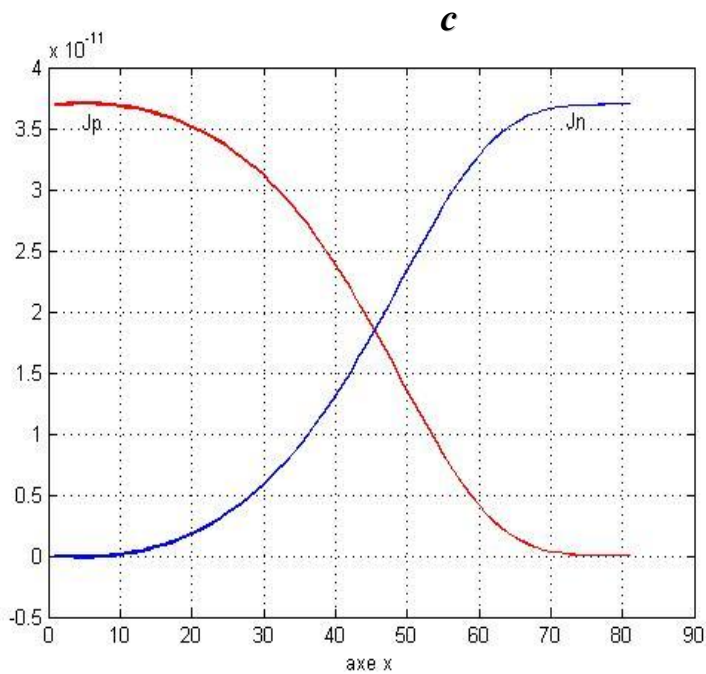
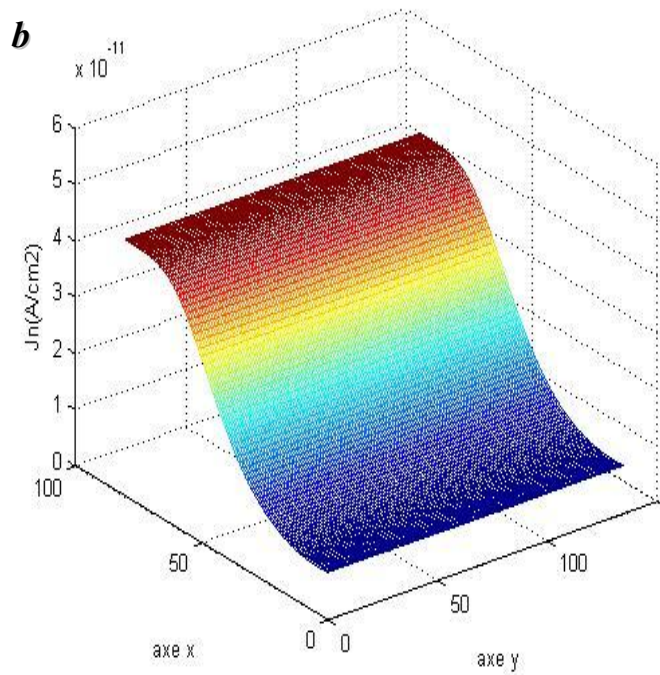
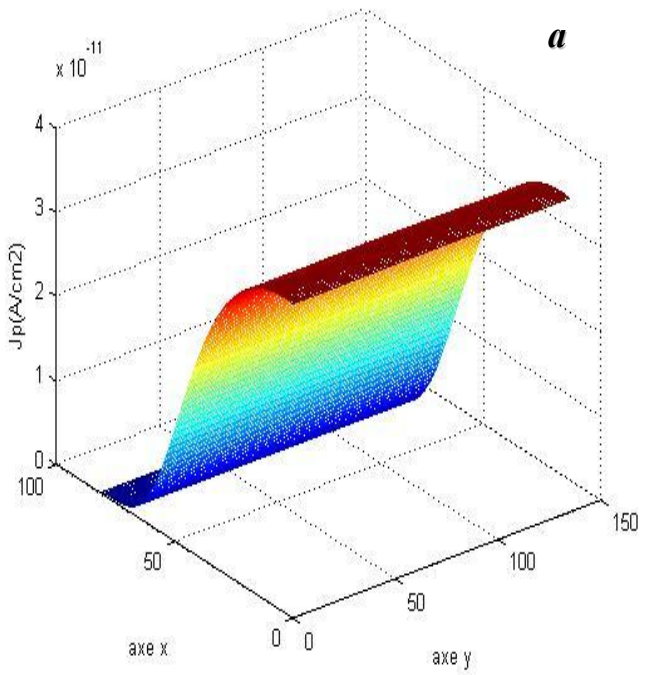
Pour $x=0$ on a $E=0$ et $V=0$, cela laisse supposer que le contact P est un contact ohmique pour les trous, en pratique la continuité de courant des trous doit être assuré par un courant de diffusion puisque le champ électrique est nul en $x=0$.

D'une façon générale, l'application d'une polarisation directe a pour conséquence une diminution de la barrière de potentiel voir figure (V-6), et par suite, une diminution de la valeur absolue du champ électrique qui se traduit par une augmentation par rapport à l'équilibre thermodynamique de la concentration des porteurs libres et une diminution de l'épaisseur de la zone de charge d'espace.

V-3-2-2) le Courant électrique :

On va s'intéresser maintenant au calcul du courant électrique et pouvoir enfin tracer les courbes $I(V)$ pour les deux types de semi-conducteur et pouvoir faire une comparaison entre eux, on va ainsi présenter le profil du courant que pour une seule tension et assembler le tout pour pouvoir tracer la caractéristique $I(v)$.

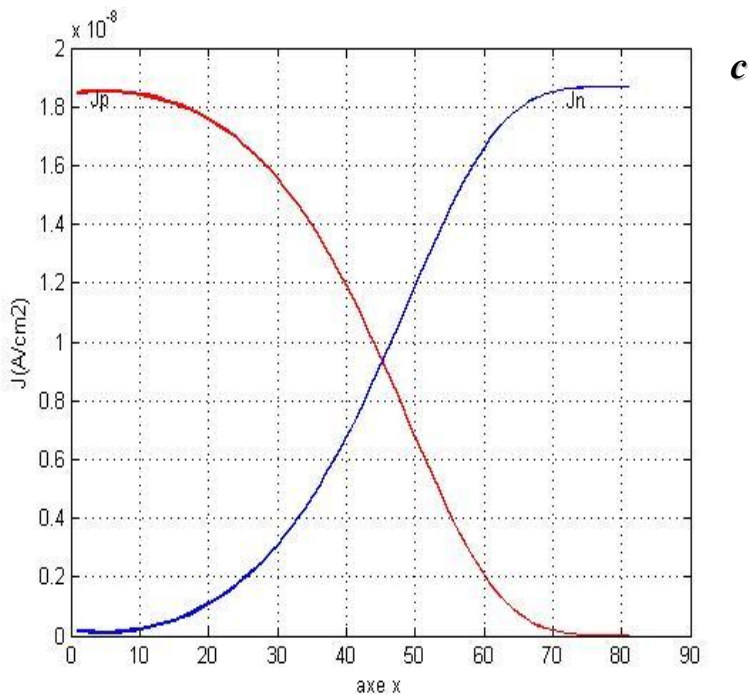
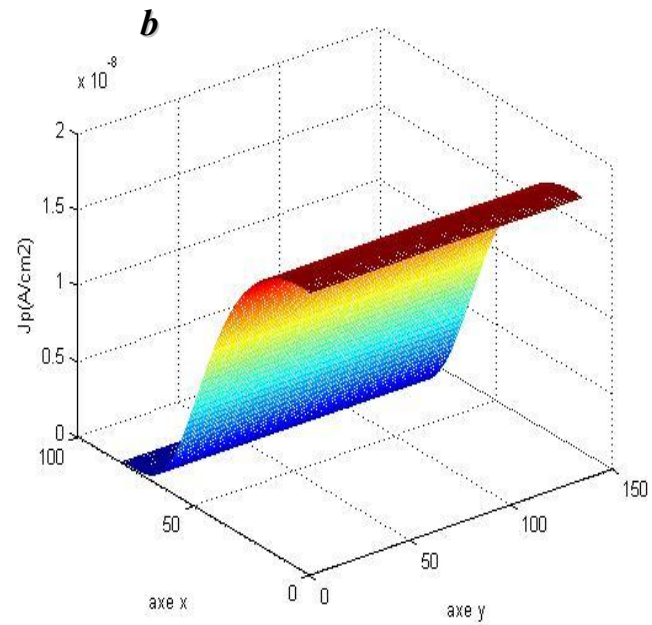
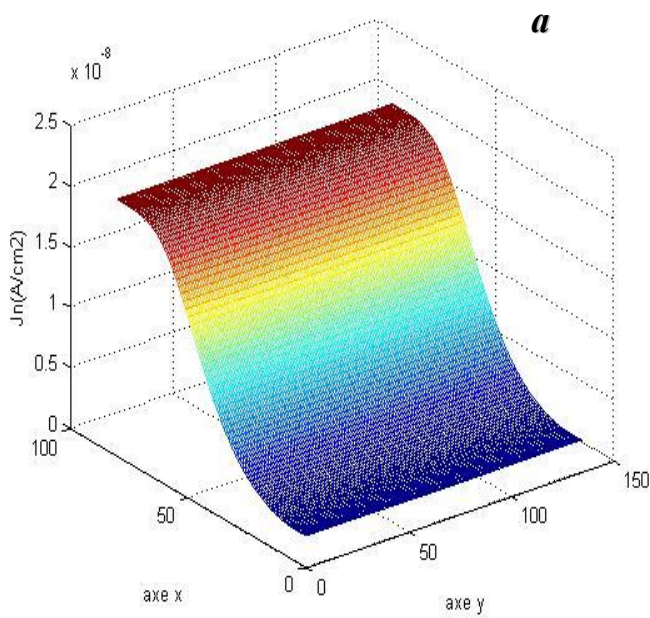
1) Semi conducteur à durée de vie



- a) Distribution de courant de trous J_p
- b) Distribution de courant de trous J_n
- c) Distribution des deux courants suivant l'axe x

Figure (V-13) Distribution du courant pour un semi-conducteur à durée de vie pour une tension de $10 KT/q$

2) Semi conducteur à relaxation

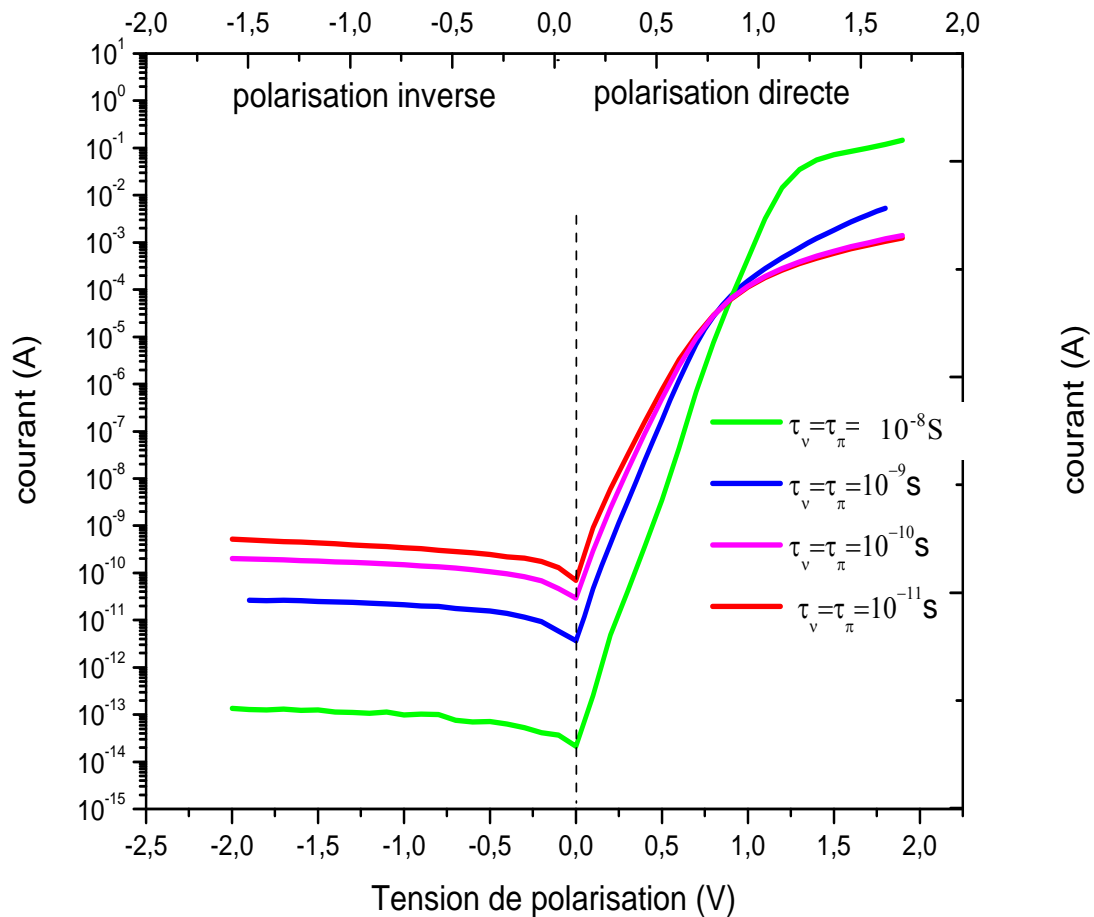


- a) Distribution de courant de trous J_p
- b) Distribution de courant de trous J_n
- c) Distribution des deux courants suivant l'axe x

Figure (V-14) Distribution du courant pour un semi-conducteur à relaxation pour une tension de $10 KT/q$

On remarque que pour les deux types de semi-conducteur à relaxation ou à durée de vie le courant J_n augmente de plus en plus qu'on se rapproche du cote N et il diminue en se rapprochant plus de cote P+. Contrairement au courant J_p qui augmente en se rapprochant de cote P+ et diminue en se rapprochant du cote N, la sommation de ces deux courant donne un courant constant pour une tension donnée sur toute la structure voir figure (V-13-c)et (V-14-c), ce résultat valide l'exactitude de nos résultats de calcul pour les concentrations de porteurs libres (trous et électrons) et distribution du potentiel.

Dans le souci de ne pas répéter les graphes pour différents tensions et dans le but de faire une étude comparative plus complète, nous avons tracé les courbes $I(v)$ sous polarisation directe et inverse pour différentes valeurs de τ_n , passant ainsi d'un semiconducteur à durée de vie à un autre type de semiconducteur qui est à relaxation



**Figure (V-15) Figure comparative de la courbe $I(v)$
Entre SC à durée de vie et à relaxation**

Sous polarisation directe la variation de la charge d'espace dans la zone v est associée à une variation de l'occupation du centre profond, qui résulte d'une très grande section de capture découlant elles-mêmes d'une très faible valeurs de durée de vie, entraînant une augmentation de la densité de trous injectés à travers le contact P⁺v par suite une augmentation de Δpt. La tendance à la neutralité électrique globale de la charge d'espace nécessite un accroissement important de la densité d'électrons libres qui va entraîner l'augmentation de la valeur de courant de diffusion.

La structure n'est munie que d'un seul contact injectant. D'une manière générale, pour une tension appliquée pas trop élevé les courbes I(v) sont très différentes pour les semi conducteurs à durée de vie et à relaxation. Nous considérons donc ces deux cas :

Pour les semi-conducteurs à durée de vie ($\tau_n=10^{-8}$ S et $\tau_n=10^{-9}$ S) la charge d'espace du contact P⁺N s'étend à travers la plupart de la structure cote N.

À très basses tensions, le comportement est en général ohmique car l'effet de contact est négligeable, on a alors l'équation suivante [12]:

$$J = q(n\mu_n + p\mu_p) \frac{V}{L}.$$

Pour les semi-conducteurs à relaxation (voir figure (V-15) ($\tau_n=10^{-10}$ S et $\tau_n=10^{-11}$ S)), aux basses tensions, la conductance est maintenant très élevée, on observe un accroissement des quatre courbes, au-delà de la valeur de $20KT/q$ la conductance devient plus faible que pour le cas de durée de vie, une preuve a été fournie expérimentalement [14] pour le comportement à relaxation. Pour une tension comprise entre 10 et 20 KT/q le contact P v contrôle le mécanisme de conduction à travers un phénomène de recombinaison qui est maintenant dominant. Dans le cas présent, la recombinaison ne se produit pas uniformément à travers toute la région de charge d'espace mais dans une zone étroite appelée le front de recombinaison dont la largeur est de l'ordre de $L_D=10.2\mu m$. A faible polarisation, la conduction est dominée par l'effet de contact, ceci correspond à des tensions plus faible que $20 KT/q$, la déplétion des électrons au voisinage de l'anode est associé à une valeur négative de la durée de vie τ_n des électrons en excès, comme $\mu_n \gg \mu_p$ le front de recombinaison se produit au voisinage de p, à la droite du front de recombinaison, on observe une déplétion du trou .

En se dépassant de la valeur de tension $20 KT /q$, le courant des semi-conducteurs à durée de vie est plus important que celui du semi-conducteur à relaxation ceci traduit l'augmentation de le densité des porteurs libres des SC à durée de vie par rapport à celles des

SC à relaxation qui reste proche des concentrations à l'équilibre thermodynamique dans les régions neutres.

V-4) CONCLUSION

Le comportement électrique en régime stationnaire d'injection de porteurs pour des structures possédant un contact injectant d'un seul porteur a été étudié pour un semiconducteur à relaxation et à durée de vie.

Notre étude s'est basée sur la comparaison de deux types de semiconducteur qui ont les mêmes paramètres électriques sauf le temps de durée de vie ; pour le semiconducteur à durée de vie, on a : $\tau_{nt}=\tau_{pt} = 10^{-8}$ s avec $\tau_{rd}=4.8.10^{-9}$ s et $\tau_0 = 10^{-6}$ s, et pour un semiconducteur à relaxation on a $\tau_{nt}=\tau_{pt} = 10^{-11}$ s avec $\tau_{rd}=4.8.10^{-9}$ s et $\tau_0 = 10^{-11}$ s.

Cette spécificité a conduit à un comportement très différent pour ces deux types de semiconducteur qui est confirmé par le tracé de la distribution de la densité des porteurs libres. Nous avons montré une augmentation des porteurs libres sur l'extrémité du côté P⁺ en fonction de la tension de polarisation pour les semiconducteurs à durée de vie avec une large zone de charge d'espace qui s'étend à travers la plupart de la région la moins dopée v.

un comportement très opposé a été constaté pour les semiconducteurs à relaxation, on observe l'apparition d'un front de recombinaison, en dehors de ce dernier, la condition de quasi équilibre thermique prédomine : $n.p = n_i^2$.

Cette différence de comportement a été appuyée par le calcul du champ et du courant électrique. Pour un semiconducteur à durée de vie, on a constaté clairement une augmentation rapide de courant en fonction de la tension de polarisation comparé à celui d'un semiconducteur à relaxation, ce qui traduit les résultats trouvés pour les densités de porteurs.

Références bibliographiques

[1]W. Van Roosbroeck and H. C. Casey, Jr.

Phys. Rev. B 5, 2154 (1972) – Published 15 March 1972

[2]G.M. Martin

In semi insulating III-V materials

Nottingham, 1980, Ed.G.J.REES, p1, (1980)

[3]R. S .Tang L.Sargentand J.S More Blake

Compensation assessment in undoped high resistivity GaAs

J.Appl.Phys.65, pp.256-261, (1989)

[4]N.O.Hadler and D.C.Look

Diviation from bulk transport measurement in semi insulating GaAs

J.Appl.Phys.66, pp4858-5861, (1989).

[5] B.K. Jones, J. Santana and M. McPherson

Ohmic I-V characteristics in semi insulating semiconductor diodes.

Solid State Communications, Vol. 105. No. 9, pp. 547-549, 1998

[6] F.S.NOUAR

Modélisation tridimensionnelle du transport dans une jonction PN en présence de centres profonds

Thèse de magister, Université Djilali liabes, sidi bel Abbés (1999)

[6] R.Ardebili, J.C Manificier

Etude par simulation numérique du transport dans les semi-conducteurs en présence de centres profonds

Thèse doctorat d'état, Centre d'électronique de Montpellier (laboratoire associé au C.N.R.S ;UA 391), 1992.

[7] A.BENCHIHEB

Modélisation d'un transistor bipolaire de puissance
Thèse de magister université de Constantine, 1996

[8] H.Mathieu

Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques
Deuxième édition, Masson 1990

[9] Neumann A.

J Appl Phys 2001;90:1–26.

**[10] Rogalla M, Geppert R, Göppert R, Hornung M, Ludwig J, Schmid T, et al.
Nucl**

Instr and Meth A 1998;410:74–8.

[11] Bonilla LL, Hernando PJ, Kindelan M, Piazza F.

Appl Phys Lett 1999;74:988–90.

[12] [fr.wikipedia.org/wiki/Relaxation diélectrique](http://fr.wikipedia.org/wiki/Relaxation_diélectrique)

[13] www.polytech-lille.fr/cours-atome-circuit-integre/phys/sc840.htm

[14] Y Moreau, JMaifacier and H.K.Henish

Minority carrier injection into relaxation semiconductors
J.appl. phy 52 :5195, (1981)

CONCLUSION GENERALE

Conclusion générale

Notre programme de simulation développé est destiné à l'étude des composants à faible géométrie de conception permettant de déterminer dans le volume d'une structure, les distributions du potentiel électrostatique, et les densités de porteurs libres en fonction d'une polarisation donnée.

Dans ce travail nous nous sommes proposé de renforcer le modèle physique en incluant l'effet des centres pièges sur le comportement physique et électrique d'une structure sous polarisation et d'améliorer l'usage des principaux programmes aussi bien du point de vue stabilité et précision que du point de vue discrétisation et vitesse d'exécution.

Ce travail a été poursuivi par l'introduction du calcul de grandeurs secondaires telles que les distributions de la densité de courant des électrons et des trous et champ électrique qui sont indispensables pour une meilleure compréhension et interprétation des phénomènes de transport dans les semiconducteurs.

Les équations physiques considérées sont des équations différentielles à 3D formé par celles de Poisson et de continuité.

Malgré leur complexité, un calcul exact des dérivées au niveau de l'équation de Poisson, a pu être effectué. Les différentes explications ont été données au chapitre II.

Les équations non linéaires aux différences partielles découlant du modèle physique sont discrétisées par les différences finies et résolues par l'utilisation des algorithmes de Gummel ou de Newton.

Une méthode judicieuse de stockage des éléments non nuls de la jacobienne découlant de la méthode de Newton, a pu être développée.

Il a été constaté à travers différents tests de simulation que l'algorithme de Newton est le mieux qualifié pour résoudre les équations couplées représentant le modèle physique. L'algorithme de Gummel est efficace tant que le couplage entre les différentes équations reste faible. Une méthode combinée a été également mise en œuvre à travers laquelle les valeurs initiales de l'algorithme de Newton sont calculées par la méthode de Gummel à l'équilibre thermodynamique.

Afin d'optimiser le maillage et obtenir des résultats satisfaisants du point de vue précision, différents types de discrétisation ont été testés. Nous avons finalement opté pour un maillage irrégulier à pas variable permettant une discrétisation fine dans les zones critiques, et grossières dans les zones neutres.

Conclusion générale

Les résultats de simulation pour la validation du modèle du piégeage des porteurs, ont été obtenus à partir de tests sur des structures de type P^+v et P^+vN^+ ($N_a=2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $N_a=2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $N_d= 10^{14} \text{ cm}^{-3}$) à base de GaAs. Nous sommes arrivés aux conclusions suivantes :

L'existence des centres pièges ont une influence importante sur la détermination de la nature du semi-conducteur selon la densité du centre piège. Dans notre cas et avec une densité de $N_T=2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ($n_e=2.10^7 \text{ cm}^{-3}$, $n_i=2.10^6 \text{ cm}^{-3}$), le matériau GaAs se comporte comme un semi-conducteur de type N, résultat confirmant un calcul analytique.

Nous avons remarqué aussi que l'introduction d'une forte densité de piège peut mener parfois à la divergence du système. Pour remédier à cet inconvénient, nous entamons nos simulations avec d'abord une densité de pièges modérées. Les résultats obtenus sont introduits comme valeurs initiales pour une nouvelle simulation avec un taux de pièges plus important.

Hors équilibre et sous polarisation directe, une augmentation de la densité en électrons libres se produit près du contact P^+v ce qui est évident, pour une maintenance de la neutralité électrique, puisque sous polarisation directe une injection importante des trous s'effectue de la région P^+ à la région v . Sous polarisation inverse, une déplétion d'électrons dans les zones quasi neutres de la région v est observée.

L'application d'une polarisation directe a pour conséquence une diminution de la largeur de la zone de charge d'espace sa variation est essentiellement associée à une variation de l'occupation du centre profond Δp_i .

Sous polarisation inverse les courbes de concentration en électrons libres ont révélé un appauvrissement en électrons dans les zones quasi neutres de la région v faiblement dopée, Cet état est lié à l'existence d'une charge d'espace négative due à la considération de pièges à trou uniquement.

On a vérifié par la caractéristique simulée courant-tension $I(V)$ que la diode PIN se comporte comme diode redresseuse ; elle conduit le courant en polarisation direct et le bloque en régime inverse.

Dans notre travail et dans le but de faire une comparaison entre les semiconducteurs à relaxation et à durée de vie, nous avons considéré le cas de deux valeurs très différentes de durée de vie de diffusion τ_0 .

Conclusion générale

Pour une valeur τ_0 très supérieure au temps de relaxation diélectrique τ_{rd} ($\tau_{rd} \ll \tau_0$ avec ($\tau_{rd}=4.8.10^{-9}s$, $\tau_0 =10^{-6}s$)), les résultats obtenus ont été analysés en utilisant de simple injection et en supposant une durée de vie commune des porteurs en excès qui est constante pour les électrons et les trous à travers la région v . C'est le cas d'un semi-conducteur à durée de vie, dans le cas contraire où τ_0 est très inférieur au temps de relaxation diélectrique τ_{rd} soit ($\tau_{rd} \gg \tau_0$ ($\tau_{rd}=4.8.10^{-9}s$, $\tau_0 =10^{-11}s$)), les effets de charge d'espace sont très importants par tous et les durées de vie des porteurs en excès et varient énormément d'un point à un autre le long de la structure. C'est le cas d'un semi-conducteur à relaxation.

Le comportement électrique de porteurs possédant un contact injectant d'un seul porteur a été étudié pour un semi-conducteur à durée de vie et à relaxation.

A l'équilibre thermodynamique et pour un semi-conducteur à durée de vie ou à relaxation la zone de charge d'espace s'étend essentiellement à travers la structure la moins dopée N .

Pour les semiconducteurs à durée de vie ($\tau_{nt}=\tau_{pt} =10^{-8}s$, $\tau_{rd}=4.8.10^{-9}s$, $\tau_0 =10^{-6}s$) et sous polarisation directe, nous avons remarqué une diminution de la largeur de la zone de charge d'espace par rapport à l'équilibre thermodynamique mais largement plus étendue que celle des semiconducteurs à relaxation ($\tau_{nt}=\tau_{pt} =10^{-11}s$, $\tau_{rd}=4.8.10^{-9}s$, $\tau_0 =10^{-11}s$).

Pour des semiconducteurs à relaxation et à faible polarisation, les valeurs de n et p dans les zones neutres gardent les mêmes valeurs que celles de l'équilibre thermodynamiques. Pour des tensions plus faibles que $20 KT/q$, la conduction est contrôlée par l'effet de contact, comme $\mu_n \gg \mu_p$ ($\mu_n=4000 \text{ cm}^2/V.s$, $\mu_p=280 \text{ cm}^2/V.s$), le front de recombinaison se produit au voisinage du contact P , et à la droite du front de recombinaison on a observé une déplétion de trou.

Pour les semi-conducteurs à relaxation, nous avons remarqué un front de recombinaison plus près de la région P , et la charge d'espace est toujours supérieure en régime d'injection à celle correspondante à l'équilibre thermodynamique. En dehors du front de recombinaison, la condition du quasi équilibre thermique prédomine :

$$n.p=n_i^2$$

Conclusion générale

Pour les semi-conducteurs à durée de vie et à très basses tensions, le comportement est en général ohmique car l'effet de contact est négligeable

Pour les semi-conducteurs à relaxation et à faible polarisation la conduction est dominée par l'effet de contact.

Ce travail peut être poursuivi par l'étude de l'effet géométrique sur les grandeurs physiques et électrique. Le développement d'une version parallèle du logiciel exécuté sur un réseau de processus reste un de nos objectifs pour réduire le temps de calcul importants découlant des simulations à trois dimensions.

Finalement, nous espérons que ce travail contribuera grandement à la qualité des simulations et surtout à la crédibilité de celles-ci.



ANNEXE A

II-1) propriétés du GaAs :

Le GaAs[28][30] est un semi-conducteur de la famille III-V qui représente une densité de centres profonds importantes pour lequel il va être l'objet d'étude dans une structure PIN, qui nous permettra de bien voir l'influence des centres profonds dans un régime de conduction .

le matériau GaAs préparé par la méthode de czochralski , présente :

♣ Un niveau accepteur peu profond E_A (N_A) du au bore et du carbone provenant de l'encapsulant B_2O_3

♣ Un niveau profond E_{L2} , $E_t(N_t)$, qui assure la compensation des défauts accepteurs peu profonds présents à l'état naturel.

♣ Un niveau donneur peu profond provenant de la présence de Si, mais comme nous avons en général $N_A > N_D$, N_A sera en général la densité effective des centres accepteurs peu profonds .

♣ Un centre recombinant efficace E_r ,situé au milieu de la bande interdite dont la densité $N_r < N_t$.cela signifie que la capacité de stocker une charge d'espace de ce centre est négligeable par rapport à celle du centre E_T .

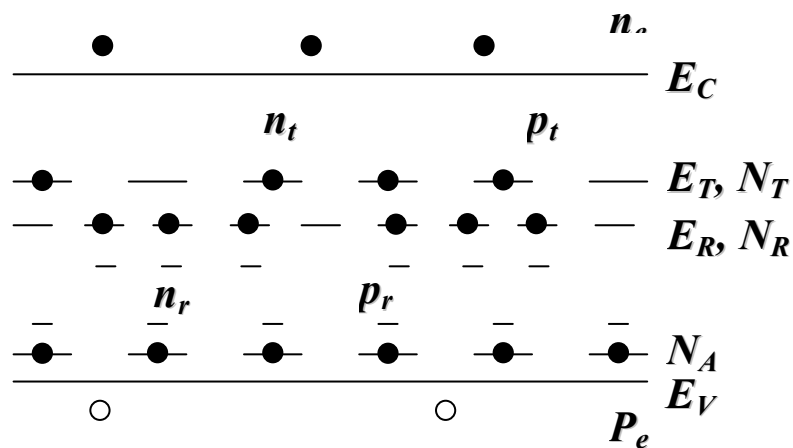


Figure (A-1) Représentation schématique des bandes d'énergie et des niveaux pièges pour le GaAs semi isolant

ANNEXE B

Eléments de la matrice jacobienne :

A partir des équations (II-4), (II-5) et (II-6) on peut calculer les éléments de la matrice élémentaire U.

Matrice U_{ijl}

$$U_{ijl} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_{\psi}}{\partial \psi_{ijl}} & \frac{\partial F_{\psi}}{\partial N_{ijl}} & \frac{\partial F_{\psi}}{\partial P_{ijl}} \\ \frac{\partial F_N}{\partial \psi_{ijl}} & \frac{\partial F_N}{\partial N_{ijl}} & \frac{\partial F_N}{\partial P_{ijl}} \\ \frac{\partial F_p}{\partial \psi_{ijl}} & \frac{\partial F_p}{\partial N_{ijl}} & \frac{\partial F_p}{\partial P_{ijl}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{ijl}^{1.1} & U_{ijl}^{1.2} & U_{ijl}^{1.3} \\ U_{ijl}^{2.1} & U_{ijl}^{2.2} & U_{ijl}^{2.3} \\ U_{ijl}^{3.1} & U_{ijl}^{3.2} & U_{ijl}^{3.3} \end{pmatrix}$$

Matrice U_{i-1jl}

$$U_{i-1jl} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_{\psi}}{\partial \psi_{i-1jl}} & \frac{\partial F_{\psi}}{\partial N_{i-1jl}} & \frac{\partial F_{\psi}}{\partial P_{i-1jl}} \\ \frac{\partial F_N}{\partial \psi_{i-1jl}} & \frac{\partial F_N}{\partial N_{i-1jl}} & \frac{\partial F_N}{\partial P_{i-1jl}} \\ \frac{\partial F_p}{\partial \psi_{i-1jl}} & \frac{\partial F_p}{\partial N_{i-1jl}} & \frac{\partial F_p}{\partial P_{i-1jl}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{i-1jl}^{1.1} & U_{i-1jl}^{1.2} & U_{i-1jl}^{1.3} \\ U_{i-1jl}^{2.1} & U_{i-1jl}^{2.2} & U_{i-1jl}^{2.3} \\ U_{i-1jl}^{3.1} & U_{i-1jl}^{3.2} & U_{i-1jl}^{3.3} \end{pmatrix}$$

Matrice U_{i+1jl} :

$$U_{i+1jl} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_{\psi}}{\partial \psi_{i+1jl}} & \frac{\partial F_{\psi}}{\partial N_{i+1jl}} & \frac{\partial F_{\psi}}{\partial P_{i+1jl}} \\ \frac{\partial F_N}{\partial \psi_{i+1jl}} & \frac{\partial F_N}{\partial N_{i+1jl}} & \frac{\partial F_N}{\partial P_{i+1jl}} \\ \frac{\partial F_p}{\partial \psi_{i+1jl}} & \frac{\partial F_p}{\partial N_{i+1jl}} & \frac{\partial F_p}{\partial P_{i+1jl}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{i+1jl}^{1.1} & U_{i+1jl}^{1.2} & U_{i+1jl}^{1.3} \\ U_{i+1jl}^{2.1} & U_{i+1jl}^{2.2} & U_{i+1jl}^{2.3} \\ U_{i+1jl}^{3.1} & U_{i+1jl}^{3.2} & U_{i+1jl}^{3.3} \end{pmatrix}$$

Annexe B

Matrice U_{ij-1l} :

$$U_{ij-1l} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_\Psi}{\partial \Psi_{ij-1l}} & \frac{\partial F_\Psi}{\partial N_{ij-1l}} & \frac{\partial F_\Psi}{\partial P_{ij-1l}} \\ \frac{\partial F_N}{\partial \Psi_{ij-1l}} & \frac{\partial F_N}{\partial N_{ij-1l}} & \frac{\partial F_N}{\partial P_{ij-1l}} \\ \frac{\partial F_p}{\partial \Psi_{ij-1l}} & \frac{\partial F_p}{\partial N_{ij-1l}} & \frac{\partial F_p}{\partial P_{ij-1l}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{ij-1l}^{1.1} & U_{ij-1l}^{1.2} & U_{ij-1l}^{1.3} \\ U_{ij-1l}^{2.1} & U_{ij-1l}^{2.2} & U_{ij-1l}^{2.3} \\ U_{ij-1l}^{3.1} & U_{ij-1l}^{3.2} & U_{ij-1l}^{3.3} \end{pmatrix}$$

Matrice U_{ij+1l} :

$$U_{ij+1l} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_\Psi}{\partial \Psi_{ij+1l}} & \frac{\partial F_\Psi}{\partial N_{ij+1l}} & \frac{\partial F_\Psi}{\partial P_{ij+1l}} \\ \frac{\partial F_N}{\partial \Psi_{ij+1l}} & \frac{\partial F_N}{\partial N_{ij+1l}} & \frac{\partial F_N}{\partial P_{ij+1l}} \\ \frac{\partial F_p}{\partial \Psi_{ij+1l}} & \frac{\partial F_p}{\partial N_{ij+1l}} & \frac{\partial F_p}{\partial P_{ij+1l}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{ij+1l}^{1.1} & U_{ij+1l}^{1.2} & U_{ij+1l}^{1.3} \\ U_{ij+1l}^{2.1} & U_{ij+1l}^{2.2} & U_{ij+1l}^{2.3} \\ U_{ij+1l}^{3.1} & U_{ij+1l}^{3.2} & U_{ij+1l}^{3.3} \end{pmatrix}$$

Matrice U_{ijll} :

$$U_{ijll} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_\Psi}{\partial \Psi_{ijll}} & \frac{\partial F_\Psi}{\partial N_{ijll}} & \frac{\partial F_\Psi}{\partial P_{ijll}} \\ \frac{\partial F_N}{\partial \Psi_{ijll}} & \frac{\partial F_N}{\partial N_{ijll}} & \frac{\partial F_N}{\partial P_{ijll}} \\ \frac{\partial F_p}{\partial \Psi_{ijll}} & \frac{\partial F_p}{\partial N_{ijll}} & \frac{\partial F_p}{\partial P_{ijll}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{ijll}^{1.1} & U_{ijll}^{1.2} & U_{ijll}^{1.3} \\ U_{ijll}^{2.1} & U_{ijll}^{2.2} & U_{ijll}^{2.3} \\ U_{ijll}^{3.1} & U_{ijll}^{3.2} & U_{ijll}^{3.3} \end{pmatrix}$$

Matrice U_{ijl-1l} :

$$U_{ijl-1l} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_\Psi}{\partial \Psi_{ijl-1l}} & \frac{\partial F_\Psi}{\partial N_{ijl-1l}} & \frac{\partial F_\Psi}{\partial P_{ijl-1l}} \\ \frac{\partial F_N}{\partial \Psi_{ijl-1l}} & \frac{\partial F_N}{\partial N_{ijl-1l}} & \frac{\partial F_N}{\partial P_{ijl-1l}} \\ \frac{\partial F_p}{\partial \Psi_{ijl-1l}} & \frac{\partial F_p}{\partial N_{ijl-1l}} & \frac{\partial F_p}{\partial P_{ijl-1l}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{ijl-1l}^{1.1} & U_{ijl-1l}^{1.2} & U_{ijl-1l}^{1.3} \\ U_{ijl-1l}^{2.1} & U_{ijl-1l}^{2.2} & U_{ijl-1l}^{2.3} \\ U_{ijl-1l}^{3.1} & U_{ijl-1l}^{3.2} & U_{ijl-1l}^{3.3} \end{pmatrix}$$

LE CALCUL DES ELEMENTS DE LA MATRICE JACOBIENNE :

Calcul du reste des éléments de la matrice $U_{i,j,l}$:

$$U_{i,j,l}^{1,1} = -(A_{i+1,j,l} + A_{i-1,j,l} + A_{i,j+1,l} + A_{i,j-1,l} + A_{i,j,l+1} + A_{i,j,l-1})$$

$$U_{i,j,l}^{2,1} = \mu_n \cdot (\alpha_{i-1,j,l} \cdot \exp(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l}) N_{i,j,l} + \alpha_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l}) N_{i+1,j,l}) \cdot \frac{1}{X_{i+1,j,l} - X_{i,j,l}} +$$

$$\mu_n \cdot (\beta_{i,j-1,l} \cdot \exp(\psi_{i,j-1,l} - \psi_{i,j,l}) N_{i,j,l} + \beta_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j+1,l}) N_{i,j+1,l}) \cdot \frac{1}{Y_{i,j+1,l} - Y_{i,j,l}} +$$

$$\mu_n \cdot (\gamma_{i,j,l-1} \cdot \exp(\psi_{i,j,l-1} - \psi_{i,j,l}) N_{i,j,l} + \gamma_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j,l+1}) N_{i,j,l+1}) \cdot \frac{1}{Z_{i,j,l+1} - Z_{i,j,l}}$$

$$U_{i,j,l}^{3,1} = \mu_p \cdot (\alpha_{i-1,j,l} \cdot \exp(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l}) P_{i-1,j,l} + \alpha_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l}) P_{i,j,l}) \cdot \frac{1}{X_{i+1,j,l} - X_{i,j,l}} +$$

$$\mu_n \cdot (\beta_{i,j-1,l} \cdot \exp(\psi_{i,j-1,l} - \psi_{i,j,l}) P_{i,j-1,l} + \beta_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j+1,l}) P_{i,j,l}) \cdot \frac{1}{Y_{i,j+1,l} - Y_{i,j,l}} +$$

$$\mu_n \cdot (\gamma_{i,j,l-1} \cdot \exp(\psi_{i,j,l-1} - \psi_{i,j,l}) P_{i,j,l-1} + \gamma_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j,l+1}) P_{i,j,l}) \cdot \frac{1}{Z_{i,j,l+1} - Z_{i,j,l}}$$

Calcul des éléments de la matrice $U_{i+1,j,l}$:

$$U_{i+1,j,l}^{1,1} = A_{i+1,j,l}$$

$$U_{i+1,j,l}^{1,2} = 0$$

$$U_{i+1,j,l}^{1,3} = 0$$

$$U_{i+1,j,l}^{2,1} = -\mu_n \cdot \alpha_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l}) \cdot \frac{1}{X_{i+1,j,l} - X_{i,j,l}} \cdot N_{i+1,j,l}$$

$$U_{i+1,j,l}^{2,2} = \mu_n \cdot \alpha_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l}) \cdot \frac{1}{X_{i+1,j,l} - X_{i,j,l}}$$

$$U_{i+1,j,l}^{2,3} = 0$$

$$U_{i+1,j,l}^{3,1} = -\mu_p \cdot \alpha_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l}) \cdot \frac{1}{X_{i+1,j,l} - X_{i,j,l}} \cdot P_{i,j,l}$$

$$U_{i+1,j,l}^{3,2} = 0$$

Annexe B

$$U_{i+1,j,l}^{3,3} = -\mu_n \cdot \alpha_{i,j,l} \cdot \frac{1}{X_{i+1,j,l} - X_{i,j,l}}$$

Calcul des éléments de la matrice $U_{i-1,j,l}$:

$$U_{i-1,j,l}^{1,1} = A_{i-1,j,l}$$

$$U_{i-1,j,l}^{1,2} = 0$$

$$U_{i-1,j,l}^{1,3} = 0$$

$$U_{i-1,j,l}^{2,1} = -\mu_n \cdot \alpha_{i-1,j,l} \cdot \exp(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l}) \cdot \frac{1}{X_{i,j,l} - X_{i-1,j,l}} \cdot N_{i,j,l}$$

$$U_{i-1,j,l}^{2,2} = -\mu_n \cdot \alpha_{i-1,j,l} \cdot \frac{1}{X_{i,j,l} - X_{i-1,j,l}}$$

$$U_{i-1,j,l}^{2,3} = 0$$

$$U_{i-1,j,l}^{3,1} = -\mu_p \cdot \alpha_{i-1,j,l} \cdot \exp(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l}) \cdot \frac{1}{X_{i,j,l} - X_{i-1,j,l}} \cdot P_{i-1,j,l}$$

$$U_{i-1,j,l}^{3,2} = 0$$

$$U_{i-1,j,l}^{3,3} = -\mu_p \cdot \alpha_{i-1,j,l} \cdot \exp(\psi_{i-1,j,l} - \psi_{i,j,l}) \cdot \frac{1}{X_{i,j,l} - X_{i-1,j,l}}$$

Calcul des éléments de la matrice $U_{i,j+1,l}$:

$$U_{i,j+1,l}^{1,1} = A_{i,j+1,l}$$

$$U_{i,j+1,l}^{1,2} = 0$$

$$U_{i,j+1,l}^{1,3} = 0$$

$$U_{i,j+1,l}^{2,1} = -\mu_n \cdot \beta_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j+1,l}) \cdot \frac{1}{Y_{i,j+1,l} - Y_{i,j,l}} \cdot N_{i,j+1,l}$$

$$U_{i,j+1,l}^{2,2} = \mu_n \cdot \beta_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j+1,l}) \cdot \frac{1}{Y_{i,j+1,l} - Y_{i,j,l}}$$

Annexe B

$$U_{i,j+1,l}^{2.3} = 0$$

$$U_{i,j+1,l}^{3.1} = -\mu_p \cdot \beta_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j+1,l}) \cdot \frac{1}{Y_{i,j+1,l} - Y_{i,j,l}} \cdot P_{i,j,l}$$

$$U_{i,j+1,l}^{3.2} = 0$$

$$U_{i,j+1,l}^{3.3} = -\mu_p \cdot \beta_{i,j,l} \cdot \frac{1}{Y_{i,j+1,l} - Y_{i,j,l}}$$

Calcul des éléments de la matrice $U_{i,j-1,l}$:

$$U_{i,j-1,l}^{1.1} = A_{i,j-1,l}$$

$$U_{i,j-1,l}^{1.2} = 0$$

$$U_{i,j-1,l}^{1.3} = 0$$

$$U_{i,j-1,l}^{2.1} = -\mu_n \cdot \beta_{i,j-1,l} \cdot \exp(\psi_{i,j-1,l} - \psi_{i,j,l}) \cdot \frac{1}{Y_{i,j,l} - Y_{i,j-1,l}} \cdot N_{i,j,l}$$

$$U_{i,j-1,l}^{2.2} = -\mu_n \cdot \beta_{i,j-1,l} \cdot \frac{1}{Y_{i,j,l} - Y_{i,j-1,l}}$$

$$U_{i,j-1,l}^{2.3} = 0$$

$$U_{i,j-1,l}^{3.1} = -\mu_p \cdot \beta_{i,j-1,l} \cdot \exp(\psi_{i,j-1,l} - \psi_{i,j,l}) \cdot \frac{1}{Y_{i,j,l} - Y_{i,j-1,l}} \cdot P_{i,j-1,l}$$

$$U_{i,j-1,l}^{3.2} = 0$$

$$U_{i,j-1,l}^{3.3} = -\mu_p \cdot \beta_{i,j-1,l} \cdot \frac{1}{Y_{i,j-1,l} - Y_{i,j,l}}$$

Annexe B

Calcul des éléments de la matrice $U_{i,j,l+1}$:

$$U_{i,j,l+1}^{1.1} = A_{i,j,l+1}$$

$$U_{i,j,l+1}^{1.2} = 0$$

$$U_{i,j,l+1}^{1.3} = 0$$

$$U_{i,j,l+1}^{2.1} = -\mu_n \cdot \gamma_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j,l+1}) \cdot \frac{1}{Z_{i,j,l+1} - Z_{i,j,l}} \cdot N_{i,j,l+1}$$

$$U_{i,j,l+1}^{2.2} = \mu_n \cdot \gamma_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j,l+1}) \cdot \frac{1}{Z_{i,j,l+1} - Z_{i,j,l}}$$

$$U_{i,j,l+1}^{2.3} = 0$$

$$U_{i,j,l+1}^{3.1} = -\mu_p \cdot \gamma_{i,j,l} \cdot \exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j,l+1}) \cdot \frac{1}{Z_{i,j,l+1} - Z_{i,j,l}} \cdot P_{i,j,l}$$

$$U_{i,j,l+1}^{3.2} = 0$$

$$U_{i,j,l+1}^{3.3} = -\mu_p \cdot \gamma_{i,j,l-1} \cdot \frac{1}{Z_{i,j,l} - Z_{i,j,l-1}}$$

Calcul des éléments de la matrice $U_{i,j,l-1}$:

$$U_{i,j,l-1}^{1.1} = A_{i,j,l-1}$$

$$U_{i,j,l-1}^{1.2} = 0$$

$$U_{i,j,l-1}^{1.3} = 0$$

$$U_{i,j,l-1}^{2.1} = -\mu_n \cdot \gamma_{i,j,l-1} \cdot \exp(\psi_{i,j,l-1} - \psi_{i,j,l}) \cdot \frac{1}{Z_{i,j,l} - Z_{i,j,l-1}} \cdot N_{i,j,l}$$

$$U_{i,j,l-1}^{2.2} = \mu_n \cdot \gamma_{i,j,l-1} \cdot \frac{1}{Z_{i,j,l} - Z_{i,j,l-1}}$$

$$U_{i,j,l-1}^{2.3} = 0$$

Annexe B

$$U_{i,j,l-1}^{3,1} = -\mu_p \gamma_{i,j,l-1} \cdot \exp(\psi_{i,j,l-1} - \psi_{i,j,l}) \cdot \frac{1}{Z_{i,j,l} - Z_{i,j,l-1}} \cdot P_{i,j,l-1}$$

$$U_{i,j,l-1}^{3,2} = 0$$

$$U_{i,j,l-1}^{3,3} = -\mu_p \gamma_{i,j,l-1} \cdot \frac{1}{Z_{i,j,l} - Z_{i,j,l-1}} \cdot \exp(\psi_{i,j,l+1} - \psi_{i,j,l})$$

Calcul des éléments intermédiaire intervenant dans le calcul de la matrice jacobienne et des équations de base :

$$A_{i+1,j,l} = \frac{2}{(X_{i+1,j,l} - X_{i,j,l})(X_{i+1,j,l} - X_{i-1,j,l})}$$

$$A_{i-1,j,l} = \frac{2}{(X_{i,j,l} - X_{i-1,j,l})(X_{i+1,j,l} - X_{i-1,j,l})}$$

$$A_{i,j+1,l} = \frac{2}{(Y_{i,j+1,l} - Y_{i,j,l})(Y_{i,j+1,l} - Y_{i,j-1,l})}$$

$$A_{i,j-1,l} = \frac{2}{(Y_{i,j,l} - Y_{i,j-1,l})(Y_{i,j+1,l} - Y_{i,j-1,l})}$$

$$A_{i,j,l+1} = \frac{2}{(Z_{i,j,l+1} - Z_{i,j,l})(Z_{i,j,l+1} - Z_{i,j,l-1})}$$

$$A_{i,j,l-1} = \frac{2}{(Z_{i,j,l} - Z_{i,j,l-1})(Z_{i,j,l+1} - Z_{i,j,l-1})}$$

$$\alpha_{i,j,l} = \frac{\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l}}{(X_{i+1,j,l} - X_{i,j,l})(\exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i+1,j,l}) - 1)}$$

$$\beta_{i,j,l} = \frac{\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j+1,l}}{(Y_{i,j+1,l} - Y_{i,j,l})(\exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j+1,l}) - 1)}$$

$$\gamma_{i,j,l} = \frac{\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j,l+1}}{(Z_{i,j,l+1} - Z_{i,j,l})(\exp(\psi_{i,j,l} - \psi_{i,j,l+1}) - 1)}$$