

THESE

présentée en vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'INSTITUT NATIONAL DES SCIENCES APPLIQUÉES

Spécialité : Mathématiques Appliquées

par

Eric POLIZZI

MODÉLISATION ET SIMULATIONS NUMÉRIQUES DU TRANSPORT QUANTIQUE BALISTIQUE DANS LES NANOSTRUCTURES SEMI-CONDUCTRICES

Soutenue le 17 Décembre 2001 devant le jury composé de :

Naoufel BEN ABDALLAH	<i>Directeur de thèse</i>	Université Paul Sabatier, Toulouse
Abderrahmane BENDALI	<i>Examineur</i>	INSA, Toulouse
Pierre DEGOND	<i>Président</i>	CNRS, Université Paul Sabatier, Toulouse
Ansgar JÜNGEL	<i>Rapporteur</i>	Université de Konstanz, ALLEMAGNE
Florian MÉHATS	<i>Examineur</i>	Université Paul Sabatier, Toulouse
Christian RINGHOFER	<i>Rapporteur</i>	Université d'Arizona, USA
Olivier VANBÉSIEN	<i>Examineur</i>	Université de Lille

Département de Génie Mathématique et Modélisation

Mathématiques pour l'Industrie et la Physique

Unité Mixte de Recherches CNRS - Universités Toulouse 1 et Toulouse 3 - INSA Toulouse

(UMR 5640)

A mes parents,
cette thèse est aussi la leur.

A mon épouse,
les rêves, les désirs et les espoirs sont les étoiles de notre vie.

“Aucun coeur n’a jamais souffert alors qu’il était à la poursuite de ses rêves”
P. Coelho, l’Alchimiste

Remerciements

Je remercie vivement Messieurs les Professeurs Naoufel Ben Abdallah et Pierre Degond pour m'avoir accueilli au sein du laboratoire Mathématiques pour l'Industrie et la Physique.

Tout au long de mes travaux de recherche, j'ai apprécié l'enthousiasme et la disponibilité de mon directeur de thèse, Naoufel Ben Abdallah. A ses côtés et dans une ambiance de travail agréable, j'ai été amené à faire preuve d'exigence et de rigueur scientifique. Il a su sans cesse motiver ma curiosité et je lui suis très reconnaissant pour toutes ces choses. Je n'oublie pas de saluer ses qualités humaines et je le remercie encore pour la confiance qu'il me porte.

J'adresse mes remerciements à Messieurs les Professeurs Ansgar Jüngel et Christian Ringhofer de l'honneur qu'ils me font en acceptant de juger cette thèse et d'en être les rapporteurs.

Je remercie sincèrement Messieurs Abderrahmane Bendali, Pierre Degond, Florian Méhats et Olivier Vanbésien qui ont accepté de faire partie du jury de thèse.

La collaboration établie avec Olivier Vanbésien au cours de ce travail a été précieuse sur bien des points, et je lui suis reconnaissant pour l'intérêt qu'il porte à ces travaux.

Je remercie chaleureusement le personnel du département de génie mathématique et modélisation, ainsi que tous les collègues doctorants. J'ai partagé avec nombre d'entre eux des discussions toujours passionnantes dans un climat agréable.

Je remercie mon épouse, Marie-Christine, pour son réconfort et sa patience. Sa présence et sa compréhension ont été pour moi d'un grand soutien moral.

Je remercie enfin mes parents, ma soeur Sabrina et son fiancé Thierry, ainsi que toute ma famille pour leur soutien constant.

Table des matières

Introduction générale	7
-----------------------	---

Partie I

Généralités sur les systèmes quantiques ouverts	13
---	----

1 Description du transport quantique dans les nanostructures	13
---	-----------

1.1 Quelques rappels de physique quantique	14
1.2 Quelques rappels de physique du solide	18
1.3 Confinement et transport	21
1.4 Les dispositifs à guides d'onde électronique	21
1.5 Présentation des dispositifs étudiés	23
1.5.1 Les dispositifs "split-gate" AlGaAs/GaAs	23
1.5.2 Les "nano-transistors" MOSFETs	28

2 Les dispositifs à guides d'onde électronique : un cas modèle	31
---	-----------

2.1 Position du problème	32
2.1.1 Définitions et hypothèses	32
2.1.2 Les effets électrostatiques	33
2.2 Le modèle de transport des électrons	34
2.2.1 L'approche quantique	34
2.2.2 L'approximation semi-classique : Thomas-Fermi	39
2.2.3 Récapitulatif des modèles	41
2.3 Calcul du courant et de la conductance	43
2.3.1 Le courant électronique : définition	43
2.3.2 Expression du courant en fonction des coefficients de réflexion et de transmission	44
2.3.3 La conductance	52

Partie II

Applications aux dispositifs ‘split-gate’ AlGaAs/GaAs et aux ‘nano-MOSFETs’ 57

3	Présentation d’un modèle de transport quantique dans les gaz d’électrons bidimensionnels pour les dispositifs AlGaAs/GaAs	57
3.1	Position du problème	58
3.1.1	Introduction	58
3.1.2	Définitions et hypothèses	61
3.2	Le modèle quantique quasi-3D	63
3.2.1	Préliminaires	63
3.2.2	Description détaillée du modèle quasi-3D	65
3.2.3	Conditions aux bords sur le potentiel	70
3.2.4	Calcul du courant et de la conductance	73
3.3	Etude sur les ordres d’approximation dans un cadre simplifié	74
3.3.1	Approximations sur les fonctions d’onde	75
3.3.2	Approximations sur la densité et sur le courant	77
3.3.3	Commentaires	80
3.4	Récapitulatif	81
4	Etude numérique de quelques dispositifs AlGaAs/GaAs	85
4.1	Les différentes équations à résoudre	86
4.1.1	Rappel des équations	86
4.1.2	Choix des différents maillages	89
4.1.3	Discrétisation du problème	91
4.2	Mise en oeuvre numérique	103
4.2.1	Organigramme général	103
4.2.2	Présentation du code ‘NESSIE’	111
4.3	Résultats numériques	113
4.3.1	Le stub électronique	114
4.3.2	Le coupleur quantique	129
5	Présentation d’un modèle de transport quantique pour les dispositifs ‘nano-MOSFETs’	139
5.1	Position du problème	140
5.2	Description du transport quantique	142
5.2.1	Le modèle de transport des électrons	142
5.2.2	Le modèle de transport des trous	147
5.2.3	Conditions aux bords sur le potentiel	148
5.2.4	Récapitulatif	149
5.3	Etude numérique d’un MOSFET à 25nm	151
5.3.1	Discrétisation des équations et mise en oeuvre numérique	151
5.3.2	Commentaires sur les résultats préliminaires	152

<i>TABLE DES MATIÈRES</i>	3
Conclusion générale	161
Annexes	165
A Les conditions de quasi-équilibre sur les bords associées au modèle 3D pour les dispositifs AlGaAs/GaAs	165
B Les conditions de quasi-équilibre sur les bords associées au modèle quantique pour les dispositifs “nano-MOSFETs”	169
C Différentes méthodes de résolution numérique des systèmes couplés	171
D Compléments de calculs	175

Introduction générale

Depuis la seconde moitié du 20^{ème} siècle, un effort constant dans la miniaturisation des dispositifs semi-conducteurs a été entrepris. Ces dispositifs peuvent être insérés en nombre de plus en plus important dans les circuits intégrés : ainsi, en l'espace de 26 ans, le nombre de transistors intégrés sur une puce a augmenté de plus de 3200 fois, passant de 2300 sur le 4004 en 1971 à 7,5 millions sur l'Intel Pentium II. Les performances des ordinateurs se voient augmentées de façon exponentielle sur des périodes relativement courtes (comme cela est stipulé par la "loi" de Moore). En outre, ces composants possèdent des temps de réponse de plus en plus courts, et nécessitent une consommation de plus en plus faible. Dans le but d'améliorer les performances et de repousser les limites de la miniaturisation de ces composants, on peut procéder à de multiples essais expérimentaux. Dans cette démarche longue et coûteuse, la simulation numérique peut être un outil utile d'aide à la décision. En effet, l'approche numérique présente l'avantage d'une part, d'être d'une grande souplesse d'utilisation, d'autre part, d'anticiper les progrès futurs qui pourront être réalisés dans le domaine de la nano-électronique. Elle permet alors de procéder à des "tests" idéalisées sur des dispositifs virtuels en s'affranchissant notamment des barrières et des limites liées aux technologies de fabrication de ces composants. Les études paramétriques réalisées en faisant varier une ou plusieurs caractéristiques de la structure (certaines longueurs de la structure, les densités de dopage, la température...), peuvent permettre une compréhension du fonctionnement des composants et de prédire des comportements singuliers. Les résultats numériques fournissent alors des indications sur les valeurs des différents paramètres permettant ainsi de cadrer de manière optimale les essais expérimentaux.

En micro-électronique, le transport des électrons (ou éventuellement des trous) dans les semi-conducteurs peut être considéré comme classique ou semi-classique, il est souvent traité en utilisant des modèles fluides [10, 36] (modèle de Dérive-Diffusion [54, 55, 77, 80, 97, 106], modèle hydrodynamique [66], modèle d'énergie-transport [12, 37–39],...) ou cinétiques [78, 98] (équation de Boltzmann [47, 72, 73, 81, 100]...). Dans des dispositifs de très petite taille ($< 100\text{nm}$), où les variations du potentiel électrostatique peuvent être importantes en comparaison avec la longueur d'onde des électrons, une description quantique du transport s'avère nécessaire. Dans ce cas, les électrons sont associés à des ondes électroniques. Loin de considérer l'apparition de phénomènes quantiques dans les composants comme une nouvelle limitation physique, l'électronique dite quantique se propose la pleine intégration de ces phénomènes dans le fonctionnement des dispositifs électroniques pour des applications futures originales et prometteuses [75]. Il existe toute une panoplie d'algorithmes différents pour simuler, comprendre, prédire et optimiser le fonctionnement des composants. Pour des exposés détaillés sur les phénomènes de transport dans les dispositifs quantiques, nous renvoyons aux nombreux ouvrages de références [29, 34, 44, 51, 112].

Dans le cas des systèmes dits ouverts, c'est à dire reliés à des réservoirs d'électrons, l'étude du transport électronique est restreint au domaine borné quantique du dispositif pour lequel il est nécessaire de définir des conditions aux bords prenant en compte l'injection des porteurs dans celui-ci. Une différence de potentiel entre les réservoirs va modifier leur potentiel chimique respectif, ce qui aura pour effet d'amorcer le transport d'électrons à travers le système. Dans les dispositifs unidimensionnels, comme les diodes à effet tun-

nel résonnant (RTD : **R**esonant-**T**unneling **D**iode) qui sont caractérisées par une double barrière de potentiel, les conditions aux bords du composant sont dites transparentes dans le cas stationnaire [11, 50]. La modélisation du transport quantique dans les RTDs a fait l’objet, depuis plus de vingt cinq ans, de nombreux travaux qui présentent à la fois des résultats expérimentaux, physiques et mathématiques [11, 23, 25, 49, 58, 70, 103, 132]. En particulier, les caractéristiques courant-tension des RTDs, mettent en évidence une résistance différentielle négative (fonction très utile pour l’électronique non-linéaire). Par ailleurs, nous pouvons citer d’autres travaux présentant différents modèles de transport quantique (équations Wigner [3, 4, 14, 43], modèle hydrodynamique quantique [57, 99], modèle de Dérive-Diffusion quantique [56, 67, 94] ...), ainsi que différentes méthodes de simulations numériques [104] (méthode de raccordement de modes ou matrices de transfert pour l’équation de Schrödinger [65, 128]...) pour divers dispositifs.

Ce travail de thèse concerne l’étude du transport électronique balistique dans des dispositifs semi-conducteurs qui sont munis de guides d’onde. Le principe de fonctionnement de ces composants repose sur l’aspect ondulatoire des mécanismes de transport. Le transport des électrons sera donc décrit en utilisant l’équation de Schrödinger stationnaire. Dans un cas général multidimensionnel, nous faisons le choix d’effectuer le traitement des conditions aux bords ouvertes à l’aide de la méthode QTBM (**Q**uantum **T**ransmitting **B**oundary **M**ethod) [74]. Par ailleurs, les réactions de charge d’espace des électrons seront décrites en utilisant l’équation de Poisson.

Dans la première partie du mémoire, nous présenterons des notions de base de la mécanique quantique, ainsi que quelques généralités sur les dispositifs semi-conducteurs ouverts constitués de guides d’onde électronique. La seconde partie de la thèse sera consacrée à l’étude spécifique du transport quantique dans les dispositifs “split-gate” AlGaAs/GaAs et les dispositifs “nano-MOSFETs”. Le manuscrit est organisé de la manière suivante :

- dans le chapitre **1**, nous introduirons les notions de base de la mécanique quantique et de la physique du solide. Nous parlerons des effets quantiques qui peuvent apparaître dans les nanostructures et nous effectuerons la description des dispositifs que nous allons étudier dans la deuxième partie de la thèse.
- dans le chapitre **2**, nous présenterons l’étude complète d’un dispositif à guides d’onde électronique que nous avons baptisé le cas modèle. Nous effectuerons notamment la description quantique du transport électronique en présentant le couplage des équations de Schrödinger et de Poisson pour un cas multidimensionnel. En complément, nous établirons l’expression des coefficients de transmission, de l’intensité et de la conductance dans les guides.
- dans le chapitre **3**, consacré à l’étude du transport des électrons dans les dispositifs tridimensionnels “split-gate” AlGaAs/GaAs, nous développerons un modèle prenant en compte le confinement des charges dans la direction verticale des composants. Nous étudierons formellement l’ordre d’approximation de ce modèle baptisé quasi-3D, en fonction du modèle 3D complet. Nous présenterons ensuite les différents

modèles de résolution des systèmes couplés de la densité électronique et du potentiel électrostatique que nous utiliserons lors de l'étude numérique.

- dans le chapitre 4, nous effectuerons l'étude numérique des dispositifs AlGaAs/GaAs. Nous présenterons dans un premier temps la discrétisation des équations du problème sur différents domaines préalablement définis. Nous parlerons ensuite de la mise en oeuvre numérique à travers l'organigramme général de calcul et du code de calcul NESSIE (**N**ano-**E**lectronics **S**imulator for **S**ystems with **I**nterference **E**ffects) que nous avons développé. Finalement, de nombreux résultats de simulations numériques seront présentés à travers les exemples du stub électronique et du coupleur quantique. Nous effectuerons en outre la comparaison des modèles 3D et quasi-3D, et nous donnerons des exemples de caractéristiques courant-tension. Nous noterons que les mécanismes de fonctionnement de ces dispositifs reposent principalement sur les phénomènes d'interférences quantiques qui interviennent dans la zone active du composant.

- dans le chapitre 5, nous présenterons un modèle de transport quantique dans les "nano-MOSFETs". Dans le cas du transistor MOS (Metal Oxyde Semiconducteur) à l'échelle nanométrique, nous verrons qu'il est possible sous certaines conditions de se ramener au problème modèle présenté dans le chapitre 2, dans le cas d'un dispositif à deux guides d'onde. Finalement, nous montrerons l'importance des phénomènes quantiques dans ces dispositifs à l'aide des premiers résultats de simulations numériques que nous avons obtenus.

Partie I

Généralités sur les systèmes quantiques ouverts

Chapitre 1

Description du transport quantique dans les nanostructures

Sommaire

1.1	Quelques rappels de physique quantique	14
1.2	Quelques rappels de physique du solide	18
1.3	Confinement et transport	21
1.4	Les dispositifs à guides d'onde électronique	21
1.5	Présentation des dispositifs étudiés	23
1.5.1	Les dispositifs "split-gate" AlGaAs/GaAs	23
1.5.2	Les "nano-transistors" MOSFETs	28

1.1 Quelques rappels de physique quantique

Nous allons rappeler dans un premier temps quelques notions de base de mécanique quantique qui nous seront nécessaires dans la suite de notre étude [26, 79].

Louis de Broglie a introduit en 1923 le postulat de dualité onde-corpuscule, selon lequel : à toute particule possédant une impulsion \mathbf{p} , on peut associer un vecteur d'onde \mathbf{k} , par la relation

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}, \quad (1.1)$$

la longueur d'onde associée à la particule étant donnée par

$$\lambda = \frac{2\pi}{\|\mathbf{k}\|}. \quad (1.2)$$

En mécanique quantique, on associe alors à une particule dans un potentiel $U(\mathbf{x})$ à l'instant t une fonction $\Psi(\mathbf{x}, t)$, appelée la fonction d'onde de la particule et qui obéit à l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{x}, t) = \hat{H}\Psi(\mathbf{x}, t), \quad (1.3)$$

où \hat{H} représente l'opérateur Hamiltonien

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathbf{x}), \quad (1.4)$$

m étant la masse de la particule. Le premier terme représente l'énergie cinétique et le second terme l'énergie potentielle. La signification physique de la fonction d'onde repose sur son module au carré $|\Psi(\mathbf{x}, t)|^2$. Celui-ci représente la densité de probabilité de trouver la particule en \mathbf{x} à l'instant t . Notons que la phase absolue de la fonction d'onde n'a pas de signification physique connue, mais que la phase relative de la superposition de deux ondes peut affecter l'amplitude de la fonction d'onde.

Dans ce travail de thèse, nous limitons notre étude aux états quantiques des électrons pour lesquels la densité de probabilité est indépendante du temps. Ces états, dits stationnaires, peuvent s'écrire sous la forme

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \Psi(\mathbf{x}) \exp(-i\frac{Et}{\hbar}). \quad (1.5)$$

Ils sont alors solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{x}) = E\Psi(\mathbf{x}). \quad (1.6)$$

La fonction Ψ peut alors être vue comme un vecteur propre de \hat{H} , l'énergie E étant la valeur propre associée. Selon que Ψ est de carré intégrable ou non, l'énergie E appartiendra au spectre discret ou continu de \hat{H} . Dans ce dernier cas, le courant total porté par Ψ

pourra être non nul.

Nous allons maintenant présenter différents exemples d'effets quantiques à l'aide de l'étude des états stationnaires d'un électron de masse m , se déplaçant suivant l'axe des x dans un potentiel simple à une dimension. Ce potentiel peut prendre l'allure d'une marche de potentiel, d'une barrière de potentiel ou d'un puits de potentiel.

Marche de potentiel

Soit $U(x) = 0$ si $x < 0$, $U(x) = U_0 > 0$ si $x > 0$ (voir Figure 1.1a). On suppose une particule émise par une source située à $-\infty$, la solution de l'équation de Schrödinger (1.6) dans le domaine $x < 0$ peut alors s'écrire

$$\Psi(x) = A \exp(ik_0x) + B \exp(-ik_0x) \quad \text{avec} \quad k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad (1.7)$$

où le premier terme est l'onde dite incidente d'amplitude A , et le second terme l'onde dite réfléchie d'amplitude B . Le coefficient de réflexion est défini par la relation

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2}. \quad (1.8)$$

La solution de l'équation de Schrödinger (1.6) dans le domaine $x > 0$ dépend de la position de l'énergie E par rapport à la marche de potentiel U_0 . On peut alors distinguer deux cas : $E > U_0$ et $E < U_0$.

– **Cas $E > U_0$** : on obtient alors

$$\Psi(x) = C \exp(ik_1x) + D \exp(-ik_1x) \quad \text{avec} \quad k_1 = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}}, \quad (1.9)$$

où le premier terme est l'onde dite transmise d'amplitude C , et le second terme correspond à une onde venant de $+\infty$ que l'on suppose nulle ($D = 0$). Les équations de continuité des fonctions d'onde (1.7) et (1.9), ainsi que leur dérivée en $x = 0$ s'écrivent

$$A + B = C \quad \text{et} \quad k_0(A + B) = k_1C. \quad (1.10)$$

On peut alors déterminer les coefficients B et C en fonction de A , et en déduire l'expression du coefficient de réflexion (1.8). Ce coefficient de réflexion n'est pas nul, contrairement aux résultats de mécanique classique. Dans ce cas précis, la réflexion des particules est donc un effet purement quantique.

– **Cas $E < U_0$** : on obtient alors

$$\Psi(x) = C \exp(-Kx) + D \exp(Kx) \quad \text{avec} \quad K = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}, \quad (1.11)$$

où le premier terme est une onde dite évanescente. Etant donné que la fonction d'onde est bornée à l'infini, on pose $D = 0$. Les équations de continuité des fonctions d'onde (1.7) et (1.11), ainsi que leur dérivée en $x = 0$ s'écrivent

$$A + B = C \quad \text{et} \quad ik_0(A + B) = -KC \quad (1.12)$$

On peut alors déterminer les coefficients B et C en fonction de A , et en déduire l'expression du coefficient de réflexion (1.8). Ce coefficient de réflexion est alors égal à 1, en accord avec les résultats de la mécanique classique. Cependant, la densité de probabilité de trouver la particule dans le domaine $x > 0$ n'est pas nulle dans ce cas quantique. Celle-ci prend la valeur

$$|\Psi(x)|^2 = |C|^2 \exp(-2Kx). \quad (1.13)$$

Cette densité tend très rapidement vers 0 à mesure que l'onde pénètre dans la marche de potentiel.

Barrière de potentiel

Soit $U(x) = 0$ si $x < 0$ ou $x > L$, $U(x) = U_0 > 0$ si $0 < x < L$ (voir Figure 1.1b). Dans le cas d'une marche de potentiel avec $E < U_0$, on a montré la possibilité de trouver la particule dans le domaine $x > 0$ au voisinage de la marche. C'est ce phénomène quantique qui est à l'origine de l'effet tunnel dans le cas d'une barrière de potentiel. Le coefficient de transmission associé à l'onde dans la région $x > a$ n'est donc pas nul.

Puits de potentiel

Soit $U(x) = +\infty$ si $x < 0$ ou $x > L$, $U(x) = 0$ si $0 < x < L$ (voir Figure 1.1c). Dans ce cas on considère une particule de masse m placée dans un puits de potentiel. La fonction d'onde d'un électron plongé dans un potentiel infini (cas $x < 0$ ou $x > L$) est nulle. La solution de l'équation de Schrödinger (1.6) dans le domaine $0 < x < L$ est de la forme

$$\Psi(x) = A \exp(ik_0x) + B \exp(-ik_0x), \quad k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (1.14)$$

Les équations de continuité en $x = 0$ et $x = L$ de la fonction d'onde (1.14), ainsi que de sa dérivée en $x = 0$ et $x = l$, permettent de trouver les relations

$$A + B = 0 \quad \text{et} \quad \sin(k_0L) = 0. \quad (1.15)$$

La deuxième condition aux bords implique que le vecteur d'onde k_0 ne peut prendre que des valeurs discrètes :

$$k_0 = \frac{n\pi}{L}. \quad (1.16)$$

Dans ces conditions, l'énergie des états dits liés au puits de potentiel (ou modes propres), ne peut prendre que des valeurs discrètes E_n (quantification de l'énergie). A l'aide de la condition de normalisation à l'unité de la fonction d'onde sur $[0, L]$, on

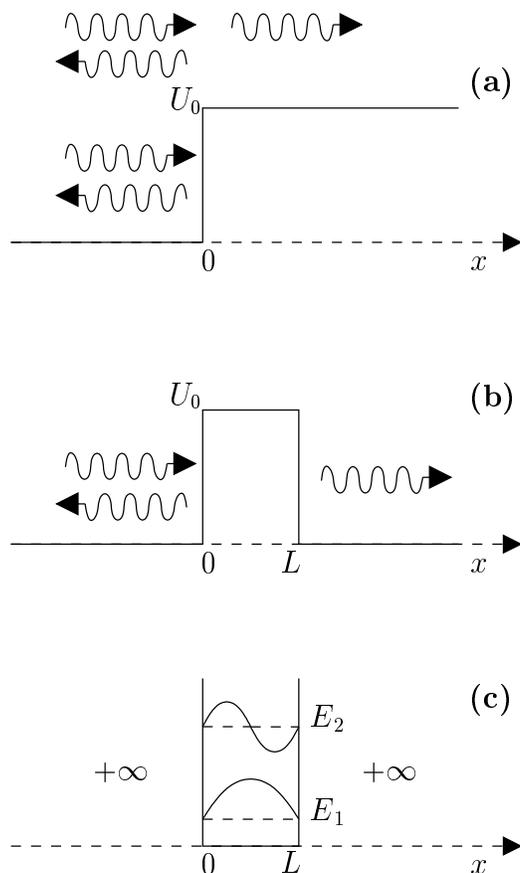


Figure 1.1: Description de quelques effets quantiques pour différentes configurations du potentiel dans un cas unidimensionnel. Dans le cas d'une marche de potentiel en (a), on peut associer à une onde incidente d'énergie $E > U_0$, une onde réfléchie et une onde transmise. Dans le cas où l'onde incidente est associée à une énergie $E < U_0$, toute l'onde est réfléchie (on retrouve les mêmes résultats qui seraient obtenus avec la mécanique classique). La probabilité de trouver la particule en $x > 0$ aux alentours de la marche de potentiel, n'est par conséquent, pas nulle (il existe une onde dite évanescente). Ce phénomène est à l'origine de l'effet tunnel dans le cas d'une barrière de potentiel (b) (il existe une onde transmise). Autrement dit, en mécanique quantique, la particule a la possibilité de traverser une barrière de potentiel par effet tunnel. Finalement dans le cas d'un puits de potentiel (c), les états quantiques sont dits liés aux puits, on note alors l'apparition de modes propres, l'énergie ne pouvant prendre que des valeurs discrètes. Dans ce cas, nous avons représenté les deux premiers niveaux d'énergie ainsi que les fonctions d'onde associées.

en déduit le coefficient A à un facteur de phase près (choisi arbitrairement comme $\exp(-i\pi/2)$), on écrit alors

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad \text{avec} \quad E_n = n^2 E_1 \quad \text{et} \quad E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2}. \quad (1.17)$$

Finalement, dans les régions où $E > U$, si deux ondes issues d'une même source se propagent entre les points A et B et suivent deux chemins différents (voir Figure 1.2), elles peuvent alors se décomposer ou se recomposer suivant les différences relatives entre leur phase (analogie avec les ondes électromagnétiques). Le phénomène d'interférence quantique est donc une conséquence de l'aspect ondulatoire du transport des particules.

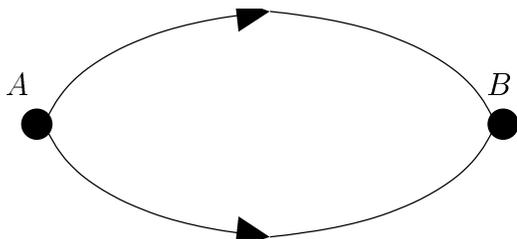


Figure 1.2: Deux ondes issues de la même source en A , peuvent se propager suivant deux chemins différents, elles interfèrent en B .

Remarque: la quantification de l'énergie dans un puits de potentiel, peut être considérée comme une conséquence d'une interférence quantique dans le cas d'une résonance (dans ce cas, l'existence des ondes n'est plus reliée à une source extérieure).

En résumé, l'effet tunnel à travers une marche de potentiel, la quantification de l'énergie dans un puits de potentiel et les phénomènes d'interférences quantiques, sont autant de phénomènes physiques spécifiques à la mécanique quantique.

1.2 Quelques rappels de physique du solide

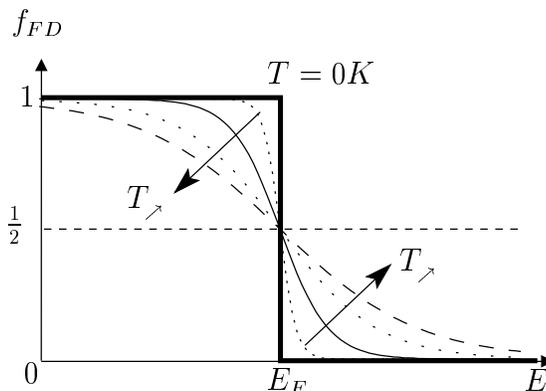
Dans un solide, l'énergie d'un électron est donnée par la théorie de Bloch [5, 102]. Le potentiel U ayant la périodicité du réseau cristallin, le spectre de l'opérateur \hat{H} est formé d'intervalles fermés (appelés bandes) séparés par des intervalles interdits (appelés gap). Pour chaque bande n , l'énergie est reliée au vecteur d'onde k par une relation de dispersion $E = \varepsilon_n(k)$. Les électrons sont des fermions (particules de spin demi-entier) et obéissent au principe d'exclusion de Pauli. Il ne peut donc y avoir deux électrons dans le même état quantique. Les électrons remplissent les états d'énergie distribués en bande, par énergie croissante. Des énergies plus élevées sont dès lors permises, elles se situent dans la bande de conduction. La bande de conduction est séparée par un gap d'énergie d'une bande dite de valence. Le niveau de Fermi E_F est défini comme le niveau d'énergie maximal pour une température absolue nulle, c'est à dire sans agitation thermique. Lorsque la température augmente, l'agitation thermique vient bousculer l'arrangement du cristal et

la probabilité d'occupation d'un état d'énergie E est donnée par la distribution de Fermi-Dirac (*voir* Figure 1.3)

$$f_{FD}(E - E_F) = \frac{1}{1 + \exp(\beta(E - E_F))}, \quad (1.18)$$

avec $\beta = 1/(k_B T)$, T étant la température et k_B la constante de Boltzmann.

Figure 1.3: Diverses représentations de la fonction de distribution de Fermi-Dirac à des températures différentes. A $T = 0$ la fonction est carrée, telle que $f_{FD} = 1$ si $E \leq E_F$, et $f_{FD} = 0$ sinon. Quand la température augmente, la fonction de distribution s'éloigne de la fonction carré.



La position du niveau de Fermi par rapport aux bandes permises (séparées par des bandes interdites) détermine la nature électrique du cristal. On distingue ainsi les conducteurs, les isolants et les semi-conducteurs.

Dans un conducteur, l'énergie de Fermi est autorisée, elle se trouve sur la bande de conduction (*voir* Figure 1.4a). Avec l'agitation thermique, les électrons peuvent trouver dans leur voisinage un état libre pour s'y déplacer, la conductivité électrique est alors permise. Les électrons peuvent acquérir une vitesse d'ensemble non nulle sous l'effet d'un champ électrique, ce qui explique la conduction.

Dans un isolant, l'énergie de Fermi est située dans une bande interdite dont le gap d'énergie est trop important pour être franchi par les électrons (*voir* Figure 1.4b). La probabilité de trouver un électron dans la bande de conduction est donc quasiment nulle.

Dans un semi-conducteur, l'énergie de Fermi est aussi située dans une bande interdite, mais dans ce cas, le gap d'énergie est suffisamment étroit ($\sim 1eV$) pour être franchi sous l'effet de fluctuations thermiques (*voir* Figure 1.4c). Par conséquent, quelques électrons se trouvant dans la bande de valence ont assez d'énergie pour atteindre la bande de conduction, où de nombreux états permis sont disponibles. Ils peuvent alors aisément se déplacer. En même temps, des états vacants de la bande de valence, que l'on appelle des trous, deviennent eux aussi disponibles. Un trou est équivalent à une charge positive qui peut se déplacer librement dans la bande de valence. Un champ électrique extérieur peut à la fois mettre en mouvement les électrons et les trous. La conduction due aux électrons est appelée conduction de type n , et celle due aux trous est appelée conduction de type p . La conductivité par paires électron-trou est dite intrinsèque, elle est une fonction rapidement croissante de la température. Il est possible de créer des régions où la conduction est

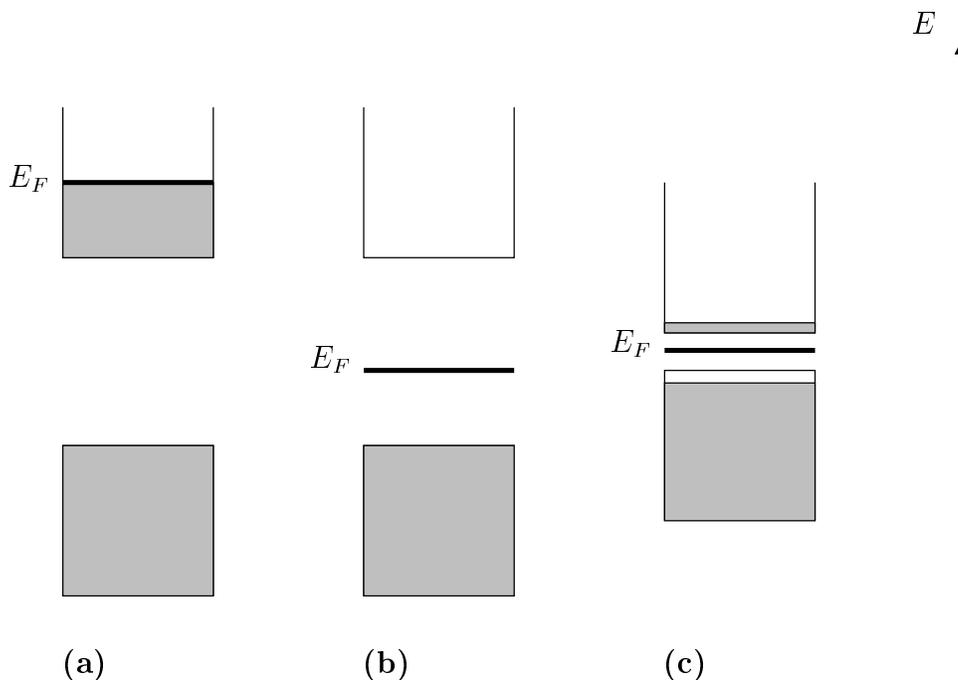


Figure 1.4: Schémas de la population en électrons des bandes d'énergie permises dans un métal (a), un isolant (b), et un semi-conducteur (c). Les régions ombrées représentent des régions du spectre remplies d'électrons. Dans le cas du semi-conducteur, les porteurs excités thermiquement peuvent franchir le gap d'énergie.

essentiellement de type n (respectivement de type p) en y insérant des impuretés qui vont s'ioniser positivement (respectivement négativement) et introduire de nouveaux électrons libres dans la bande de conduction (respectivement de nouveaux trous dans la bande de valence). Ce procédé de dopage des semi-conducteurs, introduit des niveaux intermédiaires qui contribuent à la conduction (niveaux donneurs ou accepteurs selon les types de dopage). La conduction extrinsèque obtenue par dopage, permet la réalisation des circuits à semi-conducteurs en micro-électronique [120, 133]. La grande majorité des applications des semi-conducteurs en électronique, utilisent les phénomènes liés aux jonctions de zones aux propriétés électriques différentes : diode (jonctions $p - n$), effet transistor...

Finalement, notons que l'énergie d'une particule libre de masse m dans le vide est donnée par la relation

$$E = \frac{\hbar^2 ||\mathbf{k}||^2}{2m}, \quad (1.19)$$

où \mathbf{k} est le vecteur d'onde. Dans l'étude des phénomènes de transport électronique dans les semi-conducteurs, nous effectuons l'approximation de la masse effective qui consiste à remplacer dans toutes les formules, la masse des particules (électrons ou trous) dans le vide par leur masse effective relative aux différents matériaux semi-conducteurs et aux différentes bandes considérées.

1.3 Confinement et transport

Dans le but d'obtenir un meilleur contrôle sur le transport des électrons, il peut être utile de les confiner dans une ou plusieurs directions de l'espace. Il est alors possible de séparer le mouvement des électrons dans les trois directions de l'espace et de les traiter séparément. Citons alors plusieurs exemples :

- (a) dans le cas où les électrons sont confinés dans une seule direction de l'espace (généralement la direction dite verticale), on voit alors apparaître des modes d'énergie verticaux (comme dans un puits de potentiel), tandis que les autres directions perpendiculaires présentent un spectre continu en énergie. Il est possible, en changeant la densité des électrons, d'occuper uniquement le mode vertical le plus faible en énergie (mode fondamental), ce qui laisse apparaître un gaz d'électrons bidimensionnel dans les autres directions de l'espace (*voir* Figure 1.5a).
- (b) dans le cas où les électrons sont confinés dans deux directions de l'espace, le transport électronique ne peut alors se produire que dans une seule direction. On obtient alors un fil quantique (quantum wire), ou guide d'onde électronique dans le cas d'un transport balistique (*voir* Figure 1.5b).
- (c) dans le cas où les électrons sont confinés dans toutes les directions de l'espace, on réalise une boîte quantique (quantum dot) (*voir* Figure 1.5c).

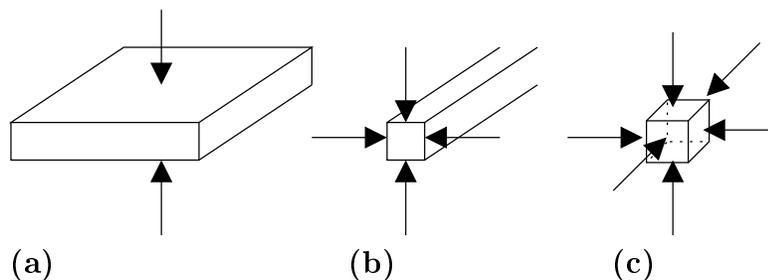


Figure 1.5: Schémas représentant le confinement des électrons dans les diverses directions de l'espace. En (a), les électrons sont confinés dans une seule direction de l'espace et le dispositif est dit 2D (nombre de degrés de liberté pour les électrons). En (b), on réalise un fil quantique à l'aide d'un confinement dans deux directions de l'espace, le dispositif est dit 1D. Comme les électrons sont confinés dans toutes les directions de l'espace dans le cas d'une boîte quantique en (c), le dispositif est dit 0D.

1.4 Les dispositifs à guides d'onde électronique

D'un point de vue général, nous appelons dispositif à guide d'onde électronique, un système dans lequel des ondes électroniques confinées dans les directions transverses d'un guide, peuvent à la fois pénétrer et ressortir d'une zone dite "active" par un ou plusieurs

guides d'onde. Les dimensions caractéristiques du dispositif étant de l'ordre de la longueur d'onde des électrons, le transport électronique nécessite donc une description quantique. Le dispositif se compose, dans son ensemble, de trois parties : les réservoirs d'électrons, les guides d'onde et une zone dite "active" (voir Figure 1.6 pour l'exemple d'un dispositif possédant deux guides d'onde).

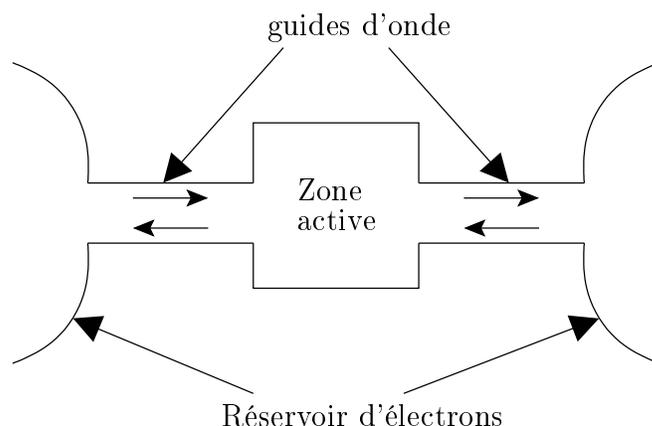


Figure 1.6: Représentation schématique d'un dispositif possédant deux guides d'onde électronique.

Les réservoirs d'électrons

Dans un premier temps, les électrons qui participent au transport sont concentrés dans des réservoirs se situant aux extrémités du dispositif. Les ondes électroniques qui pénètrent dans le système (noté Ω) sont émises par les réservoirs et ne possèdent aucune relation de phase entre elles. Dans les réservoirs, l'équilibre thermodynamique est assuré par les collisions inélastiques subies par les électrons. Ainsi, toutes les ondes issues du système Ω sont entièrement absorbées en sortie par les réservoirs. Pour chaque réservoir, on peut définir un potentiel chimique dépendant de la tension appliquée (i.e. quasi-niveau de Fermi associé à chaque réservoir). Une différence de potentiel appliquée entre les réservoirs privilégie l'injection des électrons dans tels ou tels guides d'onde, et amorce le transport électronique (il n'existe plus d'équilibre thermodynamique en dehors des réservoirs).

Les guides d'onde électronique

Le potentiel électrostatique dans le système Ω définit la géométrie dans laquelle vont se mouvoir les électrons. En effet, dans les régions où l'énergie potentielle est élevée, la probabilité de trouver un électron est très faible. Par définition dans les guides d'onde, le potentiel électrostatique varie uniquement dans la direction transverse. Les électrons sont alors confinés dans la direction transverse et le transport électronique s'effectue uniquement dans la direction longitudinale des guides. Ainsi, les électrons issus des réservoirs sont dirigés par les guides d'onde et pénètrent dans une région dite "active".

La zone active

Les électrons qui pénètrent dans la zone active peuvent suivant la géométrie du dispositif (c'est à dire suivant la valeur du potentiel électrostatique), et suivant la polarisation des ports d'entrée/sortie, ressortir par un ou plusieurs guides d'onde (ports de sortie). En effet, dans l'hypothèse d'un régime balistique, la différence de phase entre les ondes électroniques qui suivent des chemins différents dans la zone active est uniquement obtenue par les réflexions de ces ondes sur le potentiel de confinement. Ces ondes interfèrent ensuite de manière cohérente, et c'est la recombinaison ou la décomposition de ces ondes de phases relatives différentes qui est à l'origine de la transmission ou de la réflexion dans les guides. La géométrie du système est ainsi directement responsable des fluctuations du transport électronique.

Au cours de ce travail, nous nous plaçons toujours dans l'hypothèse d'un transport quantique balistique. Notre objectif est de calculer les caractéristiques courant-tension de dispositifs à guides d'onde électronique. Pour cela, nous prendrons également en compte le phénomène de réaction de charge d'espace : les électrons (et/ou les trous) modifient le potentiel électrostatique dans lequel ils se déplacent à cause de l'interaction électrostatique.

1.5 Présentation des dispositifs étudiés

1.5.1 Les dispositifs “split-gate” AlGaAs/GaAs

Depuis un peu plus d'une dizaine d'années, les progrès conjoints des techniques de croissance épitaxiale et de lithographie électronique ont permis de confiner un gaz d'électrons dans plusieurs dimensions spatiales d'un composant. Ces progrès ont été à l'origine de la notion de composants à base de guides d'onde électronique qui présentent de nombreuses analogies avec les circuits de guidage de l'énergie électromagnétique [131]. Ces composants du futur, issus de la technologie *split-gate* [122], présentent l'intérêt d'être ultra rapides (régime de fonctionnement de l'ordre du TéraHertz) et de faible consommation [19].

Les dispositifs ‘split-gate’ AlGaAs/GaAs sont constitués d'un empilement de couches d'hétérostructures semi-conductrices à haute mobilité et présentent des grilles métalliques (grilles Shottky) en surface. L'alimentation en courant du dispositif est assurée par des contacts ohmiques formant des réservoirs d'électrons et situés aux extrémités du composant (*voir* Figure 1.7a). La configuration de dopage dans les hétérostructures semi-conductrices fait apparaître un potentiel de confinement pour les électrons à l'interface de la couche de AlGaAs non dopée et du substrat GaAs (*voir* Figure 1.8). Tous les électrons de conduction sont alors confinés dans le puits de potentiel, donnant ainsi naissance à un gaz d'électrons bidimensionnel (2DEG : 2 Dimensional Electron Gas) possédant une mobilité très élevée [1, 63, 91]. Un potentiel négatif appliqué sur les grilles, permet d'obtenir un confinement additionnel pour le gaz 2D d'électrons en provoquant la désertion des porteurs des zones du gaz 2D (*voir* Figure 1.9) positionnées sous les grilles [33]. Ce potentiel de commande rend ainsi possible le contrôle du transport électronique dans la

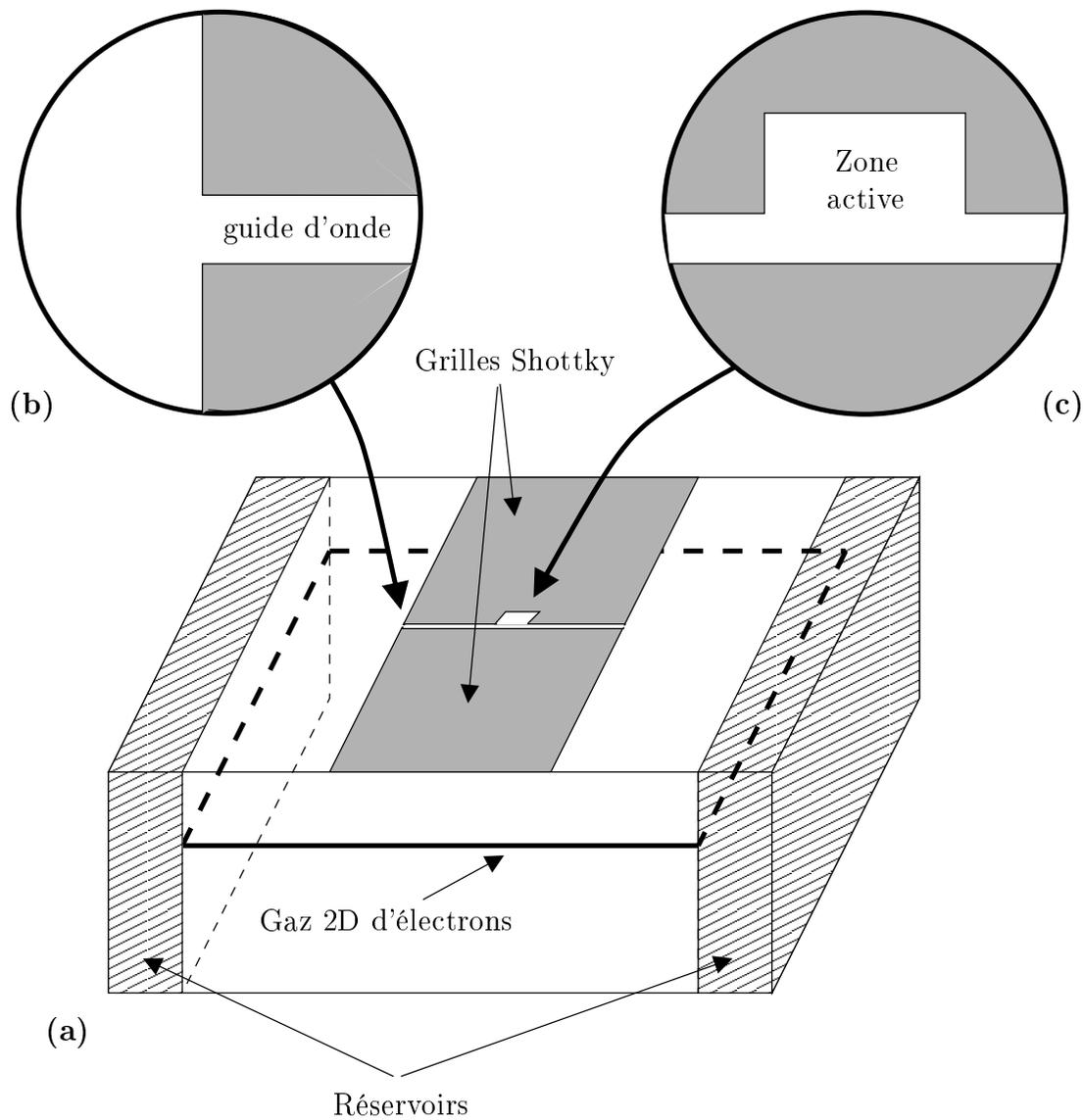


Figure 1.7: Représentation schématique d'un composant de type stub électronique muni de deux réservoirs et de deux grilles Shottky (a). La disposition parallèle des grilles en surface (b) fait apparaître des guides d'onde électronique dans le plan du gaz d'électrons. Les électrons confinés dans le plan, sont dirigés par les guides d'onde vers une zone dite "active" définie à la fois par la géométrie des grilles en surface (c) et par la valeur du potentiel appliqué sur les grilles. La zone active est le siège d'interférences quantiques.

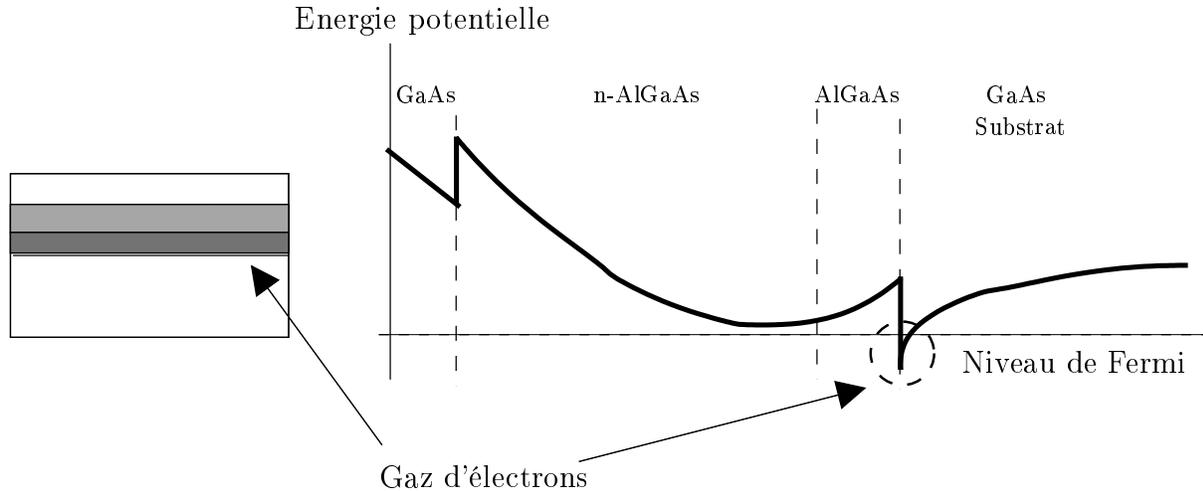


Figure 1.8: Représentation des couches semi-conductrices et du profil du potentiel vertical, avec confinement du gaz 2D d'électrons dans le puits. Le transport électronique est bidimensionnel.

structure en “dessinant” un profil de potentiel de même nature pour le plan du gaz 2D. Les grilles en surface sont alors disposées de manière à réaliser des guides d'onde électronique reliés aux réservoirs d'électrons (*voir* Figure 1.7b).

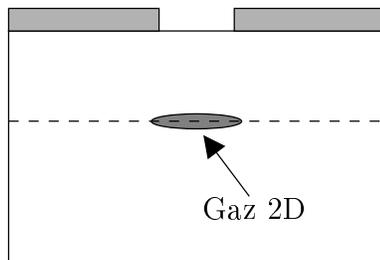


Figure 1.9: Vue en coupe du fil quantique prise au centre du composant. Un potentiel appliqué sur les grilles en surface entraîne des zones de déplétion en électrons sous les grilles dans le plan du gaz 2D. On réalise alors un guide d'onde électronique.

Remarque: en électronique quantique, l'emploi d'hétérostructures semiconductrices à haute mobilité électronique permet d'obtenir un transport sans collision de type impuretés dans la nanostructure, et avec l'hypothèse de faible température, un régime balistique. Le régime de transport balistique (sans collision) est défini par

$$L < l_e < l_\phi, \quad (1.20)$$

où L représente la longueur caractéristique du dispositif électronique, l_e représente le libre parcours moyen des électrons, et l_ϕ la longueur de cohérence de phase des électrons. La condition $l_e < l_\phi$ qui privilégie les interactions élastiques par rapport aux interactions inélastiques, est obtenue avec l'hypothèse de faible température. Par ailleurs dans le cas d'un régime mésoscopique où $l_e < L < l_\phi$, les caractéristiques de transport sont liées à la configuration des impuretés.

Dans le cas d'un fil quantique (*voir* Figure 1.10a) où un seul guide d'onde relie entre eux deux ports d'entrée/sortie, on peut montrer aussi bien théoriquement, qu'expérimentalement,

talement, la quantification de la conductance en fonction de l'espacement inter-grilles (c'est à dire de la largeur du guide comme le montre la figure 1.10b). En effet, dès, 1988, la quantification de la conductance dans un fil quantique connecté à deux réservoirs à 4.2K a été mise en évidence dans [127, 138], puis pour des températures plus élevées dans [113]. L'observation de ces phénomènes nécessite l'obtention d'un régime balistique (une zone active de faible dimension et des mobilités de porteurs très élevées). D'un point de vue théorique [69, 71], le potentiel uniquement transverse qui se trouve dans les guides (supposé suffisamment long) au niveau du gaz 2D d'électrons, fait apparaître des modes propres. Chacun de ces modes qui se situent sous le niveau de Fermi transporte une même quantité de courant. L'évolution de la conductance G s'effectue donc en marche d'escalier de saut $2q^2/h$ ce qui exprime le nombre croissant de modes transverses du guide impliqués dans le transport avec l'augmentation de la largeur du guide. La conductance est calculée à partir de l'équation (1.21) pour un système à l'équilibre thermodynamique et à température nulle. On obtient alors

$$G = \frac{2q^2}{h}N, \quad (1.21)$$

avec q la charge élémentaire, h la constante de Planck et M le nombre de modes transverses du guide se trouvant sous le niveau de Fermi.

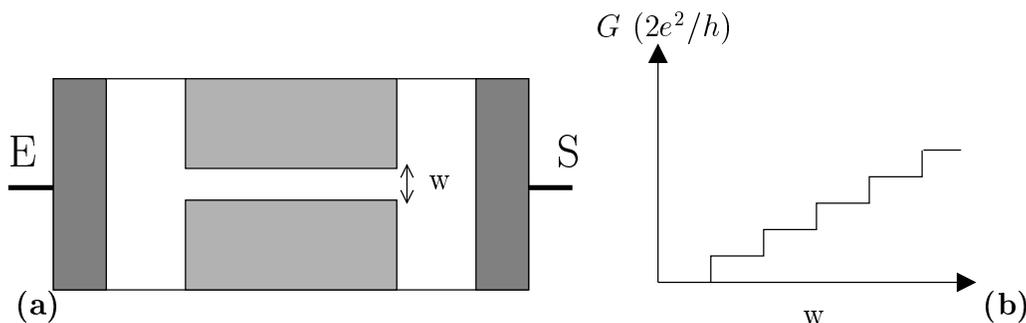


Figure 1.10: Fil quantique (vue de dessus avec largeur du guide accentuée) (a), et quantification de la conductance en fonction de la largeur w du guide (b).

La modulation de la tension de commande appliquée à des grilles fixes en surface montre la même quantification de la conductance avec un saut à chaque croisement entre un niveau quantifié (confinement perpendiculaire aux guides) et le niveau de Fermi. En définitive, le potentiel appliqué sur les grilles contrôle la géométrie du dispositif et notamment la largeur du guide [142].

Dans le but d'obtenir la mise en place des fonctions pour l'électronique non-linéaire sur de nouvelles échelles, il a été envisagé d'étudier des structures plus complexes que la structure de base du fil quantique, pouvant présenter des discontinuités (cavités ...) et plusieurs guides d'onde [19, 90, 136]. Dans ce sens, des études sur différentes structures ont été envisagées. Citons comme exemples :

- les structures composées d'un seul guide d'onde qui présentent une cavité (T-stub) [20, 35, 115],

- les structures qui présentent une constriction [119, 124],
- les structures composées de trois guides d’onde dites de “switch” (Y-branch) [88, 137],
- les structures à anneaux [21, 111],
- les structures à guides d’onde croisés [7, 108],
- les structures qui réalisent le couplage de deux guides d’onde (coupleur quantique) [40, 109, 126, 128–130, 134, 141]
- et autres. . . [16, 27, 31, 48, 59, 85, 107, 114, 123, 139]

Les mécanismes de fonctionnement de l’ensemble de ces composants reposent sur les phénomènes d’interférences quantiques qui apparaissent dans la zone dite “active” de très petite dimension dans laquelle se dirigent les électrons (*voir* Figure 1.7c). Si l’on souhaite ne pas détruire les interférences quantiques en évitant toute perte de cohérence de l’onde électronique dues aux impuretés, il est nécessaire de se placer dans un régime balistique. Les principes de fonctionnement de structures complexes constituées de plusieurs guides d’onde associés à des ports d’entrées/sorties (comme l’exemple du coupleur quantique sur la Figure 1.11) ont été décrits dans la section précédente. Rappelons brièvement que contrairement aux principes de fonctionnement d’un transistor à effet de champs, dans les dispositifs à interférences quantiques, les électrons ne sont pas stoppés directement par une barrière de potentiel contrôlée par les grilles. En effet, les électrons peuvent, suivant la géométrie du dispositif (c’est à dire suivant la modulation du potentiel appliqué aux grilles), et suivant la polarisation des ports d’entrée/sortie, ressortir par un ou plusieurs guides d’onde (ports de sortie).

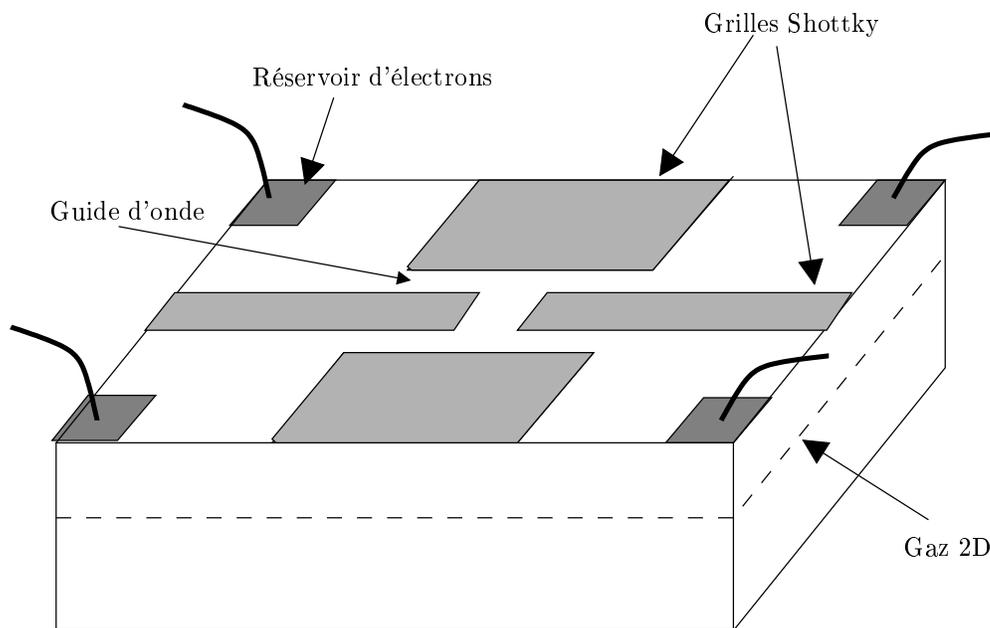


Figure 1.11: Représentation schématique d’un composant dont la disposition des grilles et des contacts ohmiques définit une configuration coupleur quantique simple-branche faisant apparaître quatre guides d’onde (la largeur des guides et la zone active n’étant pas ici à l’échelle en comparaison avec les dimensions de la grille).

Remarque: les caractéristiques de commutation peuvent dépendre d’un changement dans

une partie de la géométrie dans laquelle aucun courant ne circule, ce qui dénote la caractère non local du fonctionnement du dispositif [30].

Remarque: il existe des limitations technologiques liées à la fabrication de ces dispositifs. La difficulté majeure concerne le dépôt des grilles en surface. Des problèmes apparaissent inévitablement pour une longueur de grille inférieure à 100nm [122].

1.5.2 Les “nano-transistors” MOSFETs

Le transistor MOS est le composant électronique le plus employé de nos jours [120]. Le transistor à effet de champ MOSFET (**M**etal **O**xide **S**emiconductor **F**ield **E**ffect **T**ransistor) possède une grille G (Gate) (isolée du canal par une couche de dioxyde de Silicium SiO_2) ainsi que trois électrodes (*voir* Figure 1.12). On note alors S, la Source qui est le point de départ des porteurs, D, le Drain qui est le point de collecte des porteurs, et B (Body) le substrat de Silicium Si.

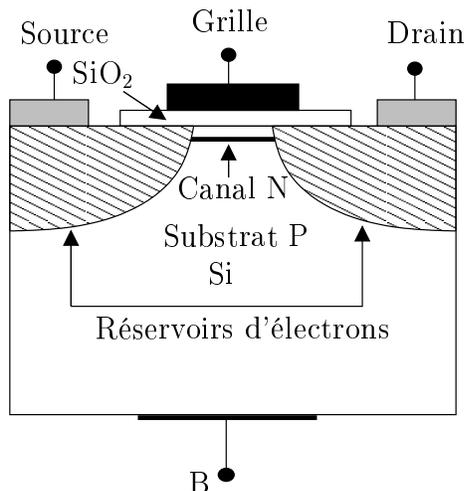


Figure 1.12: Transistor MOS à canal N. Le transistor est composé d’une grille, d’une couche d’Oxyde, ainsi que des électrodes de la source, du drain et du substrat de Silicium.

Très souvent, les électrodes de la source et du substrat sont électriquement reliées, on retrouve alors un composant dans lequel le courant entre la source et le drain I_{DS} est commandé par une tension V_{GS} entre la grille et la source. Dans chaque type de MOSFET, on peut distinguer le MOSFET à canal N où le courant provient du déplacement d’électrons et le MOSFET à canal P où le courant provient du déplacement des trous.

Dans cette thèse, nous proposons l’étude uniquement des dispositifs n-MOSFETs à canal N. Les électrons sont alors concentrés dans les réservoirs d’électrons qui se situent sous la source et le drain, et un canal d’électrons d’une dimension de quelques dizaines de nanomètres se forme donc sous la couche d’Oxyde. Si l’on applique une tension négative sur la grille, les électrons sont repoussés et la conductivité du canal diminue (*voir* Figure 1.13a).

Nous notons V_{GSoff} la tension de commande pour laquelle le transistor se bloque ($I_{DS} = 0$). Pour chacune des tension de grille V_{GS} , nous pouvons obtenir une caractéristique courant-tension I_{DS} en fonction de V_{DS} (*voir* Figure 1.13b). Si le potentiel entre la source et le drain est faible, le transistor se trouve dans un régime linéaire. Ce régime linéaire laisse

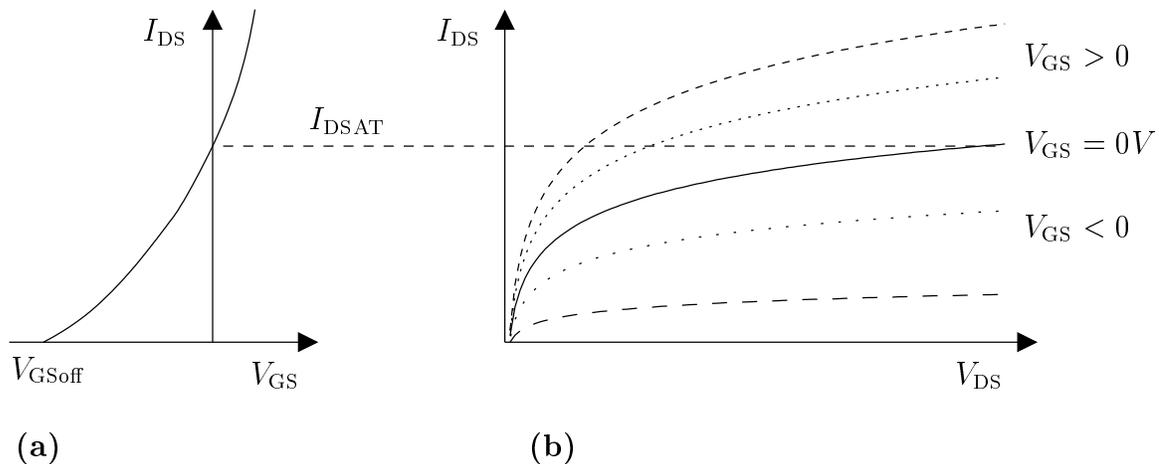


Figure 1.13: Caractéristiques courant-tension du transistor MOS. (a) représente la caractéristique de transfert, et (b) les caractéristiques I_{DS} en fonction du potentiel V_{DS} pour différentes valeurs du potentiel de grille V_{GS} .

place à un régime de saturation (I_{DSAT}) quand la valeur du potentiel devient plus élevé. Les transistors MOS (à appauvrissement) sont passants sans tension de commande de grille $V_{GS} = 0$, et si nous notons I_{DSS} la caractéristique courant-tension correspondante, nous obtenons alors la relation usuelle suivante

$$I_{DS} = I_{DSS} \left(1 - \frac{V_{GS}}{V_{GSoff}} \right)^2 \quad (1.22)$$

La réduction agressive de la taille du canal à un ordre de grandeur de plusieurs dizaines de nanomètres (dans le but d'améliorer les performances du composant), fait apparaître plusieurs limitations physiques comme discutées dans [6, 125]. Dans notre étude, nous allons nous affranchir des problèmes qui peuvent être liés à la fabrication d'un "nano-MOSFET". Dans ces dispositifs de très petite taille, les effets quantiques sont prépondérants (confinement des électrons dans le canal...). En outre, nous supposons que le transport des électrons et des trous est balistique.

Remarque: il existe d'autres alternatives permettant de concevoir des nano-transistors, citons par exemple le transistor à double grille [62, 92].

Chapitre 2

Les dispositifs à guides d'onde électronique : un cas modèle

Sommaire

2.1	Position du problème	32
2.1.1	Définitions et hypothèses	32
2.1.2	Les effets électrostatiques	33
2.2	Le modèle de transport des électrons	34
2.2.1	L'approche quantique	34
2.2.2	L'approximation semi-classique : Thomas-Fermi	39
2.2.3	Récapitulatif des modèles	41
2.3	Calcul du courant et de la conductance	43
2.3.1	Le courant électronique : définition	43
2.3.2	Expression du courant en fonction des coefficients de réflexion et de transmission	44
2.3.3	La conductance	52

2.1 Position du problème

2.1.1 Définitions et hypothèses

Le dispositif modèle que nous considérons occupe un volume Ω de \mathbb{R}^d constitué de la zone active Ω_0 de géométrie quelconque, et de N guides d'onde Ω_j ($j = 1, \dots, N$). On note Γ_j ($j = 1, \dots, N$) l'interface entre le guide Ω_j et la zone active, et Γ_0 la frontière extérieure de Ω (voir Figure 2.1).

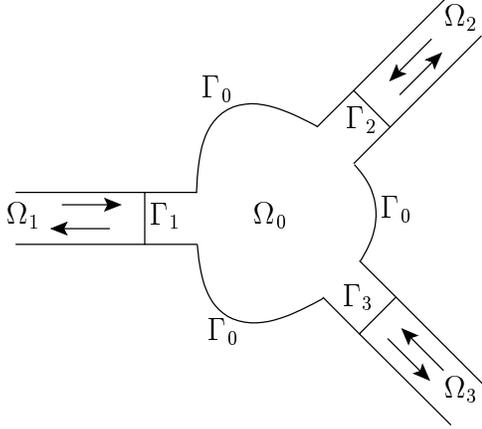


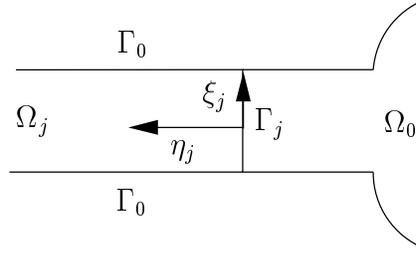
Figure 2.1: Représentation de la géométrie Ω du problème modèle, ainsi que ces différentes parties et frontières (exemple d'un dispositif possédant trois guides d'onde).

Hypothèse 2.1 Nous allons supposer que :

- (i) la longueur d'onde des électrons est du même ordre de grandeur que les dimensions du système.
- (ii) la région Ω peut admettre des zones dopées. Le dopage peut être positif (donneurs ionisés N_D^+) ou négatif (accepteurs ionisés N_A^-).
- (iii) le transport électronique est balistique (sans collision).
- (iv) la probabilité de trouver un électron en dehors du domaine Ω est nulle (zones de fort potentiel).
- (v) le potentiel électrostatique dans les guides Ω_j ($j = 1, \dots, N$) dépend uniquement de la direction transverse : $V = V(\xi_j)$ où $\xi_j \in \Gamma_j$ et $\eta_j \in \mathbb{R}^+$ représentent les coordonnées locales de Ω_j (voir Figure 2.2).
- (vi) les interfaces guides d'onde-zone active Γ_j ($j = 1, \dots, N$) se trouvent dans un état de quasi-équilibre. En d'autres termes, tous les phénomènes de conduction liés aux électrons qui entrent ou qui sortent de la zone active en Γ_j , ne représentent alors qu'une petite perturbation pour le guide Ω_j et le réservoir d'électrons qui lui est associé. Par conséquent, les électrons dans le guide j se trouvent dans un mélange statistique d'états obéissant à la distribution de Fermi-Dirac avec le potentiel chimique μ_j du réservoir j .

Remarque: la coordonnée locale ξ_j représente dans le problème modèle un ensemble de coordonnées locales sur Γ_j de dimension $(d - 1)$.

Figure 2.2: Coordonnées locales du guide j . ξ_j et η_j représentent respectivement, la coordonnée transverse et la coordonnée longitudinale du guide.



2.1.2 Les effets électrostatiques

La densité de charge d'espace ρ est reliée au déséquilibre local existant d'une part entre les donneurs ionisés N_D^+ et la densité électronique libre n , et d'autre part entre les accepteurs ionisés N_A^- et les trous libres p . On obtient alors

$$\rho = q(N_D^+ - N_A^- - n + p), \quad (2.1)$$

où q désigne la charge élémentaire. Dans la zone active, le potentiel électrostatique V induit par les charges d'espace est alors solution de l'équation de Poisson

$$\begin{cases} -\nabla(\epsilon_r(\mathbf{x})\nabla V(\mathbf{x})) = \frac{\rho(\mathbf{x})}{\epsilon_0} & \text{dans } \Omega_0, \\ \text{avec les conditions aux bords que l'on précisera plus loin,} \end{cases} \quad (2.2)$$

où ϵ_0 est la permittivité du vide, et ϵ_r est la constante diélectrique relative aux différents matériaux semi-conducteurs composant le domaine Ω_0 . Dans le problème modèle, nous définissons les conditions aux bords pour le potentiel électrostatique sur les bords $\partial\Omega_0$ du type :

- Neumann homogènes ou Dirichlet sur les bord Γ_0 . La nature des conditions aux bords pour le potentiel électrostatique V sur ces bords est liée à la physique du modèle d'étude. Dans la deuxième partie de la thèse, nous sommes amenés à étudier uniquement des cas où les conditions aux bords sont du type Dirichlet ou Neumann homogènes sur des parties de Γ_0 . Dans le problème modèle, nous choisissons des conditions de Dirichlet, notées V_0 , sur les bords Γ_{0D} et de Neumann homogènes sur les bords Γ_{0N} avec

$$\Gamma_0 = \Gamma_{0D} \cup \Gamma_{0N}. \quad (2.3)$$

- Neumann homogènes sur les frontières guides d'onde-zone active Γ_j ($j = 1, \dots, N$) à cause de l'invariance par translation du potentiel sur ces limites. Ces limites sont supposées se trouver dans un état de quasi-équilibre.

Remarque: dans l'hypothèse de quasi-équilibre, les bords Γ_j peuvent s'interpréter comme les coupes transverses d'un fil quantique supposé infini, lequel possède une distribution d'énergie relative au réservoir d'électrons j . Dans ces conditions,

il serait possible d'introduire des conditions de Dirichlet sur les frontières guides d'onde-zone active Γ_j pour le potentiel électrostatique, à l'aide de la résolution d'un système couplé entre la densité et le potentiel sur chacun de ces bords. Ce modèle dit de quasi-équilibre sera développé spécifiquement pour chacun des dispositifs qui seront étudiés au cours de cette thèse.

En résumé, les conditions aux bords pour le potentiel électrostatique sont définies par

$$\begin{cases} (\nabla V \cdot \mathbf{n}) = 0 & \text{sur } \Gamma_j \ (j = 1, \dots, N), \\ (\nabla V \cdot \mathbf{n}) = 0 & \text{sur } \Gamma_{0_N}, \\ V(\mathbf{x}) = V_0 & \text{sur } \Gamma_{0_D}, \end{cases} \quad (2.4)$$

avec \mathbf{n} normale extérieure au domaine Ω_0 . Dans notre description du problème modèle, l'expression de la densité de trous est supposée connue. Nous allons, dans un premier temps, établir l'expression de la densité électronique en fonction du potentiel électrostatique, et nous définirons par la suite les différents systèmes non-linéaires couplés.

2.2 Le modèle de transport des électrons

2.2.1 L'approche quantique

Les électrons sont émis par les réservoirs dans les divers guides d'onde j en accord avec la statistique d'un gaz de fermions, caractérisée par la distribution d'énergie de Fermi-Dirac et du potentiel chimique associé au réservoir du guide j . En présence d'un mélange statistique d'états Ψ_E , la densité électronique pour un potentiel électrostatique V donné peut s'écrire de manière générale comme une somme sur tous les guides de toutes les configurations d'états d'énergie E possible dans ce guide

$$n(\mathbf{x}) = 2 \sum_{j=1}^N \sum_{\{E\}} |\Psi_E(\mathbf{x})|^2 f_{FD}(E - \mu_j), \quad (2.5)$$

où $|\Psi_E(\mathbf{x})|^2$ est la densité de probabilité de présence de l'électron d'énergie E en \mathbf{x} , le facteur 2 intervient comme facteur de spin de l'électron, et μ_j est le potentiel chimique associé au guide j .

Remarque: la somme sur les configurations d'énergie qui intervient dans la formule (2.5), est suivant les cas une somme discrète ou une intégrale.

Nous allons maintenant donner une version plus précise de la formule (2.5). Les fonctions qui y apparaissent sont des états de scattering de l'opérateur de Schrödinger que nous cherchons à déterminer.

Equation de Schrödinger et conditions aux bords d'ondes entrantes

Le système que l'on cherche à résoudre peut s'écrire

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta\Psi_E(\mathbf{x}) + U(\mathbf{x})\Psi_E(\mathbf{x}) = E\Psi_E(\mathbf{x}) & \text{dans } \Omega_0, \\ \Psi_E(\mathbf{x}) = 0 & \text{sur } \Gamma_0, \\ \text{avec les conditions aux bords d'ondes entrantes sur les } \Gamma_j (j = 1, \dots, N). \end{cases} \quad (2.6)$$

L'énergie potentielle U est donnée par

$$U(\mathbf{x}) = -qV(\mathbf{x}) + E_c(\mathbf{x}), \quad (2.7)$$

avec E_c l'énergie potentielle du cristal semi-conducteur.

Remarque: dans le but de simplifier la description du problème modèle, la masse effective des électrons est supposée isotrope, constante et égale à m^* .

Tout le problème consiste donc à déterminer les conditions aux bords entrantes sur les bords Γ_j . Dans ce but, nous proposons d'utiliser la méthode QTBM (**Q**uantum **T**ransmitting **B**oundary **M**ethod) décrite en [74] et utilisée dans les problèmes d'électromagnétisme [82].

Nous allons tout d'abord effectuer la décomposition de l'onde dans les guides. On note U_j le potentiel transverse dans le guide j . On peut alors exprimer (2.6) dans Ω_j à l'aide des coordonnées locales ξ_j et η_j (voir Figure 2.2)

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta\Psi_E(\xi_j, \eta_j) + U_j(\xi_j)\Psi_E(\xi_j, \eta_j) = E\Psi_E(\xi_j, \eta_j) & \text{dans } \Gamma_j \times \mathbb{R}_+, \\ \Psi_E(\xi_j, \eta_j) = 0 & \text{sur } \Gamma_0, \\ \text{avec } \Psi_E(\xi_j, \eta_j) \text{ bornée.} \end{cases} \quad (2.8)$$

Toute fonction Ψ_E qui satisfait (2.8) sur Ω_j peut alors s'écrire

$$\Psi_E(\xi_j, \eta_j) = \sum_{m=1}^{\infty} f_m^j(\eta_j)\chi_m^j(\xi_j), \quad (2.9)$$

où $\{\chi_m^j\}_{m \in \mathbb{N}^*}$ est la base orthonormée de vecteurs propres transverses sur $L^2(\Gamma_j)$ à valeurs dans \mathbb{R} , diagonalisant l'opérateur de Schrödinger transverse défini sur Γ_j avec des conditions aux bords de Dirichlet homogènes

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta_{\xi_j}\chi_m^j(\xi_j) + U_j(\xi_j)\chi_m^j(\xi_j) = E_m^j\chi_m^j(\xi_j) & \text{dans } \Gamma_j, \\ \chi_m^j(\xi_j) = 0 & \text{sur } \partial\Gamma_j, \\ \int_{\Gamma_j} \chi_m^j\chi_{m'}^j d\xi_j = \delta_{m,m'}, \end{cases} \quad (2.10)$$

où E_m^j représente la valeur propre réelle transverse associée à χ_m^j , m l'indice du mode transverse, et δ est le symbole de Kronecker. Nous notons alors f_m^j la fonction d'onde longitudinale définie sur \mathbb{R}_+ et qui est associée au mode transverse m . En insérant l'expression (2.9) dans (2.8), l'équation sur les fonctions d'onde f_m^j s'écrit

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{d\eta_j^2} f_m^j(\eta_j) = (E - E_m^j) f_m^j(\eta_j) & \text{dans } \mathbb{R}_+, \\ \text{avec } f_m^j(\xi_j) & \text{bornée.} \end{cases} \quad (2.11)$$

En définissant le nombre d'onde $k_m^j(E)$ par

$$k_m^j(E) = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} |E - E_m^j|}, \quad (2.12)$$

les solutions de f_m^j peuvent alors s'écrire sous la forme

$$\begin{cases} f_m^j(\eta_j) = a_m^j e^{-ik_m^j \eta_j} + b_m^j e^{ik_m^j \eta_j} & \text{si } m \leq M^j(E), \\ f_m^j(\eta_j) = b_m^j e^{-k_m^j \eta_j} & \text{si } m > M^j(E), \end{cases} \quad (2.13)$$

avec :

- a_m^j , l'amplitude de l'onde incidente du guide j et du mode m , supposée connue.
- b_m^j , l'amplitude de l'onde réfléchi-transmise ou le coefficient de l'onde évanescence, du guide j et du mode m .
- $M^j(E)$, le nombre de modes propagatifs donné par

$$M^j(E) = \sup_m \{m \geq 1; E > E_m^j\}. \quad (2.14)$$

Remarque: comme f_m^j doit être une fonction bornée sur \mathbb{R}_+ , on ne tiendra pas compte des termes en $e^{k_m^j \eta_j}$ dans le cas où $m > M^j(E)$.

Finalement, la fonction d'onde Ψ_E a pour expression dans Ω_j

$$\Psi_E(\xi_j, \eta_j) = \sum_{m=1}^{M^j} (a_m^j e^{-ik_m^j \eta_j} + b_m^j e^{ik_m^j \eta_j}) \chi_m^j(\xi_j) + \sum_{m=M^j+1}^{\infty} (b_m^j e^{-k_m^j \eta_j}) \chi_m^j(\xi_j) \quad (2.15)$$

Remarque: dans (2.15), la première somme regroupe l'ensemble des modes transverses dits propagatifs tandis que la deuxième somme regroupe l'ensemble des modes évanescents. L'onde transverse définie par les fonctions d'onde χ_m^j ne se propage pas, elle est dite stationnaire. Le transport électronique s'effectue uniquement suivant la direction longitudinale du guide.

Remarque: les fonctions propres χ_m^j et les valeurs propres E_m^j solutions de (2.10) peuvent être déterminées analytiquement dans certains cas simples comme avec un profil de potentiel de confinement U_j de nature carré ou parabolique. En mécanique quantique, les approximations sous forme carré ou parabolique d'un profil de potentiel réel sont très souvent utilisées, elles permettent de trouver les fonctions propres χ_m et les valeurs propres E_m respectives du puits carré quantique ou de l'oscillateur harmonique quantique. Dans notre problème modèle, le profil du potentiel de confinement transverse U_j est supposé quelconque et nous aurons donc à traiter numériquement un problème aux valeurs propres.

Nous allons maintenant établir des conditions aux bords entrantes dans les guides, indépendantes des coefficients b_m^j . A l'interface Γ_j , (2.15) s'écrit

$$\Psi_E(\xi_j, \eta_j = 0) = \sum_{m=1}^{M^j(E)} (a_m^j + b_m^j) \chi_m^j(\xi_j) + \sum_{m=M^j(E)+1}^{\infty} b_m^j \chi_m^j(\xi_j), \quad (2.16)$$

ou bien encore

$$\Psi_{E|\Gamma_j} = \sum_{m=1}^{\infty} \Psi_m^j \chi_m^j(\xi_j), \quad (2.17)$$

et comme $\{\chi_m^j\}_{m \in \mathbb{N}^*}$ forme une base orthonormée de $L^2(\Gamma_j)$, on définit les coefficients Ψ_m^j par

$$\Psi_m^j = \int_{\Gamma_j} \Psi_E(\xi_j, \eta_j = 0) \chi_m^j d\xi_j. \quad (2.18)$$

(2.16) implique que

$$\Psi_m^j = \begin{cases} a_m^j + b_m^j & \text{si } m \leq M^j(E) \\ b_m^j & \text{si } m > M^j(E) \end{cases} \quad (2.19)$$

En différenciant (2.15) par rapport à η_j puis en posant $\eta_j = 0$, on trouve alors

$$\partial_{\eta_j} \Psi_{E|\Gamma_j} = \sum_{m=1}^{M^j(E)} (-a_m^j + b_m^j) i k_m^j(E) \chi_m^j(\xi_j) - \sum_{m=M^j(E)+1}^{\infty} k_m^j(E) b_m^j \chi_m^j(\xi_j). \quad (2.20)$$

En utilisant l'expression (2.19) des coefficients b_m^j en fonction des Ψ_m^j , dans (2.20), on obtient finalement l'expression des conditions d'ondes entrantes aux interfaces guides d'onde-zone active indépendantes des b_m^j

$$\partial_{\eta_j} \Psi_{E|\Gamma_j} = \sum_{m=1}^{M^j(E)} i k_m^j(E) (-2a_m^j + \Psi_m^j) \chi_m^j(\xi_j) - \sum_{m=M^j(E)+1}^{\infty} k_m^j(E) \Psi_m^j \chi_m^j(\xi_j). \quad (2.21)$$

L'équation de Schrödinger (2.6) définie sur le domaine borné Ω_0 avec des conditions aux bords entrantes (2.21), peut se mettre sous la forme variationnelle suivante :

$$\left\| \begin{array}{l} \text{Trouver } \Psi \in \mathcal{H}(\Omega_0) = \{\Psi : \Omega_0 \rightarrow \mathbb{C}; \Psi \in H^1(\Omega_0); \Psi = 0 \text{ sur } \Gamma_0\}, \text{ tel que} \\ \forall \Phi \in \mathcal{H}, \quad a(\Psi, \Phi) = L(\Phi), \end{array} \right. \quad (2.22)$$

où a est une forme bilinéaire, symétrique et continue sur $H^1(\Omega_0)$

$$\begin{aligned} a(\Psi, \Phi) &= \int_{\Omega_0} \nabla \Psi \nabla \Phi \, d\Omega_0 + \frac{2m^*}{\hbar^2} \int_{\Omega_0} (U - E) \Psi \Phi \, d\Omega_0 - i \sum_{j=1}^N \sum_{m=1}^{M^j(E)} k_m^j(E) \Psi_m^j \Phi_m^j \\ &\quad + \sum_{j=1}^N \sum_{m=M^j(E)+1}^{\infty} k_m^j(E) \Psi_m^j \Phi_m^j, \end{aligned} \quad (2.23)$$

et L est une forme linéaire continue sur $H^1(\Omega_0)$

$$L(\Phi) = -2i \sum_{j=1}^N \sum_{m=1}^{M^j(E)} a_m^j k_m^j(E) \Phi_m^j, \quad (2.24)$$

avec

$$\Psi_m^j = \int_{\Gamma_j} \Psi \chi_m^j \, d\xi_j \quad \text{et} \quad \Phi_m^j = \int_{\Gamma_j} \Phi \chi_m^j \, d\xi_j. \quad (2.25)$$

Théorème 2.1 *Soit $E_{\min} = \inf_{m,j} E_m^j$ et soit V donnée dans $L^\infty(\Omega_0)$. Par conséquent, il existe suite croissante $(E_j(V))_{j \in \mathbb{N}^*}$ qui tend vers $+\infty$, telle que le problème variationnel (2.22) admette une solution unique pour chaque a_m^j donnée et pour chaque $E \in \{E \geq E_{\min}, E \neq E_p, \forall p \geq 1\}$.*

Preuve: l'analyse de l'existence et de l'unicité de la solution du problème est effectuée en [9] à l'aide de l'alternative de Fredholm. Notons que plusieurs détails de la preuve peuvent se retrouver en [82] pour des problèmes analogues en électromagnétisme. \square

La densité électronique quantique

Le calcul de la densité électronique doit prendre en compte les états relatifs à la propagation du transport électronique dans les divers guides j_0 et les divers modes m_0 . Dans le cas où une seule onde associée à un vecteur d'onde longitudinal $k > 0$, est injectée dans le guide j_0 et dans le mode propre transverse m_0 , on a

$$a_m^j = \delta_{j,j_0} \delta_{m,m_0}. \quad (2.26)$$

L'énergie E peut alors s'écrire avec (2.12)

$$E(j_0, m_0, k) = E_{m_0}^{j_0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (2.27)$$

Remarque: dans chaque guide, il existe un sens unique pour l'injection de l'onde, $k > 0$.

Sur la figure 2.3 représentative de l'équation de dispersion (2.27) dans un guide j_0 , nous pouvons distinguer plusieurs feuillets d'énergie associés aux différents modes transverses d'injection m_0 .

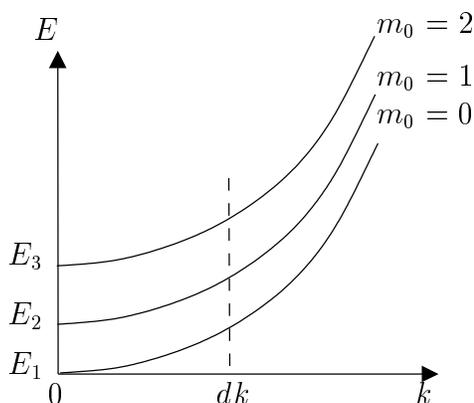


Figure 2.3: Courbes représentatives de l'équation de dispersion (2.27) dans un guide j_0 . A chaque mode m_0 est associé un feuillet d'énergie différent.

Les fonctions d'onde Ψ_E qui sont solutions de (2.6) et (2.21), sont paramétrées par les indices j_0, m_0, k . On obtient alors les états $\Psi_{j_0, m_0, k}$, avec ($j_0 = 1, \dots, N$, $m_0 \in \mathbb{N}^*$, et $k \in \mathbb{R}_+^*$). Nous définissons alors la densité électronique comme un mélange statistique d'états $\Psi_{j_0, m_0, k}$, on obtient une fonctionnelle densité de V non locale en \mathbf{x}

$$n[V](\mathbf{x}) = 2 \sum_{j_0=1}^N \sum_{m_0=1}^{\infty} \int_0^{\infty} |\Psi_{j_0, m_0, k}|^2 f_{FD}(E(j_0, m_0, k) - \mu_{j_0}) \frac{dk}{2\pi}. \quad (2.28)$$

Remarque: le transport électronique dans la direction longitudinale du guide j_0 n'est autorisé que si $E > E_{min} = \inf_{m,j} E_m^j$. Dans les cas où l'injection ne s'effectue sur aucun mode, les états électroniques sont dits liés au système (ils ne participent pas au transport). Dans ce problème modèle, la contribution de ces états propres au calcul de la densité électronique n'est pas prise en compte.

2.2.2 L'approximation semi-classique : Thomas-Fermi

Nous faisons l'hypothèse que le potentiel électrostatique V varie lentement en comparaison avec la longueur d'onde des électrons. Dans ces conditions, nous pouvons définir une approche semi-classique pour le calcul de la densité des électrons dépendant uniquement du potentiel local via l'approximation de Thomas-Fermi [5]. L'énergie d'un électron

est alors modifiée de sa valeur en énergie d'un électron libre par la valeur du potentiel local

$$E = \frac{\hbar^2 \|\mathbf{k}\|^2}{2m^*} + U(\mathbf{x}), \quad (2.29)$$

avec \mathbf{k} le vecteur d'onde de l'électron libre. Dans ce cas, les charges électroniques sont des charges libres dans toutes les directions de l'espace. Les solutions de l'équation (2.6) munie des conditions aux bords périodiques, sont des ondes planes (normalisées sur tout l'espace à l'amplitude unité). L'expression de la densité électronique est uniquement déterminée en fonction de la distribution de Fermi-Dirac et de la densité d'état. A la limite thermodynamique (grand volume) et quand le système se trouve à l'équilibre, on obtient

$$n[V(\mathbf{x})] = 2 \int_{\mathbb{R}^d} f_{FD} \left(E(V(\mathbf{x}), \mathbf{k}) - \mu \right) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}, \quad (2.30)$$

où $(1/(2\pi)^d)$ représente la densité d'état dans l'espace des k , le facteur 2 représente le facteur de spin de l'électron, et μ le potentiel chimique défini à l'équilibre ($\mu = \mu_j \quad \forall j$). L'approximation de Thomas-Fermi suppose donc que la densité de particule est une fonctionnelle du potentiel électrostatique V locale en \mathbf{x} .

Remarque: dans cette approche semi-classique, nous pouvons aisément effectuer le calcul de la densité de trous par analogie. Dans ce cas, la relation de dispersion dans la bande de valence s'écrit

$$E = -\frac{\hbar^2 \|\mathbf{k}\|^2}{2m_h^*} + (U(\mathbf{x}) - \Delta(\mathbf{x})), \quad (2.31)$$

où m_h^* est la masse effective des trous, et Δ représente le gap d'énergie entre la bande de conduction et la bande de valence des matériaux semi-conducteurs. La densité des trous a alors pour expression

$$p[V(\mathbf{x})] = 2 \int_{\mathbb{R}^d} f_{FD} \left(\mu - E(V(\mathbf{x}), \mathbf{k}) \right) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}. \quad (2.32)$$

Remarque: on peut aussi écrire un modèle de transport Thomas-Fermi avec un potentiel chimique qui dépend de \mathbf{x} . Ce potentiel chimique est alors solution d'une équation de type dérive-diffusion. Dans le cas où les potentiels chimiques des réservoirs sont différents, le système se trouve dans un état hors-équilibre. Dans notre modèle (2.30), les potentiels chimiques de tous les réservoirs sont égaux à μ et le système se trouve donc à l'équilibre. Dans des situations hors-équilibre, il n'est pas paru nécessaire de développer l'approximation de Thomas-Fermi, puisque nous envisageons d'utiliser le potentiel donné par cette approximation définie à l'équilibre, dans le seul but d'initialiser la résolution numérique du système couplé quantique Schrödinger/Poisson.

2.2.3 Récapitulatif des modèles

Dans un cadre général, le système non-linéaire couplé sur le potentiel électrostatique V peut s'écrire d'une manière unique pour les deux modèles physiques dans Ω_0

$$\begin{cases} -\nabla(\epsilon_r(\mathbf{x})\nabla V(\mathbf{x})) + \frac{q}{\epsilon_0}\mathcal{G}[V](\mathbf{x}) = \frac{q}{\epsilon_0}(N_D^+(\mathbf{x}) - N_A^-(\mathbf{x})), & \text{dans } \Omega_0, \\ \text{avec les conditions aux bords (2.4)}, \end{cases} \quad (2.33)$$

où \mathcal{G} est la fonctionnelle définie par

$$G[V] = n[V] - p[V]. \quad (2.34)$$

Dans cette section, nous effectuons la synthèse des résultats précédemment établis concernant les modèles semi-classique et quantique, puis nous discutons sur l'existence et l'unicité des solutions des systèmes couplés.

Le système Thomas-Fermi/Poisson

Dans l'approche semi-classique, les densités de charge induites par les électrons et les trous, ont été définies par l'approximation de Thomas-Fermi en (2.30) et (2.32). Pour rappel :

$$\begin{cases} n[V(\mathbf{x})] = 2 \int_{\mathbb{R}^d} f_{FD} \left(E(V(\mathbf{x}), \mathbf{k}) - \mu \right) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \\ E(V(\mathbf{x}), \mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \|\mathbf{k}\|^2}{2m^*} + U(\mathbf{x}), \end{cases} \quad (2.35)$$

et

$$\begin{cases} p[V(\mathbf{x})] = 2 \int_{\mathbb{R}^d} f_{FD} \left(\mu - E(V(\mathbf{x}), \mathbf{k}) \right) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \\ E(V(\mathbf{x}), \mathbf{k}) = -\frac{\hbar^2 \|\mathbf{k}\|^2}{2m_h^*} + (U(\mathbf{x}) - \Delta(\mathbf{x})). \end{cases} \quad (2.36)$$

Par conséquent, \mathcal{G} est une fonctionnelle densité de V locale en \mathbf{x} .

Théorème 2.2 *Le problème (2.33) admet une solution unique $V \in H^1(\Omega_0)$.*

Preuve: la dérivée de $n[V]$ par rapport à V est strictement positive et a pour expression

$$n'[V] = \frac{q\beta}{2} \int_{\mathbb{R}^d} \cosh^{-2} \left(\frac{\beta}{2} \left(E(V(\mathbf{x}), \mathbf{k}) - \mu \right) \right) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \quad (2.37)$$

la dérivée de $p[V]$ par rapport à V est strictement négative et a pour expression

$$p'[V] = -\frac{q\beta}{2} \int_{\mathbb{R}^d} \cosh^{-2} \left(\frac{\beta}{2} \left(\mu - E(V(\mathbf{x}), \mathbf{k}) \right) \right) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \quad (2.38)$$

\mathcal{G} est donc une fonction monotone et croissante de \mathbb{R} dans \mathbb{R} . Par conséquent, le théorème est vérifié d'après [68]. \square

Le système Schrödinger/Poisson

Dans le cas quantique, $n[V]$ est une fonctionnelle densité de V non locale en \mathbf{x} . La densité de trous est supposée connue (en fonction de V). Rappelons l'expression de la densité électronique établie en (2.28)

$$n[V](\mathbf{x}) = 2 \sum_{j_0=1}^N \sum_{m_0} \int_0^\infty |\Psi_{j_0, m_0, k}|^2 f_{FD}(E(j_0, m_0, k) - \mu_{j_0}) \frac{dk}{2\pi} \quad (2.39)$$

$$E(j_0, m_0, k) = E_{m_0}^{j_0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

où les fonctions d'onde, $\Psi_{j_0, m_0, k}$, sont solutions de l'équation de Schrödinger dans Ω_0 :

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \Psi_{j_0, m_0, k}(\mathbf{x}) + U(\mathbf{x}) \Psi_{j_0, m_0, k}(\mathbf{x}) = E \Psi_{j_0, m_0, k}(\mathbf{x}) \quad \text{dans } \Omega_0, \\ \Psi_{j_0, m_0, k}(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{sur } \Gamma_0, \\ \partial_{\eta_j} \Psi_{j_0, m_0, k}|_{\Gamma_j} = \sum_{m=1}^{M^j(E)} i k_m^j(E) (-2a_m^j + \Psi_m^j) \chi_m^j(\xi_j) \\ \quad - \sum_{m=M^j(E)+1}^{\infty} k_m^j(E) \Psi_m^j \chi_m^j(\xi_j) \quad \text{sur les } \Gamma_j \ (j \neq 0), \\ \text{où } E \equiv E(j_0, m_0, k) \quad \text{et} \quad a_m^j = \delta_{j, j_0} \delta_{m, m_0}, \end{array} \right. \quad (2.40)$$

avec :

- N , le nombre de guides.
- a_m^j , l'amplitude de l'onde incidente (connue).
- ξ_j , la coordonnée locale transverse du guide j (voir Figure 2.2).
- χ_m^j et E_m^j , les vecteurs propres (modes propres) et valeurs propres (niveaux d'énergie) de l'équation de Schrödinger transverse exprimée dans le guide j où l'on suppose que le potentiel est transverse.
- $M^j(E)$, le nombre de modes propagatifs

$$M^j(E) = \sup_m \{m \geq 1; E > E_m^j\}.$$

- $k_m^j(E)$, le nombre d'onde

$$k_m^j(E) = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} |E - E_m^j|}.$$

- Ψ_m^j , le coefficient défini par (en posant $\Psi \equiv \Psi_{j_0, m_0, k}$)

$$\Psi_m^j = \int_{\Gamma_j} \Psi \chi_m^j \, d\xi_j.$$

Théorème 2.3 *Il existe une solution $V \in H^1(\Omega_0)$ satisfaisant le système couplé (2.33), (2.39) et (2.40).*

Preuve: le résultat d'existence a été démontrée en [9]. □

2.3 Calcul du courant et de la conductance

Dans cette section, nous allons établir l'expression du courant électronique en fonction de la tension de polarisation des ports, dans le cas où le potentiel électrostatique est connu. Nous effectuons la description quantique du transport électronique à l'aide de l'équation de Schrödinger définie en (2.40), et nous présentons deux méthodes permettant le calcul du courant électronique. La première méthode est basée sur l'expression de la densité de courant dans un mélange statistique d'états. La deuxième méthode nécessite le calcul des coefficients de transmission dans les guides [18, 28, 30]. Cette dernière méthode nous permettra de définir par la suite, la notion de conductance.

2.3.1 Le courant électronique : définition

Notons $\mathbf{j}_{j_0, m_0, k}$ la densité de courant relative à la fonction d'onde $\Psi_{j_0, m_0, k}$ solution de (2.40) avec une énergie

$$E(j_0, m_0, k) = E_{m_0}^{j_0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (2.41)$$

Nous pouvons alors définir le courant électronique total $\mathbf{J}(\mathbf{x})$ dans Ω_0 , en remplaçant dans l'expression de la densité quantique (2.28), la densité de probabilité de présence de l'électron par la densité de courant d'un électron. On obtient

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = 2 \sum_{j_0=1}^N \sum_{m_0=1}^{\infty} \int_0^{\infty} \mathbf{j}_{j_0, m_0, k}(\mathbf{x}) f_{FD}(E(j_0, m_0, k) - \mu_{j_0}) \frac{dk}{2\pi}. \quad (2.42)$$

Par la suite et afin d'alléger l'exposé, nous allons omettre les indices j_0, m_0, k dans $\Psi_{j_0, m_0, k}$ et $\mathbf{j}_{j_0, m_0, k}$.

En mécanique quantique, la densité de courant \mathbf{j} associée à une fonction d'onde Ψ est donnée par

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}) = \frac{q\hbar}{m^*} \mathcal{I}m\{\bar{\Psi}(\mathbf{x}) \nabla \Psi(\mathbf{x})\}, \quad (2.43)$$

avec $\mathcal{I}m\{\mathbf{a}\}$ partie imaginaire de \mathbf{a} . L'intensité I_j est définie par le flux de courant qui traverse Γ_j (frontière guide d'onde-zone active, voir Figure 2.2) par

$$I_j = \int_{\Gamma_j} (\mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\eta}_j) d\xi_j \quad (2.44)$$

Remarque: d'après le sens de la normale $\boldsymbol{\eta}_j$ du guide j , si $I_j < 0$, alors le courant dans le guide j pénètre dans Ω_0 , et si $I_j > 0$, alors le courant dans le guide j sort de Ω_0 .

Proposition 2.1 *La somme algébrique des courants entrants dans le système Ω_0 est égale à la somme des courants sortants de ce système (loi des noeuds)*

$$\sum_{j=1}^N I_j = 0. \quad (2.45)$$

Preuve: d'après la formule de Green, on peut écrire

$$\int_{\Omega_0} \operatorname{div} \mathbf{J} \, d\Omega_0 = \int_{\Gamma} (\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}) \, d\Gamma, \quad (2.46)$$

avec \mathbf{n} normale extérieure au domaine Ω_0 et la frontière Γ est définie par $\Gamma = \partial\Omega_0$. D'après la loi de conservation locale de la charge, on a

$$\operatorname{div} \mathbf{J} = 0. \quad (2.47)$$

Puisque $\Gamma = \Gamma_0 \cup \Gamma_1, \dots \cup \Gamma_N$, et que le courant sur les limites Γ_0 est nul (la fonction d'onde est nulle sur Γ_0), on trouve finalement

$$\sum_{j=1}^N \int_{\Gamma_j} (\mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\eta}_j) \, d\xi_j = 0, \quad (2.48)$$

et avec (2.44) le résultat est immédiat. \square

2.3.2 Expression du courant en fonction des coefficients de réflexion et de transmission

Seules les ondes électroniques qui se propagent dans le système par l'intermédiaire des guides d'onde, participent au transport électronique. De ce fait, nous pouvons extraire des fonctions d'onde présentes dans les guides toutes les informations relatives au transport électronique comme le taux de transmission, l'intensité et la conductance. Rappelons l'expression de la fonction d'onde présente dans un guide j que nous avons auparavant définie en (2.15) par

$$\Psi(\xi_j, \eta_j) = \sum_{m=1}^{M^j} (a_m^j e^{-ik_m^j \eta_j} + b_m^j e^{ik_m^j \eta_j}) \chi_m^j(\xi_j) + \sum_{m=M^j+1}^{\infty} (b_m^j e^{-k_m^j \eta_j}) \chi_m^j(\xi_j). \quad (2.49)$$

L'injection d'une onde d'amplitude unité dans un unique guide j_0 et dans un unique mode m_0 , peut être obtenue avec la condition

$$a_m^j = \delta_{j,j_0} \delta_{m,m_0}. \quad (2.50)$$

Nous obtenons alors la fonction d'onde Ψ_{j_0} du guide j_0 défini en port d'entrée

$$\Psi_{j_0}(\xi_{j_0}, \eta_{j_0}) = e^{-ik_{m_0}^{j_0} \eta_{j_0}} \chi_{m_0}^{j_0} + \sum_{m=1}^{M^{j_0}} b_m^{j_0} e^{ik_m^{j_0} \eta_{j_0}} \chi_m^{j_0} + \sum_{m=M^{j_0}+1}^{\infty} b_m^{j_0} e^{-k_m^{j_0} \eta_{j_0}} \chi_m^{j_0}, \quad (2.51)$$

et la fonction Ψ_j des autres guides $j \neq j_0$ définis en ports de sortie

$$\Psi_j(\xi_j, \eta_j) = \sum_{m=1}^{M^j} b_m^j e^{ik_m^j \eta_j} \chi_m^j + \sum_{m=M^j+1}^{\infty} b_m^j e^{-k_m^j \eta_j} \chi_m^j. \quad (2.52)$$

Remarque: nous pouvons alors identifier plusieurs types d'onde :

- l'onde incidente dans le guide j_0 définie par le premier terme de l'équation (2.51), notée $\Psi_{j_0, m_0, k}^I$ et égale à

$$\Psi_{j_0, m_0, k}^I = e^{-ik_{m_0}^{j_0} \eta_{j_0}} \chi_{m_0}^{j_0}(\xi_{j_0}). \quad (2.53)$$

- l'onde réfléchie dans le guide j_0 définie par le second terme de l'équation (2.51), notée $\Psi_{j_0, m_0, k}^R$. Elle est constituée d'une somme sur l'ensemble des modes propagatifs des ondes d'amplitude $b_m^{j_0}$ et de nombre d'onde $k_m^{j_0}$, qui sont réfléchies par le système

$$\Psi_{j_0, m_0, k}^R = \sum_{m=1}^{M^{j_0}} b_m^{j_0} e^{ik_m^{j_0} \eta_{j_0}} \chi_m^{j_0}(\xi_{j_0}). \quad (2.54)$$

- l'onde transmise dans le guide j ($j \neq j_0$) définie par l'équation (2.52), notée $\Psi_{j_0, m_0, k}^{T \rightarrow j}$. Elle est constituée d'une somme sur l'ensemble des modes propagatifs des ondes d'amplitude b_m^j et de nombre d'onde k_m^j , qui sont transmises par le système

$$\Psi_{j_0, m_0, k}^{T \rightarrow j} = \sum_{m=1}^{M^j} b_m^j e^{ik_m^j \eta_j} \chi_m^j(\xi_j). \quad (2.55)$$

- l'onde évanescente dans les guides j ($j = 1, \dots, N$) définie par les derniers termes des équations (2.51) et (2.52), notée $\Psi_{j_0, m_0, k}^{E \rightarrow j}$. Elle est constituée d'une somme sur l'ensemble des modes évanescents

$$\Psi_{j_0, m_0, k}^{E \rightarrow j} = \sum_{m=M^j+1}^{\infty} b_m^j e^{-k_m^j \eta_j} \chi_m^j(\xi_j). \quad (2.56)$$

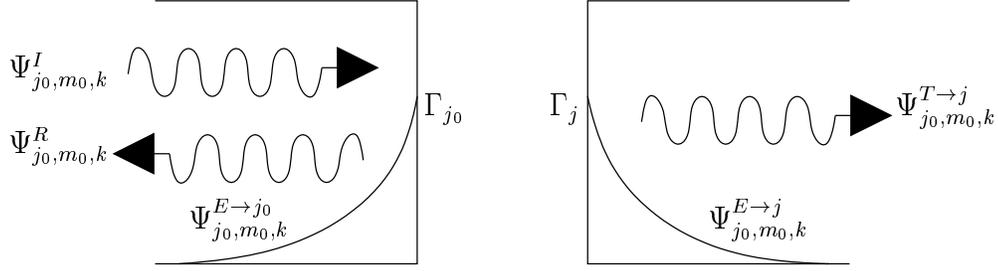


Figure 2.4: Représentation schématique des ondes réfléchies, transmises et évanescentes dans les guides j_0 et j ($j \neq j_0$), dans le cas où une onde est injectée dans le guide j_0 .

Les ondes propagatives incidentes (2.53), réfléchies (2.54), et transmises (2.55) transportent toute l'information, tandis que l'onde évanescente (2.56) tend à disparaître le long des guides d'onde (*voir* Figure 2.4).

Pour exprimer les coefficients de réflexion-transmission et leurs propriétés, il est commode d'indexer les fonctions d'onde par l'énergie E plutôt que par le vecteur d'onde. Ainsi, nous posons

$$\widehat{\Psi}_{E, j_0, m_0} = \Psi_{j_0, m_0, k}, \quad (2.57)$$

où $k \geq 0$ est défini par (2.41). On définit le coefficient de transmission $T_{j_0 \rightarrow j}^{m_0 \rightarrow m}(E)$ comme la fraction d'électron incident dans le guide j_0 et le mode m_0 associée à $\widehat{\Psi}_{E, j_0, m_0}$, qui est transmise dans le guide j et le mode m

$$\begin{cases} T_{j_0 \rightarrow j}^{m_0 \rightarrow m}(E) = \frac{k_m^j(E)}{k_{m_0}^{j_0}(E)} |b_m^j|^2 & \text{si } 1 \leq m \leq M^j(E), \\ T_{j_0 \rightarrow j}^{m_0 \rightarrow m}(E) = 0 & \text{si } m > M^j(E), \\ T_{j_0 \rightarrow j}^{m_0 \rightarrow m}(E) = 0 & \text{si } E < E_m^j \text{ ou } E < E_{m_0}^{j_0}. \end{cases} \quad (2.58)$$

On note $T_{j_0 \rightarrow j}^{m_0}$, le coefficient de transmission défini comme la fraction d'électron incident dans le guide j_0 et le mode m_0 associée à $\widehat{\Psi}_{E, j_0, m_0}$, qui est transmis dans le guide j sur tous les modes propagatifs m

$$T_{j_0 \rightarrow j}^{m_0}(E) = \sum_{m=1}^{\infty} T_{j_0 \rightarrow j}^{m_0 \rightarrow m}(E), \quad (2.59)$$

et dans le cas particulier où $j_0 = j$, le coefficient de réflexion $R_{j_0}^{m_0}$ associé à $\widehat{\Psi}_{E, j_0, m_0}$, est défini par

$$R_{j_0}^{m_0}(E) \equiv T_{j_0 \rightarrow j_0}^{m_0}(E). \quad (2.60)$$

Proposition 2.2 *On définit le flux de courant incident pour onde injectée dans le guide j_0 , le mode m_0 , et possédant une énergie E par*

$$i_{inc} = \frac{q\hbar}{m^*} k_{m_0}^{j_0}(E), \quad (2.61)$$

ainsi que le flux de courant dans le guide j par

$$i_j = \int_{\Gamma_j} (\mathbf{j}_j \cdot \boldsymbol{\eta}_j) d\xi_j, \quad (2.62)$$

où le courant \mathbf{j}_j est défini à l'aide de l'expression (2.43). Le flux de courant total dans chacun des guides est alors donné par :

$$i_{j_0} = -i_{inc}(1 - R_{j_0}^{m_0}(E)), \quad (2.63a)$$

$$i_j = i_{inc} T_{j_0 \rightarrow j}^{m_0}(E) \quad \text{si } j \neq j_0. \quad (2.63b)$$

Preuve: le calcul des densités de courant \mathbf{j}_j est obtenu dans le guide j_0 et les guides j ($j \neq j_0$) en substituant respectivement les fonctions d'onde (2.51) et (2.52), dans l'équation (2.43). A l'aide de la relation d'orthonormalisation des fonctions propres des guides donnée en (2.10), et après calcul, on trouve

$$i_{j_0} = \frac{q\hbar}{m^*} \left(-k_{m_0}^{j_0}(E) + \sum_{m=1}^{M^{j_0}(E)} k_m^{j_0}(E) |b_m^{j_0}|^2 \right), \quad (2.64a)$$

$$i_j = \frac{q\hbar}{m^*} \sum_{m=1}^{M^j(E)} k_m^j(E) |b_m^j|^2 \quad \text{si } j \neq j_0. \quad (2.64b)$$

En utilisant les définitions (2.58), (2.59), (2.60) et (2.61), on en déduit alors les expressions (2.63a) et (2.63b). \square

Remarque: si l'on suppose connue la valeur de la fonction d'onde $\widehat{\Psi}_{E,j_0,m_0}$, alors les coefficients b_m^j peuvent être déterminés à l'aide des équations (2.18), (2.19) et (2.50). On a alors

$$\begin{cases} b_{m_0}^{j_0} = -1 + \int_{\Gamma_{j_0}} \widehat{\Psi}_{E,j_0,m_0}(\xi_{j_0}, \eta_{j_0}) \chi_{m_0}^{j_0}(\xi_{j_0}) d\xi_{j_0}, \\ b_m^j = \int_{\Gamma_j} \widehat{\Psi}_{E,j_0,m_0}(\xi_j, \eta_j) \chi_m^j(\xi_j) d\xi_j \quad \text{si } j \neq j_0. \end{cases} \quad (2.65)$$

Remarque: une onde injectée dans le guide j_0 et dans le mode m_0 peut être transmise (ou réfléchi) suivant un ou plusieurs modes propagatifs m en sortie. Dans ce cas, le transfert est dit multimodal.

Proposition 2.3 *Les coefficients de réflexion et de transmission vérifient la relation*

$$R_{j_0}^{m_0}(E) + \sum_{j \neq j_0} T_{j_0 \rightarrow j}^{m_0}(E) = 1. \quad (2.66)$$

Preuve: dans la formulation variationnelle de l'équation de Schrödinger que nous avons établie en (2.22), (2.23) et (2.24), nous posons la fonction test $\Phi = \widehat{\Psi}$. On obtient alors en prenant la partie imaginaire de l'ensemble

$$-\sum_{j=1}^N \sum_{m=1}^{M^j(E)} k_m^j(E) |\Psi_m^j|^2 = -2\mathcal{R}e\{k_{m_0}^{j_0}(E) \overline{\Psi}_{j_0}^{m_0}\},$$

avec $\mathcal{R}e\{a\}$ partie réelle de a . Puis en ajoutant de part et d'autre de l'expression le terme $k_{m_0}^{j_0}(E)$, on trouve

$$\sum_{j=1}^N \sum_{m=1}^{M^j(E)} k_m^j(E) |\Psi_m^j - \delta_{j,j_0} \delta_{m,m_0}|^2 = k_{m_0}^{j_0}(E),$$

et finalement avec les définitions (2.19) et (2.50)

$$\sum_{j=1}^N \sum_{m=1}^{M^j(E)} \frac{k_m^j(E)}{k_{m_0}^{j_0}(E)} |b_m^j|^2 = 1.$$

□

Nous allons maintenant considérer la contribution totale au courant dans le guide j , dans le cas où des électrons sont injectés dans le guide j_0 , sur chacun des modes m_0 et suivant une distribution d'énergie de Fermi-Dirac liée au potentiel chimique μ_{j_0} du réservoir d'origine. On peut alors écrire

$$I_{j_0 \rightarrow j} = 2 \sum_{m_0=1}^{\infty} \int_0^{\infty} i_j(k) f_{FD}(E(j_0, m_0, k) - \mu_{j_0}) \frac{dk}{2\pi}. \quad (2.67)$$

En utilisant les résultats (2.61) et (2.63b), ainsi que le changement de variable (2.41), on obtient alors

$$I_{j_0 \rightarrow j} = \frac{q}{\pi \hbar} \sum_{m_0=1}^{\infty} \int_{E_{m_0}^{j_0}}^{\infty} T_{j_0 \rightarrow j}^{m_0}(E) f_{FD}(E(j_0, m_0, k) - \mu_{j_0}) dE. \quad (2.68)$$

L'intensité du courant du guide j_0 au guide j peut encore s'écrire avec (2.58) et (2.59)

$$I_{j_0 \rightarrow j} = \frac{q}{\pi \hbar} \int_0^{\infty} T_{j_0 \rightarrow j}(E) f_{FD}(E - \mu_{j_0}) dE, \quad (2.69)$$

où le coefficient de transmission $T_{j_0 \rightarrow j}(E)$ est défini comme la fraction d'électron incident dans le guide j_0 qui est transmis dans le guide j . Avec l'aide de (2.58) et (2.59), on obtient

$$T_{j_0 \rightarrow j}(E) = \sum_{m_0, m} T_{j_0 \rightarrow j}^{m_0 \rightarrow m}(E). \quad (2.70)$$

L'intensité du courant résultant dans un guide j se calcule comme la somme sur la différence des contributions des intensités entre les guides j_0 et j

$$I_j = \sum_{j_0 \neq j} (I_{j_0 \rightarrow j} - I_{j \rightarrow j_0}), \quad (2.71)$$

où $I_{j_0 \rightarrow j}$ est l'intensité du courant transmis du guide j_0 au guide j , et $I_{j \rightarrow j_0}$ est l'intensité du courant transmis du guide j_0 au guide j . On note par convention I_j positif, si le courant dans le guide j sort du système, et I_j négatif, si le courant dans le guide j pénètre dans le système. Avec (2.71) et (2.69), on obtient finalement

$$I_j = \frac{q}{\pi \hbar} \sum_{j_0 \neq j} \int_0^\infty \{T_{j_0 \rightarrow j}(E) f_{FD}(E - \mu_{j_0}) - T_{j \rightarrow j_0}(E) f_{FD}(E - \mu_j)\} dE. \quad (2.72)$$

Proposition 2.4 Soit E tel que $E \geq E_{m_0}^{j_0}$ et $E \geq E_{m_1}^{j_1}$, $\forall j_0 \neq j_1$, les coefficients de transmission vérifient alors les propriétés de réciprocity suivantes :

$$T_{j_0 \rightarrow j_1}^{m_0 \rightarrow m_1}(E) = T_{j_1 \rightarrow j_0}^{m_1 \rightarrow m_0}(E). \quad (2.73)$$

Preuve: nous pouvons établir la relation (2.73) avec l'aide de la formulation variationnelle de l'équation de Schrödinger que nous avons écrite en (2.22), (2.23) et (2.24). Supposons que $\widehat{\Psi}_{E, j_0, m_0}$ soit la fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger (2.40), et si l'on pose la fonction test égale à Φ_{E, j_1, m_1} , on obtient alors une première expression

$$a(\widehat{\Psi}_{E, j_0, m_0}, \Phi_{E, j_1, m_1}) = L(\Phi_{E, j_1, m_1}).$$

Supposons maintenant que Φ_{E, j_1, m_1} soit la fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger et $\widehat{\Psi}_{E, j_0, m_0}$ la fonction test, on obtient alors une seconde expression

$$a(\Phi_{E, j_1, m_1}, \widehat{\Psi}_{E, j_0, m_0}) = L(\widehat{\Psi}_{E, j_0, m_0}).$$

Comme a est une forme symétrique, les formes bilinéaires a sont donc identiques, et on obtient une égalité entre les deux formes linéaires L

$$L(\Phi_{E, j_1, m_1}) = L(\widehat{\Psi}_{E, j_0, m_0}).$$

Puisque $a_m^j = \delta_{j, j_0} \delta_{m, m_0}$ pour $\widehat{\Psi}_{E, j_0, m_0}$ solution de l'équation de Schrödinger, et $a_m^j = \delta_{j, j_1} \delta_{m, m_1}$ pour Φ_{E, j_1, m_1} solution de l'équation de Schrödinger, on obtient alors

$$k_{m_0}^{j_0} \Phi_{m_0}^{j_0} = k_{m_1}^{j_1} \Psi_{m_1}^{j_1}. \quad (2.74)$$

Notons enfin que, $\Phi_{m_0}^{j_0} = b_{m_0}^{j_0}$ et $\Psi_{m_1}^{j_1} = b_{m_1}^{j_1}$, où les coefficients de transmission b_m^j sont définis en (2.65). Dans le cas où $j_0 \neq j_1$, on trouve

$$\begin{cases} b_{m_0}^{j_0} = \int_{\Gamma_{j_0}} \Phi_{E,j_1,m_1}(\xi_{j_0}, \eta_{j_0}) \chi_{m_0}^{j_0}(\xi_{j_0}) d\xi_{j_0}, \\ b_{m_1}^{j_1} = \int_{\Gamma_{j_1}} \widehat{\Psi}_{E,j_0,m_0}(\xi_{j_1}, \eta_{j_1}) \chi_{m_1}^{j_1}(\xi_{j_1}) d\xi_{j_1}. \end{cases}$$

On peut alors écrire (2.74) sous la forme

$$b_{m_1}^{j_1} = b_{m_0}^{j_0} \frac{k_{m_0}^{j_0}}{k_{m_1}^{j_1}}. \quad (2.75)$$

Le coefficient de transmission (2.58) pour une onde $\widehat{\Psi}_{E,j_0,m_0}$ a pour expression

$$T_{j_0 \rightarrow j_1}^{m_0 \rightarrow m_1}(E) = \frac{k_{m_1}^{j_1}(E)}{k_{m_0}^{j_0}(E)} |b_{m_1}^{j_1}|^2,$$

et avec l'aide de (2.75) on obtient

$$T_{j_0 \rightarrow j_1}^{m_0 \rightarrow m_1}(E) = \frac{k_{m_0}^{j_0}(E)}{k_{m_1}^{j_1}(E)} |b_{m_0}^{j_0}|^2,$$

qui n'est rien d'autre que l'expression du coefficient de transmission $T_{j_1 \rightarrow j_0}^{m_1 \rightarrow m_0}(E)$ pour une onde Φ_{E,j_1,m_1} . \square

Remarque: avec (2.70) et la relation de réciprocité (2.73), on trouve

$$T_{j_0 \rightarrow j} = T_{j \rightarrow j_0}. \quad (2.76)$$

On obtient alors avec la relation de réciprocité (2.76)

$$I_j = \frac{q}{\pi \hbar} \sum_{j_0=1}^N \int_0^\infty T_{j_0 \rightarrow j}(E) \{f_{FD}(E - \mu_{j_0}) - f_{FD}(E - \mu_j)\} dE \quad (2.77)$$

Remarque:

- l'expression (2.77) est identiquement nulle pour $j_0 = j$. Par conséquent, nous avons levé la restriction sur la sommation.
- le système est dit en équilibre si tous les guides possèdent une polarisation identique, c'est à dire $\mu_j = \mu_{j_0} = \mu$. Dans ce cas, la condition $I_j = 0, \forall j$, est vérifiée.
- si v_j représente la tension de polarisation du guide j , on peut alors écrire que

$$\mu_j = \mu - qv_j. \quad (2.78)$$

- la vérification de la loi de conservation (2.45) sur les intensités définies dans le cas général (2.72), est obtenue à l'aide de (2.66).
- à température nulle l'expression de l'intensité du courant dans le guide j devient

$$I_j = \frac{q}{\pi\hbar} \sum_{j_0=1}^N \int_{\mu_j}^{\mu_{j_0}} T_{j_0 \rightarrow j}(E) dE. \quad (2.79)$$

Nous proposons d'illustrer la notion d'intensité à travers deux exemples portant sur un système à deux guides d'onde, puis à quatre guides d'onde.

Exemple d'un système à deux guides d'onde : La figure 2.5 représente le transport électronique dans le cas d'un système à deux guides d'onde relié aux réservoirs 1 et 2. Les potentiels chimiques des deux réservoirs sont séparés en énergie par un potentiel u . Nous pouvons constater que le courant ne circule que dans le sens des potentiels chimiques les plus élevés au moins élevés et uniquement dans la gamme d'énergie définie comme la différence des distributions d'énergie de Fermi-Dirac des deux réservoirs. En appliquant l'équation 2.77, on trouve pour l'expression de l'intensité

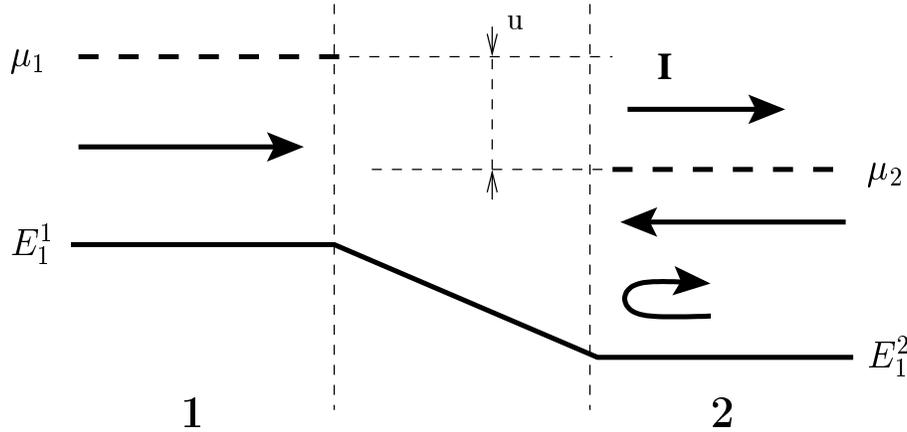


Figure 2.5: Circulation du courant dans le cas d'un système à deux guides d'onde reliés à deux réservoirs. Les potentiels chimiques, associé à chacun des guides, sont séparés en énergie par un potentiel u .

dans le guide 2 (notons que $I_2 = -I_1$)

$$I_2 = \frac{q}{\pi\hbar} \int_0^\infty T_{1 \rightarrow 2}(E) \{f_{FD}(E - \mu_1) - f_{FD}(E - \mu_2)\} dE.$$

Et à température nulle

$$I_2 = \frac{q}{\pi\hbar} \int_{\mu_2}^{\mu_1} T_{1 \rightarrow 2}(E) dE$$

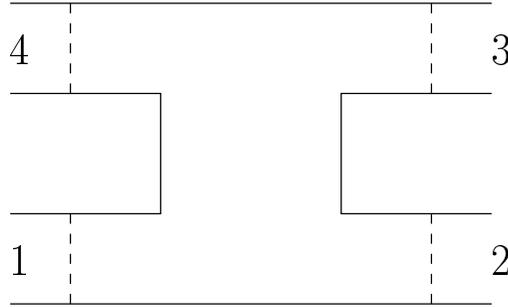
Exemple d'un système à quatre guides d'onde : Prenons le cas d'un système à quatre guides d'onde illustré sur l'exemple du coupleur quantique sur la figure 2.6. On obtient pour l'intensité dans le guide 4

$$I_4 = \frac{q}{\pi\hbar} \int_0^\infty \{T_{1\rightarrow 4}(f_{FD}^1 - f_{FD}^4) + T_{2\rightarrow 4}(f_{FD}^2 - f_{FD}^4) + T_{3\rightarrow 4}(f_{FD}^3 - f_{FD}^4)\} dE,$$

où $f_{FD}^j \equiv f_{FD}(E - \mu_j)$. Supposons maintenant que la tension de polarisation dans les guides 2, 3, et 4 soit identique et égale à u . Supposons encore une polarisation nulle pour le réservoir associé au guide 1. On trouve alors pour l'intensité dans le guide 4 relative à "l'effet backward"

$$I_4 = \frac{q}{\pi\hbar} \int_0^\infty T_{1\rightarrow 4}(E)(f_{FD}^1 - f_{FD}^4) dE.$$

Figure 2.6: Schéma du coupleur quantique possédant quatre guides d'onde.



2.3.3 La conductance

Dans le but de rendre compte des effets de non-linéarité dans les caractéristiques courant-tension, il est utile d'introduire la notion de conductance. Dans un cas général, la conductance (différentielle) est définie par

$$G = \frac{\partial I}{\partial V}. \quad (2.80)$$

Dans un système composé de plusieurs guides d'onde, la conductance entre deux guides j et j_0 est donnée par

$$G_{j_0j} = \frac{\partial I_{j_0j}}{\partial (v_j - v_{j_0})} \quad (2.81)$$

Nous allons supposer que le flux de courant I_{j_0j} est uniquement porté par les guides j et j_0 indépendamment des autres guides [17, 21]

$$I_{j_0j} = I_{j_0\rightarrow j} - I_{j\rightarrow j_0}. \quad (2.82)$$

Hypothèse 2.2 Nous allons supposer que les potentiels électrochimiques $\mu_{j_0,j}$ s'éloignent très peu de la valeur du potentiel électrochimique μ à l'équilibre (ce qui conduit à des "petites" différences entre les tensions de polarisation des guides d'après (2.78)). Dans ce cas, nous supposons encore que les coefficients de transmission $T_{j_0 \rightarrow j}$ sont bien approximés par leur valeur à l'équilibre $T_{j_0 \rightarrow j}^0$.

On peut alors effectuer la décomposition en série de Taylor à l'ordre 1 de la fonction de Fermi-Dirac par rapport à E en $(\mu_{j_0,j} - \mu)$. On obtient ainsi

$$f_{FD}(E - \mu_{j_0,j}) \simeq f_0(E) + \left(-\frac{\partial f_{FD}^0}{\partial E} \right) (\mu_{j_0,j} - \mu), \quad (2.83)$$

où $f_{FD}^0 \equiv f_{FD}(E - \mu)$ est la distribution de Fermi-Dirac à l'équilibre. En substituant le développement (2.83) dans l'expression de l'intensité (2.82), on obtient avec (2.69) et (2.78)

$$I_{j_0j} = \frac{q^2}{\pi \hbar} \tilde{T}_{j_0 \rightarrow j}(v_j - v_{j_0}), \quad (2.84)$$

où $\tilde{T}_{j_0 \rightarrow j}$ est défini par

$$\tilde{T}_{j_0 \rightarrow j} = \int_0^\infty T_{j_0 \rightarrow j}^0(E) \left(-\frac{\partial f_{FD}^0}{\partial E} \right) dE. \quad (2.85)$$

Nous obtenons alors pour la conductance défini en (2.81)

$$G_{j_0j} = \frac{q^2}{\pi \hbar} \tilde{T}_{j_0 \rightarrow j} \quad (2.86)$$

Remarque:

- comme $\tilde{T}_{j_0 \rightarrow j} = \tilde{T}_{j \rightarrow j_0}$ d'après (2.76) et (2.85), on obtient $G_{j_0j} = G_{jj_0}$.
- d'après (2.84), l'intensité entre deux guides est proportionnelle à leur différence de potentiels (quand cette différence est petite). Le système à guides d'ondes électronique est donc équivalent à un réseaux de résistances de telle sorte qu'avec (2.71), (2.82), (2.84) et (2.86), l'intensité au guide j s'exprime

$$I_j = \sum_{j_0} G_{j_0j}(v_j - v_{j_0}). \quad (2.87)$$

- à température nulle, la dérivée de la fonction de distribution de Fermi-Dirac dans (2.85) se transforme en une fonction delta de Dirac non nulle pour $E = \mu$. Nous retrouvons alors à l'aide des équations (2.59), (2.70) et (2.86) la formule de Landauer-Büttiker [17, 21, 71]

$$G_{j_0j} = \frac{q^2}{\pi \hbar} \sum_{m_0=1}^{M_0} T_{j_0 \rightarrow j}^{m_0}(\mu). \quad (2.88)$$

Cette formule traduit le phénomène de quantification de la conductance. Elle est utilisée dans des cas où la température est très faible, et où les différences entre les potentiels de polarisation sont petites.

Partie II

Applications aux dispositifs “split-gate”
AlGaAs/GaAs et aux “nano-MOSFETs”

Chapitre 3

Présentation d'un modèle de transport quantique dans les gaz d'électrons bidimensionnels pour les dispositifs AlGaAs/GaAs

Sommaire

3.1	Position du problème	58
3.1.1	Introduction	58
3.1.2	Définitions et hypothèses	61
3.2	Le modèle quantique quasi-3D	63
3.2.1	Préliminaires	63
3.2.2	Description détaillée du modèle quasi-3D	65
3.2.3	Conditions aux bords sur le potentiel	70
3.2.4	Calcul du courant et de la conductance	73
3.3	Etude sur les ordres d'approximation dans un cadre simplifié	74
3.3.1	Approximations sur les fonctions d'onde	75
3.3.2	Approximations sur la densité et sur le courant	77
3.3.3	Commentaires	80
3.4	Récapitulatif	81

3.1 Position du problème

3.1.1 Introduction

Dans les dispositifs “split-gate” AlGaAs/GaAs, le transport électronique peut être considéré comme classique dans les régions qui entourent les réservoirs et comme quantique dans la région qui se situe sous les grilles de commande Shottky. Toutes les réflexions des ondes électroniques qui peuvent apparaître à l’entrée des guides sont concentrées dans une zone dite de transition. Les zones tridimensionnelles classique, quantique, et de transition, sont représentées sur l’exemple du stub électronique sur la figure 3.1a.

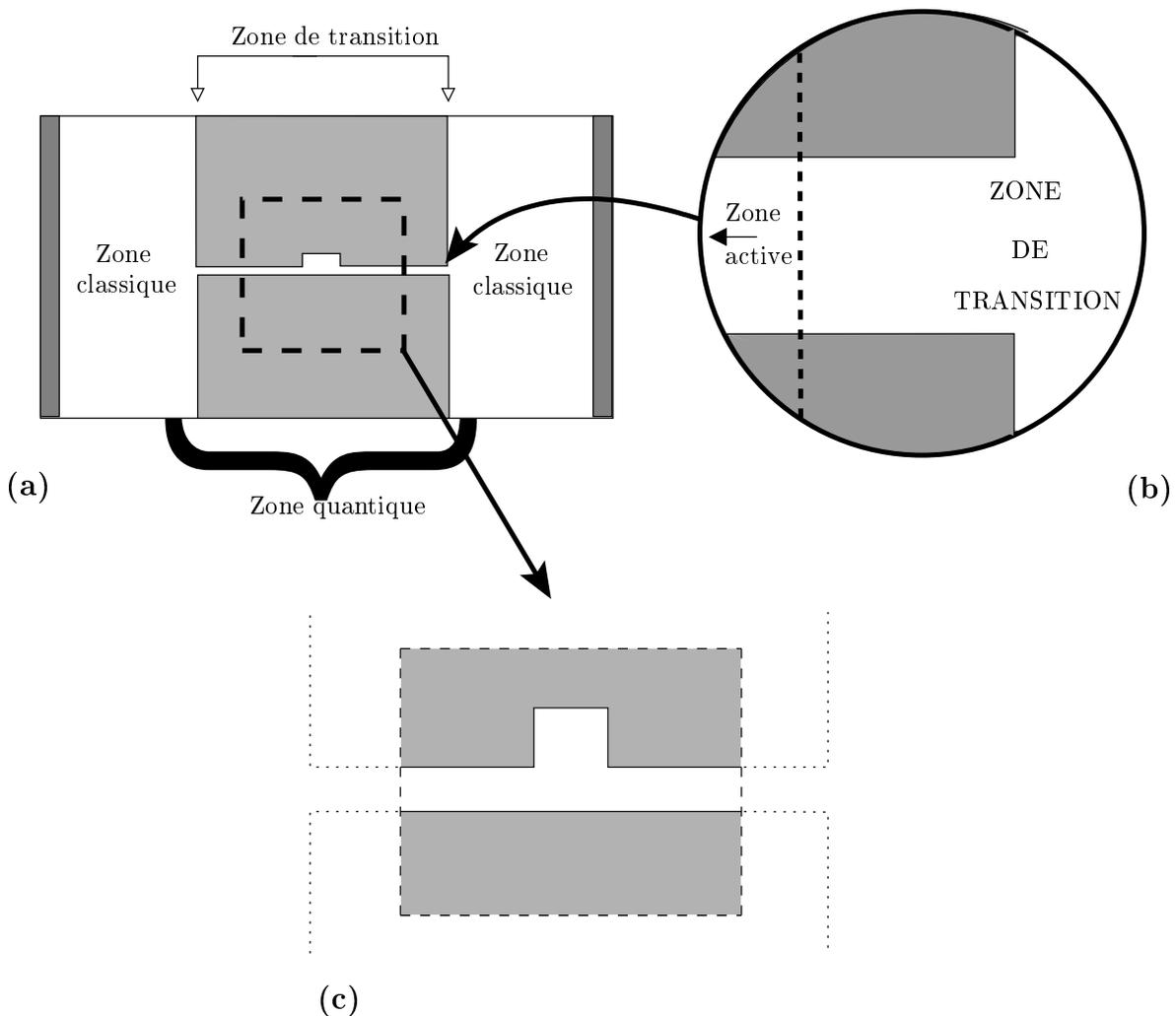


Figure 3.1: Description des zones de différentes natures dans le cas du stub en (a). Un gros plan sur le guide à l’entrée de la zone quantique est présenté en (b). (c) représente la restriction du domaine d’étude à la zone quantique (vue de dessus).

Nous allons concentrer notre étude uniquement sur les phénomènes de transport quantique. Par conséquent, le transport électronique dans les zones classiques, ainsi que les phénomènes de réflexion relatifs à la zone de transition, ne seront pas pris en compte. On

note Ω la géométrie d'étude telle que :

- Ω est la restriction de la zone quantique dans les régions où la probabilité de trouver un électron est non nulle dans le plan du gaz 2D d'électrons (on ne tient pas compte des régions de fort potentiel qui se situent sous les grilles loin de la zone active, voir Figure 3.1c).
- Ω est délimité dans les guides loin de la zone active et loin de la zone transition, avec la condition selon laquelle le potentiel dans les guides est transverse. Ainsi, le potentiel dans les guides est supposé ne plus subir l'influence des phénomènes de réaction de charge d'espaces pouvant apparaître, soit dans la zone de transition, soit dans la zone active (voir Figure 3.1b). Cette condition implique que les limites bidimensionnelles guides d'onde-zone active, de la géométrie d'étude Ω , se trouvent dans un état de quasi-équilibre.

Le domaine de restriction d'étude Ω est présenté à travers les exemples tridimensionnels du coupleur quantique et du stub électronique sur les figures 3.2a et 3.2b.

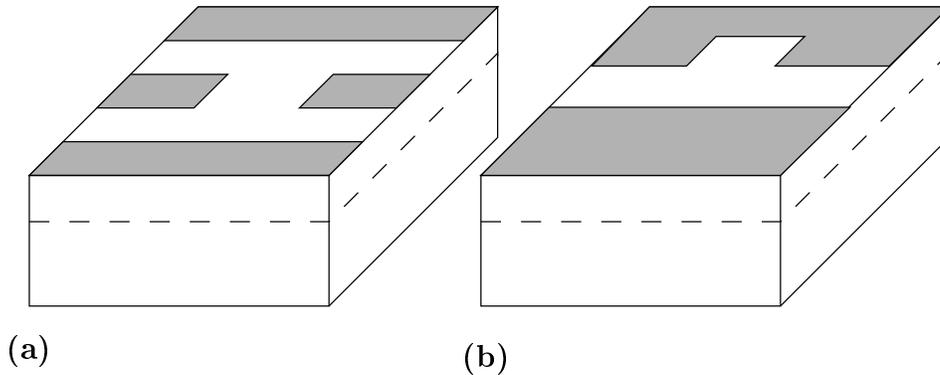


Figure 3.2: Exemples de la restriction de la géométrie d'étude (zone active) : dans le cas du coupleur quantique (a), et dans le cas du stub électronique (b).

Dans ce modèle, nous allons supposer que les tensions de polarisation aux limites guides d'onde-zone active sont identiques aux tensions de polarisation des réservoirs d'électrons qui leur sont associés. L'injection des ondes incidentes s'effectue ainsi directement dans les guides. Rappelons alors la relation (2.78) qui associe le potentiel chimique μ_j du guide j au potentiel de polarisation v_j du réservoir correspondant

$$\mu_j = \mu - qv_j,$$

où μ est le potentiel chimique à l'équilibre.

La grande majorité des articles cités en introduction concernant l'étude du transport quantique dans les divers dispositifs à guides d'onde électronique, suppose des systèmes bidimensionnels où le gaz d'électrons est déjà formé et dont la géométrie est délimitée par des murs infinis de potentiel (projection des grilles en surface). Il s'agit le plus souvent de résoudre l'équation de Schrödinger 2D dans des domaines bornés avec un potentiel constant

et d'en déduire les coefficients de réflexion et de transmission des ondes sur les frontières. Dans ces cas où la géométrie du dispositif est simple, c'est à dire que la décomposition en zone rectangulaire du domaine d'étude est possible, la méthode de raccordement de modes pour le calcul des fonctions d'onde est fréquemment utilisée [129, 135]. La méthode QTBM présentée dans le chapitre précédent, propose la résolution par la méthode des éléments finis de la formulation variationnelle de l'équation de Schrödinger munie de conditions aux bords entrantes. Cette méthode apparaît pertinente dans le traitement de géométries dites complexes possédant un potentiel quelconque ("smooth") [96, 121]. En effet, l'image du potentiel de grille sur le plan du gaz d'électrons est nécessairement un potentiel "mou". Cette dernière remarque, nous invite à penser que les effets électrostatiques qui se produisent dans le composant semi-conducteur sont de nature tridimensionnel. Par conséquent, pour définir un modèle qui tienne compte de la réaction de charge d'espace des électrons dans le calcul du potentiel électrostatique, il est nécessaire de tenir compte d'un système tridimensionnel [118]. Etudier le modèle de transport quantique 3D revient alors à appliquer le problème modèle défini au chapitre 2 de la première partie, pour un cas tridimensionnel.

Dans les dispositifs étudiés, les électrons se trouvent confinés dans la direction verticale essentiellement au niveau de l'hétérojonction AlGaAs/GaAs. Nous pouvons illustrer ce résultat à l'aide de la figure 3.3 qui donne une idée de l'extension du gaz d'électrons dans la direction z sur l'exemple d'un stub électronique.

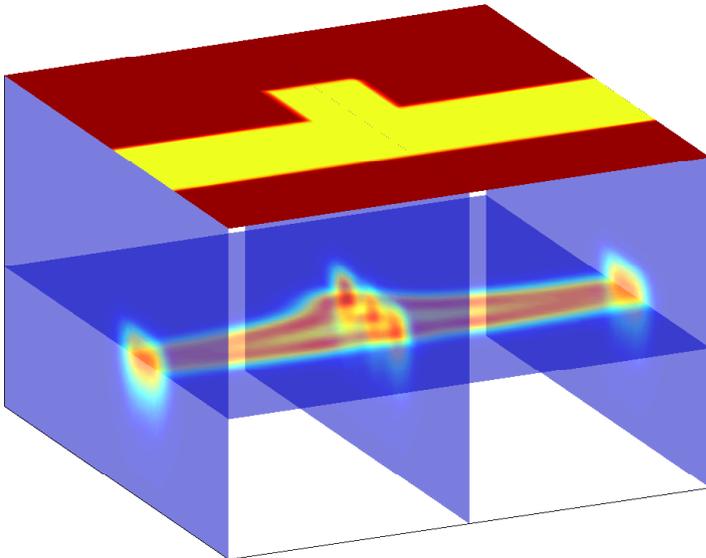


Figure 3.3: Localisation du gaz d'électrons dans le stub électronique. Le gaz d'électrons est confiné dans la direction verticale du composant au niveau de l'hétérojonction. En complément, quand un potentiel négatif est appliqué sur les grilles, le gaz d'électrons déserte les zones se trouvant sous ces grilles.

Dans ces conditions, si le calcul du potentiel électrostatique semble nécessiter une résolution tridimensionnelle, le calcul des fonctions d'onde à l'aide de l'équation de Schrödinger 3D peut être simplifié en notant le confinement vertical du gaz d'électrons et donc sa nature bidimensionnelle. Afin de tenir compte de cet aspect du gaz, nous proposons de définir un modèle qui consiste d'une certaine manière à découpler la résolution de l'équation de Schrödinger 3D en z et x, y (section 3.2). Nous l'avons baptisé le modèle quasi-3D. Nous espérons ainsi diminuer le coût numérique de nos simulations tout en conservant

une bonne approximation du modèle 3D complet.

Remarque: en effet, dans le modèle de transport 3D, le calcul de la densité électronique nécessite la résolution d'un grand nombre d'équations de Schrödinger 3D, ce qui implique l'utilisation de grandes ressources informatiques. Nous montrerons dans le chapitre 4, que le modèle de transport quasi-3D (qui ne nécessite principalement que la résolution d'équations de Schrödinger 2D), rend obsolète une description tridimensionnelle complète du transport des électrons, et de ce fait, diminue le coût numérique.

Dans la section (3.3), nous proposons d'analyser l'ordre d'approximation du modèle quasi-3D de manière formelle. Commençons tout d'abord par quelques définitions et hypothèses.

3.1.2 Définitions et hypothèses

Toutes les hypothèses (2.1) énoncées au chapitre 2 dans le cadre du problème modèle restent valables concernant l'étude des dispositifs AlGaAs/GaAs. Toutefois comme il n'y a pas de dopage négatif dans la nanostructure, il n'y a donc pas de trous. De plus, le dopage positif dans la couche n-AlGaAs (*voir* Figure 1.8) est supposé uniforme.

Dans la suite de l'étude, nous faisons le choix d'étendre la zone active Ω_0 jusqu'aux limites de la géométrie d'étude Ω . De ce fait, $\Omega_0 = \Omega$ et nous obtenons

$$\partial\Omega_0 = \Gamma_0 \cup \left(\bigcup_j^N \Gamma_j \right),$$

où les bords Γ_j représentent les frontières bidimensionnelles des guides d'onde j et de la zone active Ω_0 . Γ_0 est défini par

$$\Gamma_0 = \Gamma_B \cup \Gamma_T \cup \Gamma_F,$$

avec le bord Γ_B (B : Bottom) qui représente la base du composant quand $z = 0$, le bord Γ_T (T : Top) la surface du composant quand $z = L_z$, et les bords Γ_F (F : Face) l'ensemble des autres faces du composants ne comportant pas les frontières aux guides. Notons finalement, Γ_{T_G} et Γ_{T_0} respectivement les zones en surface du composant avec ou sans les grilles

$$\Gamma_T = \Gamma_{T_G} \cup \Gamma_{T_0}.$$

Remarque: quand un potentiel négatif est appliqué sur les grilles, les électrons désertent les zones se trouvant sous celles-ci. Cependant, la probabilité de trouver un électron sous les grilles est négligeable uniquement dans les zones de très fort potentiel [33]. Afin de prévenir d'éventuelles erreurs d'approximation dans le modèle liées aux conditions aux bords de confinement du gaz d'électrons dans la direction transverse des guides d'onde, nous proposons d'élargir les frontières Γ_j au maximum comme indiqué sur les figures 3.4a et 3.4b.

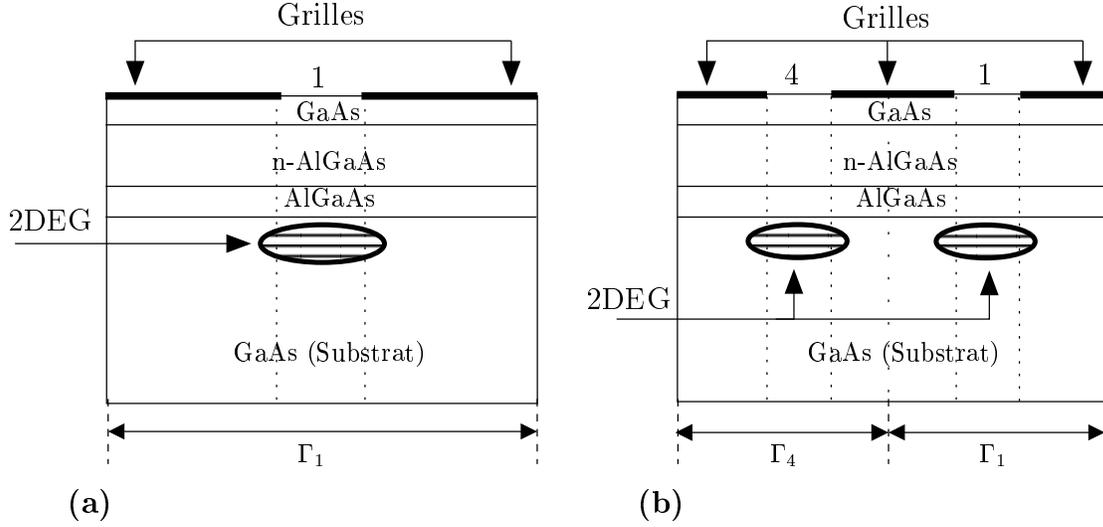
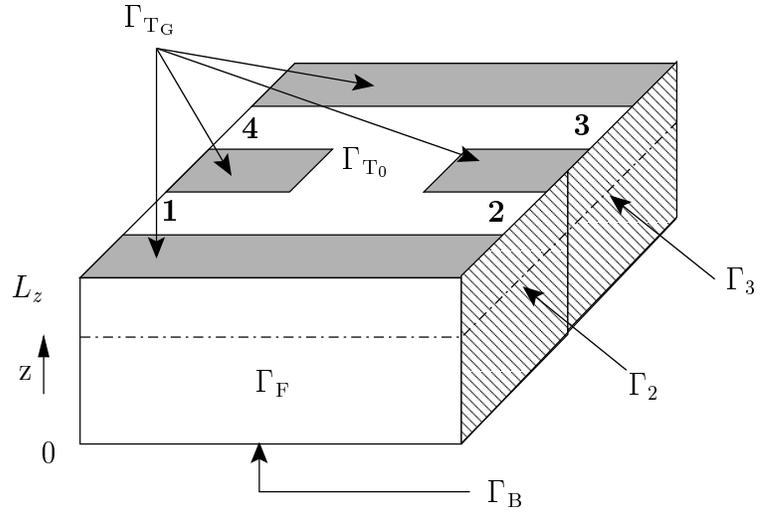


Figure 3.4: Représentation schématique de la position du gaz d'électrons (2DEG) sur l'exemple d'un dispositif possédant un guide d'onde sur une face (a) (stub), et deux guides d'onde sur une face (b) (coupleur).

Le domaine d'étude tridimensionnel Ω_0 ainsi que ses différentes frontières sont représentés en perspective dans le cas du coupleur quantique sur la figure 3.5.

Figure 3.5: Représentation des divers domaines de la zone d'étude tridimensionnelle du coupleur quantique. A la surface du composant, on note Γ_{T_G} et Γ_{T_0} respectivement les zones avec les grilles et sans les grilles. Les sections Γ_j ($j \neq 0$) contiennent les frontières bidimensionnelles guides d'onde-zone active.



Posons maintenant $\Omega_0 = \omega_0 \times]0, L_z[$, où ω_0 représente le domaine bidimensionnel défini par

$$\omega_0 =]0, L_x[\times]0, L_y[\quad \text{avec} \quad \partial\omega_0 = \gamma_F \cup \left(\bigcup_j^N \gamma_j \right), \quad (3.1)$$

Ainsi, les frontières γ_F et γ_j représentent les traces des domaines Γ_F et Γ_j sur le plan ω_0

$$\Gamma_F = \gamma_F \times]0, L_z[, \quad \Gamma_j = \gamma_j \times]0, L_z[. \quad (3.2)$$

Les domaines équivalents Ω_0 et $\omega_0 \times]0, L_z[$, ainsi que leurs frontières, sont représentés sur l'exemple du coupleur quantique, respectivement sur les figures 3.6a et 3.6b.

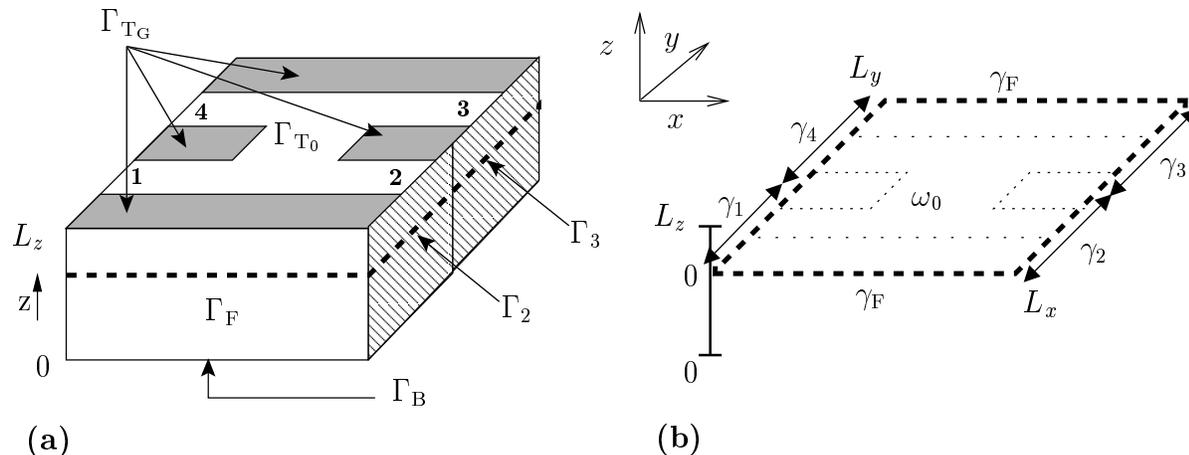


Figure 3.6: Description des domaines d'étude Ω_0 en (a) et $\omega_0 \times]0, L_z[$ en (b), sur l'exemple du coupleur quantique.

3.2 Le modèle quantique quasi-3D

3.2.1 Préliminaires

L'idée de départ consiste à décomposer l'énergie potentielle $U(\mathbf{x})$ ($\mathbf{x} \equiv (x, y, z)$) de la manière suivante :

$$U(\mathbf{x}) = U_1(z) + U_2(x, y) + u(\mathbf{x}), \quad (3.3)$$

où $U_1(z)$ est défini comme un potentiel vertical sur $]0, L_z[$, U_2 comme un potentiel bidimensionnel sur ω_0 , et u comme un potentiel sur Ω_0 . Cette décomposition est arbitraire et non unique. Dans la suite de l'exposé, nous traiterons le potentiel $u(\mathbf{x})$ de manière perturbative, et nous indiquerons la stratégie que nous avons adoptée pour calculer les potentiels U_1 et U_2 .

Toute fonction $\Psi(\mathbf{x})$ définie sur Ω_0 peut se décomposer comme

$$\Psi(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi^n(x, y) \phi_n(z), \quad (3.4)$$

où $\{\phi_n\}_{n \in \mathbb{N}^*}$ est la base orthonormée de vecteurs propres sur $L^2(]0, L_z[)$ à valeurs dans \mathbb{R} , diagonalisant l'opérateur de Schrödinger vertical défini sur $]0, L_z[$ avec des conditions aux

bords de Dirichlet homogènes

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \phi_n(z) + U_1(z) \phi_n(z) = E_{z_n} \phi_n(z) \quad \text{dans }]0, L_z[, \\ \phi_n(z) = 0 \quad \text{en } z = 0 \text{ et } z = L_z, \\ \int_0^{L_z} \phi_n(z) \phi_{n'}(z) dz = \delta_{n,n'}, \end{array} \right. \quad (3.5)$$

où E_{z_n} la valeur propre réelle verticale associée à ϕ_n , et n l'indice du mode vertical. Nous notons alors, $\psi^n(x, y)$ la fonction d'onde bidimensionnelle définie sur ω_0 et qui est associée au mode vertical n . En insérant l'expression de la fonction Ψ (3.4) dans l'équation de Schrödinger 3D définie dans Ω_0 (2.6), nous obtenons alors le système d'équations de Schrödinger 2D couplées suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \psi^n(x, y) + U_2(x, y) \psi^n(x, y) + \psi^n(x, y) \left(\int_0^{L_z} u(\mathbf{x}) |\phi_n(z)|^2 dz \right) \\ + \sum_{n' \neq n} \psi^{n'}(x, y) \left(\int_0^{L_z} \phi_n(z) u(\mathbf{x}) \phi_{n'}(z) dz \right) = (E - E_{z_n}) \psi^n(x, y) \quad \text{dans } \omega_0, \\ \psi^n(x, y) = 0 \quad \text{sur } \gamma_{\mathbb{F}}, \\ \text{avec les conditions d'onde entrantes sur les } \gamma_j, (j = 1, \dots, N). \end{array} \right. \quad (3.6)$$

Remarque: le gaz d'électrons étant principalement concentré dans un puits de potentiel se trouvant dans le GaAs, la masse effective des électrons (intervenant dans l'équation de Schrödinger) est par conséquent supposée égale à la masse effective des électrons dans le GaAs.

Hypothèse 3.1 *Nous allons supposer que $u(\mathbf{x})$ est une fonction lentement variable dans la direction z en comparaison avec les fonctions propres $\phi_n(z)$. L'échelle de variation de u en z étant supposée beaucoup plus grande que l'échelle de variation des fonctions ϕ_n , nous choisissons de ne pas prendre en compte les termes non-diagonaux de l'équation (3.6) (puisque $\{\phi_n\}_{n \in \mathbb{N}^*}$ forme une base orthonormée de $L^2(]0, L_z[)$).*

Nous appelons modèle quasi-3D le modèle qui consiste à ne conserver que les termes diagonaux de l'équation (3.6). A l'aide de la décomposition (3.3), on trouve pour le terme d'énergie potentielle

$$\widehat{U}_n(x, y) = \int_0^{L_z} (U(\mathbf{x}) - U_1(z)) |\phi_n(z)|^2 dz. \quad (3.7)$$

Finalement, on note ψ_{Q3D}^n les fonctions d'onde solutions de l'équation de Schrödinger 2D suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \psi_{Q3D}^n(x, y) + \widehat{U}_n(x, y) \psi_{Q3D}^n(x, y) = (E - E_{zn}) \psi_{Q3D}^n(x, y) \quad \text{dans } \omega_0, \\ \psi_{Q3D}^n(x, y) = 0 \quad \text{sur } \gamma_F, \\ \text{avec les conditions d'onde entrantes sur les } \gamma_j, (j = 1, \dots, N). \end{array} \right. \quad (3.8)$$

Sur les frontières guides d'onde-zone active γ_j , le potentiel bidimensionnel \widehat{U}_n dépend uniquement de la direction transverse ξ_j du guide j (découle directement du fait que U possède la même propriété). Le problème (3.8) peut, par conséquent, s'interpréter comme le problème modèle défini en (2.6) pour un cas bidimensionnel. Les solutions du problème tridimensionnel peuvent s'écrire d'après (3.4) de la façon suivante :

$$\Psi_{Q3D}(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_{Q3D}^n(x, y) \phi_n(z). \quad (3.9)$$

3.2.2 Description détaillée du modèle quasi-3D

Dans cette section, nous proposons de présenter les différentes étapes de calcul des fonctions d'onde quasi-3D à partir du potentiel électrostatique V , lesquelles seront nécessaires à la résolution de la densité électronique $n[V]$. La description des conditions aux bords sur le potentiel électrostatique, solution de l'équation de Poisson, sera présentée ultérieurement dans la suite de l'exposé.

Calcul du potentiel U_1

On définit l'énergie potentielle par

$$U(\mathbf{x}) = -qV(\mathbf{x}) + E_c(z), \quad (3.10)$$

avec $E_c(z)$ l'énergie potentielle liée au bas des bandes de conduction des diverses couches semi-conductrices (E_c est donc une fonction constante par morceaux sur z). Nous définissons la densité surfacique par

$$ns[V](x, y) = \int_0^{L_z} n[V](\mathbf{x}) dz. \quad (3.11)$$

Dans le but d'obtenir un potentiel U_1 dépendant uniquement de z quel que soit x ou y , nous choisissons alors d'approximer le potentiel U_1 par la moyenne du potentiel U pondérée à l'aide de la densité surfacique des électrons sur le domaine ω_0

$$U_1[V](z) = \frac{\int_{\omega_0} U(\mathbf{x}) ns[V](x, y) dx dy}{\int_{\omega_0} ns[V](x, y) dx dy}. \quad (3.12)$$

Nous savons que le domaine ω_0 est composé d'une zone où sont concentrés les électrons et d'une zone privée d'électrons qui se situe principalement sous les grilles. Contrairement à la zone "vue" par les électrons (constituée des guides d'onde et du milieu de la zone active), dans la zone désertée par les électrons, la densité électronique surfacique (intégrale de la densité dans la direction verticale) est nulle puisque le profil du potentiel U dans la direction z ne présente pas de puits de potentiel au niveau de l'hétérojonction AlGaAs/GaAs. La figure 3.7 présente deux types de profils de potentiel et de densité possibles dans la direction z à x, y fixée. Lorsque nous effectuons la moyenne sur x, y du potentiel U , les profils de potentiel sur z dans lesquels aucun électron n'est confiné, ne doivent pas être pris en compte, puisque le potentiel U_1 est un potentiel qui doit être "vu" par les électrons. Nous choisissons alors de pondérer cette moyenne sur ω_0 par la densité surfacique ns .

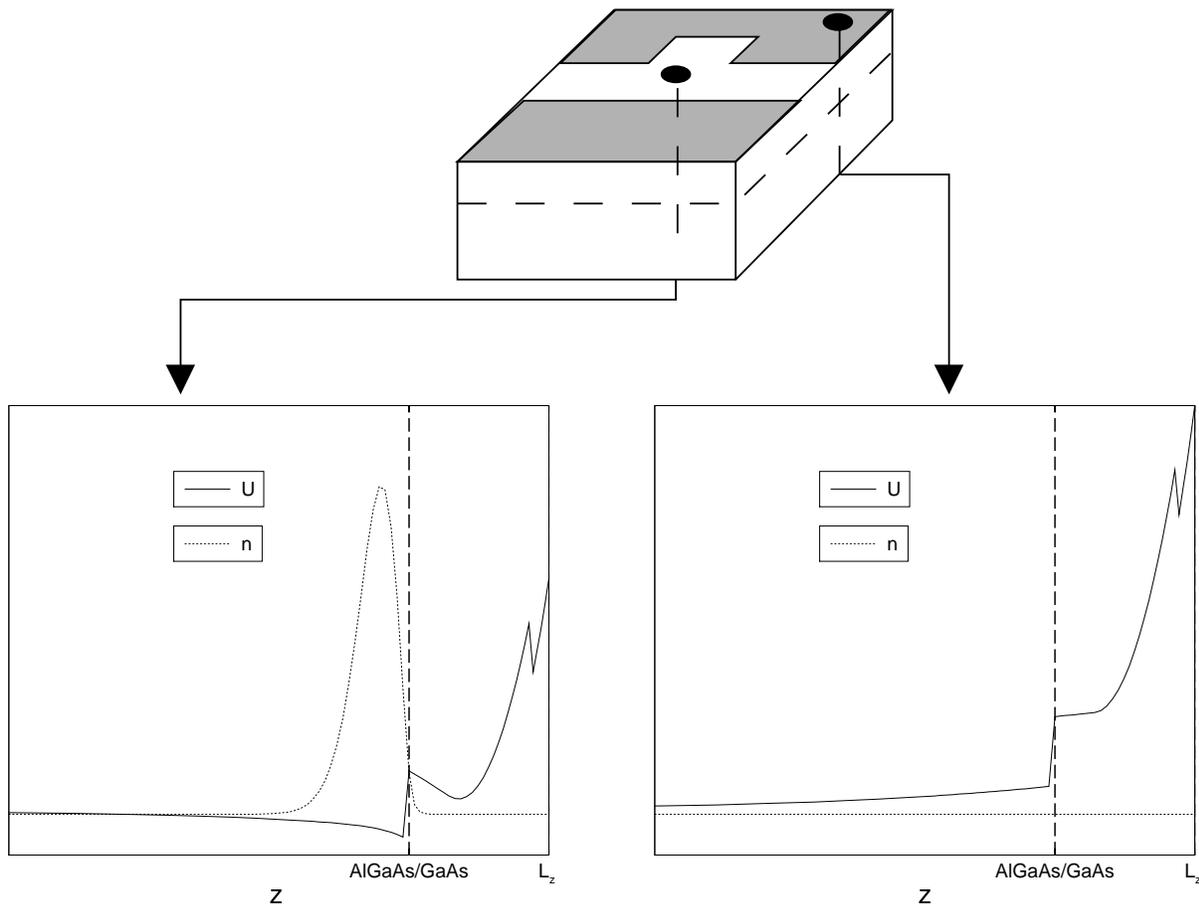


Figure 3.7: Présentation de deux types de profil de potentiel U et de densité n possibles dans la direction z à x, y fixée. Le profil de potentiel dans une zone "vue" par les électrons (à gauche) présente un puits de potentiel au niveau de l'hétérojonction AlGaAs/GaAs dans lequel les électrons sont confinés. À l'inverse, le profil de potentiel dans la zone désertée par les électrons (sous les grilles) implique une densité électronique nulle.

Remarque: le potentiel U_1 dépend du potentiel électrostatique total V . Les fonctions d'onde verticales $\phi_n(z)$ associées aux valeurs propre E_{zn} , dépendent alors aussi du potentiel électrostatique V .

Une fois le potentiel $U_1(z)$ déterminé, nous pouvons calculer les fonctions propres verticales $\phi_n(z)$ associées aux valeurs propres E_{zn} à l'aide de (3.5).

Remarque: un exemple d'un profil de potentiel vertical U_1 est donné sur la figure 3.8. Les premiers niveaux d'énergie se situent à proximité de l'interface du AlGaAs et du GaAs. Si nous supposons que les niveaux des potentiels chimiques des réservoirs se situent dans le puits de potentiel, de telle sorte que seul le premier niveau d'énergie de la fonction d'onde $\phi_1(z)$ soit occupé, alors tous les électrons sont confinés dans le puits et le transport électronique est dit bidimensionnel.

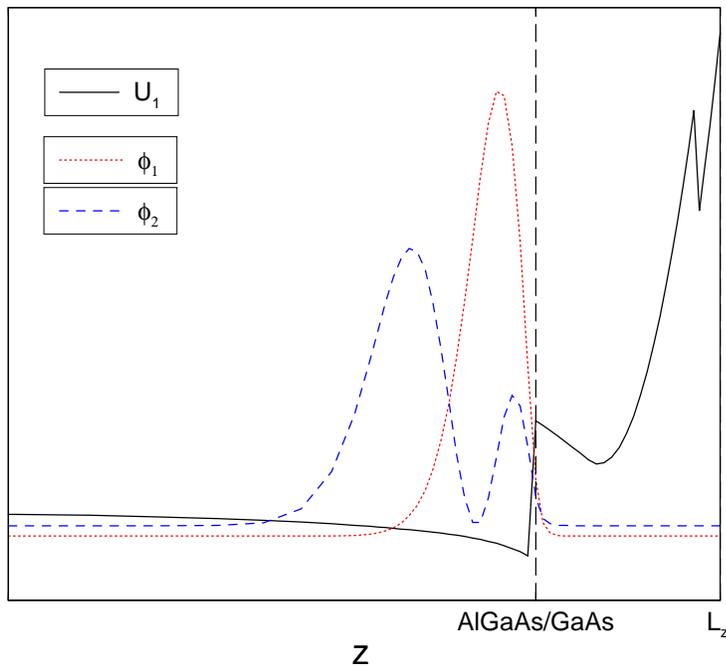


Figure 3.8: Profil du potentiel vertical U_1 et représentation de l'allure des deux premières fonctions propres verticales. Chacune des fonctions propres verticales a pour base la valeur de l'énergie propre qui lui est associée.

Conditions aux bords pour l'équation de Schrödinger 2D

Nous obtenons avec (3.7) et (3.12), les divers potentiels $\hat{U}_n(x, y)$ qui définissent les géométries bidimensionnelles dans lesquelles vont se mouvoir les électrons. La figure 3.9 illustre le plan du gaz d'électrons pour un profil de potentiel \hat{U}_n confiné en $z = z_n$.

Remarque: pour chaque état ϕ_n , la hauteur de confinement z_n du gaz d'électrons peut être déterminée de manière plus précise que la limite du plan d'interface des deux hétérostructures AlGaAs et GaAs. En effet, la hauteur z_n peut être définie comme la moyenne sur l'étendue spatiale de la fonction d'onde $\phi_n(z)$ normée

$$z_n = \int_0^{L_z} z |\phi_n(z)|^2 dz. \quad (3.13)$$

- $P_n^j(E)$, le nombre de modes transverses propagatifs

$$P_n^j(E) = \sup_p \{p \geq 1; (E - E_{zn}) > \widehat{E}_{p,n}^j\}. \quad (3.17)$$

- $a_{p,n}^j$, l'amplitude de l'onde incidente du guide j pour le mode transverse p et le mode vertical n (connue).
- $b_{p,n}^j$, l'amplitude de l'onde réfléchi-transmise ou le coefficient de l'onde évanescente, du guide j , du mode transverse p et du mode vertical n .

En appliquant la méthode QTBM, définie dans l'étude du problème modèle, nous obtenons les conditions aux bords d'ondes entrantes sur les γ_j suivantes :

$$\partial_{\eta_j} \psi_{Q3D}^n|_{\gamma_j} = \sum_{p=1}^{P_n^j(E)} ik_{p,n}^j(E) (-2a_{p,n}^j + \psi_{p,n}^j) \widehat{\chi}_{p,n}^j(\xi_j) - \sum_{p=P_n^j(E)+1}^{\infty} k_{p,n}^j(E) \psi_{p,n}^j \widehat{\chi}_{p,n}^j(\xi_j), \quad (3.18)$$

où $\psi_{p,n}^j$ est un coefficient défini par

$$\psi_{p,n}^j = \int_{\Gamma_j} \psi_{Q3D}^n \widehat{\chi}_{p,n}^j d\xi_j.$$

Remarque: dans le cas où $(E - E_{zn}) < \widehat{E}_{min} = \inf_{p,j} \widehat{E}_{p,n}^j$, le transport électronique n'est plus autorisé et il n'y a plus de somme sur les modes propagatifs dans (3.15) et (3.18). Notons que la condition $(E - E_{z1}) > 0$ est une condition nécessaire au transport bidimensionnel d'électrons.

Par analogie avec l'étude du problème modèle, nous pouvons écrire sous forme variationnelle le problème (3.8) et (3.18). L'existence et l'unicité de la solution sont alors assurées à l'aide du théorème 2.1.

Calcul de la densité électronique

Considérons une onde injectée dans le mode vertical n_0 , le guide j_0 , le mode transverse p_0 et possédant une impulsion k , et notons alors $\psi_{j_0,p_0,k}^{n_0}(x, y)$, la fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger 2D (3.8) munie des conditions aux bord entrantes (3.18) où l'on pose

$$a_{p,n}^j = \delta_{j,j_0} \delta_{p,p_0} \delta_{n,n_0}, \quad (3.19)$$

et $\phi_{n_0}(z)$, la fonction propre verticale associée à la valeur propre E_{zn_0} , solution de l'équation de Schrödinger 1D (3.5). D'après l'expression du nombre d'onde (3.16), nous pouvons écrire la relation de dispersion

$$E(j_0, p_0, n_0, k) = E_{zn_0} + \widehat{E}_{p_0,n_0}^{j_0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (3.20)$$

Nous définissons la densité électronique comme un mélange statistique d'état $\psi_{j_0, p_0, k}^{n_0} \phi_{n_0}$. On obtient alors

$$n[V](\mathbf{x}) = \sum_{n_0=1}^{\infty} |\phi_{n_0}(z)|^2 n_{2D}^{n_0}(x, y), \quad (3.21)$$

où $n_{2D}^{n_0}$ est défini comme la densité du gaz d'électrons bidimensionnel portée par le mode vertical n_0

$$n_{2D}^{n_0}(x, y) = 2 \sum_{j_0=1}^N \sum_{p_0=1}^{\infty} \int_0^{\infty} |\psi_{j_0, p_0, k}^{n_0}(x, y)|^2 f_{FD}(E(j_0, p_0, n_0, k) - \mu_{j_0}) \frac{dk}{2\pi}. \quad (3.22)$$

La densité surfacique définie en (3.11) peut encore s'écrire

$$ns[V](x, y) = \sum_{n_0=1}^{\infty} n_{2D}^{n_0}(x, y). \quad (3.23)$$

En résumé, la densité électronique et le potentiel électrostatique seront obtenus à travers la résolution d'un système non-linéaire couplé Schrödinger 1D/Schrödinger 2D/Poisson 3D. Le tableau (3.1) dresse un récapitulatif du système non-linéaire couplé associé au modèle quantique quasi-3D.

3.2.3 Conditions aux bords sur le potentiel

La densité de charge d'espace ρ s'écrit en tenant compte de la présence des donneurs ionisés N_D^+ dans la couche AlGaAs dopée uniformément, et de la densité des électrons n dans la structure. On obtient alors dans Ω_0

$$\rho(\mathbf{x}) = q(N_D^+(z) - n(\mathbf{x})). \quad (3.24)$$

Le potentiel électrostatique V présent dans le dispositif est solution de l'équation de Poisson définie dans la présentation du problème modèle en (2.2)

$$-\nabla(\epsilon_r(z)\nabla V(\mathbf{x})) = \frac{\rho(\mathbf{x})}{\epsilon_0} \quad \text{dans } \Omega_0, \quad (3.25)$$

où $\epsilon_r(z)$ représente la constante diélectrique relative aux différentes natures des couches semi-conductrices dans la direction z .

Dans notre étude, les conditions aux bords pour le potentiel électrostatique sur les bords $\partial\Omega_0$ que nous utilisons sont :

- des conditions de Neumann homogènes nulles sur la limite du substrat en Γ_B ($z = 0$). En effet, loin des grilles en surface, le champ électrique est supposé nul (condition de neutralité électrique).

Calcul de	à l'aide de	on a besoin de
$U(\mathbf{x})$	$U(\mathbf{x}) = -qV(\mathbf{x}) + E_c(z)$	$V(\mathbf{x})$
$ns(x, y)$	$ns(x, y) = \int_0^{L_z} n(\mathbf{x}) dz$	$n(\mathbf{x})$
$U_1(z)$	$U_1(z) = \frac{\int_{\omega_0} U(\mathbf{x})ns(x, y) dx dy}{\int_{\omega_0} ns[V](x, y) dx dy}$	$U(\mathbf{x})$ et $ns(x, y)$
$\{\phi_n(z)\}, \{E_{zn}\}$	Equation de Schrödinger 1D fermée sur $]0, L_z[$	$U_1(z)$
$\{\hat{U}_n(x, y)\}$	$\hat{U}_n(x, y) = \int_0^{L_z} (U(\mathbf{x}) - U_1(z)) \phi_n(z) ^2 dz$	$\{\phi_n(z)\}, U_1(z)$ et $U(\mathbf{x})$
$\{\psi_{Q3D}^n(x, y)\}$	Equation de Schrödinger 2D ouverte sur ω_0	$\{\hat{U}_n(x, y)\}, \{E_{zn}\}$
$n(\mathbf{x})$	Expression (3.21) et (3.22)	$\{\psi_{Q3D}^n(x, y)\}, \{\phi_n(z)\}$
$V(\mathbf{x})$	Equation de Poisson (+ C.B. à définir)	$n(\mathbf{x})$

Tableau 3.1: Récapitulatif du système non-linéaire couplé relatif au modèle quasi-3D.

- des conditions de Dirichlet sur la surface du composant en Γ_T ($z = L_z$). Le potentiel à la surface est supposé être accroché à la valeur fixe $V_S = -0.7V$ [33]. De plus, nous ajouterons au potentiel de surface et uniquement dans les zones Γ_{TG} se situant sous les grilles Shottky, le potentiel appliqué sur ces grilles, à savoir V_G .

Remarque: il existe d'autres manières de considérer les conditions aux bords sur les surfaces dites exposées (zones sans les grilles) : citons par exemple des modèles faisant apparaître des charges fixes en surfaces ou la prise en compte d'un domaine diélectrique sur le semi-conducteur. Tous ces modèles comparés dans le cas du fil quantique dans [24] donnent des résultats qui sont très proches les uns des autres. Dans notre étude, nous avons fait le choix de l'approche simplifiée des conditions aux bords de Dirichlet.

- des conditions de Neumann partout ailleurs à cause de l'invariance par translation du potentiel en ces limites. Rappelons que sur les frontières guides d'onde-zone active Γ_j ($j = 1, \dots, N$) le système est supposé se trouver dans un état de quasi-équilibre et que le potentiel ne dépend pas de la composante longitudinale des guides d'onde.

Remarque: dans le cas où le dispositif possède des guides symétriques deux à deux (comme dans le cas du stub ou du coupleur quantique pour les guides 1, 2 et 3, 4), nous pourrions aussi utiliser des conditions aux bords de type périodique sur les frontières guides d'onde-zone active Γ_j . Une autre manière de procéder serait de considérer des conditions aux bords de Dirichlet qui dérivent de l'hypothèse de quasi-équilibre sur ces frontières. Dans ce cas, nous devrions aussi tenir compte de la décomposition du potentiel (3.3). Nous serions alors en mesure d'obtenir des conditions sur les bords $\Gamma_j = \gamma_j \times]0, L_z[$ à l'aide d'un modèle spécifique quasi-2D sur ces bords. Ce modèle n'a pas été développé dans le cadre de cette thèse. Par ailleurs, une tension de polarisation v_j appliquée dans le guide j , apparaît de manière explicite dans les conditions aux bords du potentiel sur Γ_j quand celles-ci sont du type périodique ou Dirichlet. Elle est implicite dans le cas où nous choisissons des conditions de type Neumann. En effet, dans notre modèle, la tension de polarisation n'apparaît que dans l'expression du quasi-niveau de Fermi nécessaire au calcul de la densité électronique.

En résumé, les conditions aux bords du potentiel électrostatique sont définies par

$$\left\{ \begin{array}{ll} (\nabla V \cdot \mathbf{n}) = 0 & \text{sur } \Gamma_j \ (j = 1, \dots, N), \\ (\nabla V \cdot \mathbf{n}) = 0 & \text{sur } \Gamma_F \text{ et } \Gamma_B, \\ V(\mathbf{x}) = V_S & \text{sur } \Gamma_{T_0}, \\ V(\mathbf{x}) = V_S + V_G & \text{sur } \Gamma_{TG}, \end{array} \right. \quad (3.26)$$

avec \mathbf{n} normale extérieure au domaine Ω_0 .

Remarque: par analogie avec les conditions aux bords pour le potentiel définies en (2.4) dans le cadre du problème modèle, nous pouvons constater que

$$\Gamma_{0_N} = \Gamma_F \cup \Gamma_B \quad \text{et} \quad \Gamma_{0_D} = \Gamma_T.$$

3.2.4 Calcul du courant et de la conductance

Nous voulons définir l'expression du courant et de la conductance pour un potentiel électrostatique donné. Remarquons que dans le cas du modèle de transport 3D, les expressions des coefficients de transmission, de l'intensité et de la conductance établies au chapitre 2 du problème modèle restent inchangées.

Dans le cas du modèle de transport quasi-3D, la fonction d'onde dans le guide j peut s'écrire d'après (3.9)

$$\Psi_{Q3D}(\eta_j, \xi_j, z) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_{Q3D}^n(\eta_j, \xi_j) \phi_n(z), \quad (3.27)$$

où $\psi_{Q3D}^n(\eta_j, \xi_j)$ a été défini en (3.15). On pourra alors vérifier que tous les résultats relatifs aux coefficients de transmission, de réflexion, aux calculs d'intensité et de conductance, obtenus dans le chapitre 2 dans la description du transport quantique électronique du problème modèle, restent inchangés sous les conditions suivantes :

- les indices m_0 du mode transverse d'injection dans le cas multidimensionnel du problème modèle sont alors remplacés par les indices p_0, n_0 relatifs à une onde injectée dans le mode transverse p_0 et le mode vertical n_0 .
- les indices m sont aussi remplacés par les indices p, n et les sommations sur les modes propagatifs m deviennent

$$\sum_{m=1}^{M^j} \rightarrow \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{p=1}^{P_n^j}.$$

- les fonctions d'onde transverses χ_m^j associées aux valeurs propres E_m^j , sont remplacées par les fonctions propres transverses $\widehat{\chi}_{p,n}^j$ associées aux valeurs propres $\widehat{E}_{p,n}^j$.

Remarque: dans le cas particulier où seul le mode vertical $n = n_0$ peut être occupé, on obtient

$$\Psi_{Q3D}(\eta_j, \xi_j, z) = \psi_{Q3D}^{n_0}(\eta_j, \xi_j) \phi_{n_0}(z).$$

Dans ce cas, nous ne tiendrons plus compte de l'indice n . Les indices m_0 et m des modes transverses dans le cas multidimensionnel du problème modèle sont alors remplacés respectivement par les indices p_0 et p , et M^j par $P_{n_0}^j$.

3.3 Etude sur les ordres d'approximation dans un cadre simplifié

La dérivation du modèle quasi-3D à partir du modèle 3D suppose que le potentiel $u(\mathbf{x})$ est une fonction lentement variable dans la direction z à l'échelle des fonctions propres verticales $\phi_n(z)$. Il serait aussi possible de dériver un modèle de transport plus simplifié que le modèle quasi-3D en posant tout naturellement $u = 0$. Dans ce cas, on note ψ_0^n les fonctions d'onde solutions de l'équation de Schrödinger 2D suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \psi_0^n(x, y) + U_2(x, y) \psi_0^n(x, y) = (E - E_{z_n}) \psi_0^n(x, y) \quad \text{dans } \omega_0, \\ \psi_0^n(x, y) = 0 \quad \text{sur } \gamma_{\text{F}}, \\ \text{avec les conditions d'onde entrantes sur les } \gamma_j, (j = 1, \dots, N). \end{array} \right. \quad (3.28)$$

Dans le cas du modèle $u = 0$, le potentiel bidimensionnel U_2 est indépendant du mode vertical n . Sur les frontières guide d'onde-zone active γ_j , le potentiel U_2 dépend uniquement de la direction transverse ξ_j du guide j (ce qui découle directement du fait que U possède la même propriété). Le problème (3.28) peut, par conséquent, encore s'interpréter comme le problème modèle défini en (2.6) pour un cas bidimensionnel. L'existence et l'unicité de la solution sont alors assurées à l'aide du théorème 2.1 et les solutions du problème tridimensionnel peuvent s'écrire

$$\Psi_0(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_0^n(x, y) \phi_n(z). \quad (3.29)$$

Remarque:

- à la limite $u \rightarrow 0$, on note $\widehat{U}_n(x, y) \rightarrow U_2(x, y) \forall n$, ce qui implique que la fonction d'onde ψ_0^n (i.e. Ψ_0) est la limite quand $u \rightarrow 0$ de la fonction d'onde ψ_{Q3D}^n (i.e. Ψ_{Q3D}).
- contrairement au modèle $u = 0$, dans le modèle quasi-3D, le potentiel bidimensionnel dépend du mode vertical n .
- soit $\widetilde{\chi}_p^j$, \widetilde{E}_p^j et χ_m^j , E_m^j , les fonctions propres et les valeurs propres qui sont respectivement solutions de l'équation Schrödinger 1D transverse sur γ_j associée au modèle $u = 0$, et solutions de l'équation Schrödinger 2D transverse sur Γ_j associée au modèle 3D (par ailleurs, on avait noté $\widehat{\chi}_p^j$, \widehat{E}_p^j les fonctions propres et les valeurs propres qui sont respectivement solutions de l'équation Schrödinger 1D transverse sur γ_j associée au modèle quasi-3D). On peut alors écrire

$$\chi_m^j(\xi_j, z) = \widetilde{\chi}_p^j(\xi_j) \phi_n(z) \quad \text{et} \quad E_m^j = \widetilde{E}_p^j + E_{z_n},$$

où l'indice m représente l'indice du mode transverse sur Γ_j (domaine bidimensionnel), l'indice p représente l'indice du mode transverse sur γ_j (domaine unidimensionnel), et l'indice n représente l'indice du mode vertical dans la direction z .

Dans cette section, nous proposons d'étudier l'ordre d'approximation des modèles dits dérivés en fonction du modèle 3D pour un potentiel U quelconque (non auto-cohérent) et dans un cadre simplifié. En effet, afin de faciliter notre étude mathématique, nous supposons que, pour tous les modèles, le potentiel u est nul dans les guides (donc sur les bords Γ_j , $1 \leq j \leq N$). Nous obtenons alors les conditions d'onde entrantes sur les bords γ_j , $1 \leq j \leq N$, du modèle $u = 0$, que nous appliquerons à tous les modèles d'étude.

3.3.1 Approximations sur les fonctions d'onde

Dans la section précédente, nous avons constaté que ψ_0^n , ψ_{3D}^n et ψ_{Q3D}^n , vérifient la même équation (3.6) à des termes d'ordre 1 en u près. Par conséquent, si u est un potentiel petit, tel que

$$\|u\| \ll 1, \quad (3.30)$$

nous pouvons alors montrer que ψ_0^n , ψ_{3D}^n et ψ_{Q3D}^n , sont égaux entre eux au premier ordre en $\|u\|$. Dans ce cas, on obtient

$$\psi_0^n = \psi_{3D}^n + O(\|u\|), \quad (3.31a)$$

$$\psi_{Q3D}^n = \psi_{3D}^n + O(\|u\|). \quad (3.31b)$$

Proposition 3.1 *Soit une onde injectée sur un unique mode vertical n_0 , un guide j_0 , un mode transverse p_0 avec une énergie E , telle que*

$$E(j_0, p_0, n_0, k) = E_{z_{n_0}} + \tilde{E}_{p_0, n_0}^{j_0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (3.32)$$

on obtient alors formellement les relations suivantes :

$$\psi_{3D}^n = O(\|u\|), \quad n \neq n_0, \quad (3.33a)$$

$$\psi_0^{n_0} = \psi_{3D}^{n_0} + O(\|u\|), \quad (3.33b)$$

$$\psi_{Q3D}^{n_0} = \psi_{3D}^{n_0} + O(\|u\|^2). \quad (3.33c)$$

Preuve: on note $\psi_0^{n_0}(x, y)$ et $\psi_{Q3D}^{n_0}(x, y)$ respectivement, les solutions uniques des problèmes bidimensionnels (3.28) et (3.8) (ces équations sont similaires à une équation de Schrödinger du problème modèle dans le cas 2D). Les problèmes tridimensionnels qui sont définis dans Ω_0 , pour le modèle $u = 0$ et le modèle quasi-3D, admettent aussi des solutions uniques puisque ces équations sont similaires à une équation de Schrödinger du problème modèle dans le cas 3D. On peut alors vérifier que les fonctions $\psi_0^{n_0}(x, y)\phi_{n_0}(z)$ et $\psi_{Q3D}^{n_0}(x, y)\phi_{n_0}(z)$, sont respectivement solutions de ces deux problèmes tridimensionnels

et par conséquent, elles en sont aussi des solutions uniques. D'après (3.29) et (3.9), on peut écrire

$$\Psi_0(\mathbf{x}) = \psi_0^{n_0}(x, y)\phi_{n_0}(z) + \sum_{n \neq n_0} \psi_0^n(x, y)\phi_n(z),$$

et

$$\Psi_{Q3D}(\mathbf{x}) = \psi_{Q3D}^{n_0}(x, y)\phi_{n_0}(z) + \sum_{n \neq n_0} \psi_{Q3D}^n(x, y)\phi_n(z),$$

Par conséquent

$$\psi_0^n = 0, \quad n \neq n_0, \quad (3.34a)$$

$$\psi_{Q3D}^n = 0, \quad n \neq n_0. \quad (3.34b)$$

En d'autres termes, les fonctions Ψ_0 et Ψ_{Q3D} sont "portées" uniquement par le mode vertical n_0 . Ce qui n'est pas le cas de Ψ_{3D} puisque l'équation bidimensionnelle (3.6) sur ψ_{3D}^n relative au modèle 3D, comporte des termes extra-diagonaux pour $n \neq n_0$. A l'aide des relations (3.31), on trouve finalement que

$$\psi_{3D}^n = O(\|u\|), \quad n \neq n_0.$$

On cherche maintenant à obtenir l'ordre d'approximation en $\|u\|$ des fonctions $\psi_0^{n_0}$ et $\psi_{Q3D}^{n_0}$ en fonction de $\psi_{3D}^{n_0}$. Si l'on soustrait les équations de Schrödinger bidimensionnelles (3.28) et (3.8) à (3.6), on obtient respectivement les équations (rappelons que les conditions aux bords sont supposées homogènes)

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta h_1 + U_2 h_1 - (E - E_{z n_0})h_1 = - \sum_{n'} \psi_{3D}^{n'} \left(\int_0^{Lz} \phi_{n_0}(z) u(\mathbf{x}) \phi_{n'}(z) dz \right), \quad (3.35a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta h_2 + \widehat{U}_{n_0} h_2 - (E - E_{z n_0})h_2 = - \sum_{n' \neq n_0} \psi_{3D}^{n'} \left(\int_0^{Lz} \phi_{n_0}(z) u(\mathbf{x}) \phi_{n'}(z) dz \right), \quad (3.35b)$$

où l'on a posé

$$h_1 = \psi_{3D}^{n_0} - \psi_0^{n_0}, \quad (3.36a)$$

$$h_2 = \psi_{3D}^{n_0} - \psi_{Q3D}^{n_0}. \quad (3.36b)$$

Pour $n' \neq n_0$, dans le second terme des expressions (3.35a) et (3.35b), nous obtenons d'après (3.33a) des termes du second ordre en $\|u\|$. Des termes du premier ordre en $\|u\|$ apparaissent aussi pour $n' = n_0$ uniquement dans le second terme de l'expression (3.35a). Ceci implique que h_1 est du premier ordre en $\|u\|$, et que h_2 est du second ordre en $\|u\|$; avec (3.36a) et (3.36b) on obtient

$$\psi_0^{n_0} = \psi_{3D}^{n_0} + O(\|u\|) \quad \text{et} \quad \psi_{Q3D}^{n_0} = \psi_{3D}^{n_0} + O(\|u\|^2).$$

□

3.3.2 Approximations sur la densité et sur le courant

D'une manière générale, pour tous les modèles, la densité électronique peut être définie d'après (2.5) comme une somme sur toutes les configurations d'état d'énergie E . On note alors

$$n(\mathbf{x}) = 2 \sum_{n_0=1}^{\infty} \sum_{j_0=1}^N \sum_{p_0=1}^{\infty} \int_0^{\infty} |\Psi_{j_0, p_0, n_0, k}(\mathbf{x})|^2 f_{FD}(E(j_0, p_0, n_0, k) - \mu_{j_0}) \frac{dk}{2\pi}, \quad (3.37)$$

où quel que soit le modèle, $\Psi_{j_0, p_0, n_0, k}(\mathbf{x})$ est la fonction d'onde associée à une énergie E définie en (3.32). Afin de simplifier les notations, on écrira

$$n \sim |\Psi(\mathbf{x})|^2. \quad (3.38)$$

Remarque: plus généralement, nous introduisons la notation suivante :

$$a \sim S, \quad (3.39)$$

afin de simplifier l'expression

$$a(\mathbf{x}) = 2 \sum_{n_0=1}^{\infty} \sum_{j_0=1}^N \sum_{m_0=1}^{\infty} \int_0^{\infty} S_{j_0, p_0, n_0, k}(\mathbf{x}) f_{FD}(E(j_0, p_0, n_0, k) - \mu_{j_0}) \frac{dk}{2\pi}. \quad (3.40)$$

Nous obtenons alors avec (3.4)

$$n \sim \sum_{n=1}^{\infty} |\psi^n(x, y)|^2 |\phi_n(z)|^2 + 2\mathcal{R}e\left(\sum_n \sum_{n' > n} \psi^n(x, y) \psi^{n'}(x, y) \phi_n(z) \phi_{n'}(z)\right), \quad (3.41)$$

où $\mathcal{R}e\{a\}$ représente la partie imaginaire de a . La densité surfacique a été définie en (3.11). Comme $\{\phi_n\}_{n \in \mathbb{N}^*}$ forme une base orthonormée de $L^2(]0, L_z[)$, nous obtenons alors

$$ns(x, y) = ns(x, y) = \int_0^{L_z} n(\mathbf{x}) dz \sim \sum_{n=1}^{\infty} |\psi^n(x, y)|^2. \quad (3.42)$$

Proposition 3.2 *Les densités électroniques pour les différents modèles, le modèle 3D, le modèle $u = 0$ et le modèle quasi-3D, peuvent s'écrire respectivement*

$$n_{3D} \sim |\Psi_{3D}|^2, \quad n_0 \sim |\Psi_0|^2, \quad \text{et} \quad n_{Q3D} \sim |\Psi_{Q3D}|^2 \quad (3.43)$$

En utilisant les résultats de la proposition 3.1, nous obtenons alors formellement les relations suivantes :

$$n_0 = n_{3D} + O(\|u\|), \quad (3.44a)$$

$$n_{Q3D} = n_{3D} + O(\|u\|), \quad (3.44b)$$

et

$$ns_0 = ns_{3D} + O(\|u\|), \quad (3.45a)$$

$$ns_{Q3D} = ns_{3D} + O(\|u\|^2). \quad (3.45b)$$

Preuve: les densités électroniques des différents modèles peuvent s'écrire à l'aide de (3.41) et (3.34)

$$n_{3D} \sim |\psi_{3D}^{n_0}|^2 |\phi_{n_0}|^2 + \sum_{n' \neq n_0} |\psi_{3D}^{n'}|^2 |\phi_{n'}|^2 + 2\mathcal{R}e \left(\sum_n \sum_{n' > n} \psi_{3D}^n \psi_{3D}^{n'} \phi_n \phi_{n'} \right), \quad (3.46a)$$

$$n_{Q3D} \sim |\psi_{Q3D}^{n_0}|^2 |\phi_{n_0}|^2, \quad (3.46b)$$

$$n_0 \sim |\psi_0^{n_0}|^2 |\phi_{n_0}|^2. \quad (3.46c)$$

En remplaçant les fonctions ψ_{3D}^n dans (3.46a) par les expressions (3.33a) et (3.33b), on trouve

$$n_0 = n_{3D} + O(\|u\|).$$

En remplaçant les expressions (3.33a) et (3.33c) dans (3.46a), des termes du premier ordre en $\|u\|$ apparaissent inévitablement dans le terme d'interférence (terme partie réelle) pour $n = n_0$ ou $n' = n_0$. On obtient finalement toujours des termes du premier ordre pour la densité

$$n_{Q3D} = n_{3D} + O(\|u\|).$$

Pour les densités surfaciques, nous avons d'après (3.42)

$$ns_{3D} \sim |\psi_{3D}^{n_0}|^2 + \sum_{n' \neq n_0} |\psi_{3D}^{n'}|^2, \quad (3.47a)$$

$$ns_{Q3D} \sim |\psi_{Q3D}^{n_0}|^2, \quad (3.47b)$$

$$ns_0 \sim |\psi_0^{n_0}|^2. \quad (3.47c)$$

Comme précédemment, si l'on remplace la fonction ψ_{3D}^n par les expressions (3.33a) et (3.33b), puis (3.33a) et (3.33c), on trouve respectivement

$$ns_0 = ns_{3D} + O(\|u\|) \quad \text{et} \quad ns_{Q3D} = ns_{3D} + O(\|u\|^2).$$

□

D'une manière générale pour tous les modèles, l'intensité dans les guides j peut s'écrire à l'aide des résultats (2.42), (2.43) et (2.44) établis dans le chapitre 2. A l'aide des notations introduites dans (3.39) et (3.40), on obtient alors

$$I_j \sim \int_{\Gamma_j} \mathcal{I}m \left\{ \overline{\Psi(\mathbf{x})} \frac{\partial \Psi(\mathbf{x})}{\partial \eta_j} \Big|_{\Gamma_j} \right\} d\Gamma_j. \quad (3.48)$$

Notons que dans notre cas

$$\int_{\Gamma_j} \mathcal{I}m \left\{ \overline{\Psi}(\mathbf{x}) \frac{\partial \Psi(\mathbf{x})}{\partial \eta_j} \Big|_{\Gamma_j} \right\} d\Gamma_j = \int_0^{L_z} \int_{\gamma_j} \mathcal{I}m \left\{ \overline{\Psi}(\mathbf{x}) \frac{\partial \Psi(\mathbf{x})}{\partial \eta_j} \Big|_{\Gamma_j} \right\} d\xi_j dz. \quad (3.49)$$

De plus, on obtient à l'aide de (3.4)

$$\overline{\Psi}(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} \overline{\psi}^n(x, y) \phi_n(z), \quad (3.50)$$

et puisque la coordonnée locale η_j du guide j (coordonnée longitudinale du guide) appartient au domaine bidimensionnel ω_0

$$\frac{\partial \Psi(\mathbf{x})}{\partial \eta_j} \Big|_{\Gamma_j} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\partial \psi^n(x, y)}{\partial \eta_j} \Big|_{\gamma_j} \phi_n(z). \quad (3.51)$$

Par conséquent, avec (3.49), (3.50) et (3.51), on obtient (puisque $\{\phi_n\}_{n \in \mathbb{N}^*}$ forme une base orthonormée de $L^2(]0, L_z[)$)

$$I_j \sim \sum_{n=1}^{\infty} \int_{\gamma_j} \mathcal{I}m \left\{ \overline{\psi}^n(x, y) \frac{\partial \psi^n(x, y)}{\partial \eta_j} \Big|_{\gamma_j} \right\} d\xi_j. \quad (3.52)$$

Proposition 3.3 *Formellement, les ordres d'approximation sur les intensités dans les guides j ($j = 1, \dots, N$) pour les deux modèles dérivés, le modèle $u = 0$ et le modèle quasi-3D, sont respectivement donnés par*

$$I_{j_0} = I_{j_{3D}} + O(\|u\|), \quad (3.53a)$$

$$I_{j_{Q3D}} = I_{j_{3D}} + O(\|u\|^2). \quad (3.53b)$$

Preuve: les intensités dans les guides peuvent s'écrire pour les différents modèles à l'aide de (3.52) et (3.34)

$$\begin{aligned} I_{j_{3D}} &\sim \int_{\gamma_j} \mathcal{I}m \left\{ \overline{\psi}_{3D}^{n_0}(x, y) \frac{\partial \psi_{3D}^{n_0}(x, y)}{\partial \eta_j} \Big|_{\gamma_j} \right\} d\xi_j \\ &\quad + \sum_{n' \neq n_0} \int_{\gamma_j} \mathcal{I}m \left\{ \overline{\psi}_{3D}^{n'}(x, y) \frac{\partial \psi_{3D}^{n'}(x, y)}{\partial \eta_j} \Big|_{\gamma_j} \right\} d\xi_j, \end{aligned} \quad (3.54a)$$

$$I_{j_{Q3D}} \sim \int_{\gamma_j} \mathcal{I}m \left\{ \overline{\psi}_{Q3D}^{n_0}(x, y) \frac{\partial \psi_{Q3D}^{n_0}(x, y)}{\partial \eta_j} \Big|_{\gamma_j} \right\} d\xi_j, \quad (3.54b)$$

$$I_{j_0} \sim \int_{\gamma_j} \mathcal{I}m \left\{ \overline{\psi}_0^{n_0}(x, y) \frac{\partial \psi_0^{n_0}(x, y)}{\partial \eta_j} \Big|_{\gamma_j} \right\} d\xi_j. \quad (3.54c)$$

En remplaçant les fonctions ψ_{3D}^n dans (3.54a) par les expressions (3.33a) et (3.33b), on trouve

$$I_{j_0} = I_{j_{3D}} + O(\|u\|).$$

En remplaçant les expressions (3.33a) et (3.33c) dans (3.54a), seuls des termes du second ordre en $\|u\|$ apparaissent et on obtient finalement

$$I_{j_{Q3D}} = I_{j_{3D}} + O(\|u\|^2).$$

□

3.3.3 Commentaires

Les résultats des propositions 3.1, 3.2 et 3.3, ainsi que les résultats (3.31), obtenus à la condition (3.30) que le potentiel u soit petit, restent valables à la condition que le potentiel u soit uniquement petit à l'échelle des fonctions propres $\phi_n(z)$. En effet, nous pouvons montrer que la condition selon laquelle le potentiel u est petit partout n'est plus nécessaire : c'est le terme $(\int_0^{L_z} \phi_{n'}(z)u(\mathbf{x})\phi_n(z) dz)$ qui doit être petit, car le potentiel u peut être grand dans les régions ne se situant pas au voisinage du gaz d'électrons. Précisons maintenant que ces résultats peuvent aussi être obtenus uniquement avec la condition que le potentiel u soit lentement variable dans la direction z au voisinage du gaz d'électrons (hypothèse 3.1 qui nous a permis de définir le modèle quasi-3D). Le potentiel u peut alors se décomposer arbitrairement comme

$$u(x, y, z) = u(x, y, z_0) + \hat{u}(x, y, z), \quad (3.55)$$

z_0 étant une estimation de l'endroit où se situe le plan du gaz d'électrons, et par conséquent \hat{u} un potentiel petit à l'échelle des fonctions propres $\phi_n(z)$ tel que \hat{u} soit nul en z_0 . À l'aide de la décomposition (3.55) que l'on applique aux équations (3.35a) et (3.35b), nous trouvons alors que le potentiel bidimensionnel $u(x, y, z_0)$ peut s'ajouter respectivement aux potentiels U_2 et \hat{U} . Il reste alors un potentiel \hat{u} petit, à l'échelle des fonctions propres $\phi_n(z)$, qui se substitue à u dans les expressions et pour lequel nous avons précisé plus haut que tous les résultats qui découlent de la condition que u soit petit, restent valables.

En résumé, les résultats de la proposition 3.2 nous montrent que l'ordre d'approximation sur la densité électronique pour les deux modèles dérivés du modèle 3D est le même. Comme le gaz d'électrons est principalement un gaz bidimensionnel, nous avons aussi étudié l'ordre d'approximation de la densité surfacique. Celle-ci nous a permis d'obtenir avec le modèle quasi-3D un ordre d'approximation supérieur au simple modèle $u = 0$. Les résultats de la proposition 3.3 nous montrent aussi que l'ordre d'approximation sur l'intensité pour chacun des guides est plus élevé quand on considère le modèle quasi-3D par rapport au modèle $u = 0$. En conséquence, l'étude des ordres d'approximation des modèles dérivés par rapport au modèle 3D dans un cadre simplifié, et pour un potentiel quelconque donné, nous montre que le choix du modèle quasi-3D pour le calcul des fonctions d'onde est préférable à celui du modèle $u = 0$.

3.4 Récapitulatif

Dans cette section, nous faisons l'inventaire des différents modèles que nous allons utiliser pour le calcul de la densité $n[V]$. Nous distinguerons alors les différents systèmes non-linéaires couplés du type

$$\begin{cases} -\nabla(\epsilon_r(z)\nabla V(\mathbf{x})) + \frac{q}{\epsilon_0}n[V](\mathbf{x}) = \frac{q}{\epsilon_0}N_D^+(\mathbf{x}) & \text{dans } \Omega_0, \\ \text{avec les conditions aux bords (3.26),} \end{cases} \quad (3.56)$$

lesquels seront résolus numériquement dans le chapitre 4.

1. Le modèle quantique 3D

Etudier le modèle de transport quantique 3D revient à appliquer le problème modèle défini au chapitre 2 de la première partie, pour un cas tridimensionnel. La densité électronique est alors une fonctionnelle de V non locale en \mathbf{x} . L'expression de la densité a été définie en (2.28) par

$$n[V](\mathbf{x}) = 2 \sum_{j_0=1}^N \sum_{m_0=1}^{\infty} \int_0^{\infty} |\Psi_{j_0, m_0, k}|^2 f_{FD}(E(j_0, m_0, k) - \mu_{j_0}) \frac{dk}{2\pi} \quad (3.57)$$

$$E(j_0, m_0, k) = E_{m_0}^{j_0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}.$$

où les fonctions d'onde, $\Psi_{j_0, m_0, k}$, sont solutions de l'équation de Schrödinger 3D dans Ω_0 , que nous avons défini dans le cadre du problème modèle en (2.6). Finalement, rappelons que le théorème 2.3 assure l'existence des solutions du système Schrödinger/Poisson.

En ce qui concerne les conditions aux bords sur le potentiel (3.26), on peut noter que, dans le cas du modèle 3D (contrairement au cas du modèle quasi-3D), nous avons aussi développé un modèle de quasi-équilibre 2D sur les bords Γ_j . Nous obtenons alors des conditions aux bords de type Dirichlet sur le potentiel, où nous noterons V_j le potentiel sur le bord Γ_j . Ces conditions de quasi-équilibre sur les bords associées au modèle 3D sont présentées en annexe A.

2. Le modèle semi-classique 3D

Au chapitre 2, nous avons aussi défini l'approche semi-classique du calcul de la densité via l'approximation de Thomas-Fermi à l'équilibre en (2.30). Dans ces conditions, la densité électronique est une fonctionnelle de V locale en \mathbf{x} , et dans le cas tridimensionnel, on obtient

$$n[V(\mathbf{x})] = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \left(\frac{m^*}{\beta \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} F_{1/2}(\beta(\mu - U(\mathbf{x}))), \quad (3.58)$$

où $F_{1/2}(\eta_f)$ est l'intégrale de Fermi-Dirac telle que

$$F_{1/2}(\eta_f) = \int_0^{\infty} \frac{\eta^{\frac{1}{2}}}{1 + \exp(\eta - \eta_f)} d\eta. \quad (3.59)$$

Rappelons que le théorème 2.2 assure l'existence et l'unicité des solutions du système Thomas-Fermi/Poisson.

3. Le modèle quantique quasi-3D

Dans le cas du modèle quantique quasi-3D, la fonctionnelle densité est définie en (3.21) et (3.22). L'analyse mathématique de ce problème n'ayant pas été traité dans le cadre de cette thèse, rappelons toutefois que le modèle quasi-3D s'avère être une "bonne" approximation du modèle quantique 3D dans un cadre simplifié (voir étude sur les ordres d'approximation).

4. Le modèle hybride quasi-3D

On peut choisir d'effectuer le calcul de la densité bidimensionnelle en (3.21) par une approche semi-classique de type Thomas-Fermi. Par analogie avec le calcul de la densité semi-classique tridimensionnelle définie dans le cadre du problème modèle, on peut écrire avec (2.30) la densité semi-classique du gaz d'électrons bidimensionnel à l'équilibre

$$n_{2D}^{n_0}(x, y) = 2 \int_{\mathbb{R}^2} f_{FD}(E(\hat{U}_{n_0}, \mathbf{k}) - \mu) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}, \quad (3.60)$$

avec l'hypothèse

$$E - E_{zn_0} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \hat{U}_{n_0}(x, y). \quad (3.61)$$

En utilisant les coordonnées polaires sur (3.60) et l'équation de dispersion (3.61), on trouve finalement

$$n_{2D}^{n_0}(x, y) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2 \beta} \ln \left\{ 1 + \exp(\beta(\mu - E_{zn_0} - \hat{U}_{n_0})) \right\}. \quad (3.62)$$

Ce modèle, dit hybride, est alors défini par le système non-linéaire couplé Schrödinger 1D / Thomas-Fermi 2D / Poisson à l'équilibre (les potentiels chimiques de tous les réservoirs étant égaux à μ).

Remarque: contrairement au modèle semi-classique Thomas-Fermi 3D défini en (3.58), le modèle hybride prend en compte les effets quantiques de confinement suivant z . On espère ainsi obtenir une meilleure approximation pour le profil de potentiel dans la nanostructure. Ce potentiel pourra être utilisé comme potentiel de départ dans la résolution auto-cohérente du modèle de transport quantique quasi-3D (à l'équilibre). Par conséquent, l'analyse mathématique de ce problème uniquement destiné à initialiser l'approche quantique, n'a pas été traitée dans le cadre de cette thèse. Par ailleurs, loin de la zone active (c'est à dire loin du lieu où peuvent apparaître les interférences quantiques), nous nous attendons à obtenir dans les guides d'onde, et à l'extrémité de la géométrie d'étude, un potentiel et une densité électronique du même ordre de grandeur pour les deux modèles hybride et quantique. A la différence près qu'il existe une quantification en énergie dans la direction transverse des guides dans le cas quantique.

Le tableau (3.4) dresse un récapitulatif des systèmes non-linéaires couplés associés aux différents modèles physiques présentés.

	Modèle 3D	Modèle quasi-3D
$\mu_j = \mu$ (à l'équilibre)	Semi-classique Thomas-Fermi 3D Poisson 3D	Hybride Schrödinger 1D Thomas-Fermi 2D Poisson 3D
$\mu_j = \mu - qv_j$ (hors équilibre)	Quantique Schrödinger 3D Poisson 3D	Quantique Schrödinger 1D Schrödinger 2D Poisson 3D

Tableau 3.2: Récapitulatif des systèmes non-linéaires couplés relatifs aux différents modèles physiques.

Chapitre 4

Etude numérique de quelques dispositifs AlGaAs/GaAs

Sommaire

4.1	Les différentes équations à résoudre	86
4.1.1	Rappel des équations	86
4.1.2	Choix des différents maillages	89
4.1.3	Discrétisation du problème	91
4.2	Mise en oeuvre numérique	103
4.2.1	Organigramme général	103
4.2.2	Présentation du code "NESSIE"	111
4.3	Résultats numériques	113
4.3.1	Le stub électronique	114
4.3.2	Le coupleur quantique	129

4.1 Les différentes équations à résoudre

Dans cette section, nous allons montrer qu'il existe seulement trois types d'équations qui interviennent dans la résolution des systèmes couplés. Nous établirons les formulations variationnelles de ces équations et nous montrerons l'unicité des solutions. Nous effectuerons ensuite la discrétisation de ces problèmes types sur différents domaines d'étude à l'aide de la méthode des éléments finis [32, 76]. Rappelons que les domaines d'étude ouverts bidimensionnels et tridimensionnels sont notés respectivement ω_0 et Ω_0 . On écrit alors la relation $\Omega_0 = \omega_0 \times]0, L_z[$, où le domaine d'étude suivant z , $]0, L_z[$, est un ouvert borné. Les bords Γ_j représentent les frontières bidimensionnelles des guides d'onde j , et γ_j leur trace sur le domaine ω_0 . On obtient alors la relation $\Gamma_j = \gamma_j \times]0, L_z[$.

4.1.1 Rappel des équations

Nous allons maintenant effectuer l'inventaire de toutes les équations introduites dans les différents modèles. Nous pouvons les séparer en trois catégories : l'équation de Schrödinger ouverte, l'équation elliptique sur le potentiel et l'équation de Schrödinger aux valeurs propres.

Equation de Schrödinger ouverte

Nous effectuons la résolution d'une équation de Schrödinger munie de conditions aux bords entrantes :

- dans le domaine tridimensionnel Ω_0 pour les modèles de transport 3D (2.40).
- dans le domaine bidimensionnel ω_0 pour le modèle de transport quantique quasi-3D (3.8), (3.18).

Pour chaque cas, il est nécessaire de résoudre un grand nombre de fois cette équation de Schrödinger (suivant la valeur de l'énergie) au cours de chaque itération Schrödinger/Poisson (où le potentiel est fixé). Le théorème 2.1 assure l'existence et l'unicité des solutions.

Equation elliptique sur le potentiel

Quelles que soient les méthodes de résolution numérique des systèmes couplés, décrites dans l'annexe C, que nous choisissons d'utiliser, nous obtenons une équation sur le potentiel du type :

$$-\nabla(\epsilon_r(z)\nabla V(\mathbf{x})) + g(\mathbf{x})V(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}), \quad (4.1)$$

avec $g(\mathbf{x})$ une fonction positive ou nulle. Dans ces conditions, si :

- $g(\mathbf{x}) = 0$ et $f(\mathbf{x}) \neq 0$, l'équation est du type (C.3) (méthode de relaxation),
- $g(\mathbf{x}) > 0$ et $f(\mathbf{x}) \neq 0$, l'équation est du type (C.8) (méthode de Newton), et (C.11) (itérations de Gummel)
- Dans le cas particulier où $g(\mathbf{x}) = 0$ et $f(\mathbf{x}) = 0$, l'équation est une équation de Laplace.

Nous proposons de résoudre cette équation dans le domaine tridimensionnel Ω_0 avec les conditions aux bords (3.26) pour les modèles semi-classique et quantique 3D, ainsi que pour les modèles hybride et quantique quasi-3D. Nous allons aussi traiter cette équation dans le domaine bidimensionnel Γ_j pour le cas du modèle de quasi-équilibre avec les conditions aux bords (A.3).

La formulation variationnelle du problème (4.1) dans Ω_0 (munie des conditions aux bords du problème modèle (2.4), par exemple) s'écrit

$$\left\| \begin{array}{l} \text{Trouver } V \in \mathcal{V} = \{V : \Omega_0 \rightarrow \mathbb{R}; V \in H^1(\Omega_0); V = V_0 \text{ sur } \Gamma_{0D}\} \text{ tel que :} \\ \forall \bar{V} \in \bar{\mathcal{V}} = \{V : \Omega_0 \rightarrow \mathbb{R}; V \in H^1(\Omega_0); V = 0 \text{ sur } \Gamma_{0D}\}, \\ a(V, \bar{V}) = L(\bar{V}), \end{array} \right. \quad (4.2)$$

où a est une forme bilinéaire, symétrique et continue sur $H^1(\Omega_0)$

$$a(V, \bar{V}) = \int_{\Omega_0} \epsilon_r(\mathbf{x}) \nabla V \nabla \bar{V} \, d\Omega_0 + \int_{\Omega_0} g(\mathbf{x}) V \bar{V} \, d\Omega_0, \quad (4.3)$$

et L est une forme linéaire continue sur $H^1(\Omega_0)$

$$L(\bar{V}) = \int_{\Omega_0} f(\mathbf{x}) \bar{V} \, d\Omega_0. \quad (4.4)$$

Théorème 4.1 *Le problème (4.2) admet une solution unique.*

Preuve: comme a est une forme bilinéaire continue et coercive, nous pouvons appliquer le théorème de Lax-Milgram [15]. \square

Equation de Schrödinger aux valeurs propres

- Au cours des itérations Schrödinger/Poisson nous pouvons effectivement rencontrer :
- N (nombre de guides) équations de Schrödinger aux valeurs propres 2D sur Γ_j , ($j = 1, \dots, N$) (A.4), afin de déterminer pour chaque guide j , les vecteurs propres transverses χ_m^j associés aux valeurs propres transverses E_m^j , pour le cas du modèle de transport quantique 3D ou le modèle de quasi-équilibre sur les bords.
 - une équation de Schrödinger aux valeurs propres 1D sur $]0, L_z[$ (3.5), afin de déterminer les vecteurs propres verticaux ϕ_n associés aux valeurs propres verticales E_{zn} , pour le cas des modèles de transport quasi-3D.
 - N équations de Schrödinger aux valeurs propres 1D sur γ_j (3.14), afin de déterminer pour chaque guide j , les vecteurs propres transverses $\hat{\chi}_p^j$ associés aux valeurs propres transverses \hat{E}_p^j , pour le cas du modèle de transport quantique quasi-3D.

Nous sommes finalement amenés à résoudre une équation du type (4.5), à la fois dans divers domaines unidimensionnels et bidimensionnels.

Dans un cadre général, nous souhaitons résoudre une équation de Schrödinger aux valeurs propres dans un espace Λ de dimension d quelconque du type

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta\varphi(\mathbf{x}) + U(\mathbf{x})\varphi(\mathbf{x}) = E\varphi(\mathbf{x}) & \text{dans } \Lambda, \\ \varphi(\mathbf{x}) = 0 & \text{sur } \partial\Lambda. \end{cases} \quad (4.5)$$

La formulation variationnelle du problème général s'écrit

$$\left\| \begin{array}{l} \text{Trouver les couples } (\lambda, \varphi), \lambda \in \mathbb{R}, \varphi \in H_0^1(\Lambda) - \{0\}, \text{ tel que :} \\ \forall \bar{\varphi} \in H_0^1(\Lambda), \quad a(\varphi, \bar{\varphi}) = \lambda(\varphi, \bar{\varphi})_{L^2}, \end{array} \right. \quad (4.6)$$

où a est une forme bilinéaire, symétrique et continue sur $H_0^1(\Lambda)$

$$a(\varphi, \bar{\varphi}) = \int_{\Lambda} \nabla\varphi \nabla\bar{\varphi} \, d\Lambda + \frac{2m^*}{\hbar^2} \int_{\Lambda} U(\mathbf{x})\varphi\bar{\varphi} \, d\Lambda \quad (4.7)$$

$(\varphi, \bar{\varphi})_{L^2}$ est le produit scalaire dans $L^2(\Lambda)$

$$(\varphi, \bar{\varphi})_{L^2} = \int_{\Lambda} \varphi\bar{\varphi} \, d\Lambda, \quad (4.8)$$

et

$$\lambda = \frac{2m^*E}{\hbar^2}. \quad (4.9)$$

Théorème 4.2 *Les valeurs propres λ_m ($m = 1, 2, \dots$) du problème (4.6) forment une suite croissante : $0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_m \leq \dots$ tendant vers $+\infty$, chacune des valeurs propres ayant une multiplicité finie. En outre, il existe une base orthonormée de l'espace H_0^1 formée des vecteurs propres φ_m associés aux valeurs propres λ_m tels que :*

$$\begin{cases} a(\varphi_m, \bar{\varphi}) = \lambda_j(\varphi_m, \bar{\varphi})_{L^2}, & \forall \bar{\varphi} \in H_0^1 \\ (\varphi_m, \varphi_n)_{L^2} = \delta_{mn}. \end{cases} \quad (4.10)$$

Preuve: voir [32]. □

4.1.2 Choix des différents maillages

Nous avons pu constater que pour le cas des modèles de transport quasi-3D (hybride et quantique), la densité tridimensionnelle électronique pouvait se décomposer dans Ω_0 comme un problème bidimensionnel sur ω_0 et unidimensionnel sur $]0, L_z[$. Il est alors pratique d'effectuer la discrétisation en espace du domaine d'étude 3D en disposant des couches identiques de maillage 2D en (x, y) parallèlement sur un maillage 1D suivant z . Par conséquent, nous pouvons définir :

- $\mathcal{T}_{1,z}$, comme la “triangulation” de $[0, L_z]$; l'élément de base pour ce domaine étant alors un segment. Nous notons $\mathcal{N}_{1,z}$ le nombre total de noeuds suivant z .
- \mathcal{T}_{2,ω_0} , comme la triangulation de $\overline{\omega_0}$; l'élément de base pour ce domaine étant alors un triangle. Nous notons \mathcal{N}_{2,ω_0} le nombre total de noeuds de ce maillage 2D.
- \mathcal{T}_{3,Ω_0} , comme la “triangulation” de $\overline{\Omega_0}$; puisque $\Omega_0 = \omega_0 \times]0, L_z[$, on obtient que l'élément de base de cette espace tridimensionnel est un prisme (*voir* Figure 4.1). On peut écrire

$$\mathcal{T}_{3,\Omega_0} = \mathcal{T}_{2,\omega_0} \times \mathcal{T}_{1,z}. \quad (4.11)$$

et nous notons \mathcal{N}_{3,Ω_0} le nombre total de noeuds du maillage 3D

$$\mathcal{N}_{3,\Omega_0} = \mathcal{N}_{2,\omega_0} * \mathcal{N}_{1,z}. \quad (4.12)$$

- \mathcal{T}_{1,γ_j} , comme la “triangulation” du bord $\overline{\gamma_j}$; comme ce domaine représente la trace de $\overline{\omega_0}$ sur le guide j , il vient que l'élément de base associé à \mathcal{T}_{1,γ_j} est un segment. Nous notons \mathcal{N}_{1,γ_j} le nombre total de noeuds de ce maillage 1D.
- \mathcal{T}_{2,Γ_j} , comme la “triangulation” du bord $\overline{\Gamma_j}$; puisque $\Gamma_j = \gamma_j \times]0, L_z[$, il vient que l'élément de base associé à \mathcal{T}_{2,Γ_j} est un rectangle. On peut écrire

$$\mathcal{T}_{2,\Gamma_j} = \mathcal{T}_{1,\gamma_j} \times \mathcal{T}_{1,z}, \quad (4.13)$$

et nous notons \mathcal{N}_{2,Γ_j} le nombre total de noeuds de ce maillage 2D

$$\mathcal{N}_{2,\Gamma_j} = \mathcal{N}_{1,\gamma_j} * \mathcal{N}_{1,z}. \quad (4.14)$$

Un récapitulatif de toutes les équations qu'il nous faut discrétiser en espace, suivant les différents maillages du problème, est donné sur le tableau (4.1).

Remarque: tous les maillages sont déstructurés. En effet, comme le plan du gaz d'électrons est proche de la surface du composant, le pas du maillage 1D se doit d'être très “fin” entre la surface et le plan du gaz d'électrons, il pourra être “grossier” dans les zones où le champ électrique devient nul. Le maillage 2D pourra être plus “grossier” dans les zones de désertion en électrons dans ce même plan, il sera “fin” dans les zones de transport électronique et plus “fin” encore dans les zones de transition *guide d'onde-zone active*. Notons finalement que le choix du pas des maillages dépend de la longueur d'onde des électrons.

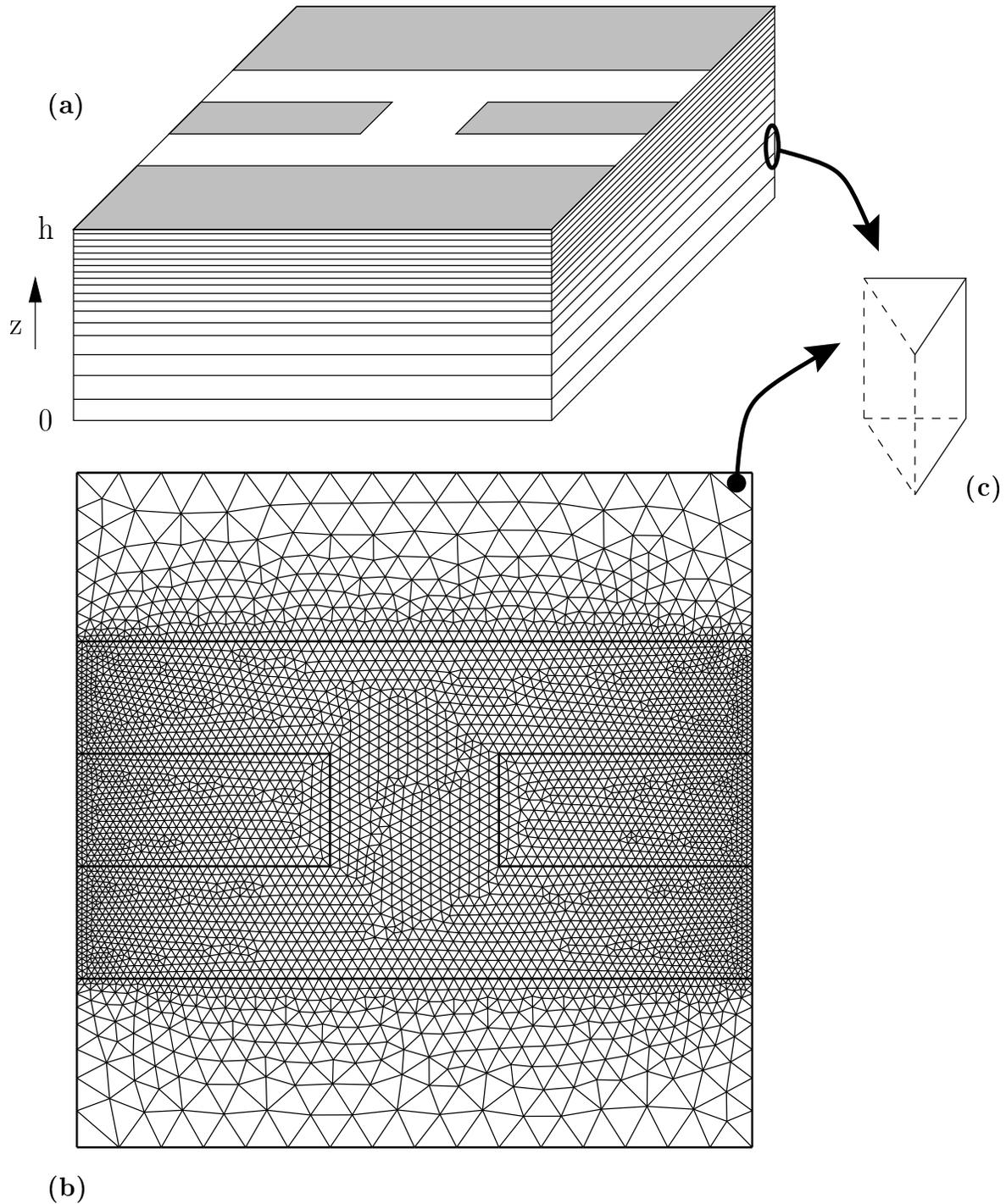


Figure 4.1: Exemple de discrétisation en espace d'un coupleur quantique. La discrétisation en espace du domaine d'étude $\overline{\Omega}_0$ est effectuée en envisageant à la fois un maillage 1D non homogène suivant z (a), et une triangulation destructurée de l'espace 2D $\overline{\omega}_0$ (b). Dans la pratique, nous obtenons des couches bidimensionnelles identiques disposées parallèlement sur un maillage 1D non homogène. Par conséquent, l'élément de base tridimensionnel est un prisme (c).

	3D	2D	1D
Equation elliptique sur le potentiel	\mathcal{T}_{3,Ω_0}	\mathcal{T}_{2,Γ_j}	
Equation de Schrödinger ouverte	\mathcal{T}_{3,Ω_0}	\mathcal{T}_{2,ω_0}	
Equation de Schrödinger aux valeurs propres		\mathcal{T}_{2,Γ_j}	$\mathcal{T}_{1,z}$ et \mathcal{T}_{1,γ_j}

Tableau 4.1: Récapitulatif des différents maillages associés aux diverses équations du problème

4.1.3 Discrétisation du problème

Nous allons maintenant établir les formulations variationnelles approchées des problèmes types dans des espaces d'approximations appropriés. Dans cette section, nous faisons le choix de détailler la discrétisation des équations en introduisant de manière progressive les différentes fonctions de base des espaces polynomiales des problèmes types. Par ailleurs, le tableau (D.1) dresse un récapitulatif des éléments de la discrétisation des problèmes types sur les différents maillages.

Equation de Schrödinger ouverte

On peut alors distinguer deux cas : le cas 2D dans ω_0 et le cas 3D dans Ω_0 .

1. **Le cas 2D dans ω_0** : l'équation est définie dans le plan du gaz d'électrons dans le domaine ω_0 , et elle est munie de conditions aux bords ouvertes (conditions d'ondes entrantes dans les guides) sur γ_j ainsi que des conditions aux bords de Dirichlet sur γ_F . Nous sommes donc amenés à résoudre l'équation de Schrödinger 2D définie en (3.8) et (3.18). Pour rappel :

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \psi_{Q3D}^n(x, y) + \widehat{U}_n(x, y) \psi_{Q3D}^n(x, y) = (E - E_{zn}) \psi_{Q3D}^n(x, y) \quad \text{dans } \omega_0, \\ \psi_{Q3D}^n(x, y) = 0 \quad \text{sur } \gamma_F, \\ \partial_{\eta_j} \psi_{Q3D}^n|_{\gamma_j}(\xi_j) = \sum_{p=1}^{P_n^j(E)} i k_{p,n}^j(E) (-2a_{p,n}^j + \psi_{p,n}^j) \widehat{\chi}_{p,n}^j(\xi_j) \\ \quad - \sum_{p=P_n^j(E)+1}^{\infty} k_{p,n}^j(E) \psi_{p,n}^j \widehat{\chi}_{p,n}^j(\xi_j) \quad \text{sur les } \gamma_j \quad (j = 1, \dots, N). \end{array} \right. \quad (4.15)$$

Par la suite, et afin de simplifier les notations, l'indice n sera considéré comme un indice muet, et nous noterons $\psi \equiv \psi_{Q3D}^n$. Si l'on considère les changements de notations suivantes :

$$\Psi(\mathbf{x}) \rightarrow \psi(x, y), \quad \chi \rightarrow \widehat{\chi}, \quad U \rightarrow \widehat{U}, \quad E \rightarrow (E - E_z),$$

et

$$\Omega_0 \rightarrow \omega_0, \Gamma_0 \rightarrow \gamma_F, \Gamma_j \rightarrow \gamma_j,$$

ainsi que $M \rightarrow P$ et les indices $m \rightarrow p$, alors le problème (4.15) est équivalent au problème type (2.40) pour lequel nous avons établi la formulation variationnelle en (2.22). Dans notre cas, l'espace \mathcal{H} , que nous notons \mathcal{H}_{ω_0} , est défini par

$$\mathcal{H}_{\omega_0} = \{\psi : \omega_0 \rightarrow \mathbb{C}; \psi \in H^1(\omega_0); \psi = 0 \text{ sur } \gamma_F\}.$$

Nous effectuons une discrétisation de ce problème en utilisant la triangulation \mathcal{T}_{2,ω_0} du domaine bidimensionnel $\overline{\omega_0}$. On définit $\mathcal{H}_{\omega_0,h}$ l'espace d'approximation de \mathcal{H}_{ω_0} , tel que

$$\mathcal{H}_{\omega_0,h} = \{v_h : \overline{\omega_0} \rightarrow \mathbb{C}; v_h \in C^0(\overline{\omega_0}); K \in \mathcal{T}_{2,\omega_0}; v_h|_K \in \mathbb{P}_1; v_h = 0 \text{ sur } \gamma_F\}, \quad (4.16)$$

avec $\dim \mathbb{P}_1 = 3$, le nombre de degrés de liberté sur une maille "triangle" étant égal à trois. La formulation variationnelle approchée du problème est alors équivalente à

$$\left\| \begin{array}{l} \text{Trouver } \psi_h \in \mathcal{H}_{\omega_0,h}, \text{ tel que :} \\ \forall \varphi_h \in \mathcal{H}_{\omega_0,h}, \quad a(\psi_h, \varphi_h) = L(\varphi_h), \end{array} \right. \quad (4.17)$$

avec

$$\begin{aligned} a(\psi_h, \varphi_h) &= \int_{\omega_0} \nabla \psi_h \nabla \varphi_h \, d\omega_0 + \frac{2m^*}{\hbar^2} \int_{\omega_0} (\widehat{U}(x, y) - (E - E_z)) \psi_h \varphi_h \, d\omega_0 \\ &\quad - i \sum_{j=1}^N \sum_{p=1}^{P^j(E)} k_p^j(E) \psi_p^j \varphi_p^j + \sum_{j=1}^N \sum_{p=P^j(E)+1}^{\infty} k_p^j(E) \psi_p^j \varphi_p^j, \end{aligned} \quad (4.18)$$

$$L(\varphi_h) = -2i \sum_{j=1}^N \sum_{p=1}^{P^j(E)} a_p^j k_p^j(E) \varphi_p^j, \quad (4.19)$$

$$\psi_p^j = \int_{\gamma_j} \psi_h \widehat{\chi}_p^j \, d\xi_j \quad \text{et} \quad \varphi_p^j = \int_{\gamma_j} \varphi_h \widehat{\chi}_p^j \, d\xi_j. \quad (4.20)$$

Soit $\{w_n\}$, $n \in \{1, \dots, \mathcal{N}_{2,\omega_0}\}$ une base de $\mathcal{H}_{\omega_0,h}$ telle que

$$\forall n \in \{1, \dots, \mathcal{N}_{2,\omega_0}\}, \quad w_n \in \mathcal{H}_{\omega_0,h} \quad \text{et} \quad w_n(x_{n'}, y_{n'}) = \delta_{n,n'}, \quad (4.21)$$

où $(x_{n'}, y_{n'})$ est le vecteur position du noeuds n' dans le maillage \mathcal{T}_{2,ω_0} . Alors une fonction de $\mathcal{H}_{\omega_0,h}$ peut se décomposer sur cette base comme

$$\psi_h(x, y) = \sum_{n=1}^{\mathcal{N}_{2,\omega_0}} u_n w_n(x, y) \quad (4.22)$$

où nous utilisons la notation $u_n \equiv \psi(x_n, y_n)$. En utilisant l'écriture (4.22) de la fonction $psi_h(x, y)$ dans (4.17), le problème se réduit à la résolution d'un système linéaire d'inconnus u_n , ($n = 1, \dots, \mathcal{N}_{2, \omega_0}$)

$$\left\| \begin{array}{l} \text{Trouver } u_n \quad (n = 1, \dots, \mathcal{N}_{2, \omega_0}), \text{ tel que } \forall n' \quad (n' = 1, \dots, \mathcal{N}_{2, \omega_0}) : \\ \sum_{n=1}^{\mathcal{N}_{2, \omega_0}} u_n a(w_n, w_{n'}) = L(w_{n'}) \quad \text{avec } u_n = 0 \text{ si } n \in \gamma_F, \end{array} \right. \quad (4.23)$$

où

$$\begin{aligned} a(w_n, w_{n'}) &= \int_{\omega_0} \nabla w_n \nabla w_{n'} \, d\omega_0 + \frac{2m^*}{\hbar^2} \int_{\omega_0} (\widehat{U}(x, y) - (E - E_z)) w_n w_{n'} \, d\omega_0 \\ &\quad - i \sum_{j=1}^N \sum_{p=1}^{P^j(E)} k_p^j(E) C_p^j(w_n, w_{n'}) + \sum_{j=1}^N \sum_{p=P^j(E)+1}^{\infty} k_p^j(E) C_p^j(w_n, w_{n'}), \end{aligned} \quad (4.24)$$

$$L(w_{n'}) = -2i \sum_{j=1}^N \sum_{p=1}^{P^j(E)} a_p^j k_p^j(E) B_p^j(w_{n'}), \quad (4.25)$$

$$B_p^j(w_{n'}) = \int_{\gamma_j} w_{n'} \widehat{\chi}_p^j \, d\xi_j \quad \text{et} \quad C_p^j(w_n, w_{n'}) = B_p^j(w_n) \cdot B_p^j(w_{n'}) \quad (4.26)$$

Remarque: les coefficients $B_p^j(w_n)$ (resp. $B_p^j(w_{n'})$) sont nuls si le noeud n (resp. n') n'appartient pas au bord γ_j .

Finalement, le système linéaire équivalent que l'on doit résoudre peut s'écrire sous la forme matricielle suivante :

$$\mathbf{A} \mathbf{u} = \mathbf{L}, \quad (4.27)$$

où \mathbf{A} est la matrice d'éléments $a(w_n, w_{n'})_{1 \leq n, n' \leq \mathcal{N}_{2, \omega_0}}$, \mathbf{u} le vecteur des $\mathcal{N}_{2, \omega_0}$ inconnus de composantes u_n , et \mathbf{L} le vecteur regroupant les $\mathcal{N}_{2, \omega_0}$ composantes du second membre $L(w_{n'})$.

Remarque:

- \mathbf{A} est une matrice complexe, symétrique et creuse.
- les éléments de calcul de a , L et B_p^j sont donnés dans le tableau (D.3) de l'annexe D.
- au cours des itérations Schrödinger-Poisson, pour chaque mode vertical d'injection n_0 , nous sommes amenés à résoudre un grand nombre de fois ce système linéaire en fonction de l'énergie $E - E_{z n_0}$ et du potentiel \widehat{U}_{n_0} .

2. **Le cas 3D dans Ω_0** : l'équation, analogue à l'équation établie dans le cadre du problème modèle (2.40), est définie dans le domaine tridimensionnel Ω_0 , et elle est munie de conditions aux bords ouvertes (conditions d'ondes entrantes dans les guides) sur Γ_j ainsi que des conditions aux bords de Dirichlet sur Γ_0 . Pour rappel, nous sommes donc amenés à résoudre l'équation de Schrödinger 3D suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \Psi(\mathbf{x}) + U(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}) = E \Psi(\mathbf{x}) \quad \text{dans } \Omega_0, \\ \Psi(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{sur } \Gamma_0, \\ \partial_{\eta_j} \Psi|_{\Gamma_j}(\xi_j, z) = \sum_{m=1}^{M^j(E)} i k_m^j(E) (-2a_m^j + \Psi_m^j) \chi_m^j(\xi_j, z) \\ \quad - \sum_{m=M^j(E)+1}^{\infty} k_m^j(E) \Psi_m^j \chi_m^j(\xi_j, z) \quad \text{sur les } \Gamma_j \quad (j = 1, \dots, N). \end{array} \right. \quad (4.28)$$

La formulation variationnelle du problème modèle a été établie en (2.22). Rappelons que l'espace \mathcal{H} , que nous notons \mathcal{H}_{Ω_0} , est défini par

$$\mathcal{H}_{\Omega_0} = \{ \Psi : \Omega_0 \rightarrow \mathbb{C}; \Psi \in H^1(\Omega_0); \Psi = 0 \text{ sur } \Gamma_0 \}.$$

Nous effectuons une discrétisation de ce problème en utilisant la "triangulation" \mathcal{T}_{3,Ω_0} du domaine tridimensionnel $\overline{\Omega_0}$. On définit $\mathcal{H}_{\Omega_0,h}$ l'espace d'approximation de \mathcal{H}_{Ω_0} , tel que

$$\mathcal{H}_{\Omega_0,h} = \{ v_h : \overline{\Omega_0} \rightarrow \mathbb{C}; v_h \in C^0(\overline{\Omega_0}); K \in \mathcal{T}_{3,\Omega_0}; v_h|_K \in \mathbb{P}_k; v_h = 0 \text{ sur } \Gamma_0 \}, \quad (4.29)$$

où nous considérons la séparation (x, y) et z de l'espace des fonctions. On obtient alors

$$\mathbb{P}_k(x, y, z) = \mathbb{P}_1(x, y) \otimes \mathbb{P}_1(z), \quad (4.30)$$

avec $\dim \mathbb{P}_k = 6$, le nombre de degrés de liberté sur une maille "prisme" étant égal à six. La formulation variationnelle approchée du problème est alors équivalente à

$$\left\| \begin{array}{l} \text{Trouver } \Psi_h \in \mathcal{H}_{\Omega_0,h}, \text{ tel que :} \\ \forall \Phi_h \in \mathcal{H}_{\Omega_0,h}, \quad a(\Psi_h, \Phi_h) = L(\Phi_h), \end{array} \right. \quad (4.31)$$

avec

$$\begin{aligned} a(\Psi_h, \Phi_h) &= \int_{\Omega_0} \nabla \Psi_h \nabla \Phi_h \, d\Omega_0 + \frac{2m^*}{\hbar^2} \int_{\Omega_0} (U(\mathbf{x}) - E) \Psi_h \Phi_h \, d\Omega_0 \\ &\quad - i \sum_{j=1}^N \sum_{m=1}^{M^j(E)} k_m^j(E) \Psi_m^j \Phi_m^j + \sum_{j=1}^N \sum_{m=M^j(E)+1}^{\infty} k_m^j(E) \Psi_m^j \Phi_m^j, \end{aligned} \quad (4.32)$$

$$L(\Phi_h) = -2i \sum_{j=1}^N \sum_{m=1}^{M^j(E)} a_m^j k_m^j(E) \Phi_m^j, \quad (4.33)$$

$$\Psi_m^j = \int_{\Gamma_j} \Psi_h \chi_m^j \, d\Gamma_j \quad \text{et} \quad \Phi_m^j = \int_{\Gamma_j} \Phi_h \chi_m^j \, d\Gamma_j \quad (4.34)$$

Soit $\{\theta_{n,k}\}$, $n \in \{1, \dots, \mathcal{N}_{2,\omega_0}\}$, $k \in \{1, \dots, \mathcal{N}_{1,z}\}$, une base de $\mathcal{H}_{\Omega_0,h}$ telle que

$$\forall n \in \{1, \dots, \mathcal{N}_{2,\omega_0}\}, \forall k \in \{1, \dots, \mathcal{N}_{1,z}\}, \quad (4.35)$$

$$\theta_{n,k} \in \mathcal{H}_{\Omega_0,h} \quad \text{et} \quad \theta_{n,k}(\mathbf{x}_{n',k'}) = \delta_{n,n'} \delta_{k,k'},$$

avec $\mathbf{x}_{n',k'}$ le vecteur position $(x_{n'}, y_{n'}, z_{k'})$ du noeuds n' dans le maillage 2D, \mathcal{T}_{2,ω_0} (tel que le vecteur $(x_{n'}, y_{n'}) \in \overline{\omega_0}$), et de la couche k' dans le maillage maillage 1D, $\mathcal{T}_{1,z}$ (tel que $z_{k'} \in [0, L_z]$). Une fonction de $\mathcal{H}_{\Omega_0,h}$ peut alors se décomposer sur cette base comme

$$\Psi_h(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{1,z}} \sum_{n=1}^{\mathcal{N}_{2,\omega_0}} u_{n,k} \theta_{n,k}(\mathbf{x}), \quad (4.36)$$

où nous utilisons la notation $u_{n,k} \equiv \Psi(\mathbf{x}_{n,k})$. En utilisant l'écriture (4.36) de la fonction $Psi_h(\mathbf{x})$ dans (4.31), le problème se réduit à la résolution d'un système linéaire d'inconnus $u_{n,k}$, ($n = 1, \dots, \mathcal{N}_{2,\omega_0}$) et ($k = 1, \dots, \mathcal{N}_{1,z}$)

$$\left\| \begin{array}{l} \text{Trouver } u_{n,k} \quad (n = 1, \dots, \mathcal{N}_{2,\omega_0}), \quad (k = 1, \dots, \mathcal{N}_{1,z}), \text{ tel que :} \\ \forall n', k' \quad (n' = 1, \dots, \mathcal{N}_{2,\omega_0}), \quad (k' = 1, \dots, \mathcal{N}_{1,z}) \\ \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{1,z}} \sum_{n=1}^{\mathcal{N}_{2,\omega_0}} u_{n,k} a(\theta_{n,k}, \theta_{n',k'}) = L(\theta_{n',k'}) \quad \text{avec } u_{n,k} = 0 \text{ si } (n,k) \in \Gamma_0, \end{array} \right. \quad (4.37)$$

où

$$\begin{aligned} a(\theta_{n,k}, \theta_{n',k'}) &= \int_{\Omega_0} \nabla \theta_{n,k} \nabla \theta_{n',k'} \, d\Omega_0 + \frac{2m^*}{\hbar^2} \int_{\Omega_0} (U(\mathbf{x}) - E) \theta_{n,k} \theta_{n',k'} \, d\Omega_0 \\ &\quad - i \sum_{j=1}^N \sum_{m=1}^{M^j(E)} k_m^j(E) C_m^j(\theta_{n,k}, \theta_{n',k'}) + \sum_{j=1}^N \sum_{m=M^j(E)+1}^{\infty} k_m^j(E) C_m^j(\theta_{n,k}, \theta_{n',k'}), \end{aligned} \quad (4.38)$$

$$L(\theta_{n',k'}) = -2i \sum_{j=1}^N \sum_{m=1}^{M^j(E)} a_m^j k_m^j(E) B_m^j(\theta_{n',k'}), \quad (4.39)$$

$$B_m^j(\theta_{n',k'}) = \int_{\Gamma_j} \theta_{n',k'} \chi_m^j d\Gamma_j \quad \text{et} \quad C_m^j(\theta_{n,k}, \theta_{n',k'}) = B_m^j(\theta_{n,k}) B_m^j(\theta_{n',k'}). \quad (4.40)$$

Remarque: les coefficients $B_m^j(\theta_{n,k})$ (resp. $B_m^j(\theta_{n',k'})$) sont nuls si le noeud n, k (resp. n', k') n'appartient pas au bord Γ_j .

Le système linéaire équivalent que l'on doit résoudre s'écrit finalement

$$\mathbf{A} \mathbf{u} = \mathbf{L}, \quad (4.41)$$

où \mathbf{A} est la matrice d'éléments $a(\theta_{n,k}, \theta_{n',k'})_{(1 \leq n, n' \leq \mathcal{N}_{2, \omega_0}), (1 \leq k, k' \leq \mathcal{N}_{1, z})}$, \mathbf{u} le vecteur des $\mathcal{N}_{3, \Omega_0}$ inconnus de composantes $u_{n,k}$, et \mathbf{L} le vecteur regroupant les $\mathcal{N}_{3, \Omega_0}$ composantes du second membre $L(\theta_{n',k'})$.

Remarque:

- \mathbf{A} est une matrice complexe, symétrique et creuse.
- dans le cas où $|k - k'| < 1$, les coefficients $a(\theta_{n,k}, \theta_{n',k'})$ sont nuls. La matrice \mathbf{A} peut être construite sous une forme tridiagonale par bloc dans le cas où l'on choisit de faire varier n, n' dans un premier temps puis k, k' dans un second temps.
- au cours des itérations Schrödinger-Poisson, nous devons résoudre un grand nombre de fois ce système linéaire de grande taille en fonction de l'énergie E et du potentiel U .

Remarque: nous choisissons d'effectuer la séparation des fonctions de base $\theta_{n,k}$ à l'aide de (4.30). On obtient alors

$$\forall n \in \{1, \dots, \mathcal{N}_{2, \omega_0}\}, \forall k \in \{1, \dots, \mathcal{N}_{1, z}\} \quad (4.42)$$

$$\theta_{n,k}(x, y, z) = w_n(x, y) \kappa_k(z),$$

avec :

- $\{w_n\}$, $n \in \{1, \dots, \mathcal{N}_{2, \omega_0}\}$ la base de l'espace $\mathcal{H}_{\omega_0, h}(\overline{\omega_0})$ définie précédemment dans le cas de la triangulation $\mathcal{T}_{2, \omega_0}$ de $\overline{\omega_0}$.
- $\{\kappa_k\}$, $k \in \{1, \dots, \mathcal{N}_{1, z}\}$ la base de l'espace d'approximation $V_{z, h}^1$ de V_z^1 où

$$V_z^1 = \{V :]0, L_z[\rightarrow \mathbb{R}; V \in H^1(]0, L_z[); V = 0 \text{ sur } z = L_z\}, \quad (4.43)$$

et

$$V_{z, h}^1 = \{v_h : [0, h] \rightarrow \mathbb{R}; v_h \in C^0([0, L_z]); K \in \mathcal{T}_{1, z}; v_h|_K \in \mathbb{P}_1; v_h = 0 \text{ sur } z = L_z\}. \quad (4.44)$$

La base $\{\kappa_k\}$ est alors définie sur $V_{z, h}^1$ par

$$\forall k \in \{1, \dots, \mathcal{N}_{1, z}\}, \quad \kappa_k \in V_{z, h}^h \quad \text{et} \quad \kappa_k(\mathbf{x}_{x_{k'}}) = \delta_{k, k'}, \quad (4.45)$$

où $x_{k'}$ est la position du noeud k' dans le maillage $\mathcal{T}_{1, z}$.

En utilisant la décomposition (4.42) de la fonction de base $\theta_{n,k}$ dans (4.38) et (4.40), on obtient alors

$$\begin{aligned}
a(\theta_{n,k}, \theta_{n',k'}) = & \\
& \int_{\omega_0} \nabla_{x,y} w_n \nabla_{x,y} w_{n'} d\omega_0 \int_0^{L_z} \kappa_k \kappa_{k'} dz + \int_{\omega_0} w_n w_{n'} d\omega_0 \int_0^{L_z} \nabla_z \kappa_k \nabla_z \kappa_{k'} dz \\
& + \frac{2m^*}{\hbar^2} \int_0^{L_z} \int_{\omega_0} (U(\mathbf{x}) - E) w_n w_{n'} \kappa_k \kappa_{k'} d\omega_0 dz - i \sum_{j=1}^N \sum_{m=1}^{M^j(E)} k_m^j(E) C_m^j(\theta_{n,k}, \theta_{n',k'}) \\
& + \sum_{j=1}^N \sum_{m=M^j(E)+1}^{\infty} k_m^j(E) C_m^j(\theta_{n,k}, \theta_{n',k'}),
\end{aligned} \tag{4.46}$$

et

$$B_m^j(\theta_{n',k'}) = \int_0^{L_z} \int_{\omega_0} w_{n'} \kappa_{k'} \chi_m^j d\omega_0 dz. \tag{4.47}$$

Les termes croisés $\nabla_{x,y}$ et ∇_z n'interviennent pas dans la décomposition de $a(\theta_{n,k}, \theta_{n',k'})$ (le produit scalaire étant nul).

Les éléments de calcul de a , L et B_m^j sont donnés dans le tableau (D.3) en annexe D.

Equation elliptique sur le potentiel

On peut distinguer deux cas : le cas 3D dans Ω_0 et le cas 2D sur les frontières Γ_j des guides.

1. **Le cas 3D dans Ω_0** : on trouve l'équation sur le potentiel du problème type (4.1), dont la formulation variationnelle est donnée en (4.2). Rappelons que les conditions aux bords du problème sont définies en (3.26). L'espace \mathcal{V} , que nous notons \mathcal{V}_{Ω_0} , ainsi que l'espace $\overline{\mathcal{V}}$, que nous notons $\overline{\mathcal{V}}_{\Omega_0}$, sont définis par

$$\mathcal{V}_{\Omega_0} = \{V : \Omega_0 \rightarrow \mathbb{R}; V \in H^1(\Omega_0); V = V_S \text{ sur } \Gamma_{T_0}; V = V_S + V_G \text{ sur } \Gamma_{T_G}\},$$

et

$$\overline{\mathcal{V}}_{\Omega_0} = \{V : \Omega_0 \rightarrow \mathbb{R}; V \in H^1(\Omega_0); V = 0 \text{ sur } \Gamma_{T_0} \cup \Gamma_{T_G}\}.$$

Par analogie avec le problème de l'équation de Schrödinger ouverte tridimensionnelle, nous discrétisons le problème à l'aide de la "triangulation" \mathcal{T}_{3,Ω_0} de $\overline{\Omega_0}$. On définit $\mathcal{V}_{\Omega_0,h}$ l'espace d'approximation de \mathcal{V}_g , et $\overline{\mathcal{V}}_{\Omega_0,h}$ l'espace d'approximation de $\overline{\mathcal{V}}_g$, tels que

$$\begin{aligned}
\mathcal{V}_{\Omega_0,h} = \{V_h : \overline{\Omega_0} \rightarrow \mathbb{R}; v_h \in C^0(\overline{\Omega_0}); K \in \mathcal{T}_{3,\Omega_0}; V_h|_K \in \mathbb{P}_k; \\
V_h = V_S \text{ sur } \Gamma_{T_0}; V_h = V_S + V_G \text{ sur } \Gamma_{T_G}\},
\end{aligned} \tag{4.48}$$

et

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{V}}_{\Omega_0, h} = \{ & V_h : \bar{\Omega}_0 \rightarrow \mathbb{R}; v_h \in C^0(\bar{\Omega}_0); K \in \mathcal{T}_{3, \Omega_0}; V_h|_K \in \mathbb{P}_k; \\ & V_h = 0 \text{ sur } \Gamma_{T_0} \cup \Gamma_{T_G}\}. \end{aligned} \quad (4.49)$$

La formulation variationnelle approchée du problème est alors équivalente à

$$\left\| \begin{aligned} & \text{Trouver } V_h \in \mathcal{V}_{\Omega_0, h}, \text{ tel que :} \\ & \forall \bar{V}_h \in \bar{\mathcal{V}}_{\Omega_0, h}, \quad a(V_h, \bar{V}_h) = L(\bar{V}_h), \end{aligned} \right. \quad (4.50)$$

avec

$$a(V_h, \bar{V}_h) = \int_{\Omega_0} \epsilon_r(z) \nabla V_h \nabla \bar{V}_h \, d\Omega_0 + \int_{\Omega_0} g(\mathbf{x}) V_h \bar{V}_h \, d\Omega_0, \quad (4.51)$$

et

$$L(\bar{V}_h) = \int_{\Omega_0} f(\mathbf{x}) \bar{V}_h \, d\Omega_0. \quad (4.52)$$

La discrétisation du problème s'effectue à l'aide des fonctions de base (4.35). Une fonction de $\mathcal{V}_{\Omega_0, h}$ peut alors se décomposer sur cette base comme

$$V_h(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{1,z}} \sum_{n=1}^{\mathcal{N}_{2,\omega_0}} v_{n,k} \theta_{n,k}(\mathbf{x}), \quad (4.53)$$

avec $v_{n,k} \equiv V(\mathbf{x}_{n,k})$. En utilisant l'écriture (4.53) de la fonction $V_h(\mathbf{x})$ dans (4.50), le problème se réduit à la résolution d'un système linéaire d'inconnus $v_{n,k}$, ($n = 1, \dots, \mathcal{N}_{2,\omega_0}$) et ($k = 1, \dots, \mathcal{N}_{1,z}$)

$$\left\| \begin{aligned} & \text{Trouver } v_{n,k} \quad (n = 1, \dots, \mathcal{N}_{2,\omega_0}), (k = 1, \dots, \mathcal{N}_{1,z}), \text{ tel que :} \\ & \forall n', k' \quad (n' = 1, \dots, \mathcal{N}_{2,\omega_0}), (k' = 1, \dots, \mathcal{N}_{1,z}) \\ & \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{1,z}} \sum_{n=1}^{\mathcal{N}_{2,\omega_0}} v_{n,k} a(\theta_{n,k}, \theta_{n',k'}) = L(\theta_{n',k'}) \quad \text{avec } v_{n,k} = V_S \text{ si } (n, k) \in \Gamma_{T_0} \\ & \text{et } v_{n,k} = V_S + V_G \text{ si } (n, k) \in \Gamma_{T_G}, \end{aligned} \right. \quad (4.54)$$

avec

$$a(\theta_{n,k}, \theta_{n',k'}) = \int_{\Omega_0} \epsilon_r(z) \nabla \theta_{n,k} \nabla \theta_{n',k'} \, d\Omega_0 + \int_{\Omega_0} g(\mathbf{x}) \theta_{n,k} \theta_{n',k'} \, d\Omega_0, \quad (4.55)$$

et

$$L(\theta_{n',k'}) = \int_{\Omega_0} f(\mathbf{x}) \theta_{n',k'} \, d\Omega_0. \quad (4.56)$$

Le système linéaire équivalent que l'on doit résoudre s'écrit finalement :

$$\mathbf{A}\mathbf{v} = \mathbf{L}, \quad (4.57)$$

où \mathbf{A} est la matrice d'éléments $a(\theta_{n,k}, \theta_{n',k'})_{(1 \leq n, n' \leq \mathcal{N}_{2,\omega_0}), (1 \leq k, k' \leq \mathcal{N}_{1,z})}$, \mathbf{v} le vecteur des \mathcal{N}_{3,Ω_0} inconnus de composantes $v_{n,k}$, et \mathbf{L} le vecteur regroupant les \mathcal{N}_{3,Ω_0} composantes du second membre $L(\theta_{n',k'})$.

Remarque:

- \mathbf{A} est une matrice réelle, symétrique, définie positive et creuse.
- dans le cas où $|k - k'| < 1$, les coefficients $a(\theta_{n,k}, \theta_{n',k'})$ sont nuls. La matrice \mathbf{A} peut être construite sous une forme tridiagonale par bloc dans le cas où l'on choisit de faire varier n, n' dans un premier temps puis k, k' dans un second temps.
- au cours des itérations Schrödinger-Poisson, nous sommes amenés à résoudre une seule fois ce système linéaire de grande taille.

Remarque: en utilisant la séparation des fonctions de base (4.42), on obtient alors

$$\begin{aligned} a(\theta_{n,k}, \theta_{n',k'}) &= \int_{\omega_0} \nabla_{x,y} w_n \nabla_{x,y} w_{n'} d\omega_0 \int_0^{Lz} \epsilon_r(z) \kappa_k \kappa_{k'} dz \\ &+ \int_{\omega_0} w_n w_{n'} d\omega_0 \int_0^{Lz} \epsilon_r(z) \nabla_z \kappa_k \nabla_z \kappa_{k'} dz \\ &+ \int_0^{Lz} \int_{\omega_0} g(\mathbf{x}) w_n w_{n'} \kappa_k \kappa_{k'} d\omega_0 dz, \end{aligned} \quad (4.58)$$

et

$$L(\theta_{n',k'}) = \int_0^{Lz} \int_{\omega_0} f(\mathbf{x}) w_{n_0} \kappa_{k'} d\omega_0 dz \quad (4.59)$$

Les éléments de calcul de a et L , sont donnés dans le tableau (D.3) en annexe D.

2. **Le cas 2D sur les frontières Γ_j des guides :** l'équation sur le potentiel est similaire à l'équation du problème type (4.1) sur Γ_j , dont la formulation variationnelle est donnée en (4.2) (dans ces conditions $\Omega_0 \rightarrow \Gamma_j$). Dans ce cas, les conditions aux bords du problème ont été définies en (A.3). L'espace \mathcal{V} , que nous notons \mathcal{V}_{Γ_j} , ainsi que l'espace $\overline{\mathcal{V}}$, que nous notons $\overline{\mathcal{V}}_{\Gamma_j}$, sont définis par

$$\mathcal{V}_{\Gamma_j} = \{V : \Gamma_j \rightarrow \mathbb{R}; V \in H^1(\Gamma_j); V = V_S \text{ sur } \gamma_{T_0}; V = V_S + V_G \text{ sur } \gamma_{T_G}\},$$

et

$$\overline{\mathcal{V}}_{\Gamma_j} = \{V : \Gamma_j \rightarrow \mathbb{R}; V \in H^1(\Gamma_j); V = 0 \text{ sur } \gamma_{T_0} \cup \gamma_{T_G}\}.$$

Nous proposons de discrétiser le problème à l'aide de la "triangulation" \mathcal{T}_{2,Γ_j} de $\overline{\Gamma_j}$. On définit $\mathcal{V}_{\Gamma_j,h}$ l'espace d'approximation de \mathcal{V}_g , et $\overline{\mathcal{V}}_{\Gamma_j,h}$ l'espace d'approximation

de $\overline{\mathcal{V}}_g$, tels que :

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{\Gamma_j, h} = \{ & V_h : \overline{\Gamma}_j \rightarrow \mathbb{R}; v_h \in C^0(\overline{\Gamma}_j); K \in \mathcal{T}_{2, \Gamma_j}; V_h|_K \in \mathbb{Q}_1; \\ & V_h = V_S \text{ sur } \gamma_{T_0}; V_h = V_S + V_G \text{ sur } \gamma_{T_G} \}, \end{aligned} \quad (4.60)$$

et

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{V}}_{\Gamma_j, h} = \{ & V_h : \overline{\Gamma}_j \rightarrow \mathbb{R}; v_h \in C^0(\overline{\Gamma}_j); K \in \mathcal{T}_{2, \Gamma_j}; V_h|_K \in \mathbb{Q}_1; \\ & V_h = 0 \text{ sur } \gamma_{T_0} \cup \gamma_{T_G} \}, \end{aligned} \quad (4.61)$$

où nous considérons la séparation ξ_j et z de l'espace des fonctions. On obtient alors

$$\mathbb{Q}_1(\xi_j, z) = \mathbb{P}_1(\xi_j) \otimes \mathbb{P}_1(z) \quad (4.62)$$

avec $\dim \mathbb{Q}_1 = 4$, le nombre de degrés de liberté sur une maille "rectangle" étant égal à quatre. La formulation variationnelle approchée du problème est alors équivalente à

$$\left\| \begin{array}{l} \text{Trouver } V_h \in \mathcal{V}_{\Gamma_j, h}, \text{ tel que :} \\ \forall \overline{V}_h \in \overline{\mathcal{V}}_{\Gamma_j, h}, \quad a(V_h, \overline{V}_h) = L(\overline{V}_h), \end{array} \right. \quad (4.63)$$

avec

$$a(V_h, \overline{V}_h) = \int_{\Gamma_j} \epsilon_r(z) \nabla V_h \nabla \overline{V}_h \, d\Gamma_j + \int_{\Gamma_j} g(\xi_j, z) V_h \overline{V}_h \, d\Gamma_j, \quad (4.64)$$

et

$$L(\overline{V}_h) = \int_{\Gamma_j} f(\xi_j, z) \overline{V}_h \, d\Gamma_j. \quad (4.65)$$

Soit $\{\vartheta_{l, k}\}$, $l \in \{1, \dots, \mathcal{N}_{1, \gamma_j}\}$, $k \in \{1, \dots, \mathcal{N}_{1, z}\}$, une base de $\mathcal{V}_{\Gamma_j, h}$ (idem $\overline{\mathcal{V}}_{\Gamma_j, h}$)

$$\forall l \in \{1, \dots, \mathcal{N}_{2, \Gamma_j}\}, \forall k \in \{1, \dots, \mathcal{N}_{1, z}\} \quad (4.66)$$

$$\vartheta_{l, k} \in \mathcal{V}_{\Gamma_j, h}, \quad \vartheta_{l, k}(\xi_{l'}, z_{k'}) = \delta_{l, l'} \delta_{k, k'},$$

avec $(\xi_{l'}, z_{k'})$ le vecteur position du noeuds l' dans le maillage 1D, $\mathcal{T}_{1, \gamma_j}$ (tel que $(\xi_{l'}) \in \overline{\gamma_j}$), et de la couche k' dans le maillage 1D ($\mathcal{T}_{1, z}$, tel que $z_{k'} \in [0, L_z]$). Une fonction de $\mathcal{V}_{\Gamma_j, h}$ (ou $\overline{\mathcal{V}}_{\Gamma_j, h}$) peut alors se décomposer sur cette base comme

$$V_h(\xi_j, z) = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{1, z}} \sum_{l=1}^{\mathcal{N}_{1, \gamma_j}} v_{l, k} \vartheta_{l, k}(\xi_j, z), \quad (4.67)$$

avec $v_{l,k} \equiv V(\xi_l, z_k)$. En utilisant l'écriture (4.67) de la fonction $V_h(\xi_j, z)$ dans (4.63), le problème se réduit à la résolution d'un système linéaire d'inconnus $v_{l,k}$, ($l = 1, \dots, \mathcal{N}_{1,\gamma_j}$) et ($k = 1, \dots, \mathcal{N}_{1,z}$)

$$\left\| \begin{array}{l} \text{Trouver } v_{l,k} \quad (l = 1, \dots, \mathcal{N}_{1,\gamma_j}), (k = 1, \dots, \mathcal{N}_{1,z}), \text{ tel que :} \\ \forall l', k' \quad (l' = 1, \dots, \mathcal{N}_{1,\gamma_j}), (k' = 1, \dots, \mathcal{N}_{1,z}) \\ \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{1,z}} \sum_{l=1}^{\mathcal{N}_{1,\gamma_j}} v_{l,k} a(\vartheta_{l,k}, \vartheta_{l',k'}) = L(\vartheta_{l',k'}) \quad \text{avec } v_{l,k} = V_S \text{ si } (l,k) \in \gamma_{T_0} \\ \text{et } v_{l,k} = V_S + V_G \text{ si } (l,k) \in \gamma_{T_G}, \end{array} \right. \quad (4.68)$$

avec

$$a(\vartheta_{l,k}, \vartheta_{l',k'}) = \int_{\Gamma_j} \epsilon_r(z) \nabla \vartheta_{l,k} \nabla \vartheta_{l',k'} d\Gamma_j + \int_{\Gamma_j} g(\xi_j, z) \vartheta_{l,k} \vartheta_{l',k'} d\Gamma_j, \quad (4.69)$$

et

$$L(\vartheta_{l',k'}) = \int_{\Gamma_j} f(\xi_j, z) \vartheta_{l',k'} d\Gamma_j. \quad (4.70)$$

Le système linéaire équivalent que l'on doit résoudre s'écrit finalement :

$$\mathbf{A} \mathbf{v} = \mathbf{L}, \quad (4.71)$$

où \mathbf{A} est la matrice d'éléments $a(\vartheta_{l,k}, \vartheta_{l',k'})_{(1 \leq l, l' \leq \mathcal{N}_{1,\gamma_j}), (1 \leq k, k' \leq \mathcal{N}_{1,z})}$, \mathbf{v} le vecteur des \mathcal{N}_{2,Γ_j} inconnus de composantes $v_{l,k}$, et \mathbf{L} le vecteur regroupant les \mathcal{N}_{2,Γ_j} composantes du second membre $L(\vartheta_{l',k'})$.

Remarque:

- \mathbf{A} est une matrice réelle, symétrique, définie positive et creuse.
- les éléments de calcul de a et L peuvent être trouvés dans [32].
- au cours des itérations Schrödinger-Poisson pour le modèle de quasi-équilibre, nous sommes amenés à résoudre une seule fois ce système linéaire.

Equations de Schrödinger aux valeurs propres

La formulation variationnelle de l'équation sur le potentiel du problème type (4.5), est donnée en (4.6). Nous effectuons, dans un cas général, une "triangulation" \mathcal{T}_h de l'espace $\bar{\Lambda}$ de dimension d , et nous allons introduire un sous-espace d'éléments finis $V_{0,h}$ de H_0^1 , de dimension fini \mathcal{N} , tel que

$$V_{0,h} = \{v_h : \bar{\Lambda} \rightarrow \mathbb{R}; v_h \in C^0(\bar{\Lambda}); K \in \mathcal{T}_h; v_h|_K \in \mathbb{P}_k; v_h = 0 \text{ sur } \partial\Lambda\}. \quad (4.72)$$

où \mathbb{P}_k représente un espace polynomiale. Le problème approché s'écrit

$$\left\| \begin{array}{l} \text{Trouver les couples } (\lambda_h, \varphi_h), \lambda_h \in \mathbb{R}, \varphi_h \in V_{0,h} - \{0\}, \text{ tel que :} \\ \forall \bar{\varphi}_h \in V_{0,h}, \quad a(\varphi_h, \bar{\varphi}_h) = \lambda_h(\varphi_h, \bar{\varphi}_h)_{L^2}. \end{array} \right. \quad (4.73)$$

Soit $\{w_n\}$, $1 \leq n \leq \mathcal{N}$, une base de l'espace $V_{0,h}$ définie par

$$\forall n \in \{1, \dots, \mathcal{N}\}, w_n \in V_{0,h}, \quad w_n(\mathbf{x}_{n'}) = \delta_{n,n'}, \quad (4.74)$$

avec $\mathbf{x}_{n'}$ le vecteur position du noeuds n' dans la maillage \mathcal{T}_h . Toute fonction de $V_{0,h}$ peut alors se décomposer sur cette base comme

$$\varphi_h(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{\mathcal{N}} \varphi_n w_n(\mathbf{x}), \quad (4.75)$$

avec $\varphi_n \equiv \varphi(\mathbf{x}_n)$. En utilisant l'écriture (4.75) de la fonction $\varphi_h(\mathbf{x})$ dans (4.73), le problème se réduit à la résolution d'un système linéaire d'inconnus φ_n , ($n = 1, \dots, \mathcal{N}$). Ce système est équivalent à un problème aux valeurs propres généralisé du type

$$\mathbf{R} \varphi = \lambda \mathbf{M} \varphi, \quad (4.76)$$

où \mathbf{R} est la matrice dite de rigidité d'éléments $a(w_n, w_{n'})_{(1 \leq n, n' \leq \mathcal{N})}$ et \mathbf{M} est la matrice dite de masse d'éléments $(w_n, w_{n'})_{L^2(1 \leq n, n' \leq \mathcal{N})}$. On obtient

$$a(w_n, w_{n'}) = \int_{\Lambda} \nabla w_n \nabla w_{n'} \, d\Lambda + \frac{2m^*}{\hbar^2} \int_{\Lambda} U(\mathbf{x}) w_n w_{n'} \, d\Lambda, \quad (4.77)$$

et

$$(w_n, w_{n'})_{L^2} = \int_{\Lambda} w_n w_{n'} \, d\Lambda. \quad (4.78)$$

Remarque: les propriétés des formes bilinéaires $a(., .)$ et $(., .)$ entraînent immédiatement que les matrices \mathbf{R} et \mathbf{M} sont réelles, symétriques et définies positives. Au cours des itérations Schrödinger/Poisson, nous sommes amenés à résoudre :

- une équation de Schrödinger aux valeurs propres 1D sur $]0, L_z[$ afin de déterminer les vecteurs propres verticaux ϕ_n associés aux valeurs propres verticales E_{zn} (nous utiliserons alors la “triangulation” $\mathcal{T}_{1,z}$). Dans ce cas, on note que $d = 1$ et $\mathbb{P}_k = \mathbb{P}_1(z)$.
- N (nombre de guides) équations de Schrödinger aux valeurs propres 1D sur γ_j , ($j = 1, \dots, N$), afin de déterminer pour chaque guide j , les vecteurs propres transverses $\hat{\chi}_p^j$ associés aux valeurs propres transverses \hat{E}_p^j (nous utiliserons alors la trace de la triangulation \mathcal{T}_{2,ω_0} sur Γ_j , c'est à dire \mathcal{T}_{1,γ_j}). Dans ce cas, on note que $d = 1$ et $\mathbb{P}_k = \mathbb{P}_1(\xi_j)$.
- une équation de Schrödinger aux valeurs propres 2D sur Γ_j afin de déterminer les vecteurs propres transverses χ_m^j associés aux valeurs propres transverses E_m^j (nous utiliserons alors la “triangulation” \mathcal{T}_{2,Γ_j}). Nous devons aussi résoudre cette même équation aux cours des itérations Schrödinger/Poisson pour le modèle de quasi-équilibre. Dans ces cas, on note que $d = 2$ et $\mathbb{P}_k = \mathbb{Q}_1(\xi_j, z)$.

4.2 Mise en oeuvre numérique

Nous allons présenter dans un premier temps, l'organigramme général que nous allons utiliser pour la résolution des systèmes couplés associés aux différents modèles physiques rappelés dans le tableau (3.4). En complément, nous ferons l'inventaire de toute les méthodes de résolutions numériques nécessaires à ces calculs. Pour finir, nous présenterons notre code de calcul 3D que nous avons baptisé NESSIE.

4.2.1 Organigramme général

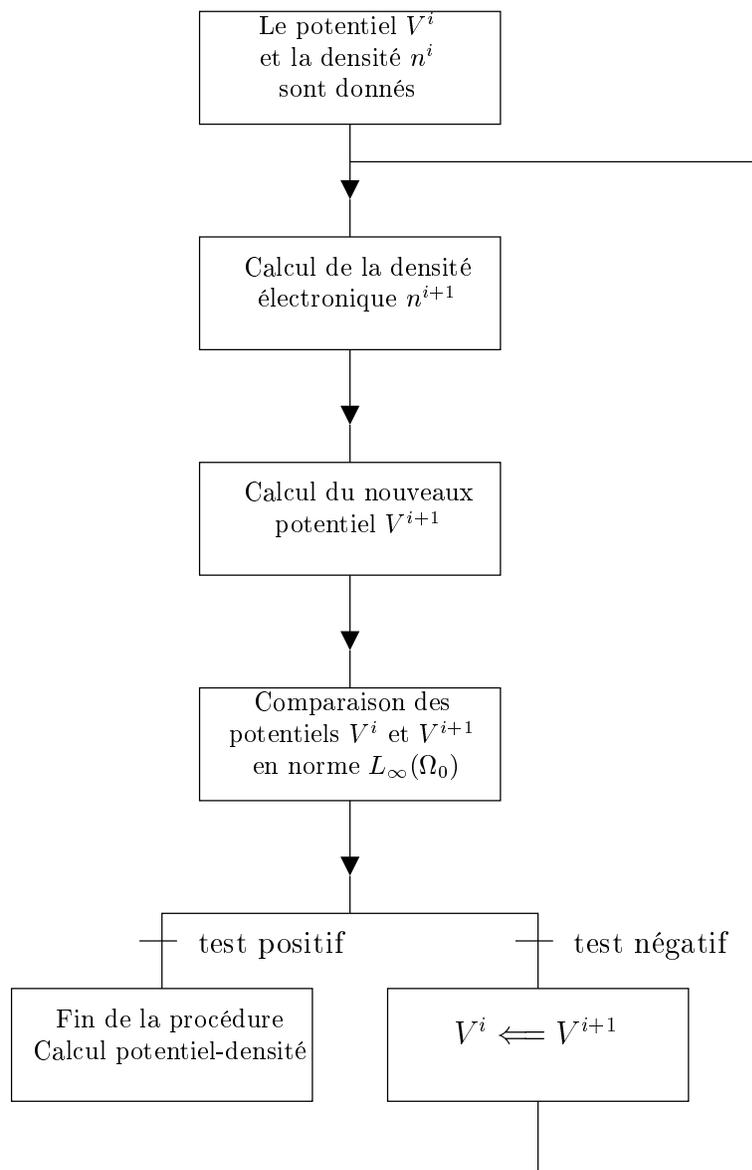


Figure 4.2: Organigramme présentant la procédure générale de calcul du potentiel et de la densité. Le potentiel à l'étape i est donné.

L'organigramme général de calcul du potentiel électrostatique et de la densité électronique est présentée sur la figure 4.2. Le potentiel à l'étape i étant supposé connu, on cherche à le comparer avec le potentiel calculé à l'étape $i + 1$. Les deux procédures de calcul du potentiel et de la densité sont spécifiques aux différents modèles physiques et nécessitent une description plus détaillée.

Procédures de calcul de la densité

On cherche à déterminer la densité électronique $n \equiv n^{i+1}$ à partir de la donnée du potentiel $V \equiv V^i$ et de la densité n^i . En complément, nous verrons qu'il est pratique de prendre aussi en compte dans la procédure de calcul de la densité, le calcul de l'intensité et de la conductance dans le cas des modèles quantiques 3D et quasi-3D. Les diverses intégrations numériques sur x, y ou sur z que nous rencontrerons sont résolues à l'aide de la méthode numérique d'intégration des trapèzes (les éléments finis étant de type \mathbb{P}_1 sur $\overline{\omega_0}$ et sur $[0, L_z]$). Nous choisissons d'utiliser la méthode numérique d'intégration de Simpson pour une meilleure précision dans le calcul des intégrations sur les énergies ou sur les impulsions (le nombre d'intervalles de discrétisation étant alors pair). Les différentes procédures de calcul dépendent des différents modèles physiques, tels que les modèles semi-classique et quantique 3D, ainsi que les modèles hybride et quantique quasi-3D.

1. **Le cas semi-classique 3D** : le calcul de la densité s'effectue à l'aide de l'approximation de Thomas-Fermi (3.58). Dans cette approche, on a uniquement besoin de calculer l'intégrale de Fermi-Dirac présentée en (3.59).
2. **Le cas quantique 3D** : le calcul de la densité nécessite la résolution d'un grand nombre d'équations de Schrödinger en fonction de l'énergie. Les fonctions d'onde ainsi obtenues, nous pouvons aussi déterminer les coefficients de transmission nécessaires au calcul de l'intensité et de la conductance. Le tableau 2 regroupe les différentes étapes du calcul de la densité, de l'intensité et de la conductance.

<p>a- Calcul des fonctions et valeurs propres transverses χ_m^j et E_m^j sur Γ_j</p> <p>b- Calcul des fonctions d'onde $\{\Psi_{j_0, m_0, k}\}$ et des coefficients de Transmission $\{T_{j_0 \rightarrow j}\}$ associés aux énergies $E = E_{m_0}^{j_0} + \frac{\hbar k^2}{2m^*}$</p> <p>c- Calcul de la densité électronique n</p> <p>d- Calcul des intensités I_j dans chacun des guides j</p> <p>e- Calcul des conductances $G_{j_0 j}$</p>

Tableau 4.2: Présentation des différentes étapes dans le calcul de la densité, de l'intensité et de la conductance dans le cas quantique.

Dans la première étape de calcul (a), il nous faut résoudre des systèmes aux valeurs propres généralisées sur les bords Γ_j ($j = 1, \dots, N$) du type (4.76). Remarquons qu'il est possible de passer d'un problème aux valeurs propres généralisées à un problème classique aux valeurs propres en utilisant la décomposition de Cholesky $\mathbf{M} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$ de la matrice de masse M . L'équation (4.76) peut alors s'écrire de manière équivalente

$$\begin{aligned} \mathbf{C} \bar{\varphi} &= \lambda \bar{\varphi} \\ \text{avec } \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{C} = \mathbf{L}^{-1} \mathbf{R} (\mathbf{L}^T)^{-1} \\ \bar{\varphi} = \mathbf{L}^T \varphi. \end{array} \right. \end{aligned} \quad (4.79)$$

Remarque: dans le but d'obtenir un problème aux valeurs propres classique, nous pourrions aussi envisager d'utiliser une condensation de masse de la matrice M (celle-ci devient diagonale). Cependant, dans notre cas bidimensionnel possédant un maillage destructuré, cette méthode s'est révélée peu efficace.

Le problème classique aux valeurs propres (4.79) peut être résolu soit par la méthode de résolution directe de Jacobi dans le cas de petits systèmes (\mathcal{N}_{2,Γ_j} est petit), soit par la méthode de résolution itérative de Lanczos dans le cas de grands systèmes (\mathcal{N}_{2,Γ_j} est grand).

Remarque: nous nous intéressons uniquement aux premiers niveaux d'énergie. La somme infinie sur les modes transverses évanescents qui apparaît dans la résolution de l'équation de Schrödinger est dans les faits bornée par M^{sup} . Nous verrons que M^{sup} n'a pas besoin d'être très grand car la contribution des termes évanescents est négligeable lorsque l'on s'éloigne un peu des modes d'injection (nous injectons uniquement des ondes sur le premier ou le deuxième mode).

La deuxième étape (b), concerne la résolution d'un grand nombre de systèmes linéaires du type (4.41), où nous rappelons que \mathbf{A} est une matrice complexe, symétrique et creuse (diagonale par bloc). À partir du calcul des différents coefficients B_m^j (4.40) indépendamment de l'énergie (à l'aide du calcul d'une intégrale numérique), nous pouvons construire la matrice \mathbf{A} pour une énergie $E(j_0, m_0, k)$ donnée. Nous effectuons alors la résolution de ce système linéaire à l'aide de la méthode de résolution itérative QMR (Quasi Minimal Residual) proposée par Freund [52, 53], et munie d'un préconditionneur (SSOR ou ILUT).

Remarque: une méthode de type GMRES avec préconditionneur (SSOR ou ILUT) a aussi été testée. Cependant, la méthode QMR que nous utilisons est adaptée au problème symétrique et se révèle bien plus efficace pour nos calculs (elle est de plus optimisée pour des systèmes creux et complexes). Notons que la taille du système

peut être très grande, $\mathcal{N}_{3,\Omega_0} \sim 300000$. Le temps de calcul de la procédure de résolution est un facteur non négligeable puisque que nous avons besoin de résoudre un nombre considérable de systèmes linéaires afin de déterminer l'ensemble des fonctions d'onde $\Psi_{j_0,m_0,k}$. Par conséquent, le modèle 3D se révèle extrêmement coûteux numériquement dans le calcul des fonctions d'onde. Nous verrons que dans le modèle quasi-3D, la taille du système est considérablement réduit, ce qui permet de réduire considérablement le temps de calcul.

Nous cherchons à résoudre l'ensemble des fonctions d'onde $\Psi_{j_0,m_0,k}$ à l'aide d'une boucle sur les énergies. Pour réaliser cette boucle sur les énergies, nous effectuons tout d'abord une boucle sur les guides d'injection j_0 ($j_0 = 1, \dots, N$), puis sur les modes d'injection m_0 ($m_0 = 1, \dots, M^{j_0}$), et finalement sur les impulsions k . En pratique, l'énergie d'intégration maximale (idem impulsion maximale), notée E_j^{sup} , n'est pas infinie, elle dépend du niveau du potentiel chimique de chaque réservoir (niveaux de Fermi) et de l'excitation thermique (*voir* Figure 1.3). Nous posons alors

$$E_j^{sup} = \mu_j + 4k_B T, \quad (4.80)$$

et nous supposons que pour $E > E_j^{sup}$ l'intégrale de Fermi-Dirac associée au guide j d'injection est nulle. Dès qu'une fonction d'onde $\Psi_{j_0,m_0,k}$ est obtenue, on peut calculer les coefficients de transmission $T_{j_0 \rightarrow j}(E)$ définis en (2.70) à l'aide de (2.58). Nous devons pour cela connaître les amplitudes b_m^j des ondes réfléchies dans les guides qui peuvent être déterminées à partir des coefficients Ψ_m^j (2.19). Ces coefficients s'obtiennent en effectuant des intégrations numériques (2.18) sur les bords Γ_j .

Dans les dernières étapes (c), (d) et (e), les calculs de la densité électronique (3.57), de l'intensité (2.77) et de la conductance (2.86), nécessitent le calcul d'une intégrale sur les énergies. Il n'est pas nécessaire de stocker en mémoire toutes les fonctions d'onde, car nous pouvons utiliser la méthode d'intégration de Simpson à l'intérieur de la boucle sur les énergies.

Remarque:

- le pas de discrétisation de l'intégrale sur les énergies est choisi uniforme. Nous veilleront, cependant, à ce que ce pas sur les énergies soit assez petit afin de bien cerner les variations des courbes de transmission en fonctions des énergies.
- les calculs des coefficients B_m^j , ainsi que la plus grande partie de l'assemblage de la matrice \mathbf{A} , peuvent s'effectuer une fois pour toute avant la boucle sur les énergies.

3. **Le cas hybride quasi-3D :** le calcul de la densité nécessite l'obtention des densités bidimensionnelles $n_{2D}^{n_0}$ associés au modes verticaux n_0 . Les différentes étapes concernant le calcul de la densité électronique à partir du potentiel électrostatique sont décrites dans le tableau (3).

Les premières étapes de calcul (a) et (b) nécessitent respectivement le calcul des intégrales en espace (3.11) et (3.12).

a-	Calcul de la densité surfacique n_s (avec n^i)
b-	Calcul du potentiel $U_1(z)$
c-	Calcul des fonctions et valeurs propres verticales $\phi_n(z)$ et E_{zn} sur $]0, L_z[$
d-	Calcul des potentiels $\{\widehat{U}_{n_0}\}$ et des densités bidimensionnelles $\{n_{2D}^{n_0}\}$ associés aux modes propres verticaux E_{zn_0}
e-	Calcul de la densité électronique n

Tableau 4.3: Présentation des différentes étapes dans le calcul de la densité dans le cas hybride.

Dans l'étape (c), il nous faut résoudre un système aux valeurs propres généralisées sur z du type (4.76). Nous avons vu qu'un tel système peut s'écrire sous la forme d'un problème aux valeurs simples du type (4.79). Comme ce système est de très petite taille ($\mathcal{N}_{1,z}$ est petit), la méthode de résolution de Jacobi apparaît la mieux adaptée au problème.

L'étape (d) concerne le calcul de l'ensemble des densités bidimensionnelles $n_{2D}^{n_0}$ associées au potentiel \widehat{U}_{n_0} . Ce potentiel bidimensionnel est résolu à travers l'intégrale sur les z (3.7), et la densité à l'aide de l'expression (3.62). Le nombre de modes propres verticaux maximum, noté n_0^{sup} , dépend de l'énergie d'intégration maximale E^{sup} définie dans le cas du modèle hybride par

$$E^{sup} = \mu + 4k_B T. \quad (4.81)$$

Comme dans notre modèle, nous ne tenons compte que d'une énergie bidimensionnelle positive (*voir* la description du modèle quantique quasi-3D qui suit). On peut alors écrire la condition suivante

$$n_0^{sup} = \sup_{n_0} \{n_0 \geq 1; E^{sup} > E_{zn_0}\}. \quad (4.82)$$

Le calcul de la densité électronique à l'étape (e), s'effectue à l'aide la sommation sur les modes verticaux n_0 allant jusqu'à n_0^{sup} définie en (3.21).

4. **Le cas quantique quasi-3D :** les étapes de calcul de la densité électronique ont déjà été détaillées sur le tableau (3.1). Ces étapes de calcul sont identiques à celles énoncées dans la procédure de calcul de la densité pour le modèle hybride (*voir* tableau 3) hormis pour le calcul de la densité bidimensionnelle. En effet, cette dernière nécessite la prise en compte des fonctions d'onde bidimensionnelles $\psi_{j_0, m_0, k}^{n_0}$. Comme dans le cas du modèle quantique 3D, il s'agit alors de résoudre un grand nombre de

systèmes linéaires du type (4.27), où nous rappelons que \mathbf{A} est une matrice complexe, symétrique et creuse (diagonale par bloc). A partir du calcul des différents coefficients B_p^j (4.26) (indépendamment de l'énergie) qui sont obtenus à l'aide des fonctions propres, et valeurs propres transverses $\widehat{\chi}_p^j$ et \widehat{E}_p^j (problèmes aux valeurs propres généralisées sur les γ_j du type (4.76) et (4.79), résolus à l'aide de la méthode de Jacobi car \mathcal{N}_{1,γ_j} est petit), nous pouvons construire la matrice \mathbf{A} pour une énergie $E(j_0, p_0, n_0, k)$ donnée. Nous effectuons alors la résolution de ce système linéaire à l'aide de la méthode QMR avec préconditionneur.

Remarque: contrairement au modèle quantique 3D, dans le modèle quasi-3D, la taille du système linéaire est considérablement réduite, $\mathcal{N}_{2,\omega_0} \sim 5000$.

Nous cherchons à résoudre l'ensemble des fonctions d'onde $\psi_{j_0,p_0,n_0,k}$ à l'aide d'une boucle sur les énergies bidimensionnelles ($E - E_{zn_0}$) à n_0 fixé. Pour réaliser cette boucle sur les énergies, nous effectuons tout d'abord une boucle sur les guides d'injection j_0 ($j_0 = 1, \dots, N$), puis sur les modes d'injection p_0 ($p_0 = 1, \dots, P^{j_0}$), et finalement sur les impulsions k . En pratique, l'énergie bidimensionnelle d'intégration maximale (idem impulsion maximale), notée $E_j^{sup} - E_{zn_0}$, n'est pas infinie, elle dépend du niveau du potentiel chimique de chaque réservoir et de l'excitation thermique (voir Figure 1.3). Rappelons que l'énergie maximale E_j^{sup} a déjà été définie dans le cas du modèle quantique 3D en (4.80). Le nombre de mode vertical maximum n_0^{sup} que nous prendrons en compte peut s'écrire

$$n_0^{sup} = \sup_{n_0} \{n_0 \geq 1; \max_j \{E_j^{sup}\} > E_{zn_0}\}. \quad (4.83)$$

Remarque: la condition (4.83) implique que nous ne tenons compte que d'une énergie bidimensionnelle positive. Cela constitue, en effet, une condition nécessaire pour autoriser le transport électronique bidimensionnel en faisant apparaître des modes propres transverses p dans les guides.

Finalement, notons qu'à l'instar du modèle 3D, dès qu'une fonction d'onde $\psi_{j_0,p_0,n_0,k}$ est obtenue, on peut calculer les coefficients de transmission $T_{j_0 \rightarrow j}(E)$. Il n'est pas nécessaire de stocker en mémoire toutes les fonctions d'onde, car nous pouvons utiliser la méthode d'intégration de Simpson à l'intérieur de la boucle sur les énergies, afin de calculer la densité électronique, l'intensité et la conductance.

Procédures de calcul du potentiel

Dans le modèle semi-classique 3D où la densité électronique est une fonctionnelle de V locale en \mathbf{x} , nous utilisons la méthode de résolution numérique de Newton sur le potentiel décrite dans l'annexe C. Dans tous les autres modèles, la densité électronique est une fonctionnelle de V non locale en \mathbf{x} , nous utilisons par conséquent la méthode de résolution implicite des itérations de Gummel présentée aussi dans l'annexe C. En effet, il

existe une dépendance fortement non-linéaire entre le potentiel et la densité, si bien que la méthode de relaxation présentée aussi dans l'annexe C, s'est révélée peu efficace. La prise en compte d'un schéma de calcul implicite s'avère donc nécessaire. L'équation que nous cherchons à résoudre est du type

$$\begin{cases} -\nabla(\epsilon_r(z)\nabla V(\mathbf{x})) = \frac{q}{\epsilon_0}N_D^+(z) - \frac{q}{\epsilon_0}n[V](\mathbf{x}) & \text{dans } \Omega_0, \\ \text{avec les conditions aux bords (3.26) sur } \partial\Omega_0. \end{cases} \quad (4.84)$$

Elle peut encore s'écrire

$$-\nabla(\epsilon_r(z)\nabla V(\mathbf{x})) = \frac{q}{\epsilon_0}N_D^+(z) - \frac{q}{\epsilon_0}n[V](\mathbf{x})\frac{\mathcal{T}[V]}{\mathcal{T}[V]} \quad (4.85)$$

avec $\mathcal{T}[V]$ une fonctionnelle de V non locale en x (avec une dépendance exponentielle en V). Compte tenu du comportement semi-classique de la densité (3.58), un choix possible est $\mathcal{T}[V] = \exp(q\beta V)$. Ainsi, le schéma itératif donnant V^{i+1} en fonction de V^i peut ensuite s'explicitier comme

$$-\nabla(\epsilon_r(z)\nabla V^{i+1}(\mathbf{x})) = \frac{q}{\epsilon_0}N_D^+(z) - \frac{q}{\epsilon_0}n[V^i](\mathbf{x})\exp(q\beta(V^{i+1} - V^i)). \quad (4.86)$$

Intuitivement, dans ce schéma de calcul itératif, plus la différence entre le nouveau potentiel V^{i+1} et l'ancien potentiel V^i est importante, moins la contribution de la densité n au calcul du nouveaux potentiel V^{i+1} est prise en compte. Nous obtenons alors un système non-linéaire en V^{i+1} . L'annexe C présente la méthode de Gummel [61] qui consiste à linéariser ce système.

Dans un cas général pour tous les modèles, la procédure de calcul du potentiel V^{i+1} à l'aide de n^{i+1} , nécessite la résolution d'un système linéaire du type (4.57) où la matrice \mathbf{A} est une matrice réelle, symétrique, et creuse (diagonale par bloc). Nous avons vu que la taille de ce système linéaire pouvait être très grand ($\mathcal{N}_{3,\Omega_0} \sim 300000$), mais contrairement au calcul des fonctions d'onde, la matrice \mathbf{A} est définie positive. Nous choisissons d'utiliser la méthode de résolution itérative du gradient conjugué munie d'un preconditionneur de Cholesky incomplet.

Test sur le potentiel

C'est un test en norme L^∞ sur Ω_0 qui compare le potentiel à l'étape i avec celui obtenue à l'étape $i + 1$. Nous dirons que la convergence est atteinte quand la norme est inférieure à un certain ϵ , lequel est lié au pas d'intégration sur les énergies (il doit être supérieur au pas).

Initialisation

Nous cherchons à connaître le potentiel et la densité à l'étape $i = 0$. Dans le cas du modèle semi-classique 3D, V^0 peut être choisi quelconque, la procédure de calcul Newton assurant rapidement la convergence. En ce qui concerne les autres modèles, le choix d'un

potentiel V^0 peu éloigné de la solution finale est essentiel pour assurer la convergence de la méthode des itérations de Gummel. Dans ces conditions, nous allons procéder par étape. Dans un premier temps, nous effectuerons le calcul du potentiel et de la densité 3D du modèle semi-classique qui s'avère être une estimation de l'ordre de grandeur des modèles quantiques plus réalistes. En outre, nous pouvons chercher une estimation de ces quantités encore meilleure à l'aide du modèle hybride. Pour finir, nous nous servirons du potentiel et de la densité obtenus, afin d'initialiser les deux modèles quantiques 3D et quasi-3D, mais uniquement à l'équilibre ($\mu = \mu_j \quad \forall j$).

Dans le but d'obtenir des caractéristiques courant-tension, nous avons renouvelé la procédure générale de calcul présentée sur la figure 4.2 dans les cas quantiques, et pour des petites variations croissantes ou décroissantes d'un potentiel de polarisation v_j (idem μ_j d'après (2.78)). Chaque potentiel et densité ainsi obtenus après convergence de la procédure de calcul, pourra servir d'initialisation pour la nouvelle procédure à résoudre.

Le modèle de quasi-équilibre sur les bords

Avant de conclure cette section, remarquons que l'on effectue aussi la résolution du modèle de quasi-équilibre à travers la procédure de calcul présentée sur la figure 4.2. Dans ces conditions, le calcul de la densité électronique quantique s'effectue à l'aide de l'expression (A.7), qui nécessite uniquement la connaissance des fonctions propres χ_m^j associées aux valeurs propres transverses E_m^j (calculs déjà spécifiés dans le cas des conditions aux bords sur γ_j du modèle quantique 3D). La résolution numérique du système couplé sur le potentiel peut aussi s'effectuer à l'aide de la méthode de calcul implicite des itérations de Gummel décrite dans l'annexe C.

Remarque: l'utilisation d'une méthode de résolution de Newton bidimensionnelle dérivant de la méthode de résolution de Newton présentée dans [84] dans le cas unidimensionnel, est possible.

L'initialisation de la procédure de calcul du modèle de quasi-équilibre quantique s'effectue à l'aide d'un modèle semi-classique (la résolution de la densité électronique semi-classique sur Γ_j s'effectue de la même manière que dans le cas 3D semi-classique).

4.2.2 Présentation du code “NESSIE”

Nano-Electronics Simulator for Systems with Interference Effects

Au cours de cette thèse, un code de calcul 3D baptisé NESSIE, a été élaboré en Fortran 90. Comme décrit dans la section précédente, il fait appel à de nombreuses routines numériques. Certaines routines font partie intégrante de paquetages informatiques parmi lesquels on compte les bibliothèques mathématiques :

- LAPACK90, pour les routines d’algèbre linéaire (résolution des problèmes aux valeurs propres généralisées . . .)
- QMR, bibliothèque proposée par Freund.

Nous utilisons aussi le mailleur 2D EASYMESH [83] afin de discrétiser le domaine ω_0 . Il nous donne en outre, la possibilité de marquer toutes les frontières γ_j et γ_F de manière à les différencier. Remarquons que la nature du dispositif étudié dépend de la configuration des grilles en surface, et notamment de l’orientation des guides et du nombre de guides N . NESSIE est un code de calcul de type général qui permet de prendre en compte n’importe quelle géométrie pouvant s’appuyer sur un nombre de guides quelconques, et dont leur orientation nécessite que la coordonnée locale longitudinale η_j soit parallèle au guide d’onde j (voir Figure 2.1). Par exemple, nous pourrions considérer des dispositifs croisés où les guides d’onde sont à la fois horizontaux et verticaux. Le code de calcul NESSIE permet aussi de prendre en compte plusieurs paramètres d’entrées qui sont décrits dans le tableau (4.2.2).

En ce qui concerne les spécificités dans la construction du code NESSIE, nous pouvons citer :

- l’utilisation du format de stockage CSR (**C**ompressed **S**parse **R**ow) pour les matrices. En effet, toutes les matrices du problème sont creuses et le stockage CSR est le stockage le moins gourmand en mémoire. La procédure d’assemblage des matrices (liée à la méthode des éléments finis), ainsi que tous les calculs effectués sur les matrices sont réalisés dans ce même format.
- la parallélisation de la procédure de calcul des fonctions d’onde décrite dans les modèles quantiques. En effet, ces calculs sont indépendants les uns des autres, et ils représentent la plus grande partie du temps de calcul. A l’aide de la parallélisation via le langage MPI, ce temps de calcul est alors réduit (divisé) d’autant que le nombre de processeurs qui sont mis en jeu.
- la séparation en couche du problème pour le calcul de la fonction d’onde tridimensionnelle du modèle quantique 3D. En effet, comme les électrons sont situés autour de l’hétérojonction AlGaAs/GaAs, nous pouvons isoler une couche s’étalant à l’intérieur du AlGaAs et du substrat GaAs, qui contient toute l’information sur la fonction d’onde. Nous allons alors résoudre l’équation de Schrödinger 3D dans cette couche (munie de conditions de Dirichlet homogènes aux deux extrémités), et non plus dans tout le domaine Ω_0 . Le coût numérique du calcul est alors réduit de manière significative. Nous notons $\mathcal{N}_{3,\Omega_0}^h$ le nombre de points associé à ce domaine réduit.

N, L_i	les paramètres liés au maillage comme le nombre de guides et leur largeur associée
L_x, L_y, L_z	les dimensions du composant (domaine ω_0)
T	la température
μ	le potentiel chimique à l'équilibre
V_G	le potentiel de grille
V_S	le potentiel d'accrochage en surface
v_j	les potentiels de polarisation
M^{sup}	le nombre de modes transverses évanescents maximum
$l_z, N_D^+(z)$	la largeur et le dopage des couches semi-conductrices suivant z décrites sur la figure 1.8
x	le pourcentage x d'aluminium dans la couche $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, notons que le gap d'énergie entre les matériaux AlGaAs et GaAs vaut $E_c = 0.77x$
$\epsilon_r(z)$	la constante diélectrique relative suivant z
m^*	la masse effective du GaAs

Tableau 4.4: Paramètres d'entrée du code de calcul NESSIE.

4.3 Résultats numériques

Nous allons maintenant présenter plusieurs résultats numériques pour des dispositifs se trouvant dans la configuration du stub électronique (avec deux guides d'onde) et dans la configuration du coupleur quantique (avec quatre guides d'onde). Dans un premier temps, les simulations numériques vont nous permettre de comparer les modèles semi-classique et quantique à l'équilibre. Nous montrerons ensuite l'efficacité du modèle quasi-3D quantique en le comparant avec le modèle 3D quantique dans le cas du stub électronique. Nous établirons finalement les caractéristiques courant-tension de ce dispositif. La structure plus complexe du coupleur quantique sera étudiée uniquement à l'aide du modèle quantique quasi-3D.

Dans tous les dispositifs étudiés, les paramètres d'entrées sont nombreux (*voir* tableau 4.2.2), nous choisissons alors arbitrairement les paramètres communs à toutes les simulations suivants :

- $T = 4\text{K}$, (la condition de très basse température est nécessaire pour obtenir un transport balistique),
- $L_z = 185\text{nm}$,
- $x = 0.26$,
- $m^* = 0.067m_e$, avec m_e masse de l'électron dans le vide,
- $\epsilon_r(z) = 12.88$, prise identique pour le AlGaAs et le GaAs dans nos simulations,
- $V_S = -0.7\text{V}$,
- $M^{sup} = 6$, nous montrerons que cette valeur maximale de mode propres transverses est suffisante si le nombre de modes propagatifs M^j ou P_n^j est petit (≤ 2),
- $\mu = 0$,
- les largeurs l_z , et les dopages N_D^+ des différentes couches verticales (*voir* Figure 1.8) sont définis par :

Matériaux	l_z en nm	N_D^+ en m^{-3}
GaAs	5	$2.4 * 10^{24}$
n-AlGaAs	20	$2.4 * 10^{24}$
AlGaAs	10	0
Substrat	150	0

l'hétérojonction AlGaAs/GaAs(substrat) se situe donc à 35nm en dessous de la surface du composant,

- $V_G = -0.5\text{V}$ pour le cas du stub et $V_G = -0.53\text{V}$ pour le cas du coupleur.

Les paramètres μ , l_z , N_D^+ , et V_G , ont été ajustés de manière à ce que les électrons soient tous confinés dans le premier mode vertical $n = 1$. On note ainsi que μ et μ_j définis en (2.78) sont compris entre les deux premiers modes verticaux E_{z1} et E_{z2} dans le cas des modèles quasi-3D (pour des petites valeurs de potentiel de polarisation v_j). Les énergies maximales d'intégration E_j^{sup} définies en (4.80), doivent également vérifier cette condition. Ces données impliquent encore que l'injection des électrons s'effectue sur les deux modes transverses dans le cas des modèles quantiques.

4.3.1 Le stub électronique

Les différents paramètres qui caractérisent les dimensions du domaine Ω_0 du stub électronique, sont décrits sur la figure 4.3. Nous posons $L_x = 300\text{nm}$ et $L_y = 210\text{nm}$. Dans notre cas, la profondeur et la largeur du stub sont respectivement donnés par $W = 40\text{nm}$ et $L_s = 60\text{nm}$, la largeur des guides est identique et vaut $L_1 = L_2 = 60\text{nm}$. Les dimensions de grilles sont définies par $L_{G_3} = 50\text{nm}$, $L_{G_4} = 100\text{nm}$, et $L_{G_1} = L_{G_2} = 120\text{nm}$. Le domaine ω_0 muni de sa triangulation \mathcal{T}_{2,ω_0} , ainsi que le domaine Γ_1 (idem Γ_2) muni de sa “triangulation” \mathcal{T}_{2,Γ_1} , sont présentés sur la figure 4.7.

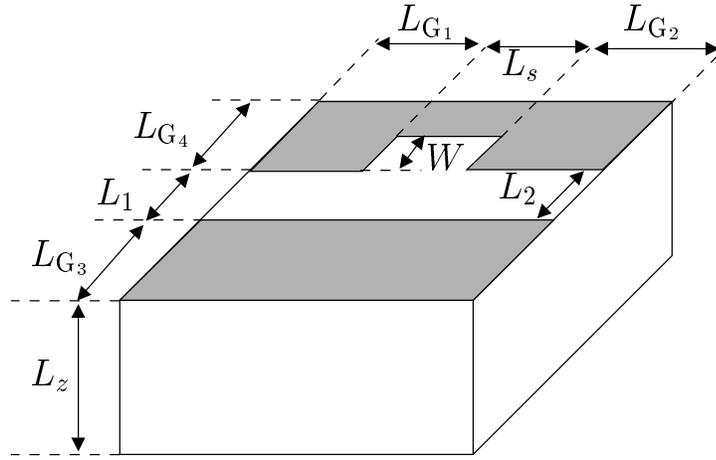


Figure 4.3: Description des longueurs caractéristiques du domaine Ω_0 . On note alors que $L_x = (L_{G_1} + L_s + L_{G_2})$ et $L_y = (L_{G_3} + L_1 + L_{G_4})$.

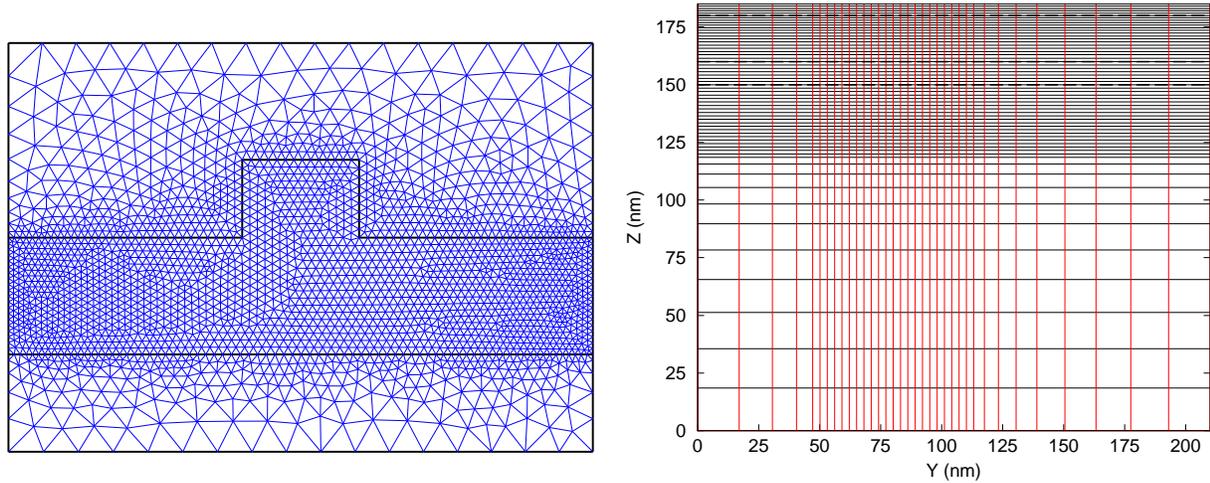


Figure 4.4: Maillage du domaine $\overline{\omega_0}$ (à gauche) et maillage du domaine $[0, L_z]$.

Le nombre de noeuds du maillage \mathcal{T}_{2,ω_0} est $\mathcal{N}_{2,\omega_0} = 2514$, et le nombre de couches est $\mathcal{N}_{1,z} = 61$. Par conséquent, avec (4.12) on obtient $\mathcal{N}_{3,\Omega_0} = 153354$. Le nombre de points du domaine réduit que nous avons choisi vaut $\mathcal{N}_{3,\Omega_0}^h = 87990$ (nous considérons 35 couches). En complément, notons que le nombre de noeuds sur γ_1 et γ_2 est identique et égal à $\mathcal{N}_{1,\gamma_1} = \mathcal{N}_{1,\gamma_2} = 36$, et avec (4.14) on obtient $\mathcal{N}_{2,\Gamma_1} = \mathcal{N}_{2,\Gamma_2} = 2196$.

Comparaison des modèles semi-classique et quantique 3D à l'équilibre

Dans le cas où le système se trouve à l'équilibre, on note que les potentiels de polarisation v_1 et v_2 sont nuls. Par conséquent, le courant total dans chacun des guides est nul. Dans un premier temps, nous allons effectuer une comparaison qualitative des résultats du calcul de la densité électronique obtenus à l'aide du modèle semi-classique (approximation Thomas-Fermi) et du modèle quantique 3D, qui sont respectivement présentés sur les figures 4.5 et 4.6.

Figure 4.5: Profil de densité dans le stub dans le cas du modèle semi-classique 3D à l'équilibre. Nous avons représenté les plans $x = 0$, $x = L_x/2$, et $x = L_x$, ainsi que le plan du gaz d'électrons.

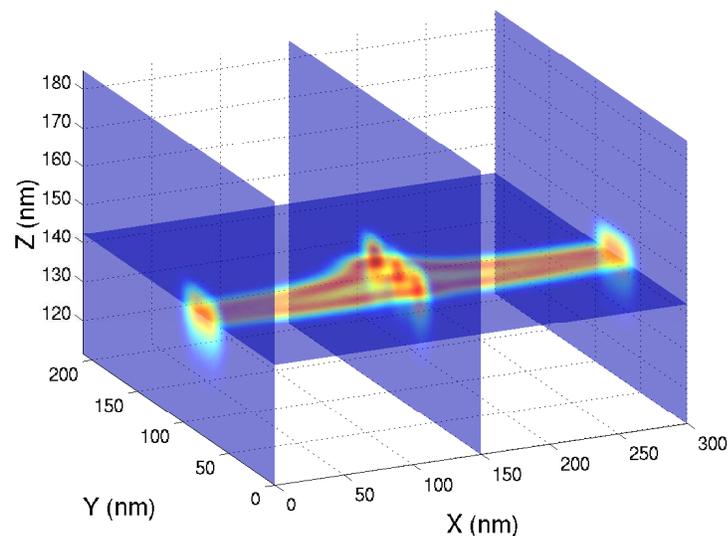
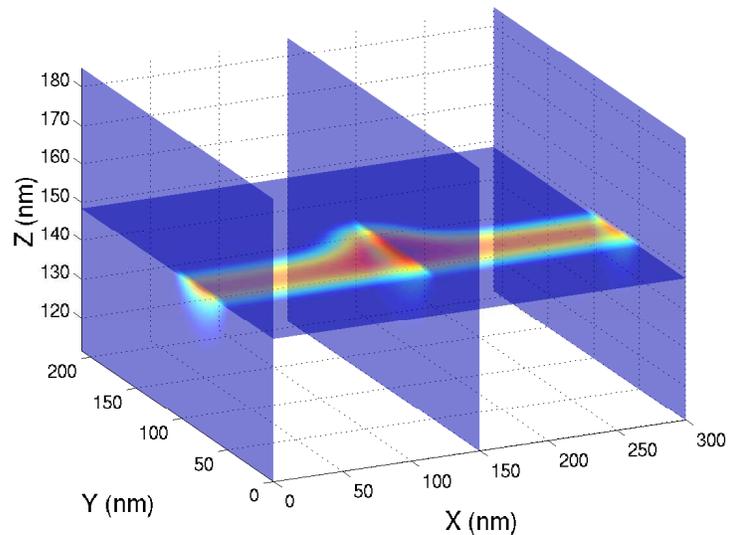


Figure 4.6: Profil de densité dans le stub dans le cas du modèle quantique 3D à l'équilibre. Nous avons représenté les plans $x = 0$, $x = L_x/2$, et $x = L_x$, ainsi que le plan du gaz d'électrons.

Nous pouvons alors noter les deux observations suivantes :

1. dans le cas quantique comme dans le cas semi-classique, les électrons désertent les zones qui se situent sous les grilles en surface. Dans le cas semi-classique, on remarque cependant, que le confinement vertical de électrons se situent essentiellement au niveau de l'hétérojonction (dans notre exemple, à 35nm au dessous de

la surface du composant, c'est à dire à 150nm de la base). Il n'en va pas de même pour le cas quantique, où la majorité des électrons se situent quelques nanomètres en dessous de l'hétérojonction, et où les électrons s'étalent de manière significative dans la direction z . Dans le but d'illustrer plus clairement notre remarque, nous avons représenté sur chacune des figures 4.7 et 4.8, les isocourbes de la densité électronique pour les deux modèles et respectivement sur une coupe en $x = 0$ (au bord du composant dans le guide d'onde) et sur une coupe en $x = L_x/2$ (au milieu du composant dans la zone active).

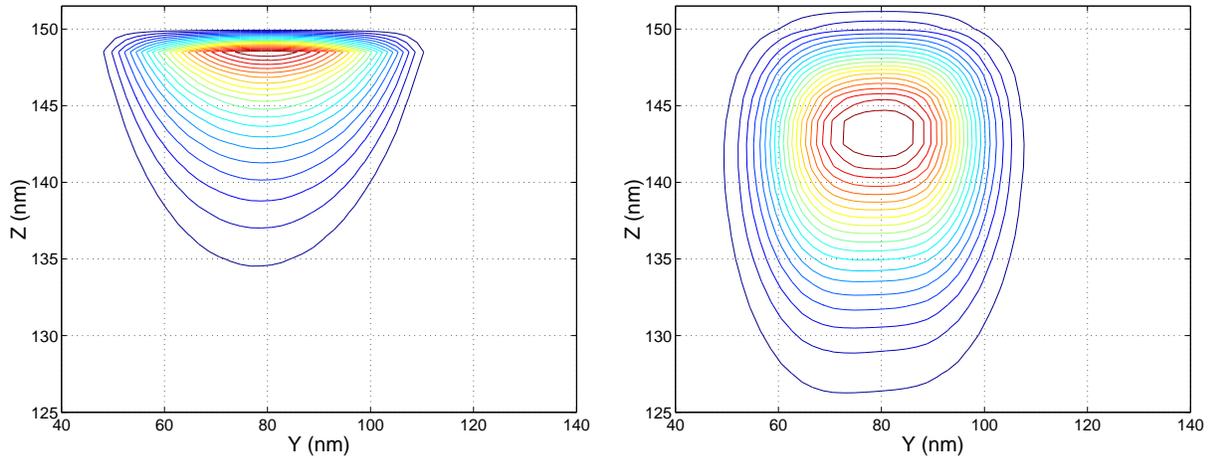


Figure 4.7: Représentation des isocourbes de la densité dans le plan $x = 0$ pour le modèle semi-classique (à gauche) et pour le modèle quantique.

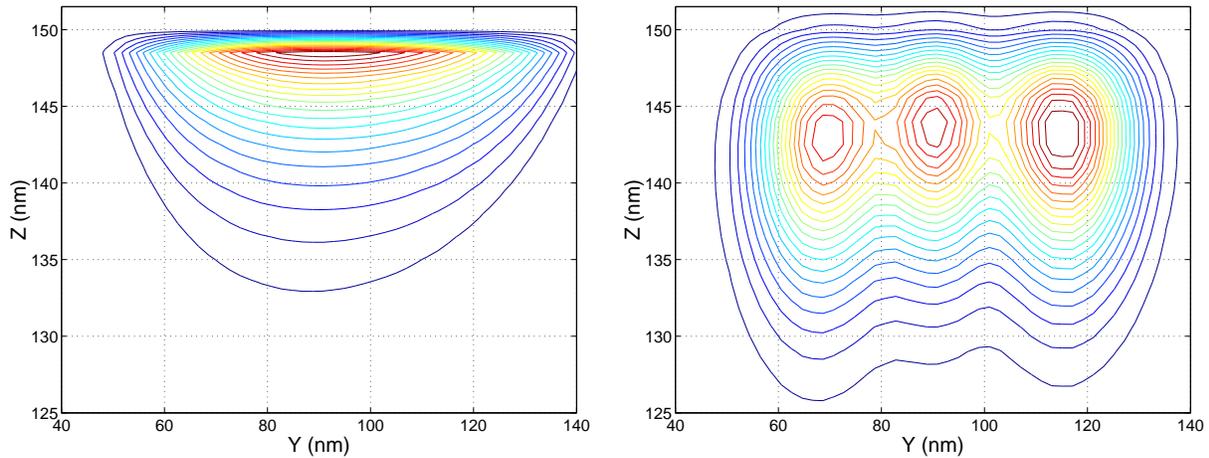


Figure 4.8: Représentation des isocourbes de la densité dans le plan $x = L_x/2$ pour le modèle semi-classique (à gauche) et pour le modèle quantique.

Nous confirmons alors que dans le cas quantique, le gaz d'électrons bidimensionnel est localisé bien en dessous de l'hétérojonction, et qu'il est plus étalé. A l'aide de ces derniers résultats, nous pouvons aussi constater que, contrairement au cas semi-classique, dans le cas quantique, la probabilité de trouver un électron au dessus de l'hétérojonction ($z > 150\text{nm}$) n'est pas nulle. Dans ce dernier cas, nos observations

nous montrent qu'il existe bien un effet tunnel comme cela avait déjà été confirmé dans le cas du fil quantique dans [140].

2. dans le cas quantique, des perturbations sur la densité apparaissent très nettement dans la zone active. Celles-ci sont dues aux effets quantiques (comme les phénomènes d'interférence) qui sont prépondérants à l'intérieur de cette zone. Les différences entre les profils de la densité électronique pour les deux modèles dans le plan du gaz d'électrons peuvent être mieux appréciées à l'aide des résultats sur les densités surfaciques présentés sur la figure 4.9.

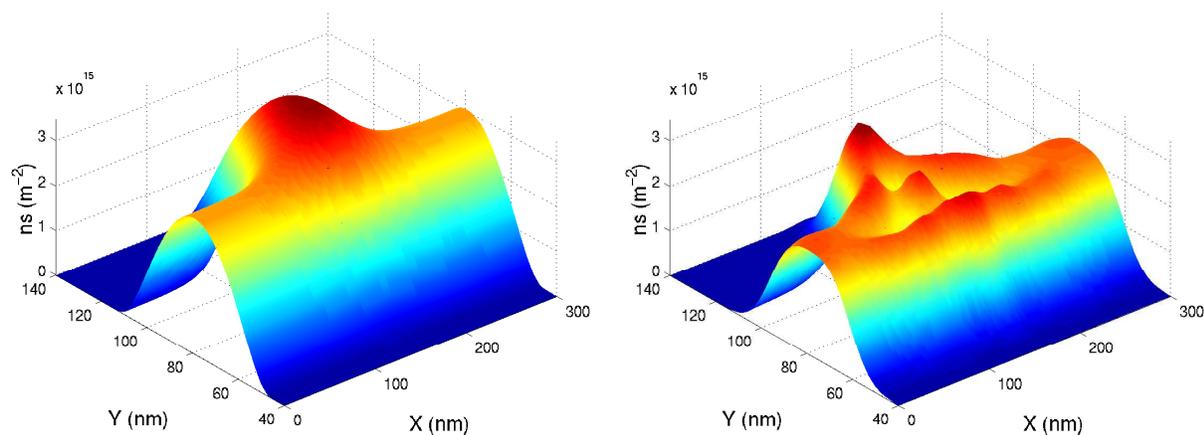


Figure 4.9: Représentation de la densité surfacique pour le modèle semi-classique (à gauche) et pour le modèle quantique.

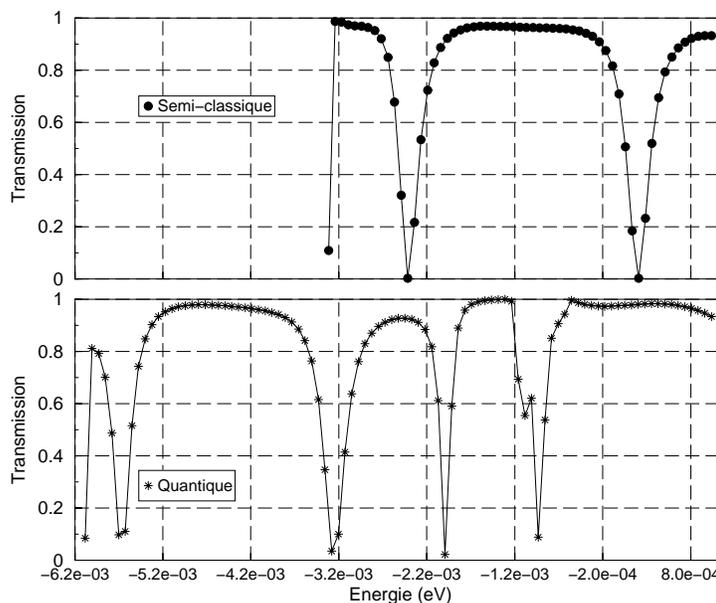
Nous pouvons ainsi observer, toujours dans le cas du modèle quantique, au milieu de la zone active sur les figures 4.6 et 4.8, trois régions bien marquées où les électrons se retrouvent concentrés. Ce phénomène de confinement est immédiatement détruit, lorsque l'on s'éloigne un peu du milieu du stub. Il peut apparaître aussi d'autres effets quantiques plus difficiles à identifier (des phénomènes d'interférence probablement, mais aussi des effets de confinement sur les rebords des cavités du stub par exemple, et même de l'effet tunnel).

Remarque: les simulations tiennent compte de l'injection des porteurs dans les deux modes transverses des guides. Dans les cas tests présentant un seul mode transverse, les effets quantiques dans la zone active apparaissent plus prononcés. On observe par exemple des zones de désertion en électrons dans la zone active [95].

Notons finalement que dans le cas semi-classique de l'approximation de Thomas-Fermi, les charges qui participent au phénomène de conduction ne sont pas prises en compte et le potentiel n'est affecté que par des charges fixes. En comparaison avec le modèle quantique, cette approximation semi-classique donne des résultats qui tendent à surestimer les densités de charges accumulées comme le montre la figure 4.9.

Nous allons apporter aux résultats précédemment établis, à savoir l'observation d'importantes différences existantes entre les modèles semi-classique et quantique, une comparaison plus quantitative à l'aide de l'étude des différences sur le potentiel. Nous ne présenterons pas les figures des profils potentiels obtenus pour les deux modèles, car les différences sur cette quantité ne pourraient sembler sur ces observations que minimales. Toutefois l'étude qualitative précédente sur la densité n'a été rendue possible que parce qu'une très "petite" variation du potentiel peut entraîner une très "grande" variation sur la densité (les fonctions d'onde dépendent "exponentiellement" du potentiel électrostatique). L'étude quantitative sur le potentiel consiste donc à tracer les coefficients de transmission relatifs à une onde injectée dans le guide 1 (par exemple) et transmise dans le guide 2, en fonction de l'énergie. Pour cette étude, nous nous placerons dans le cas monomode de telle sorte que l'injection et la transmission ne s'effectuent que sur le premier mode transverse des guides. Du fait que le potentiel définit la géométrie dans laquelle vont se mouvoir les électrons, les résultats sur la transmission de l'onde injectée dans le guide 1 sont relatifs à un potentiel donné (à savoir dans notre cas, le potentiel obtenu à l'aide du modèle semi-classique et celui obtenu à l'aide du modèle quantique). Les courbes de transmission pour les deux modèles sont données sur la figure 4.10.

Figure 4.10: Résultats des coefficients de transmission d'une onde injectée dans le guide 1 (et le mode 1), qui est transmise dans le guide 2 (et le mode 1), pour les deux modèles : semi-classique et quantique.



Nous pouvons alors constater, qu'indépendamment du modèle, les courbes de transmission présentent d'importantes variations qui se situent entre les valeurs d'une transmission totale $T_{1 \rightarrow 2} = 1$ et d'une réflexion totale $T_{1 \rightarrow 2} = 0$. Ces mêmes types de résultats présentant des fortes non-linéarités, avaient été obtenus avec l'étude simplifiée bidimensionnelle sur le stub électronique muni de murs infinis de potentiels [128, 129]. Les résultats des courbes de transmission montrent clairement que l'échelle sur les énergies est différente pour les modèles semi-classique et quantique. En effet, les courbes ont pour origine l'énergie du premier mode transverse du guide d'injection qui apparaît beaucoup plus petite dans le cas quantique. Ce déplacement sur les énergies peut s'expliquer par la prise en compte du confinement vertical pour les électrons dans le cas quantique. A proximité du niveau

fondamental de chaque modèle, l'allure des courbes (via un déplacement sur l'énergie) est différente, tandis qu'elle semble qualitativement en accord (pour le cas test étudié) pour des énergies plus élevées. Par conséquent, contrairement au cas semi-classique, la prise en compte des réactions de charge d'espace à l'aide du modèle quantique, va avoir tendance à modifier le profil du potentiel de manière significative pour les énergies proches du premier mode d'injection. Pour les énergies plus élevées, les différents cas tests effectués (non présentés ici) pour différentes valeurs du potentiel de grille (ce qui a pour effet de transformer la géométrie du système), montrent aussi des différences sur les courbes de transmission (contrairement au cas test présenté).

Compléments sur le modèle quantique 3D

Nous allons compléter la description du modèle quantique 3D à travers deux remarques.

1. **Les fonctions d'onde** : quand une onde électronique est injectée dans le guide $j_0 = 1$ et le mode $m_0 = 1$, sa fonction d'onde associée est donnée par l'expression (2.51) avec $M^{j_0} = 1$. Par conséquent, la fonction d'onde de cette onde transmise dans le guide $j = 2$ et le mode $m = 1$ est alors donnée par (2.52) avec $M^j = 1$. Nous pouvons remarquer que si l'on s'éloigne à l'intérieur du guide tel que $\eta_j \rightarrow 0$ ($j = 1, 2$), la somme sur les modes évanescents dans ces deux expressions tend à s'annuler. Dans ces conditions, nous pouvons vérifier que la densité de probabilité $|\Psi_E(\mathbf{x})|^2$ de trouver l'électron pour une énergie donnée, est alors de type sinusoïdale dans la direction longitudinale du guide incident 1, et de type constant (car égale à $|b_1^2|^2$) dans la direction longitudinale du guide en sortie 2. Dans notre étude, la zone active Ω_0 comporte une grande partie des guides d'onde et nous pouvons alors supposer, en première approximation, qu'aux limites du composant sur les frontières des guides, la contribution des ondes évanescences au calcul de la fonction d'onde est négligeable.

Remarque: nous avons aussi vérifié à travers nos simulations sur le calcul des fonctions d'onde et des courbes de transmission que cette hypothèse s'avère correcte. Ainsi, le choix du nombre d'onde évanescent maximum M^{sup} qui a été fixé à 6 dans les simulations, s'avère être une majoration supérieure (très) suffisante.

Si l'on observe maintenant les courbes de transmission obtenues à travers la figure 4.10 pour le cas quantique, nous pouvons remarquer, par exemple, que pour l'énergie $E = -3.27 * 10^{-3}$ eV, la réflexion dans le guide 1 est totale, tandis que pour l'énergie $E = -1.34 * 10^{-3}$ eV, c'est la transmission dans le guide 2 qui est totale. Notons que, quelle que soit la valeur de l'énergie, la somme du coefficient de réflexion et de transmission est bien égale à 1 en accord avec le résultat (2.66) de la proposition 2.3. Nous avons donc choisi de représenter les densités de probabilité électronique (module de la fonction d'onde au carré) relatives à ces deux énergies particulières, ainsi que pour une énergie intermédiaire, ne présentant ni réflexion totale, ni transmission totale, prise par exemple pour $E = -3.43 * 10^{-3}$ eV. Pour un plus grand

confort dans les observations, nous avons fait le choix de représenter uniquement l'intégration sur l'axe des z de ces densités de probabilité, ce qui pourrait être interprété comme une projection sur le plan du gaz d'électrons. Ainsi, nous définissons la fonction $\Upsilon(x, y)$ par

$$\Upsilon(x, y) = \int_0^{L_z} |\Psi(\mathbf{x})|^2 dz. \quad (4.87)$$

La représentation des isocourbes des fonctions $\Upsilon(x, y)$ pour le cas d'une réflexion totale, d'une transmission totale, et d'une situation intermédiaire, sont respectivement données sur les figures 4.11, 4.12 et 4.13.

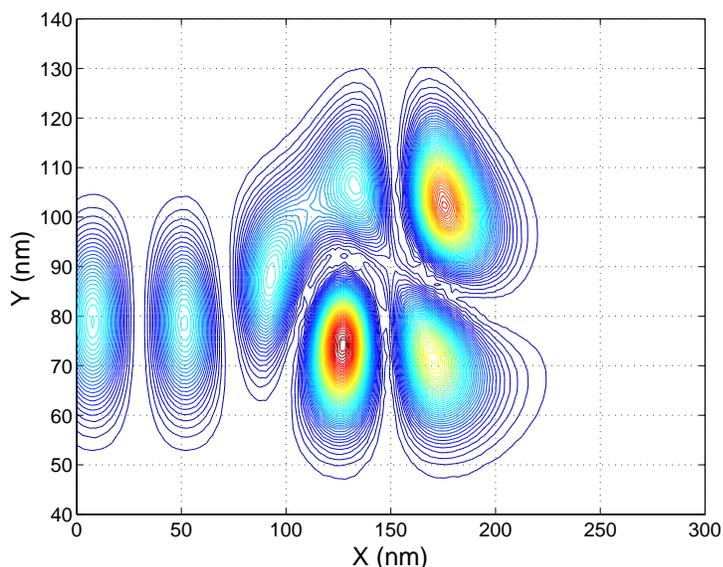
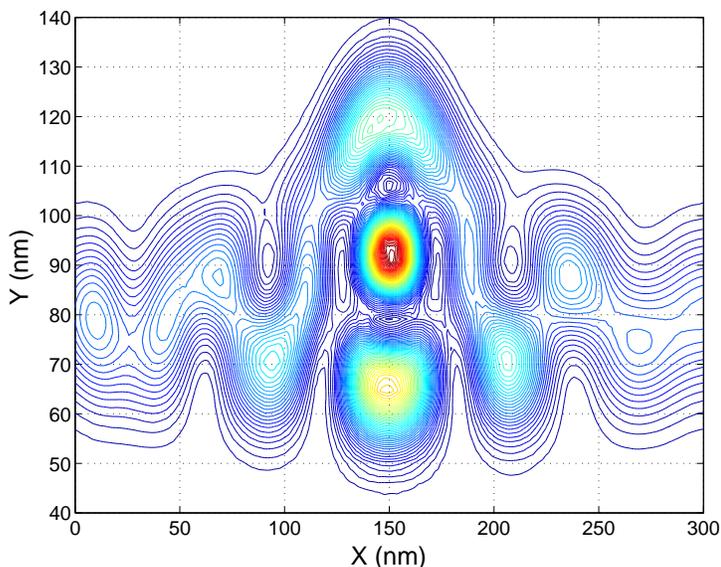


Figure 4.11: Représentation des isocourbes de la fonction $\Upsilon(x, y)$ pour une énergie $E = -3.27 * 10^{-3}$ eV relative à une réflexion totale pour une onde incidente dans le guide 1 et dans le mode 1. Dans ce cas, nous notons que les valeurs des coefficients de réflexion et de transmission sont respectivement $R_1^1 = 0.98$ et $T_{1 \rightarrow 2}^1 = 0.02$.

Figure 4.12: Représentation des isocourbes de la fonction $\Upsilon(x, y)$ pour une énergie $E = -1.34 * 10^{-3}$ eV relative à une transmission totale pour une onde incidente dans le guide 1 et dans le mode 1. Dans ce cas, nous notons que les valeurs des coefficients de réflexion et de transmission sont respectivement $R_1^1 = 0.01$ et $T_{1 \rightarrow 2}^1 = 0.99$.



La réflexion totale de l'onde sur la figure 4.11 montre des oscillations importantes (comportement sinusoïdal) dans le guide incident et l'absence d'électrons dans le

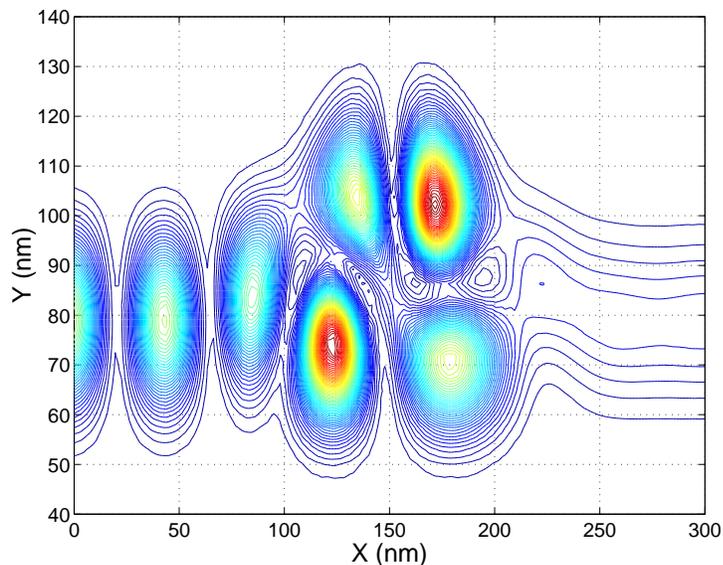


Figure 4.13: Représentation des isocourbes de la fonction $\Upsilon(x, y)$ pour une énergie $E = -3.27 * 10^{-3}$ eV pour une onde incidente dans le guide 1 et dans le mode 1. Dans ce cas, nous notons que les valeurs des coefficients de réflexion et de transmission sont respectivement $R_1^1 = 0.49$ et $T_{1 \rightarrow 2}^1 = 0.51$.

guide en sortie. Par ailleurs, nous pouvons vérifier que dans le cas d'une réflexion totale, le carré de la fonction d'onde dans le guide 1 donné à l'aide de l'expression (2.51) peut s'annuler (puisque $|b_1^1|^2 = 1$ et que nous ne tenons pas compte des termes évanescents). Comme l'indique la figure, le comportement sinusoidal de l'onde passe bien par une valeur nulle. Inversement, sur la figure 4.12 on constate qu'il n'existe pas de comportement sinusoidal dans le guide d'injection (il n'existe qu'une très faible réflexion), l'onde est donc totalement transmise. On retrouve à travers la figure 4.13, le comportement sinusoidal et constant de l'onde respectivement dans le guide incident et le guide en sortie. Notons toutefois dans ce cas un comportement sinusoidal qui ne passe plus par la valeur nulle puisque la réflexion n'est plus totale.

2. **Le modèle de quasi-équilibre sur les bords :** la figure 4.14 représente les isocourbes de la densité électronique sur une coupe en $x = 0$ (au bord du composant dans le guide d'onde) à la fois pour le modèle quantique 3D (trace de la densité sur la frontière déjà effectuée sur la figure 4.14), et pour le modèle de quasi-équilibre sur les bords décrit dans l'annexe A. Rappelons qu'à travers le modèle de quasi-équilibre, nous faisons l'hypothèse que les guides d'onde peuvent s'interpréter comme des fils quantiques infiniment longs. Dans le cas du modèle quantique 3D, nous faisons l'hypothèse que l'influence des effets quantiques qui sont prépondérants au milieu de la zone active (dans la cavité), devient négligeable quand on s'éloigne à l'intérieur des guides (la zone active Ω_0 comporte une grande partie des guides d'onde). Pour ce dernier cas, nous utilisons donc des conditions de Neumann homogènes nulles pour le potentiel électrostatique sur les frontières des guides d'onde aux limites du composant (invariance par translation du potentiel dans la direction longitudinale du guide). Ce choix sur les conditions aux bords assure au modèle 3D une plus grande stabilité numérique que le choix de conditions aux bords de Dirichlet qui seraient obtenues à l'aide du modèle de quasi-équilibre. Nous observons sur la figure 4.14 que pour les deux modèles, les résultats montrent un confinement transverse dans

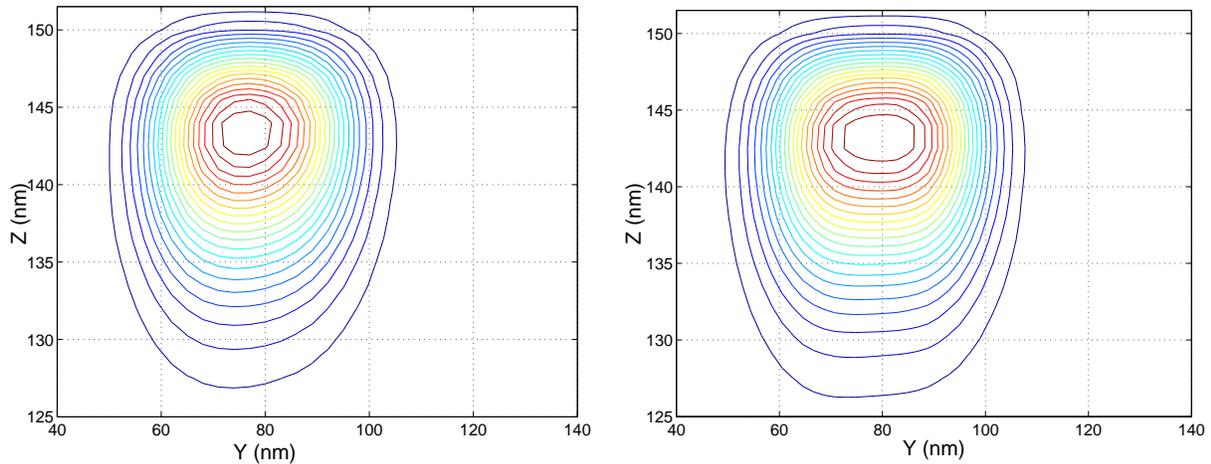


Figure 4.14: Représentation des isocourbes de la densité dans le plan $x = 0$ pour le modèle de quasi-équilibre (à gauche) et pour le modèle quantique.

le guide légèrement supérieur dans le cas du modèle de quasi-équilibre. Le choix des conditions aux bords de Neumann homogènes nulles dans le cas du modèle 3D apparaît alors raisonnable.

Remarque: un bon compromis dans le choix des conditions aux bords serait de dériver des conditions de type Robin sur les frontières Γ_j des guides. Le modèle 3D pourrait alors bénéficier (via un paramètre d'entrée) de la stabilité numérique des conditions de Neumann et de l'exactitude des conditions de Dirichlet issues du modèle de quasi-équilibre sur les bords.

Comparaison des modèles quantique 3D et quasi-3D à l'équilibre

Les résultats du calcul de la densité électronique et de la densité surfacique obtenus à l'aide du modèle quantique quasi-3D à l'équilibre, sont présentés sur la figure 4.15.

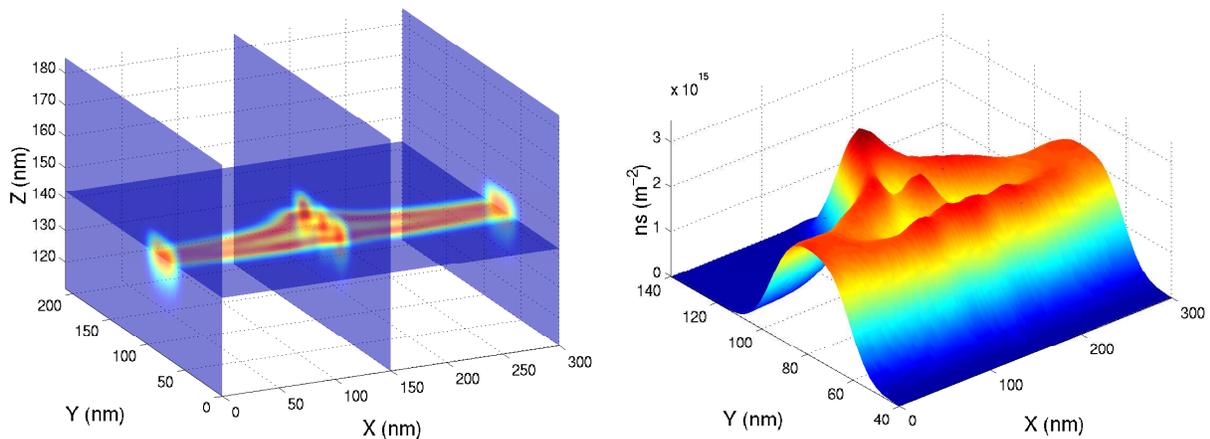


Figure 4.15: Profil de densité dans le stub dans le cas du modèle quantique quasi-3D à l'équilibre (à gauche), et représentation de la densité surfacique pour le modèle quantique quasi-3D.

En comparant les résultats présentés sur les figures 4.6 et 4.9 avec ceux de la figure 4.15, nous pouvons constater que les résultats obtenus sur la densité à l'équilibre dans le cas du modèle quantique 3D et dans le cas du modèle quantique quasi-3D sont quasiment identiques. Nous pouvons illustrer notre remarque en choisissant de tracer sur la figure 4.16, les isocourbes sur la densité aux limites des guides d'onde sur une coupe en $x = 0$. Les résultats alors obtenus sont extrêmement proches et en particulier dans les zones où la densité électrons est la plus élevée.

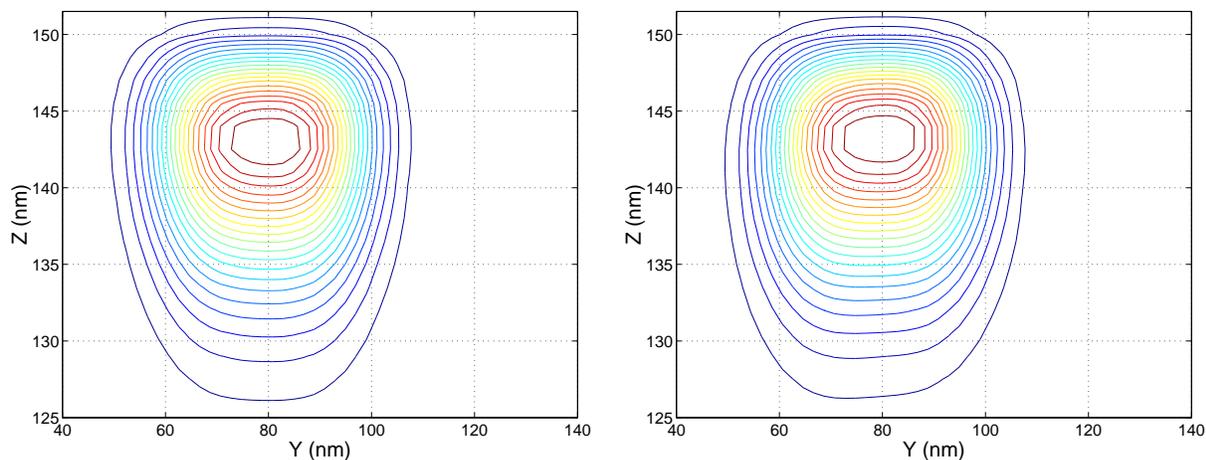


Figure 4.16: Représentation des isocourbes de la densité dans le plan $x = 0$ pour le modèle quantique quasi-3D (à gauche) et pour le modèle quantique 3D.

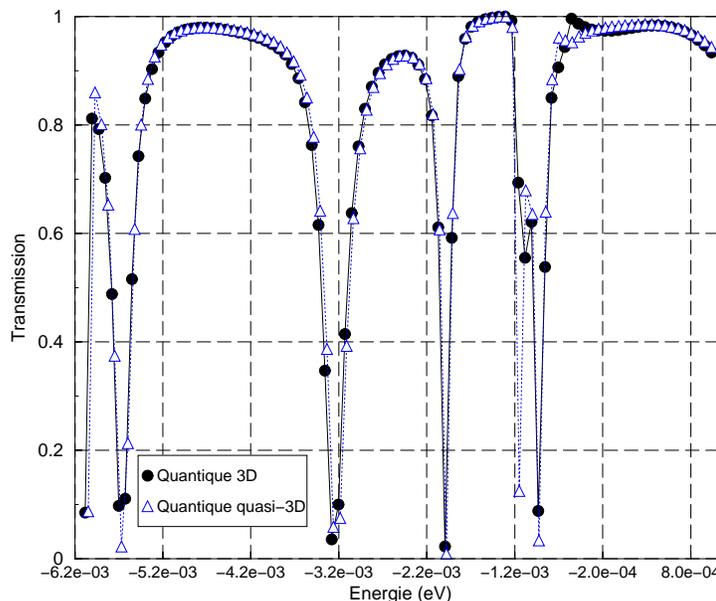
La figure 4.17 représente à la fois pour les deux modèles quantique 3D et quasi-3D, les coefficients de transmission relatifs à une onde injectée dans le guide 1 (par exemple) et transmise dans le guide 2 dans une situation monomode, en fonction de l'énergie. Nous constatons alors que les courbes de transmission pour les deux modèles sont identiques et par conséquent, les potentiels électrostatiques obtenus à travers les deux modèles sont les mêmes.

En résumé, les résultats numériques sur la densité et le potentiel obtenus pour les deux modèles montrent des différences négligeables ou nulles (rappelons qu'il existe un résultat mathématique d'existence pour le cas du modèle 3D). Les temps de calcul des simulations numériques effectuées sur un Compaq bi-processeur (DS20E) sont présentés sur le tableau suivant (4.5).

	Modèle 3D	Modèle quasi-3D
Durée de la procédure du calcul de la densité	4h	1mn
Nombre d'itérations avant convergence	~ 19	~ 19
Durée totale de la simulation	~ 3 jours	20mn

Tableau 4.5: Récapitulatif des temps de calcul du code NESSIE pour les modèles quantiques dans le cas du stub électronique.

Figure 4.17: Résultats des coefficients de transmission d'une onde injectée dans le guide 1 (et mode 1) et est transmise dans le guide 2 (et le mode 1) pour les deux modèles quantiques : 3D et quasi-3D.



Du fait du grand nombre de systèmes linéaires à résoudre pour obtenir les fonctions d'onde tridimensionnelles et cela à chacune des itérations sur le potentiel, les temps de calcul des simulations numériques apparaissent nettement supérieurs dans le cas du modèle quantique 3D. Par ailleurs, le modèle 3D nécessite de grandes quantités de mémoire pour pouvoir fonctionner (et cela même en utilisant un stockage de type CSR pour les matrices). Il semble difficile, même en utilisant une machine de calcul à multi-processeurs, d'obtenir des caractéristiques courant-tension dans des temps raisonnables à l'aide du modèle 3D.

Remarque: le modèle hybride.

Contrairement au cas du modèle semi-classique 3D, le modèle hybride prend en compte le confinement vertical des électrons. Nous pouvons alors vérifier que contrairement aux résultats sur la densité surfacique associés au modèle semi-classique présentés sur la figure 4.9, les ordres de grandeur des résultats sur la densité surfacique de la figure 4.18 obtenus avec le modèle hybride, par rapport à ceux obtenus avec le modèle quantique aussi sur la figure 4.9 (ou la figure 4.15), sont nettement supérieurs.

Le modèle hybride semble par conséquent être une meilleure approximation du modèle quantique que le modèle semi-classique. Ceci peut aussi être mis en évidence en comparant les coefficients de transmission qui ont été obtenus à l'aide du modèle quantique et semi-classique sur la figure 4.10, et ceux qui ont été reproduits avec les résultats du modèle hybride sur la figure 4.19.

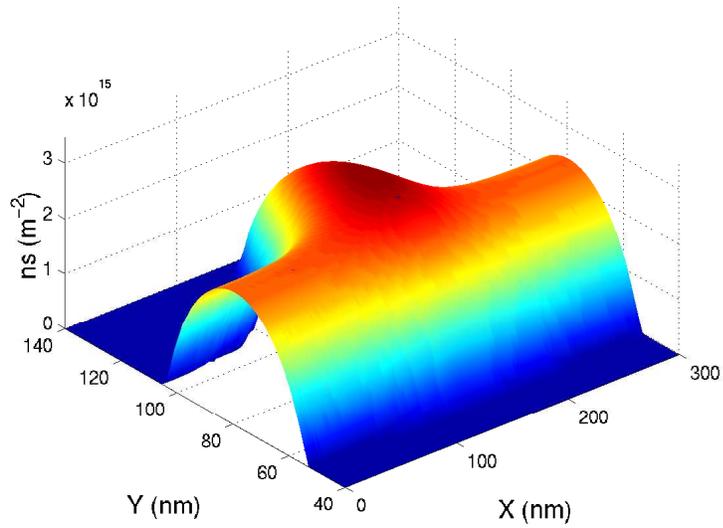
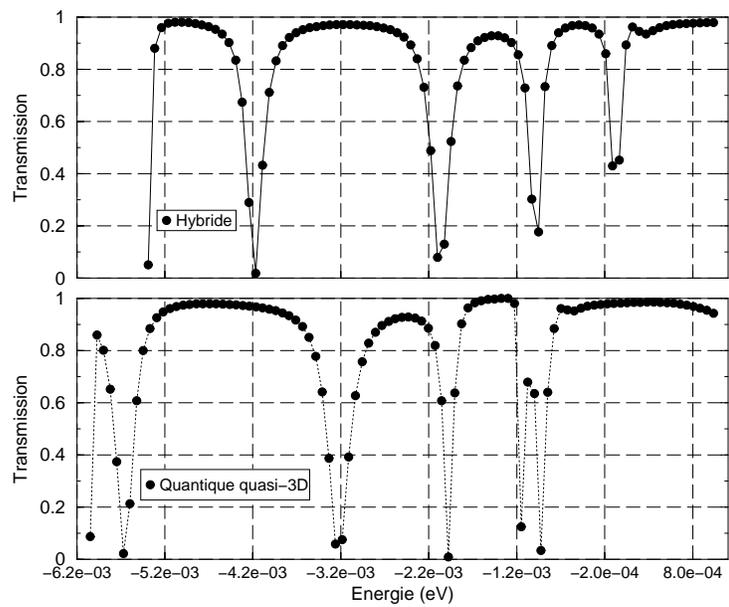


Figure 4.18: Représentation de la densité surfacique pour le modèle hybride.

Figure 4.19: Résultats des coefficients de transmission d'une onde injectée dans le guide 1 (et mode 1) et transmise dans le guide 2 (et le mode 1), pour les deux modèles : hybride et quantique.



Compléments sur le modèle quantique quasi-3D

La construction du modèle quasi-3D nécessite différentes étapes de calcul qui ont été décrites précédemment à l'aide du tableau (3.1). Nous proposons maintenant de présenter certains résultats relatifs au modèle quasi-3D (toujours après avoir obtenu la convergence numérique du système).

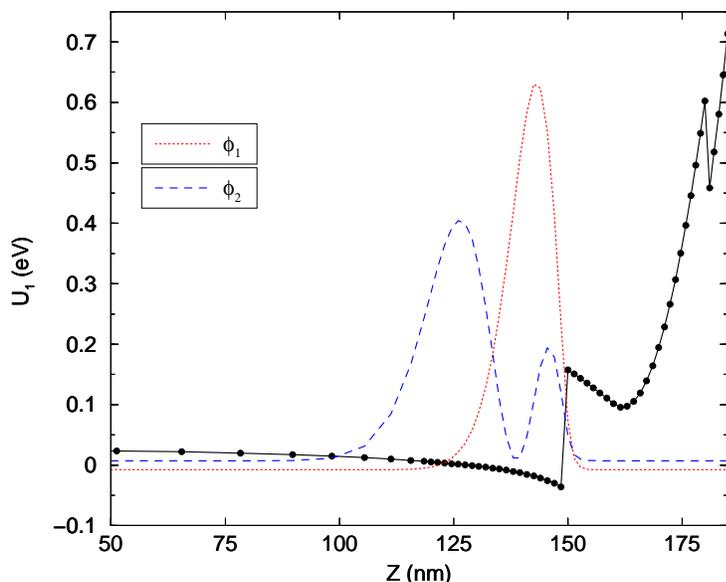


Figure 4.20: Profil du potentiel vertical U_1 et représentation de l'allure des deux premières fonctions propres verticales. Chacune des fonctions propres verticales a pour base la valeur de l'énergie propre qui lui est associée.

Le potentiel vertical $U_1(z)$, les deux premières fonctions propres ϕ_1 et ϕ_2 , ainsi que les niveaux d'énergie E_{z_1} et E_{z_2} , associés au confinement des électrons dans la direction verticale z , sont présentés sur la figure 4.20. Rappelons que dans nos simulations seul le premier niveau d'énergie vertical est occupé. Nous observons alors sur la figure 4.20, que les électrons sont majoritairement confinés un peu en dessous de l'hétérojonction. La position z_1 du plan du gaz d'électrons est donnée à l'aide de la formule (3.13). Nous trouvons alors $z_1 \simeq 140.84\text{nm}$, c'est à dire qu'il se situe environs à 9.16nm de l'hétérojonction.

L'allure du potentiel électrostatique $\hat{U}_1(x, y)$ associée au premier mode propre vertical est donnée sur la figure 4.21. Nous pouvons alors observer que le potentiel ne possède plus des murs de potentiel droit comme cela peut être le cas en surface du composant (potentiel de grille), mais il redessine la géométrie des grilles en surface à l'aide d'une courbe lisse (potentiels mous).

Finalement, nous représentons à travers la figure 4.22, la trace du potentiel \hat{U}_1 sur le bord du guide 1 (coupe en $x = 0$), ainsi que les trois premières fonctions propres $\hat{\chi}_{p,1}^1$ ($p = 1, 2, 3$) du guide associées aux énergies propres $\hat{E}_{p,1}^1$ ($p = 1, 2, 3$). Rappelons que dans nos simulations, l'injection des ondes peut s'effectuer sur les deux modes transverses. La figure 4.22 met clairement en évidence le confinement des électrons au centre du guide.

Figure 4.21: Profil de potentiel \hat{U}_1 associé au premier mode vertical et qui peut s'interpréter comme le potentiel du plan du gaz d'électrons. Le potentiel redessine la géométrie des grilles en surface mais présente une nature lisse.

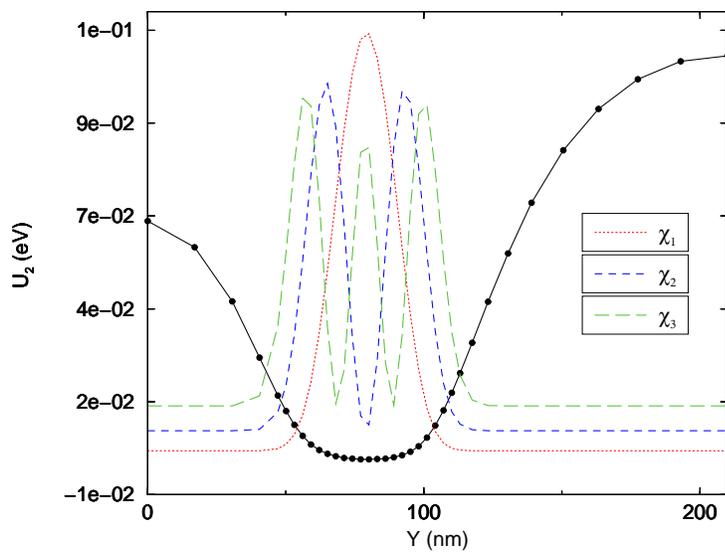
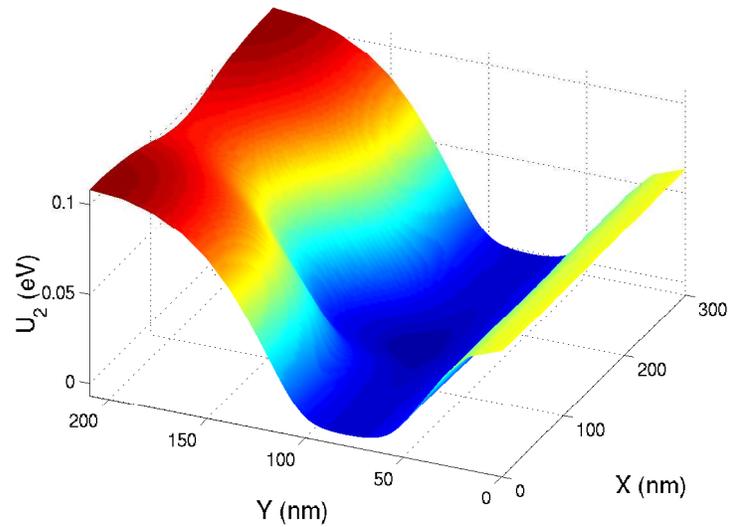


Figure 4.22: Profil du potentiel \hat{U}_1 sur le bord du guide 1 (en $x = 0$) et représentation de l'allure des trois premières fonctions propres transverses. Chacune des fonctions propres transverses a pour base la valeur de l'énergie propre qui lui est associée.

Caractéristiques courant-tension obtenues avec le modèle quantique quasi-3D

Dans nos simulations, le potentiel de polarisation v_1 associé au guide 1 est nul, et nous faisons varier le potentiel de polarisation v_2 associé au guide 2. Nous privilégions ainsi la circulation du courant du guide 1 au guide 2 comme cela avait été indiqué sur la figure 2.5. La figure 4.23, représente l'intensité I_2 dans le guide 2 ($I_2 = -I_1$) en fonction du potentiel de polarisation $v_p = v_2 - v_1$. En complément, nous avons aussi tracé sur cette figure la caractéristique linéaire courant-tension qui dérive de la loi d'Ohm écrite en (2.87) (à l'aide du calcul de la conductance) dans le cas où la variation du potentiel v_p est petite. Nous pouvons alors constater un bon accord numérique entre les deux résultats pour des faibles valeurs du potentiel (courbes tangentes).

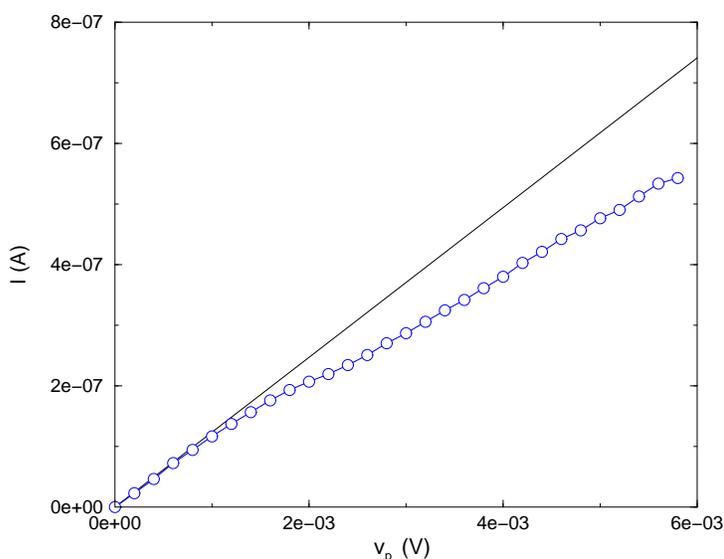


Figure 4.23: Représentations des caractéristiques courant-tension pour le stub électronique obtenues à l'aide du calcul de l'intensité dans le guide 2, ainsi que de la caractéristique courant-tension linéaire déduite de la loi d'Ohm pour des faibles valeurs de potentiel v_p .

Remarque: dans le cas test que nous avons choisi, la caractéristique courant-tension ne présente pas de forte non-linéarité (essentielle aux fonctions pour l'électronique). Nous avons constaté en outre (résultats non présentés ici), que l'allure de ces caractéristiques sera fortement liée à la géométrie du dispositif (contrôlée entre autres par le potentiel de grille).

4.3.2 Le coupleur quantique

Les différents paramètres qui caractérisent les dimensions du domaine Ω_0 du coupleur quantique, sont décrits sur la figure 4.24. Nous posons $L_x = 270\text{nm}$ et $L_y = 260\text{nm}$. Dans notre cas, nous posons $W = 50\text{nm}$, et une largeur identique pour les quatre guides $L_j = 50\text{nm}$ ($j = 1, \dots, 4$). Les dimensions de grilles sont définies par $L_{G_3} = L_{G_4} = 50\text{nm}$, $L_{G_1} = L_{G_2} = 110\text{nm}$ et $L_{G_5} = 60\text{nm}$. Le domaine ω_0 muni de sa triangulation \mathcal{T}_{2,ω_0} , ainsi que les domaines Γ_1 et Γ_4 (idem Γ_2 et Γ_3) munis de leur “triangulation” \mathcal{T}_{2,Γ_1} et \mathcal{T}_{2,Γ_4} , sont présentés sur la figure 4.25.

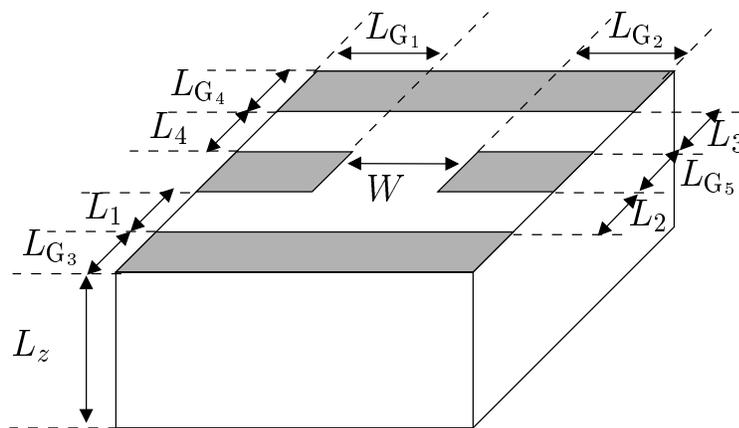


Figure 4.24: Description des longueurs caractéristiques du domaine Ω_0 . On note alors que $L_x = (L_{G_1} + W + L_{G_2})$ et $L_y = (L_{G_3} + L_{G_4} + L_{G_5} + L_1 + L_4)$.

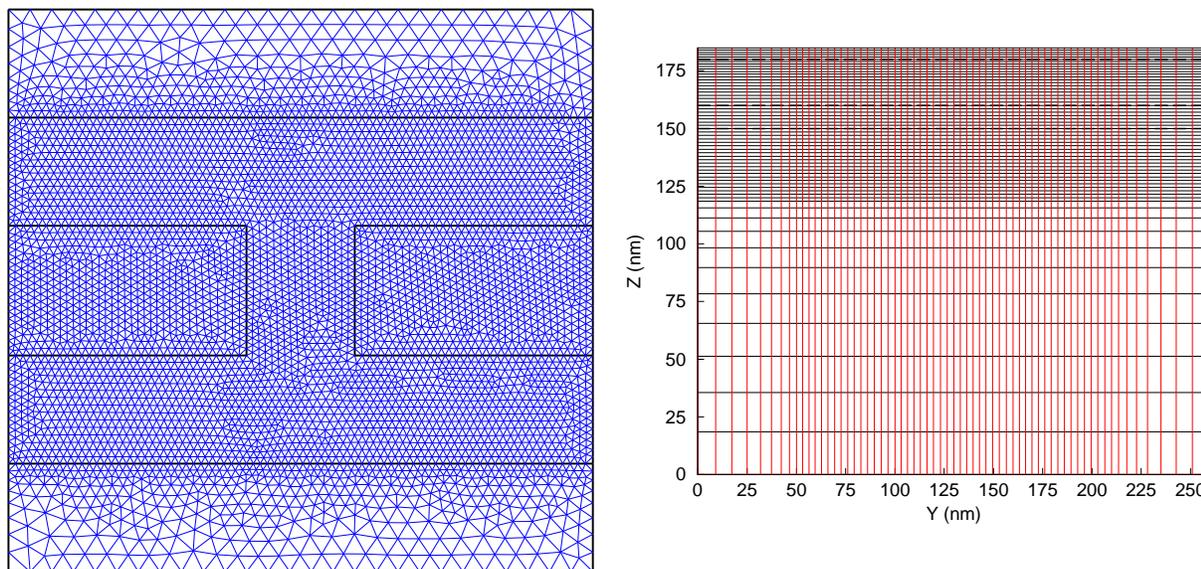


Figure 4.25: Maillage du domaine $\overline{\omega_0}$ (à gauche) et maillage du domaine $[0, L_z]$.

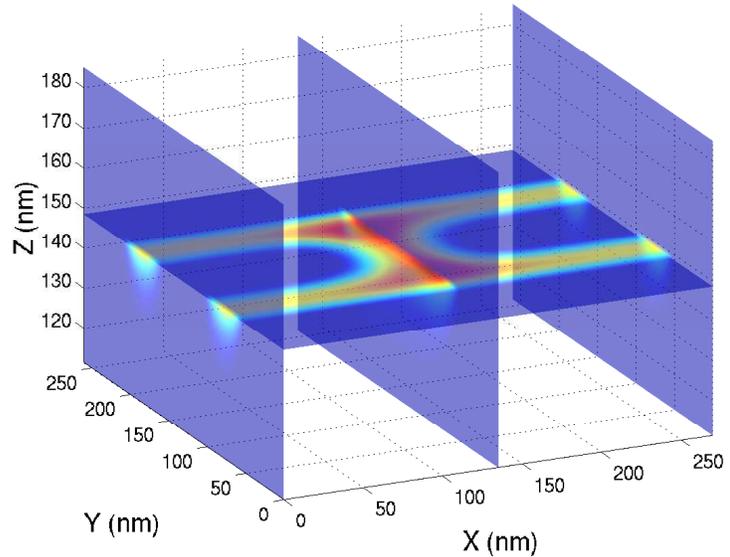
Nous notons que le nombre de noeuds sur le maillage \mathcal{T}_{2,ω_0} est $\mathcal{N}_{2,\omega_0} = 4996$, et le nombre de couches est $\mathcal{N}_{1,z} = 61$. Par conséquent, avec (4.12) on obtient $\mathcal{N}_{3,\Omega_0} = 304756$. Le nombre de points du domaine réduit que nous avons choisi vaut $\mathcal{N}_{3,\Omega_0}^h = 174860$ (nous considérons 35 couches). En complément, notons que le nombre de noeuds sur γ_j ($j = 1, \dots, 4$) est identique et égal à $\mathcal{N}_{1,\gamma_j} = 32$ ($j = 1, \dots, 4$).

Comparaison des modèles semi-classique et quantique quasi-3D à l'équilibre

Dans le cas où le système se trouve à l'équilibre, on note que les potentiels de polarisation v_j sont nuls. Par conséquent, le courant total dans chacun des guides est nul. Nous pouvons aussi remarquer que les dimensions des matrices dans le cas du coupleur quantique pour le modèle quantique 3D ont une taille nettement supérieure que dans le cas du stub électronique. Dans cette section, nous n'effectuerons pas l'étude numérique de ce dernier modèle et conformément aux résultats de l'étude sur le stub électronique, nous supposons que le modèle quasi-3D représente une bonne approximation du modèle quantique 3D.

Commençons par effectuer une comparaison qualitative des résultats du calcul de la densité électronique obtenus à l'aide du modèle semi-classique (approximation Thomas-Fermi) et du modèle quantique quasi-3D, et qui sont respectivement présentés sur les figures 4.26 et 4.27.

Figure 4.26: Profil de densité dans le stub dans le cas du modèle semi-classique 3D à l'équilibre. Nous avons représenté les plans $x = 0$, $x = L_x/2$, et $x = L_x$, ainsi que le plan du gaz d'électrons.



Par analogie avec les résultats obtenus sur le stub électronique, on note que les électrons désertent les zones qui se situent sous les grilles en surface quel que soit le modèle utilisé. Nous observons aussi que le confinement vertical des électrons se situe en dessous de l'hétérojonction dans le cas quantique. En complément, le gaz d'électrons présente un étalement beaucoup moins important dans le modèle semi-classique, et la probabilité de trouver un électron au dessus de l'hétérojonction avec ce modèle, est nulle. Dans le cas quantique, des perturbations sur la densité apparaissent très nettement dans la zone active. Celles-ci sont dues aux effets quantiques (comme les phénomènes d'interférence) qui sont prépondérants à l'intérieur de cette zone. La différence du profil de la densité électronique pour les deux modèles dans le plan du gaz d'électrons peut être mieux appréciée à l'aide des résultats pour les deux modèles sur les isocourbes de la densité électronique présentées sur une coupe en $x = L_x/2$ (au milieu du composant dans la zone active) sur la figure 4.28, ainsi que sur les résultats sur les densités surfaciques présentées sur la figure 4.36.

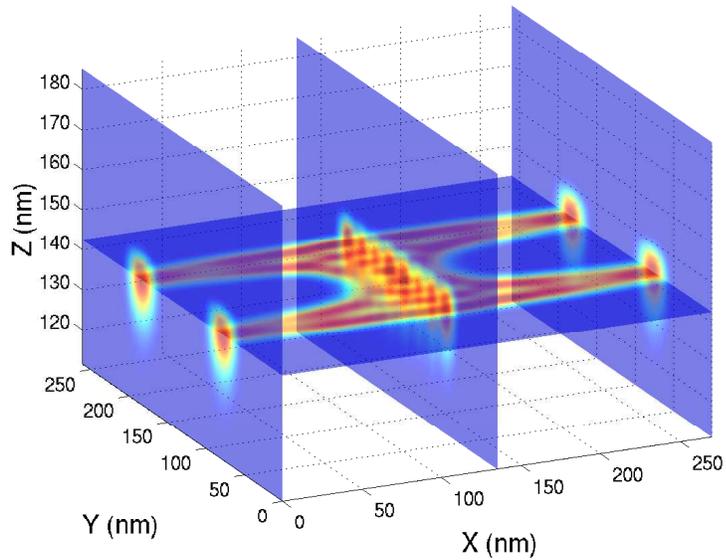


Figure 4.27: Profil de densité dans le stub dans le cas du modèle quantique quasi-3D à l'équilibre. Nous avons représenté les plans $x = 0$, $x = L_x/2$, et $x = L_x$, ainsi que le plan du gaz d'électrons.

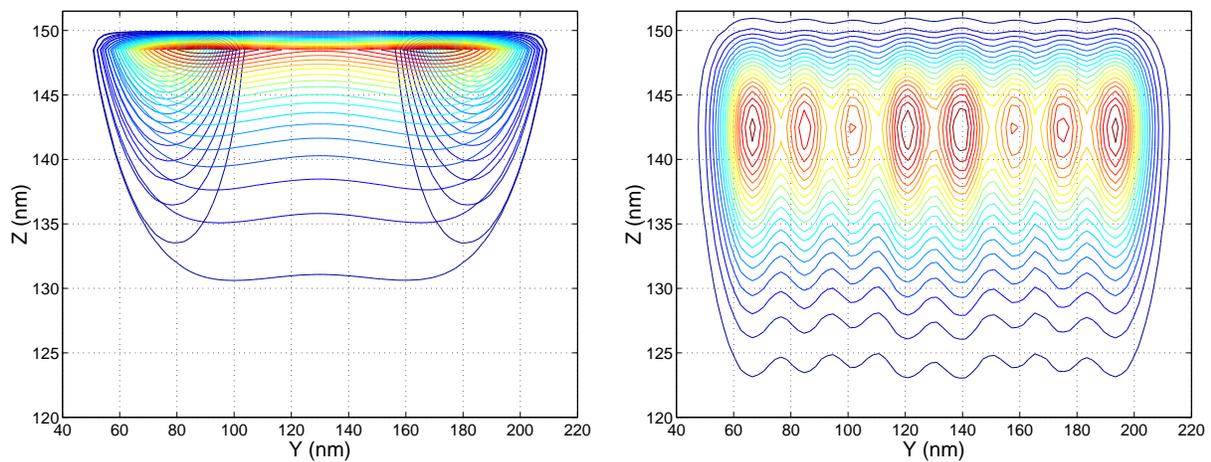


Figure 4.28: Représentation des isocourbes de la densité dans le plan $x = L_x/2$ pour le modèle semi-classique (à gauche) et pour le modèle quantique quasi-3D.

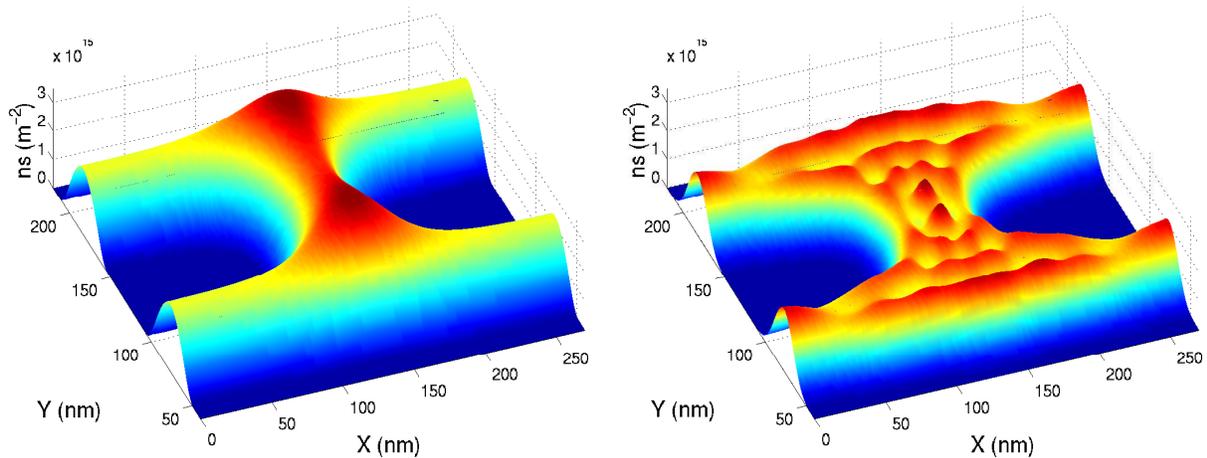


Figure 4.29: Représentation de la densité surfacique pour le modèle semi-classique (à gauche) et pour le modèle quantique quasi-3D.

Au milieu du coupleur, nous observons alors sur la figure 4.28, que dans le cas semi-classique, les électrons se retrouvent concentrés principalement dans les zones de croisement des guides d'onde. Il n'en est pas de même pour le cas quantique, où nous observons l'apparition d'un phénomène de confinement électronique (au milieu du coupleur), présentant huit régions bien marquées où les électrons se retrouvent concentrés. L'influence des phénomènes quantiques sur le profil de la densité est clairement visible sur la figure 4.36. Par ailleurs, nous pouvons encore vérifier sur l'exemple du coupleur quantique que l'approximation semi-classique donne des résultats qui tendent à surestimer les densités de charge accumulées.

Nous proposons de réaliser une étude qualitative sur le potentiel à l'aide du calcul des coefficients de transmission relatifs à une onde injectée dans le guide 1 (par exemple) et transmise dans les autres guides, en fonction de l'énergie. Rappelons que pour réaliser cette étude, nous nous plaçons dans le cas monomode de telle sorte que l'injection et la transmission ne s'effectue uniquement que sur le premier mode transverse des guides. En complément, nous allons inclure aussi dans nos résultats le cas du modèle hybride. Les courbes de transmission sont données pour les trois modèles sur la figure 4.30 pour le guide 2, et sur la figure 4.31 pour les guides 3 et 4.

Les résultats sur les courbes de transmission présentent de fortes non-linéarités pour tous les modèles. Dès lors, nous obtenons les mêmes types de résultats qu'avec l'étude simplifiée bidimensionnelle réalisée sur le coupleur quantique privée des réactions de charge d'espace [96]. Dans notre cas, nous remarquons que les résultats obtenus sur les trois modèles sont relativement différents. Par conséquent, la prise en compte des réactions de charge d'espace à l'aide du modèle quantique est essentielle car elle va modifier le profil du potentiel de manière significative. Par ailleurs, le déplacement sur les énergies, qui peut s'expliquer par la prise en compte du confinement vertical pour les électrons, est mieux apprécié avec les résultats obtenus à l'aide du modèle hybride.

Si l'on observe maintenant les courbes de transmission obtenues à travers les figures

Figure 4.30: Résultats des coefficients de transmission d'une onde injectée dans le guide 1 (et le mode 1) et transmise dans le guide 2 (et le mode 1), pour les trois modèles : semi-classique, hybride et quantique quasi-3D.

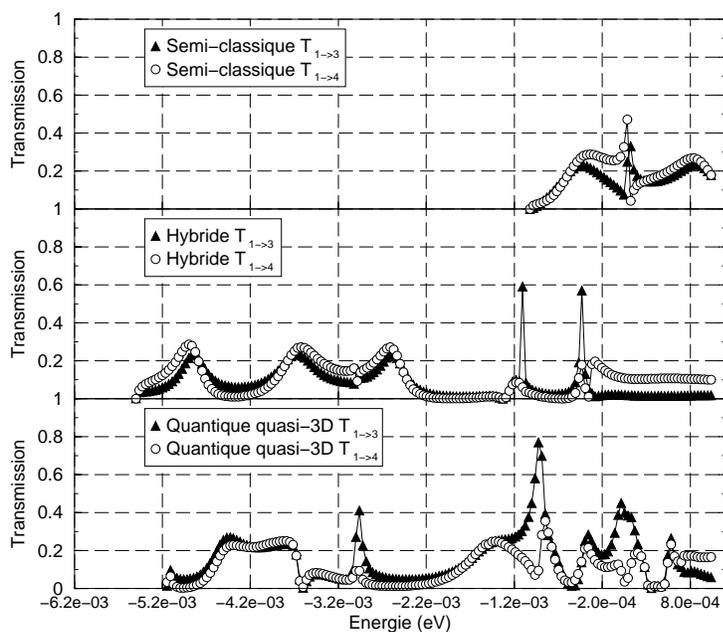
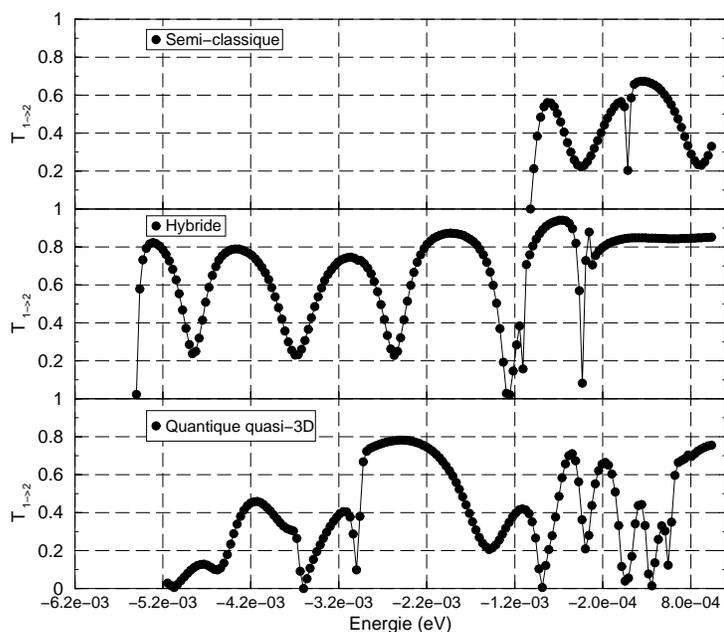


Figure 4.31: Résultats des coefficients de transmission d'une onde injectée dans le guide 1 (et le mode 1) et transmise dans les guides 3 et 4 (et le mode 1), pour les trois modèles : semi-classique, hybride et quantique quasi-3D.

4.30 et 4.31 pour le cas quantique quasi-3D, nous pouvons remarquer que pour l'énergie $E = -3.6 * 10^{-3}$ eV, par exemple, la réflexion dans le guide 1 est totale (toutes les transmissions s'annulent), tandis que pour l'énergie $E = -0.91 * 10^{-3}$ eV, c'est la transmission dans le guide 3 qui est privilégiée (très élevée). Nous avons choisi de représenter les isocourbes des fonctions $\Upsilon(x, y)$ (définies en (4.87)) relatives à ces deux énergies particulières qui sont respectivement données sur les figures 4.32 et 4.33.

Figure 4.32: Représentation des isocourbes de la fonction $\Upsilon(x, y)$ pour une énergie $E = -3.6 * 10^{-3}$ eV relative à une réflexion totale pour un onde incidente dans le guide 1 et dans le mode 1. Dans ce cas, nous notons que les valeurs des coefficients de réflexion et de transmission sont respectivement $R_1^1 = 0.986$, $T_{1 \rightarrow 2}^1 = 0.002$, $T_{1 \rightarrow 3}^1 = 0.004$ et $T_{1 \rightarrow 4}^1 = 0.008$.

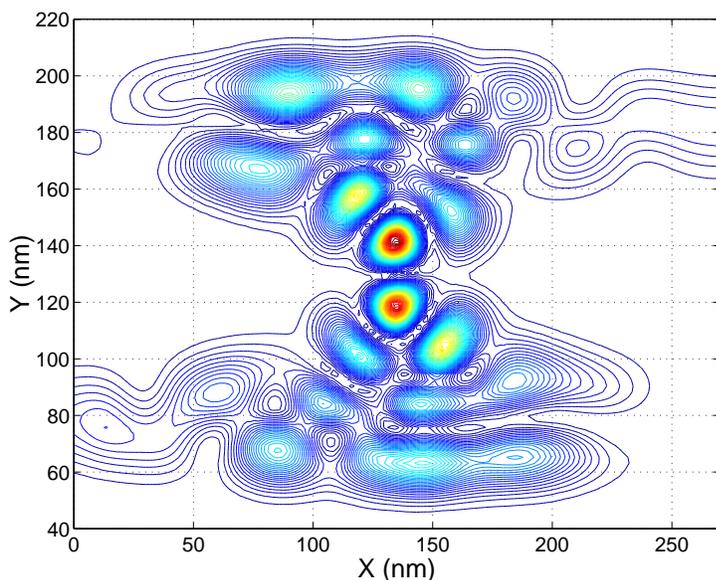
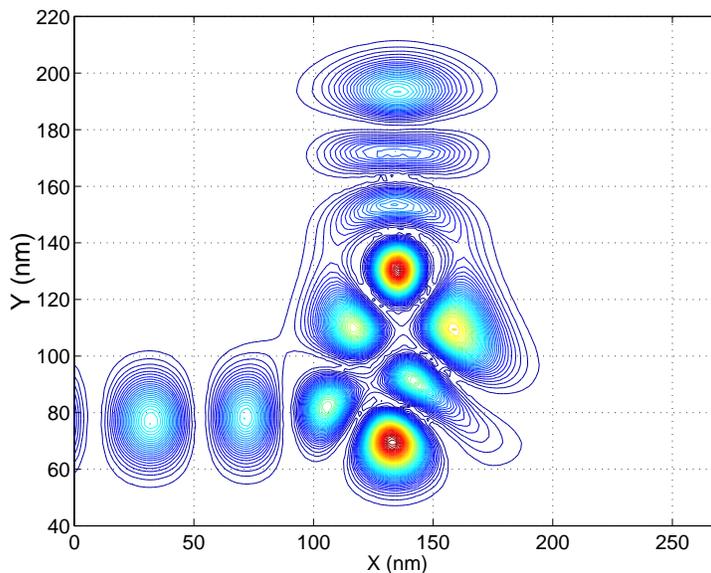


Figure 4.33: Représentation des isocourbes de la fonction $\Upsilon(x, y)$ pour une énergie $E = -0.91 * 10^{-3}$ eV relative à une transmission très élevée dans le guide 3 (et légère dans le guide 4) pour un onde incidente dans le guide 1 et dans le mode 1. Dans ce cas, nous notons que les valeurs des coefficients de réflexion et de transmission sont respectivement $R_1^1 = 0.005$, $T_{1 \rightarrow 2}^1 = 0.033$, $T_{1 \rightarrow 3}^1 = 0.807$ et $T_{1 \rightarrow 4}^1 = 0.155$.

Quelle que soit la valeur de l'énergie, la somme du coefficient de réflexion et de transmission est bien égale à 1 en accord avec le résultat (2.66) de la proposition 2.3. La réflexion totale de l'onde sur la figure 4.32 montre des oscillations (comportement sinusoïdal qui passe par la valeur nulle) dans le guide incident et l'absence d'électrons dans les guides en sortie. Inversement, sur la figure 4.33, on constate qu'il n'existe pas de comportement

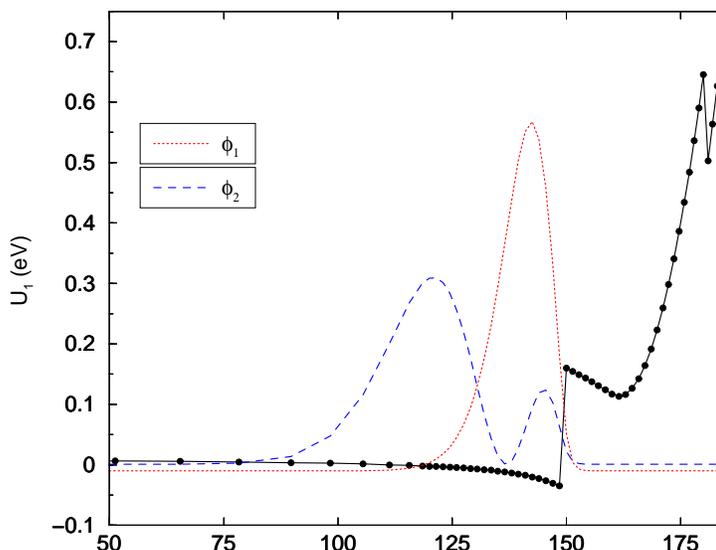
sinusoïdal dans le guide d'injection (il n'existe qu'une très faible réflexion), l'onde est donc totalement transmise dans les guides en sortie. Sur ce dernier exemple, le guide en sortie 3 est alors privilégié et l'on note un petit effet "backward" pour la sortie 4.

Compléments sur le modèle quantique quasi-3D

La construction du modèle quasi-3D nécessite différentes étapes de calcul décrites précédemment dans le tableau (3.1). Nous proposons maintenant de présenter certains résultats relatifs au modèle de quasi-3D (toujours après avoir obtenu la convergence numérique du système).

Le potentiel vertical $U_1(z)$, les deux premières fonctions propres ϕ_1 et ϕ_2 , ainsi que les niveaux d'énergie E_{z1} et E_{z2} , associés au confinement des électrons dans la direction verticale z , sont présentés sur la figure 4.34.

Figure 4.34: Profil du potentiel vertical U_1 et représentation de l'allure des deux premières fonctions propres verticales. Chacune des fonctions propres verticales a pour base la valeur de l'énergie propre qui lui est associée.



Rappelons que dans nos simulations, seul le premier niveau d'énergie vertical est occupé. Nous observons alors sur la figure 4.34, que les électrons sont majoritairement confinés un peu en dessous de l'hétérojonction. La position z_1 du plan du gaz d'électrons est donnée à l'aide de la formule (3.13), nous trouvons alors $z_1 \simeq 139.64\text{nm}$, c'est à dire qu'il se situe environ à 10.36nm de l'hétérojonction. Dans le cas du coupleur quantique, le plan du gaz d'électrons se trouve donc à une distance de l'hétérojonction un peu supérieure à la distance trouvée lors de l'étude sur le stub électronique. Nous pouvons aussi remarquer, par ailleurs, à travers les figures 4.20 et 4.34, que le gaz d'électrons semble s'étaler davantage dans le cas du coupleur quantique (sans doute parce que les dimensions de la zone active où circulent les électrons sont plus importantes dans le cas du coupleur quantique).

L'allure du potentiel électrostatique $\hat{U}_1(x, y)$ associée au premier mode propre vertical est donné sur la figure 4.35. Nous pouvons alors observer que le potentiel ne possède plus des murs de potentiel droit comme cela peut être le cas en surface du composant (potentiel de grille), mais il redessine la géométrie des grilles en surface à l'aide d'une courbe lisse.

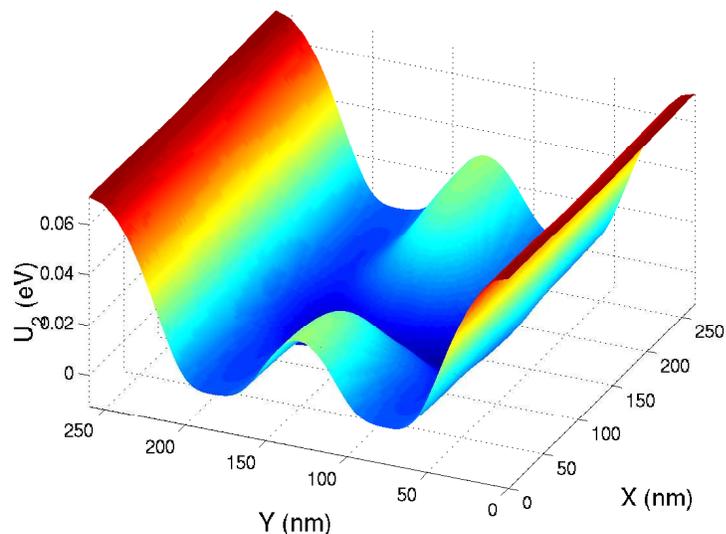


Figure 4.35: Profil de potentiel \hat{U}_1 associé au premier mode vertical et qui peut s'interpréter comme le potentiel du plan du gaz d'électrons. Le potentiel redessine la géométrie des grilles en surface mais présente une nature lisse (potentiels mous).

Finalement, nous représentons à travers la figure 4.36, la trace du potentiel \hat{U}_1 sur le bord du guide 1 (coupe en $x = 0$) et sur le bord du guide 4 (coupe en $x = 0$), ainsi que les deux premières fonctions propres $\hat{\chi}_{p,1}^1$ et $\hat{\chi}_{p,1}^4$ ($p = 1, 2$) des guides 1 et 4, associées aux énergies propres $\hat{E}_{p,1}^1$ et $\hat{E}_{p,1}^4$ ($p = 1, 2$). Dans nos simulations, l'injection des ondes peut

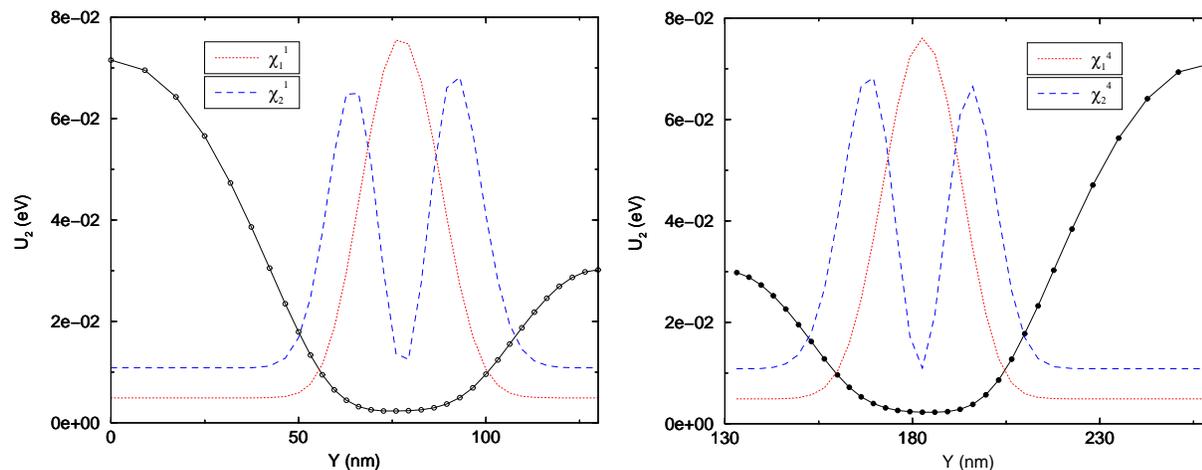


Figure 4.36: Profil du potentiel \hat{U}_1 sur le bord du guide 1 (à gauche) et sur le bord du guide 4. Les trois premières fonctions propres transverses sont aussi représentées ainsi que la valeur de l'énergie propre qui leur est associée (valeur à la base de la fonction).

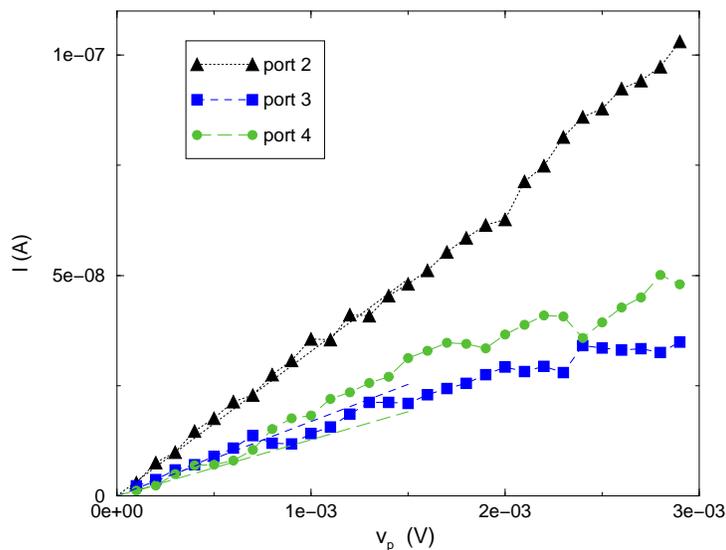
s'effectuer sur les deux modes transverses. La figure 4.36 met clairement en évidence le confinement des électrons au centre du guide.

Caractéristiques courant-tension obtenues avec le modèle quantique quasi-3D

Dans nos simulations, le potentiel de polarisation v_1 associé au guide 1 est nul, et nous avons choisi de faire varier de manière identique les potentiels de polarisation v_2 , v_3 et v_4 associés respectivement au guide 2, 3 et 4. Nous privilégions ainsi la circulation du courant

du guide 1 au guide 2, 3 et 4. La figure 4.37 représente les intensités I_2 , I_3 et I_4 dans les guides 2, 3 et 4 en fonction du potentiel de polarisation $v_p = v_j - v_1$ ($\forall j(j \neq 1)$). En complément, nous avons aussi tracé sur cette figure les caractéristiques linéaires courant-tension qui dérivent de la loi d'Ohm écrite en (2.87) (à l'aide du calcul de la conductance) dans le cas où la variation du potentiel v_p est petite. Nous constatons alors un bon accord numérique pour des faibles valeurs du potentiel (courbes tangentes).

Figure 4.37: Représentations des caractéristiques courant-tension pour le coupleur quantique obtenues à l'aide du calcul de l'intensité dans les guides 2, 3 et 4, ainsi que des caractéristiques courant-tension linéaires issues de la loi d'Ohm pour des faibles valeurs de potentiel v_p .



Remarque: dans le but de privilégier l'injection dans tel ou tel guide, nous pourrions, par exemple, faire varier indépendamment les potentiels des différents guides. La géométrie du système étant contrôlée par le potentiel de grille, la variation de celui-ci pourrait mettre en évidence des caractéristiques courant-tension présentant des fortes non-linéarités.

Chapitre 5

Présentation d'un modèle de transport quantique pour les dispositifs "nano-MOSFETs"

Sommaire

5.1	Position du problème	140
5.2	Description du transport quantique	142
5.2.1	Le modèle de transport des électrons	142
5.2.2	Le modèle de transport des trous	147
5.2.3	Conditions aux bords sur le potentiel	148
5.2.4	Récapitulatif	149
5.3	Etude numérique d'un MOSFET à 25nm	151
5.3.1	Discrétisation des équations et mise en oeuvre numérique	151
5.3.2	Commentaires sur les résultats préliminaires	152

5.1 Position du problème

Le domaine bidimensionnel restreint Ω du transistor sur lequel nous allons effectuer l'étude du transport quantique, est défini à travers la figure 5.1. Dans le cas du problème

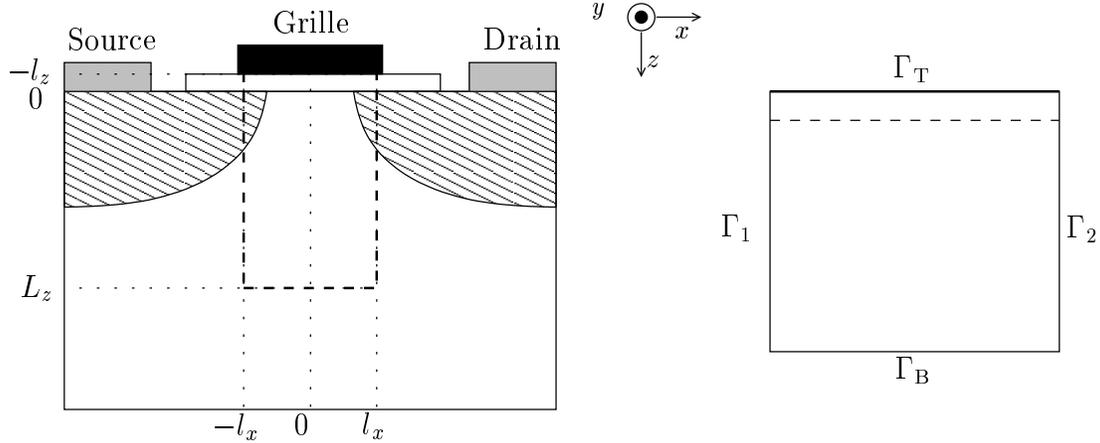


Figure 5.1: Restriction de la zone d'étude Ω du transistor MOSFET (à gauche), et présentation des frontières associées Γ_1 , Γ_2 , Γ_B et Γ_T .

modèle, le domaine Ω était constitué des guides d'ondes et de la zone active. Dans notre étude bidimensionnelle, nous allons supposer que le transistor se trouve dans un état de quasi-équilibre aux bords $x = -l_x$ et $x = +l_x$ du domaine Ω . Nous supposons alors que le système est équivalent à un dispositif possédant deux guides électroniques lesquels sont localisés sur les frontières Γ_1 et Γ_2 . Par suite nous choisirons d'étendre la zone active bidimensionnelle Ω_0 jusqu'aux limites de la géométrie d'étude Ω . Nous noterons alors

$$\Omega_0 =]-l_x, l_x[\times]-l_z, L_z[, \quad (5.1)$$

où l_z représente l'épaisseur de l'Oxyde, et L_z l'étendu du substrat de Silicium que nous considérons (conditions de neutralité électrique).

Remarque: l'épaisseur l_z de la couche SiO_2 sera choisie très petite. Elle doit cependant être supérieure à une certaine limite. En effet, le courant qui circule entre le Silicium et la grille, induit par effet tunnel des électrons doit être négligeable [101].

Nous noterons encore

$$\partial\Omega_0 = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_B \cup \Gamma_T, \quad (5.2)$$

où Γ_1 et Γ_2 représentent les bords respectifs en $x = -l_x$ et $x = +l_x$, et où Γ_B et Γ_T représentent la base (B : Bottom) et la grille en surface (T : Top) du composant (relatif au domaine Ω_0).

Dans notre étude, nous considérerons un transistor MOSFET à canal N où le courant provient du déplacement d'électrons. Nous supposons que l'injection des électrons (ondes

incidentes) s'effectue directement dans les guides et que les tensions de polarisation aux limites guides d'onde-zone active peuvent être calculés à partir des tensions de polarisation de la source et du drain à l'aide d'une équation de quasi-neutralité. En effet, il existe dans les réservoirs d'électrons, c'est à dire dans la source et le drain, des zones dites de quasi-neutralité (cette approche ne tient pas compte des électrons de conduction) où le nombre d'électrons et d'ions négatifs est égal au nombre de trous et d'ions positifs (voir figure 5.2). On obtient alors

$$n - p + N_D^+ - N_A^- = 0. \quad (5.3)$$

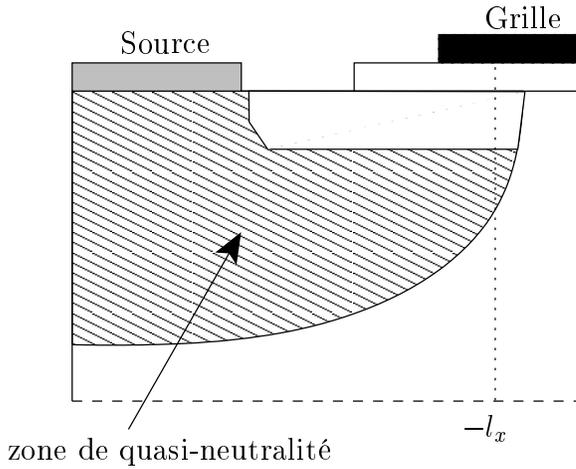


Figure 5.2: Zone de quasi-neutralité dans la source (même profil dans le drain).

Directement aux points de contacts ohmiques de la source et du drain, où le dopage est strictement positif et égal à n_D^+ , nous obtenons alors une équation de neutralité entre la concentration des donneurs et la densité d'électrons

$$n_D^+ = n(v_j, \mu_j) \quad j = 1, 2. \quad (5.4)$$

Remarque: nous notons $V_{DS} = v_2 - v_1$ la tension entre la source et le drain.

Toutes les hypothèses (2.1) énoncées au chapitre 2 dans le cadre du problème modèle restent valables concernant l'application aux "nano-MOSFETs". Dans des dispositifs de très petite taille, le confinement des électrons dans le canal nécessite une description quantique. Sur cette base, différents modèles "quasi-2D" qui considèrent un transport électronique semi-classique dans la direction longitudinale du canal, ont été élaborés par exemple dans [116, 117]. Cependant, pour une taille du canal suffisamment petite, le transport des électrons dans la direction longitudinale du canal pourrait aussi dépendre des phénomènes quantiques tel que l'effet tunnel. Nous allons donc présenter un modèle quantique bidimensionnel qui tient compte des réactions de charge d'espace des électrons (et des trous).

5.2 Description du transport quantique

Dans le but d'établir le modèle de transport pour les électrons et les trous sur le domaine Ω_0 , nous allons nous inspirer des résultats du problème modèle pour un cas bi-dimensionnel. Notons que, dans notre cas, le Silicium est un matériau semi-conducteur non-isotrope. Dans cette section, nous établirons dans un premier temps le modèle de transport des électrons, puis des trous, avant de présenter une synthèse sur les systèmes non-linéaires couplés, et sur les propriétés du courant électronique. Finalement, nous présenterons la discrétisation des équations nécessaires à la résolution du problème.

5.2.1 Le modèle de transport des électrons

Les n électrons dans l'unité de volume de ce monocristal sont répartis en six groupes identiques de population $n/6$. En effet, dans l'espace des vecteurs d'onde, les électrons qui possèdent une énergie $E(k)$ sont répartis sur six ellipsoïdes de révolution autour des axes k_x , k_y et k_z . Ces ellipsoïdes sont déduites par des opérations de symétrie du cube (voir figure 5.3).

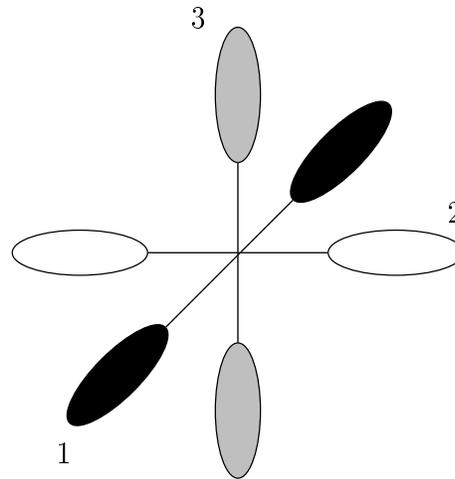


Figure 5.3: Profil des surfaces d'énergie constante dans le Si. Les électrons sont répartis dans six ellipsoïdes.

Le Silicium est un semi-conducteur à gap indirect. Il existe une anisotropie dans les extremums de la bande de conduction qui conduit à définir pour les électrons une masse effective longitudinale m_l^* et une masse effective transverse m_t^* . Les masses effectives dépendent de la nature du semi-conducteur dans la direction z . Nous noterons m^* la masse effective des électrons dans l'oxyde SiO_2 . Adoptons la notation (m_x^*, m_y^*, m_z^*) qui définit les masses effectives dans les directions x, y, z . Nous obtenons alors trois types de résonances dans le cas du Silicium (voir figure 5.3) :

1. une configuration (m_t^*, m_t^*, m_l^*) qui définit une masse effective m_l^* dans la direction z (direction de quantification), et m_t^* dans la direction de transport x .
2. une configuration (m_l^*, m_t^*, m_t^*) qui définit une masse effective m_t^* dans la direction z (direction de quantification), et m_l^* dans la direction de transport x .

3. une configuration (m_t^*, m_l^*, m_t^*) qui définit une masse effective m_t^* dans la direction z (direction de quantification), et m_t^* dans la direction de transport x .

Le calcul de la densité électronique tient compte de la contribution des électrons pour les six ellipsoïdes, elle peut alors être décomposée comme

$$n = 2n_e(m_t^*, m_t^*, m_l^*) + 2n_e(m_l^*, m_t^*, m_t^*) + 2n_e(m_t^*, m_l^*, m_t^*), \quad (5.5)$$

où $n_e(m_x^*, m_y^*, m_z^*)$ définit la densité électronique pour une seule ellipsoïde à une configuration des masses effectives (m_x^*, m_y^*, m_z^*) dans les directions x, y, z . Dans la direction y perpendiculaire au transport, les propriétés physiques du transistor sont invariantes par translation. De ce fait, nous considérons des fonctions d'onde planes dans la direction y (deux sens de propagation pour le vecteur d'onde k_y). La fonction d'onde $\Psi(\mathbf{x})$ du problème tridimensionnel (invariant dans la direction y) pour une énergie E donnée se note alors

$$\Psi(\mathbf{x}) = e^{ik_y y} \psi(x, z), \quad (5.6)$$

où la fonction d'onde $\psi(x, z)$ est la fonction d'onde bidimensionnelle définie sur Ω_0 . Le calcul de la densité électronique (via la résolution de Ψ) peut être abordé soit par des considérations purement électrostatiques dans une approche semi-classique, soit de manière plus réaliste par une approche quantique.

L'approche semi-classique

Nous choisissons d'utiliser l'approximation de Thomas-Fermi afin de calculer la densité n_e dans le cas général des masses effective (m_x^*, m_y^*, m_z^*) dans les directions x, y, z . Dans cette approche, les fonctions ψ sont des ondes planes puisque l'énergie dépend du potentiel local. D'après la définition (2.30) de la densité à l'équilibre (aucune tension de polarisation entre les guides), nous obtenons

$$n_e(m_x^*, m_y^*, m_z^*) = 2 \int_{\mathbb{R}^3} f_{FD}(E(\mathbf{k}) - \mu) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}, \quad (5.7)$$

avec dans notre cas

$$E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z^*} + U(x, z). \quad (5.8)$$

Après calculs, on obtient

$$n_e[V(x, z)] = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \left(\frac{M^*}{\beta \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} F_{1/2}(\beta(\mu - U(x, z))), \quad (5.9)$$

avec $M^* = (m_x^* m_y^* m_z^*)^{\frac{1}{3}}$ et où $F_{1/2}(\eta_f)$ est l'intégrale de Fermi-Dirac déjà définie en (3.59). Dans le cas du silicium et d'après (5.5), on obtient

$$n[V(x, z)] = 6n_e[V(x, z)] \quad \text{avec} \quad M^* = (m_l^* (m_t^*)^2)^{\frac{1}{3}}. \quad (5.10)$$

L'approche quantique

La fonction d'onde $\psi(x, z)$ est solution de l'équation de Schrödinger stationnaire bi-dimensionnelle dans l'approximation de la masse effective dans Ω_0 . Dans le cas général des masses effectives (m_x^*, m_y^*, m_z^*) dans les directions x, y, z , l'équation (2.6) peut alors s'écrire

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2} \left(\nabla \widetilde{M}_{x,z}^{-1}(z) \nabla \psi(x, z) \right) + U(x, z) \psi(x, z) = \left(E - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y^*(z)} \right) \psi(x, z) \quad \text{dans } \Omega_0, \\ \psi(x, z) = 0, \quad \text{sur } \Gamma_B \cup \Gamma_T, \\ \text{Conditions aux bords d'ondes entrantes sur } \Gamma_1 \text{ et } \Gamma_2, \end{array} \right. \quad (5.11)$$

avec $\widetilde{M}_{x,z}$ le tenseur de masse effective dans les direction (x,z) qui se note

$$\widetilde{M}_{x,z} = \begin{pmatrix} m_x^* & 0 \\ 0 & m_z^* \end{pmatrix} \quad \text{si } z > 0 \text{ (cas du Silicium)}, \quad (5.12)$$

ou

$$\widetilde{M}_{x,z} = m^* \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{si } z \leq 0 \text{ (cas de l'Oxyde)}. \quad (5.13)$$

Notons encore $U(x, z)$ l'énergie potentielle définie par

$$U(x, z) = -qV(x, z) + E_c(z), \quad (5.14)$$

où $E_c(z)$ est l'énergie potentielle liée au bas des bandes de conduction des divers couches semi-conductrices (E_c est donc une fonction constante par morceaux sur z).

Les conditions aux bords de Dirichlet nulles sur Γ_T et Γ_B traduisent le fait que la probabilité de trouver un électron sur ces bords est nulle. En effet, l'épaisseur l_y de l'Oxyde est choisie suffisamment grande afin que l'effet tunnel entre la grille et le Silicium soit négligeable. Il nous reste donc à déterminer les conditions aux bords entrantes sur les Γ_j . Le potentiel électrostatique V_j étant supposé connu et transverse autour de Γ_j , les bords Γ_j peuvent par conséquent être considérés comme des limites guides d'onde-zone active. On se propose alors de reprendre une à une les démarches du problème modèle. Dans un premier temps, on note U_j le potentiel dans le guide j , tel que $U_1(z) = U(-l_x, z)$ et $U_2(z) = U(l_x, z)$. L'équation de Schrödinger transverse exprimée sur les bords Γ_j , ($j = 1, 2$) se note alors

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m_z^*(z)} \frac{d}{dz} \chi_m^j(z) \right) + U_j(z) \chi_m^j(z) = E_m^j \chi_m^j(z) \quad \text{dans }] -l_z, L_z[, \\ \chi_m^j(z) = 0 \quad \text{sur } z = -l_z \text{ et } z = L_z, \\ \int_{-l_z}^{L_z} \chi_m^j \chi_{m'}^j dz = \delta_{m,m'}, \end{array} \right. \quad (5.15)$$

où χ_m^j sont les vecteurs propres transverses à valeurs dans \mathbb{R} associés aux valeurs propres réelles transverses E_m^j . $\{\chi_m^j\}_{m \in \mathbb{N}^*}$ forme une base orthonormée de $L^2(\Gamma_j)$. Une fonction Ψ qui satisfait (5.11) dans le guide j peut s'écrire

$$\psi(x, z) = \sum_{m=1}^{\infty} f_m^j(x) \chi_m^j(z). \quad (5.16)$$

En insérant l'expression (5.16) de la fonction d'onde dans (5.11), on obtient alors les fonctions d'onde longitudinales f_m^j , solutions de l'équation de Schrödinger suivante :

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d^2}{dx^2} f_m^j(x) = \sum_{m'} f_{m'}^j(x) (E - E_m^j) \left(\int_{-l_z}^{L_z} m_x^*(z) \chi_m^j(z) \chi_{m'}^j(z) dz \right) \quad (5.17)$$

$$+ \sum_{m'} f_{m'}^j(x) \frac{\hbar^2 k_y^2}{2} \left(\int_{-l_z}^{L_z} \frac{m_x^*(z)}{m_y^*(z)} \chi_m^j(z) \chi_{m'}^j(z) dz \right),$$

$$\text{avec } \begin{cases} x \in [-l_x, +\infty[& \text{si } j = 1, \\ x \in [+l_x, +\infty[& \text{si } j = 2, \end{cases}$$

où $f_m^j(x)$ est une fonction bornée. L'équation de la fonction d'onde f_m^j dans le guide j (5.17) fait apparaître des termes non-diagonaux pour $m' \neq m$.

Hypothèse 5.1 Dans notre étude nous prenons en compte uniquement les termes diagonaux de l'équation (pour $m' = m$). Nous supposons alors que

$$\int_{-l_z}^{L_z} m_x^*(z) \chi_m^j(z) \chi_{m'}^j(z) dz \ll \int_{-l_z}^{L_z} m_x^*(z) |\chi_m^j(z)|^2 dz, \quad (5.18a)$$

et

$$\int_{-l_z}^{L_z} \frac{m_x^*(z)}{m_y^*(z)} \chi_m^j(z) \chi_{m'}^j(z) dz \ll \int_{-l_z}^{L_z} \frac{m_x^*(z)}{m_y^*(z)} |\chi_m^j(z)|^2 dz. \quad (5.18b)$$

L'équation (5.17) peut maintenant s'écrire

$$-\frac{\hbar^2}{2M_x^*} \frac{d^2}{dx^2} f_m^j(x) = f_m^j(x) \left(E - \frac{\hbar^2 k_y^2 M_{x/y}^*}{2M_x^*} - E_m^j \right), \quad (5.19)$$

où l'on note

$$M_x^* = \int_{-l_z}^{L_z} m_x^*(z) |\chi_m^j(z)|^2 dz, \quad (5.20)$$

et

$$M_{x/y}^* = \int_{-l_z}^{L_z} \frac{m_x^*(z)}{m_y^*(z)} |\chi_m^j(z)|^2 dz. \quad (5.21)$$

Par analogie avec l'équation (2.11) établie dans le cadre de la présentation de la méthode QTBM pour le problème modèle du chapitre 2, nous trouvons les conditions entrantes aux bords Γ_j pour l'équation de Schrödinger (5.19), indépendantes des coefficients des amplitudes des ondes réfléchies et transmises dans les guides

$$\partial_x \psi|_{\Gamma_j} = \sum_{m=1}^{M^j(E)} i k_m^j(E) (-2a_m^j + \psi_m^j) \chi_m^j(z) - \sum_{m=M^j(E)+1}^{\infty} k_m^j(E) \psi_m^j \chi_m^j(z), \quad (5.22)$$

avec :

– $k_m^j(E)$, le nombre d'onde (suivant x)

$$k_x \equiv k_m^j(E) = \left(\frac{2M_x^*}{\hbar^2} \left| E - \frac{\hbar^2 k_y^2 M_{x/y}^*}{2M_x^*} - E_m^j \right| \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (5.23)$$

– $M^j(E)$, le nombre de modes propagatifs

$$M^j(E) = \sup_m \left\{ m \geq 1; \left(E - \frac{\hbar^2 k_y^2 M_{x/y}^*}{2M_x^*} \right) > E_m^j \right\}. \quad (5.24)$$

– a_m^j , l'amplitude de l'onde incidente du guide j pour le mode m .

– ψ_m^j , le coefficient défini par

$$\psi_m^j = \int_{-l_y}^{L_y} \psi \chi_m^j dz. \quad (5.25)$$

Nous sommes donc en mesure de résoudre l'équation de Schrödinger (5.11) dans Ω_0 muni des conditions (5.22) à l'aide de la formulation variationnelle du problème et ce quel que soit la configuration de masse effective (m_x^* , m_y^* , m_z^*) (Rappelons que nous avons démontré l'existence et l'unicité des solutions dans le cas du problème modèle).

Nous allons maintenant établir l'expression de la densité électronique $n_e(m_x^*, m_y^*, m_z^*)$ dans le cas général d'une configuration de masse effective (m_x^* , m_y^* , m_z^*) dans les directions x, y, z . Notons ψ_{j_0, m_0, k_x} , la fonction d'onde solution du problème (5.11) pour une onde injectée dans le guide j_0 , le mode transverse m_0 et associée à une impulsion k_x ($k_x > 0$ car un seul sens d'injection), telle que

$$a_m^j = \delta_{j, j_0} \delta_{m, m_0}. \quad (5.26)$$

La relation de dispersion se note alors

$$E(j_0, m_0, k_x, k_y) = E_{m_0}^{j_0} + \frac{\hbar^2 k_y^2 M_{x/y}^*}{2M_x^*} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2M_x^*}. \quad (5.27)$$

Alors la densité électronique est donnée par un mélange statistique d'états $e^{ik_y y} \psi(x, z)$ reliés à la distribution de Fermi-Dirac associée au guide j (dans notre cas, la source, si $j = 1$, ou le drain, si $j = 2$)

$$n_e = 2 \sum_{j_0=1}^2 \sum_{m_0} \int_0^{\infty} |\psi_{j_0, m_0, k_x}|^2 \left(\int_{\mathbb{R}} f_{FD} \left(E(j_0, m_0, k_x, k_y) - \mu_{j_0} \right) \frac{dk_y}{2\pi} \right) \frac{dk_x}{2\pi}. \quad (5.28)$$

Nous obtenons encore après calculs

$$n_e = \frac{1}{\pi^2} \sum_{j_0=1}^2 \sum_{m_0} \left(\frac{2M_x^*}{\beta \hbar^2 M_{x/y}^*} \right)^{1/2} \int_0^\infty |\psi_{j_0, m_0, k_x}|^2 G \left(\beta \left(\mu_{j_0} - E_{m_0}^{j_0} - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2M_x^*} \right) \right) dk_x, \quad (5.29)$$

où $G(\eta_f)$ est une intégrale déjà définie en (A.8).

En résumé, afin de déterminer la densité électronique, nous serons amenés à résoudre trois types d'équations de Schrödinger relatives aux six ellipsoïdes d'énergie E donnée. Nous pouvons alors définir les fonctions d'ondes, solutions de (5.11), par :

- $\psi^{tl}(x, z)$ associé à une configuration (m_t^*, m_l^*, m_i^*) .
- $\psi^{lt}(x, z)$ associé à une configuration (m_l^*, m_t^*, m_i^*) .
- $\psi^{tt}(x, z)$ associé à une configuration (m_t^*, m_l^*, m_i^*) .

Dans le cas de l'Oxyde ($z \leq 0$), m_x^* , m_y^* et m_z^* sont égaux à m^* . La densité électronique s'obtient à partir de (5.5) et se note

$$n[V](x, z) = 2n_e(m_t^*, m_t^*, m_i^*) + 2n_e(m_l^*, m_t^*, m_i^*) + 2n_e(m_t^*, m_l^*, m_i^*). \quad (5.30)$$

5.2.2 Le modèle de transport des trous

Les trous sont concentrés dans la bande de valence, il existe un seul minima équivalent mais deux types de trous

- des trous lourds possédant une masse effective m_{hh}^*
- des trous légers possédant une masse effective m_{lh}^*

Pour un système se trouvant à l'équilibre, nous pouvons utiliser un modèle semi-classique via l'approximation de Thomas-Fermi à l'aide de la définition (2.32). Nous obtenons alors la densité des trous par analogie avec le calcul de la densité des électrons dans le cas semi-classique de la section précédente

$$p[V(x, z)] = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \left(\frac{M_h^*}{\beta \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} F_{1/2} \left(\beta (U(x, z) - \Delta(z) - \mu) \right), \quad (5.31)$$

avec

$$M_h^* = \left(m_{lh}^{*\frac{3}{2}} + m_{hh}^{*\frac{3}{2}} \right)^{\frac{2}{3}}, \quad (5.32)$$

et où $\Delta(z)$ définit le gap d'énergie entre la bande de conduction et la bande de valence des matériaux semi-conducteurs. Rappelons que les trous qui apparaissent dans le nano-MOSFET se situent majoritairement dans les zones où le dopage est négatif. Dans ces régions, on pourra noter que les variations du potentiel sont petites si on les compare avec la longueur d'onde des trous. Par conséquent, nous n'allons pas développer un modèle de transport quantique pour un système hors-équilibre (tension de polarisation dans les ports). Et nous choisissons alors d'exprimer le transport des trous à l'aide d'un modèle de type dérive-diffusion.

Dans un système hors-équilibre, nous utilisons aussi l'approximation de Thomas-Fermi (5.31) pour laquelle nous considérons un potentiel chimique μ non plus constant mais dépendant de x et z . Ce potentiel chimique $\mu(x, z)$ est alors solution de l'équation de type dérive-diffusion

$$\nabla \left(\nu_p p \nabla \mu(x, z) \right) = 0, \quad (5.33)$$

avec $p[V(x, z), \mu(x, z)]$ la densité de trous et ν_p la mobilité des trous (traditionnellement notée μ_p). La mobilité des trous peut être considérée comme constante en première approximation. Nous pouvons aussi la faire dépendre du potentiel électrostatique comme cela a été décrit par exemple dans [22]. Les conditions aux bords du domaine Ω_0 que nous choisissons d'utiliser sont définies par

$$\begin{cases} (\nabla \mu \cdot \mathbf{n}) = 0 & \text{sur } \Gamma_T \text{ et } \Gamma_B, \\ \mu(\mathbf{x}) = \mu_1 & \text{sur } \Gamma_1, \\ \mu(\mathbf{x}) = \mu_2 & \text{sur } \Gamma_2. \end{cases} \quad (5.34)$$

5.2.3 Conditions aux bords sur le potentiel

De manière similaire au cas du problème modèle, la densité de charge d'espace ρ s'écrit sur Ω_0 en tenant compte du déséquilibre local existant, d'une part entre les donneurs ionisés N_D^+ et la densité électronique libre n , et d'autre part entre les accepteurs ionisés N_A^- et les trous libres p . On obtient alors

$$\rho(x, z) = q(N_D^+(x, z) - N_A^-(x, z) - n(x, z) + p(x, z)). \quad (5.35)$$

Le potentiel électrostatique V présent dans le dispositif est alors solution de l'équation de Poisson

$$-\nabla \left(\epsilon_r(z) \nabla V(x, z) \right) = \frac{\rho(x, z)}{\epsilon_0} \quad \text{dans } \Omega_0, \quad (5.36)$$

où $\epsilon_r(z)$ représente la constante diélectrique relative des couches semi-conductrices SiO_2 et Si dans la direction z . Dans notre cas, les conditions aux bords pour le potentiel électrostatique sur les bords $\partial\Omega_0$ que nous utilisons sont :

- des conditions de Neumann homogènes nulles sur la limite du substrat en Γ_B , ($z = L_z$). En effet, loin à l'intérieur du substrat (c.a.d. pour L_z suffisamment grand), nous supposons des conditions de neutralité électrique.
- des conditions de Dirichlet homogènes sur la surface du composant en Γ_T ($z = L_z$). Nous notons V_G le potentiel appliqué sur la grille en surface sur Γ_T
- des conditions aux bords de Dirichlet, notées V_j sur Γ_j ($j = 1, 2$), qui dérivent de l'hypothèse de quasi-équilibre sur ces bords et qui sont explicitées dans l'annexe B.

Remarque: contrairement à l'étude sur les dispositifs AlGaAs/GaAs, dans la zone active Ω_0 dans le cas des nano-MOSFETs, seules des petites parties autour de Γ_1 et Γ_2 sont assimilables à des guides d'onde. En d'autres termes, dans notre modèle, nous supposons que le potentiel est transverse presque uniquement sur ces frontières. Le choix des conditions aux bords de Neumann sur les guides semble bien approprié pour l'étude de dispositifs présentant des guides d'onde suffisamment longs. Ce n'est pas le cas dans notre modèle, et ce choix laisse place au choix de conditions aux bords de Dirichlet plus adéquat pour définir une condition de quasi-équilibre (par analogie avec la définition des conditions de quasi-équilibre sur les bords des composants AlGaAs/GaAs dans le cas du modèle quantique 3D présentées dans l'annexe A).

En résumé, les conditions aux bords du potentiel électrostatique sont définies par

$$\begin{cases} V(x, z) = V_G & \text{sur } \Gamma_T (z = -l_z), \\ (\nabla V \cdot \mathbf{n}) = 0 & \text{sur } \Gamma_B, (z = L_z) \\ V(x, z) = V_j & \text{sur } \Gamma_j (x = -l_x, x = l_x). \end{cases} \quad (5.37)$$

Remarque: par analogie avec les conditions aux bords pour le potentiel définies en (2.4) dans le cadre du problème modèle, nous pouvons constater que

$$\Gamma_{0_N} = \Gamma_B \quad \text{et} \quad \Gamma_{0_D} = \Gamma_T.$$

En complément, les conditions de Neumann sur les bords Γ_j laissent place à des conditions de Dirichlet.

Les calculs de la densité électronique et de la densité de trous dépendent du potentiel électrostatique. Le calcul du potentiel électrostatique dépendant de la réaction de charge d'espace des électrons et des trous, il nécessite donc une résolution auto-cohérente.

5.2.4 Récapitulatif

Dans le cas d'un modèle semi-classique, la densité des électrons et celle des trous respectivement donnée en (5.10) et (5.31), sont des fonctionnelles locales en x, z . Nous avons détaillé dans le cadre du problème modèle dans le chapitre 2 l'étude de ce système Thomas-Fermi/Poisson dont les résultats d'existence et d'unicité de la solution sont assurés par le théorème 2.2. Pour résoudre ce problème, nous utilisons la méthode de résolution numérique de Newton présentée dans l'annexe C.

Dans le cas d'un modèle quantique, la densité électronique établie en (5.29) et (5.30), est une fonctionnelle non locale en x, z , l'existence de solutions du système Schrödinger/Poisson est assurée à l'aide du théorème 2.3. Dans le but de résoudre numériquement ce système couplé, nous utilisons la méthode implicite des itérations de Gummel présentée

dans l’annexe C.

Tous les résultats du chapitre 2 concernant le calcul des coefficients de transmission, du courant, de l’intensité, et de la conductance, peuvent s’appliquer dans notre cas. La fonction d’onde multidimensionnelle Ψ se note maintenant ψ , et toutes les autres notations restent inchangées. Dans le calcul du courant, nous tiendrons aussi compte de la contribution de toutes les fonctions d’onde relatives aux électrons qui se trouvent dans les différentes ellipsoïdes.

Remarque:

- la résolution du système non-linéaire Schrödinger/Poisson 1D établi dans l’annexe B est relative aux conditions de quasi-équilibre sur les bords, pourra aussi s’effectuer à l’aide de la méthode de calcul implicite des itérations de Gummel. Signalons toutefois que l’utilisation d’une méthode de Newton pour ce problème spécifique a été décrite dans [84].
- dans les situations hors-équilibre, il est nécessaire de résoudre l’équation non-linéaire de dérive-diffusion pour les trous sur le potentiel chimique (5.33). Nous allons utiliser la méthode de Newton non plus pour résoudre une équation du type (C.1) comme cela a été précisé dans l’annexe C, mais pour résoudre l’équation (à V fixé) suivante :

$$\nabla \left(\mathcal{G}[\mu(\mathbf{x})] \nabla \mu(\mathbf{x}) \right) = 0, \quad (5.38)$$

où $\mathcal{G}[\mu(\mathbf{x})] = \nu_p p[\mu(\mathbf{x})]$ est une fonctionnelle de μ locale en \mathbf{x} . Posons

$$\mathcal{F}[\mu] = \nabla \left(\mathcal{G}[\mu] \nabla \mu \right). \quad (5.39)$$

La dérivée de \mathcal{F} par rapport à μ et appliquée à μ^* , peut alors s’écrire

$$\left(D_V \mathcal{F}(\mu) \right) \mu^*(\mathbf{x}) = -\nabla \left(\mathcal{G}'[\mu] \mu^* \nabla \mu \right) + \nabla \mathcal{G}[\mu] \nabla \mu^*, \quad (5.40)$$

où l’on note $\mathcal{G}'(\mu)$, la dérivée de $\mathcal{G}(\mu)$ par rapport à μ . Finalement, la méthode de Newton consiste à construire une suite $\{\mu^i\}$, telle que l’itéré μ^{i+1} est donné à l’aide de l’expression (C.5) de l’annexe C. Ainsi, pour chacune des itérations i (μ^i est fixé), nous devons résoudre le système suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \left(\mathcal{G}[\mu^i(\mathbf{x})] \nabla \mu^{i+1}(\mathbf{x}) \right) + \nabla \left(\mathcal{G}'[\mu^i(\mathbf{x})] (\nabla \mu^i(\mathbf{x})) \mu^{i+1}(\mathbf{x}) \right) = \\ \qquad \qquad \qquad \nabla \left(\mathcal{G}'[\mu^i(\mathbf{x})] (\nabla \mu^i(\mathbf{x})) \mu^i(\mathbf{x}) \right) \quad \text{dans } \Omega_0, \quad (5.41) \\ \text{avec les conditions aux bords (5.34) sur } \partial\Omega_0 \text{ pour } \mu^{i+1}(\mathbf{x}). \end{array} \right.$$

5.3 Etude numérique d'un MOSFET à 25nm

5.3.1 Discrétisation des équations et mise en oeuvre numérique

Dans cette section, nous allons brièvement présenter un inventaire des différents types d'équations qui interviennent dans la résolution des systèmes couplés. Ces équations sont toutes du même type que celles présentées précédemment dans l'étude des dispositifs AlGaAs/GaAs (mise à part l'équation de dérive-diffusion sur le potentiel chimique). Par conséquent, nous ne présenterons pas dans cette section les formulations variationnelles et les discrétisations de ces équations à l'aide de la méthode des éléments finis, celles-ci ayant déjà été détaillées dans le cadre numérique des dispositifs AlGaAs/GaAs du chapitre 4.

Nous pouvons distinguer quatre types d'équations à résoudre :

Equations sur le potentiel 2D sur Ω_0 et 1D sur Γ_j

Quelles que soient les méthodes de résolution numérique des systèmes couplés décrites dans l'annexe C que nous choisissons d'utiliser, nous devons résoudre une équation du type (4.1), d'une part, sur le domaine Ω_0 , avec les conditions aux bords (5.37), et d'autre part, pour le modèle de quasi-équilibre, sur les frontières Γ_1 et Γ_2 , avec les conditions aux bords décrites en (B.1).

Equation de Schrödinger 2D ouverte sur Ω_0

Au cours des itérations Schrödinger/Poisson, nous devons résoudre une multitude d'équations de Schrödinger 2D (5.11) muni de conditions aux bords entrantes (5.22) en fonction de l'énergie et des différentes configurations pour les masses effectives. Contrairement au cas du problème modèle, on note l'apparition d'un tenseur de masse effective qui décompose le laplacien.

Equation de Schrödinger 1D aux valeurs propres sur Γ_j

Deux équations de Schrödinger 1D aux valeurs propres sur les bords Γ_j ($j = 1, 2$), du type (4.5) sur lesquelles la formulation variationnelle est donnée en (4.6) pour un cas général.

Equation sur le potentiel chimique 2D sur Ω_0

Nous effectuons la résolution de l'équation sur le potentiel chimique (5.41). La résolution de ce type d'équation n'a pas été traité dans le cadre du chapitre 4. Cependant, comme l'étude numérique des résultats que nous allons présenter par la suite ne concerne pas le système hors-équilibre, nous ne présenterons donc pas la formulation variationnelle et la discrétisation de cette équation.

Les problèmes sur Ω_0 sont dès lors discrétisés à l'aide de la méthode des éléments finis à l'aide d'une triangulation (l'élément de base est un triangle) \mathcal{T}_{2,Ω_0} du domaine bidimensionnel $\overline{\Omega_0}$. Le nombre total de noeuds est noté \mathcal{N}_{2,Ω_0} , et nous utilisons l'espace

polynomiale $\mathbb{P}_1(x, z)$. La discrétisation des problèmes sur les bords Γ_j s’effectue sur un maillage 1D \mathcal{T}_{1,Γ_j} du domaine $[-l_z, L_z]$. Ce maillage représente la trace de $\overline{\Omega}_0$ sur le guide j (l’élément de base est un segment). Le nombre total de noeuds est noté \mathcal{N}_{1,Γ_j} , et nous utilisons l’espace polynomiale $\mathbb{P}_1(z)$.

Remarque: si l’on rapproche les discrétisations établies dans le chapitre 4 à l’aide des maillages \mathcal{T}_{2,ω_0} et \mathcal{T}_{1,γ_j} , respectivement avec les discrétisations qu’il nous faut établir sur les maillages \mathcal{T}_{2,Ω_0} et \mathcal{T}_{1,Γ_j} , alors les différents calculs sur les fonctions de base peuvent se retrouver dans l’annexe D.

Remarque: le pas des maillages est lié à la longueur d’onde des électrons et se doit d’être “fin”, dans les zones où circulent les électrons. Dans les zones du Silicium où se situent les électrons, la densité de dopage d’ions positifs peut être très importante et notamment aux environs des bords Γ_1 et Γ_2 . Dans ces conditions, dans ces régions, le pas de maillage doit être inférieur à la longueur de Debye λ_D qui caractérise la portée de l’interaction électrostatique :

$$\lambda_D^2 = \frac{\epsilon_0 \epsilon_r k_B T}{q^2 n_D^+}, \quad (5.42)$$

où n_D^+ représente la valeur maximale du dopage positif (proche de l’interface Oxyde/Silicium).

La mise en oeuvre numérique est définie par les étapes suivantes :

1. Nous avons établi tout d’abord, les conditions de quasi-équilibre sur les bords par une approche semi-classique puis quantique.
2. Nous effectuons ensuite (ou indépendamment si l’on utilise des conditions sur les bords des guides de Neumann homogènes), l’approche semi-classique 2D. Nous obtenons alors un profil de potentiel dans le but d’initialiser l’approche quantique.
3. Calcul du modèle Schrödinger-Poisson à l’équilibre.
4. Variation du potentiel de drain et calcul du modèle Schrödinger/Poisson hors équilibre.

Remarque: les potentiels chimiques μ_1 et μ_2 , sont solutions de l’équation (5.4) où nous considérons une approche semi-classique pour le calcul de la densité électronique. Cette équation sera résolue numériquement à l’aide d’une méthode de Newton.

5.3.2 Commentaires sur les résultats préliminaires

Les résultats de calculs au modèle quantique Schrödinger/Poisson sont actuellement en cours de test. Nous choisissons alors de présenter dans cette section, les tous premiers résultats que nous avons obtenus, notamment liés au calcul du système Schrödinger/Poisson 1D (conditions de quasi-équilibre) et aux résultats du profil de densité et du potentiel, à l’aide de l’approche semi-classique.

Pour réaliser les simulations numériques, nous choisissons les paramètres suivants :

- $l_x = 18.5\text{nm}$, $L_z = 60\text{nm}$, et $l_z = 1.5\text{nm}$ pour les dimensions de la zone active de la figure 5.1,
- $T = 300\text{K}$ pour la température,
- $V_G = 1\text{V}$ pour le potentiel de grille,
- $v_1 = v_2 = 0\text{V}$ pour les potentiels de polarisation (source et drain),
- $E_c = 3.15\text{eV}$ pour le gap d'énergie entre l'Oxyde et le Silicium,
- $m_l^* = 0.98m_e$, $m_t^* = 0.19m_e$ pour les masses effectives des électrons dans le Silicium,
- $m_{lh}^* = 0.16m_e$, $m_{hh}^* = 0.49m_e$ pour les masses effectives des trous dans le Silicium,
- $m^* = 0.5m_e$ pour la masse effective des électrons dans l'Oxyde [101],
- $\epsilon_r = 11.9$ pour le Silicium, et $\epsilon_r = 3.8$ pour l'Oxyde,
- $\Delta = 1.12$ pour le Silicium, et $\Delta = 9.0$ pour l'Oxyde.

Une partie du domaine Ω_0 muni de sa triangulation \mathcal{T}_{2,Ω_0} , est présentée sur la figure 5.4.

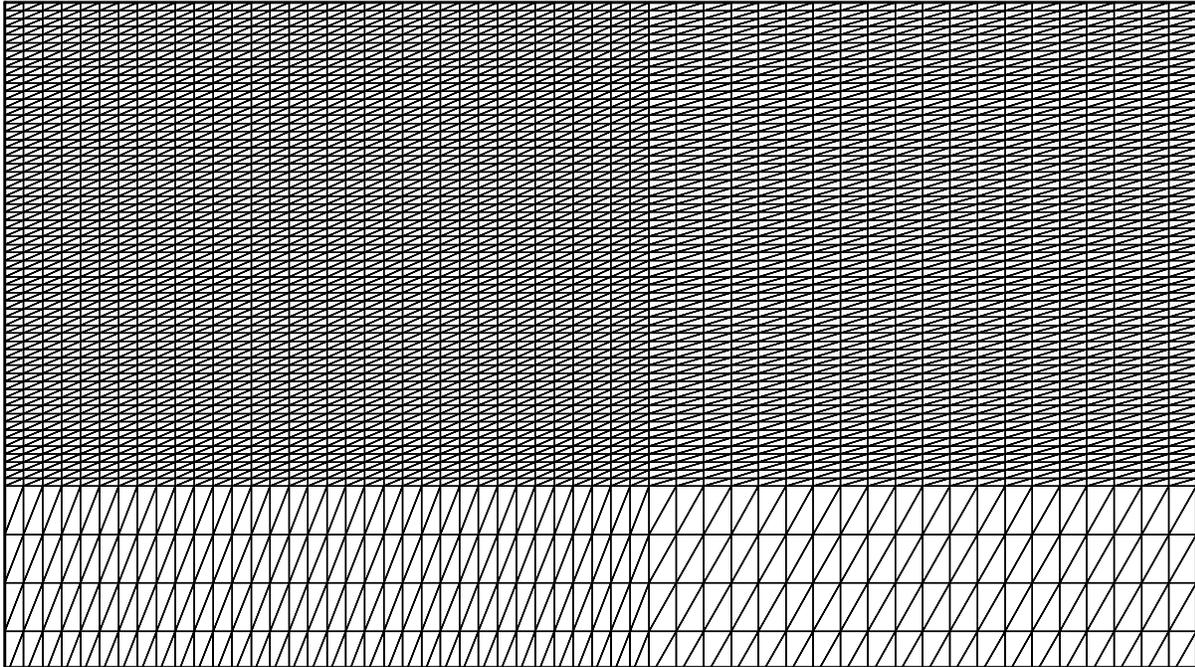


Figure 5.4: Maillage du domaine $\overline{\Omega_0}$ pour $x \in [-l_x, 0]$ et $z \in [-l_z, L_z/2]$.

Le nombre de noeuds du maillage \mathcal{T}_{2,Ω_0} est $\mathcal{N}_{2,\Omega_0} = 14300$, et le nombre de noeuds des maillages \mathcal{T}_{2,Γ_j} , $j = 1, 2$, est identique et égal à $\mathcal{N}_{2,\Gamma_j} = 130$.

La configuration de dopage d'un composant possédant un canal d'une longueur de 25nm, est une donnée du problème (fonction analytique) utilisée par la communauté scientifique qui peut se trouver dans [64] (*voir* Figure 5.5). Les valeurs maximales du dopage positif et du dopage négatif en valeur absolue, sont respectivement égales à

$$n_D^+ = 2 * 10^{26} \quad \text{et} \quad n_A^- = 2.5 * 10^{25}.$$

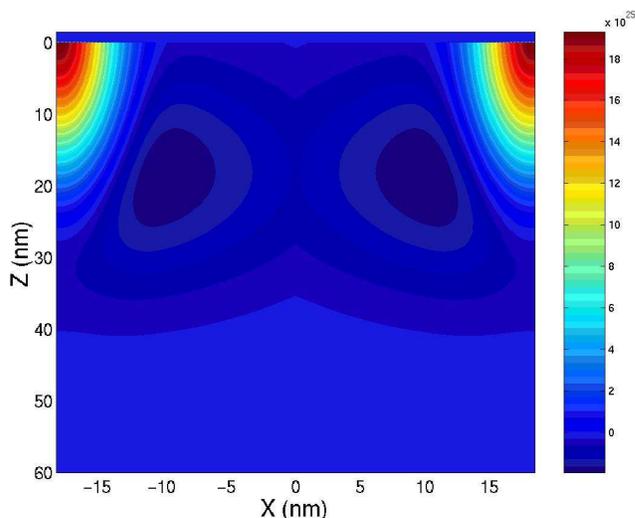


Figure 5.5: Configuration de dopage de la zone active en m^{-3} (donnée du problème). Nous observons des zones de dopage positif où se situent les électrons et des zones de dopage négatif beaucoup moins importantes où se situent les trous.

Nous observons sur ces données que la densité de dopage positive est beaucoup plus importante que la densité de dopage négative. On privilégie ainsi le transport des électrons par rapport au transport des trous. Par ailleurs, nous pouvons remarquer que les zones de dopage positif sont concentrées aux extrémités du composant, donnant ainsi naissance à des réservoirs d'électrons. Le choix de la petite dimension l_x de la zone active permet de ne pas prendre en compte une partie trop importante de ces réservoirs d'électrons (qui sont assimilés à des guides d'onde dans notre modèle). Tout en conservant la condition de quasi-équilibre sur les bords, nous allons diminuer ainsi le coût numérique des simulations.

Pour un système se trouvant à l'équilibre, nous pouvons dès lors effectuer le calcul du potentiel (en utilisant des conditions de Neumann homogènes aux bords des guides) à l'aide du modèle semi-classique. Le profil du potentiel est présenté sur la figure 5.6 et les profils de la densité électronique ainsi que de la densité de trous sont présentés sur la figure 5.7.

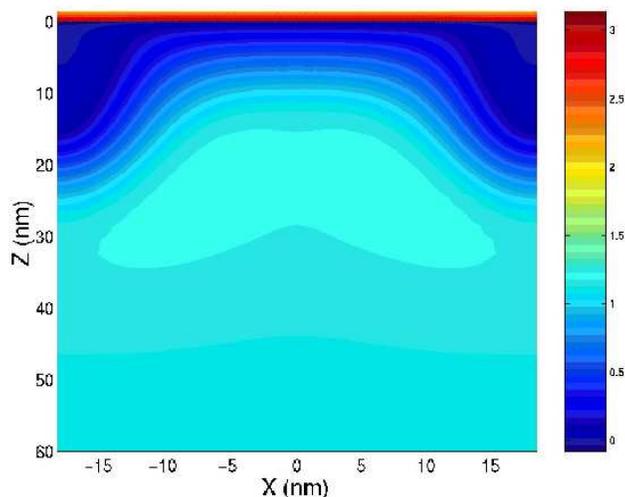


Figure 5.6: Profil du potentiel en eV dans le MOSFET à l'aide du modèle semi-classique. Nous observons la formation du canal dans lequel vont circuler les électrons.

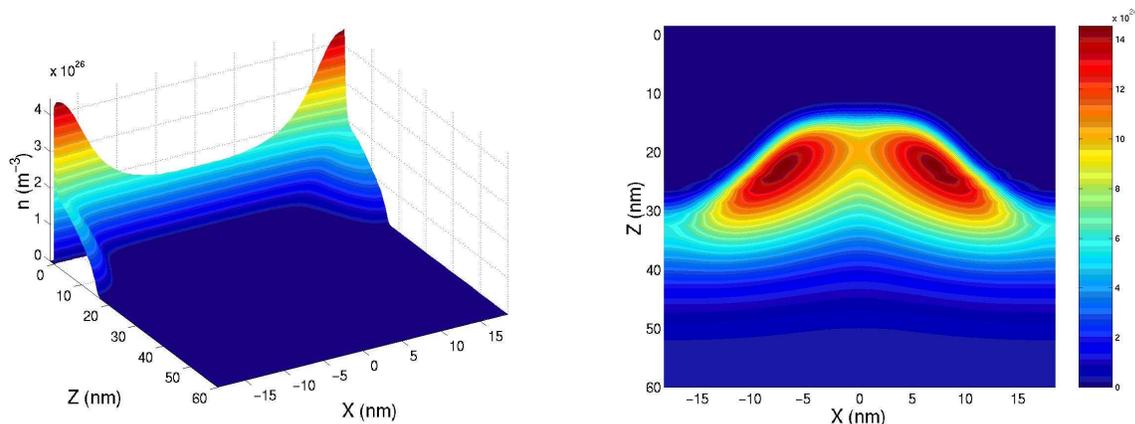


Figure 5.7: Profil de la densité électronique (à gauche) et de la densité de trous en m^{-3} dans le MOSFET, à l'aide du modèle semi-classique. A l'inverse des trous qui se situent dans le substrat loin de la couche d'Oxyde, les électrons sont principalement concentrés sous la couche d'Oxyde.

En accord avec la configuration de dopage, on observe que la densité de trous est beaucoup moins importante que la densité des électrons. Nous observons sur la figure 5.7, la formation de (petits) réservoirs d'électrons sur les bords des composants, ainsi que le pincement des électrons dans le canal.

Nous allons maintenant mettre en évidence l'importance des effets quantiques responsables du confinement des électrons dans la direction z . Dans ce but, nous présentons les résultats issus de la résolution du système Schrödinger/Poisson 1D dans la direction z et à x fixé. Nous choisissons alors de comparer les résultats de la densité électronique et du potentiel obtenus à travers les modèles semi-classique et quantique, sur les deux exemples suivants : au bord du composant en $x = -l_x$ sur la figure 5.8 et au milieu du composant (dans le canal) en $x = 0$ sur la figure 5.9.

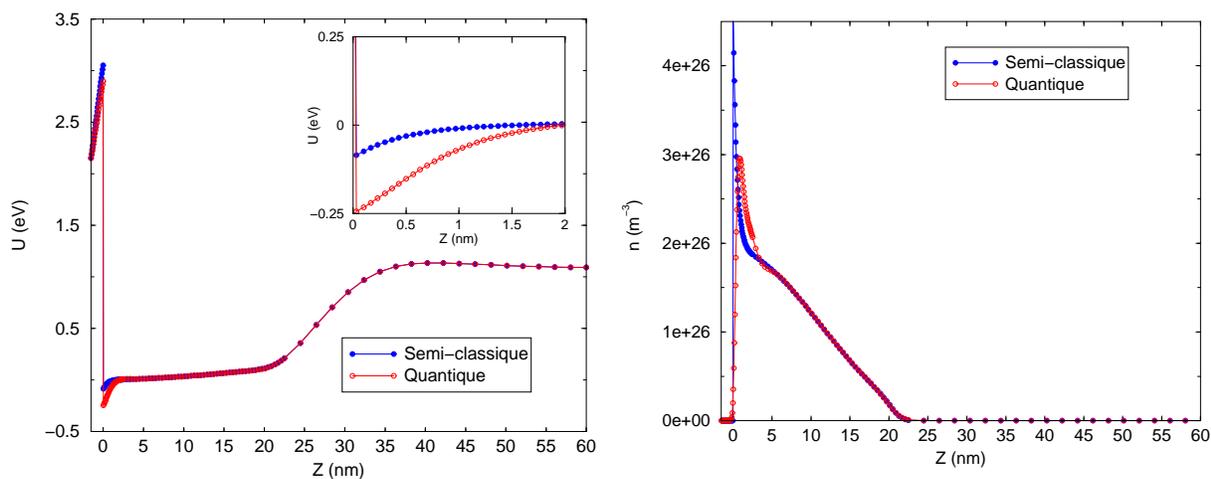


Figure 5.8: Représentation du potentiel (à gauche) et de la densité électronique en $x = -l_x$ ($\equiv l_x$ puisque $v_1 = v_2$) pour les deux modèles : semi-classique et quantique.

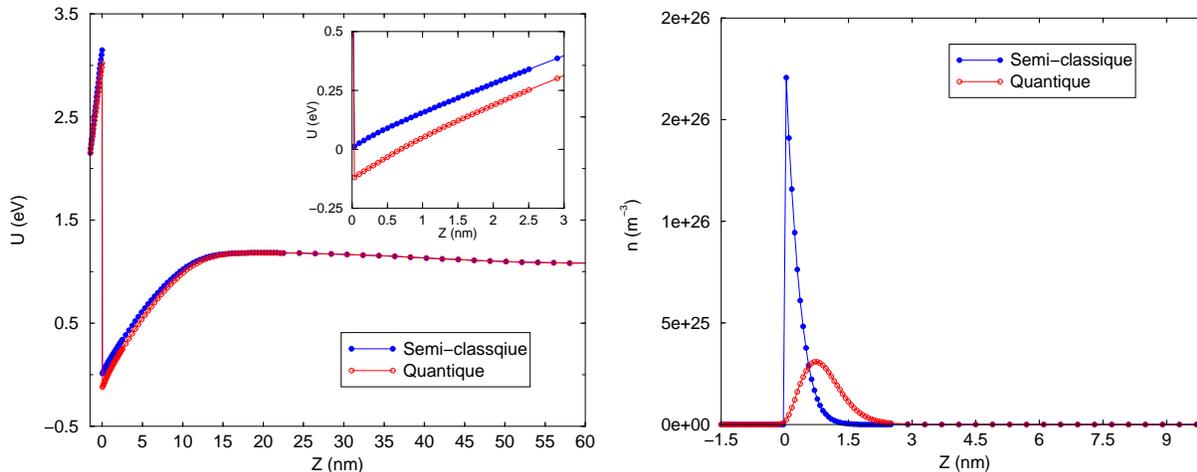


Figure 5.9: Représentation du potentiel (à gauche) et de la densité électronique en $x = 0$ pour les deux modèles : semi-classique et quantique.

Dans les deux cas, nous pouvons constater qu’avec le modèle quantique, le potentiel présente une allure plus creusée à proximité de la couche d’Oxyde en $z = 0$. Il apparaît alors un phénomène de confinement dans la direction z , lié à la mécanique quantique, qui va modifier le profil de la densité électronique. En particulier, nous observons dans le canal (*voir* Figure 5.9) que la densité électronique est plus étendue et moins localisée avec le modèle quantique qu’avec le modèle semi-classique. Les résultats de la figure 5.8 confirment l’apparition d’un réservoir d’électrons sur les bords du composant. Nous ne pouvons cependant pas réduire la dimension l_x de la zone active, au risque de perdre la condition de quasi-équilibre sur les bords. Ces derniers résultats obtenus sur le potentiel avec le modèle de quasi-équilibre sur les bords, sont utiles à la résolution du système Schrödinger/Poisson 2D. Ils peuvent en effet servir de conditions de Dirichlet aux bords des guides pour le potentiel bidimensionnel.

Les fonctions propres χ_m associées aux valeurs propres E_m sont représentées pour les deux configurations de la masse effective m_l^* et m_t^* , au bord du composant en $x = -l_x$ et au milieu du composant (dans le canal) en $x = 0$, respectivement sur les figures 5.10 et 5.11.

Les résultats de la figure 5.11 au milieu du guide montrent une séparation en énergie des états propres bien marquée. Inversement, nous constatons au bord du composant sur la figure 5.10, que les états propres forment un quasi-continuum d’énergie dans le réservoir (sauf pour le premier niveau d’énergie pour une configuration de masse effective longitudinale m_l^*). Le potentiel chimique μ du système à l’équilibre est calculé en résolvant l’équation (5.4), où nous trouvons $\mu \simeq 0.1103eV$. Par conséquent, afin de déterminer les conditions d’onde entrantes sur les bords dans la résolution de l’équation de Schrödinger 2D, nous devons tenir compte d’une grande quantité d’états propres (de l’ordre d’une dizaine de modes propagatifs et d’un grand nombre de modes évanescents).

Remarque: nous avons précisé au cours de l’étude sur les dispositifs AlGaAs/GaAs, que la valeur maximale de l’énergie d’intégration qui doit prendre en compte les effets

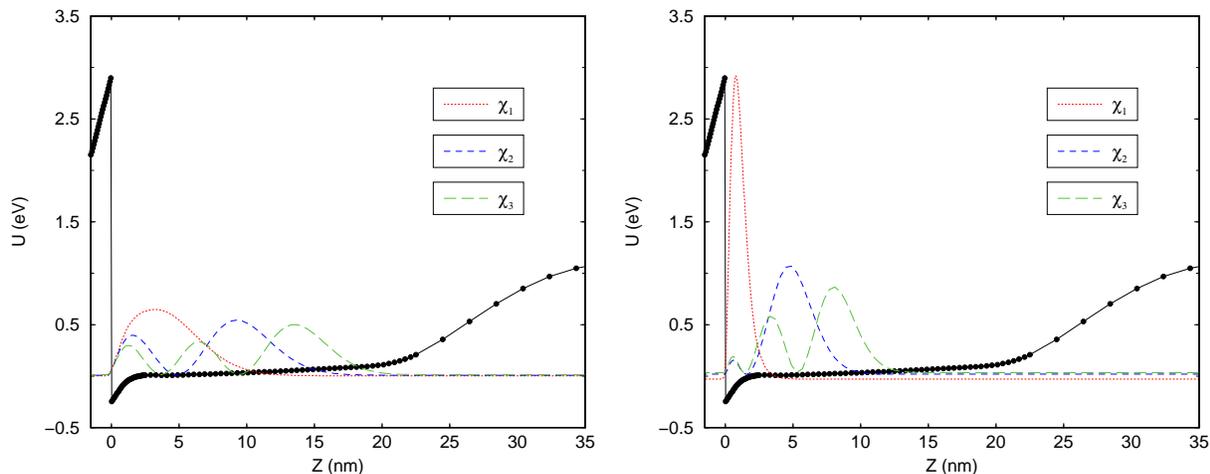


Figure 5.10: Profil du potentiel \hat{U} sur le bord du composant en $x = -l_x$ ($\equiv l_x$ puisque $v_1 = v_2$) et représentation de l'allure des trois premières fonctions propres dans le cas d'une masse effective transverse m_t^* (à gauche) et d'une masse effective longitudinale m_l^* . Chacune des fonctions propres a pour base la valeur de l'énergie propre qui lui est associée.

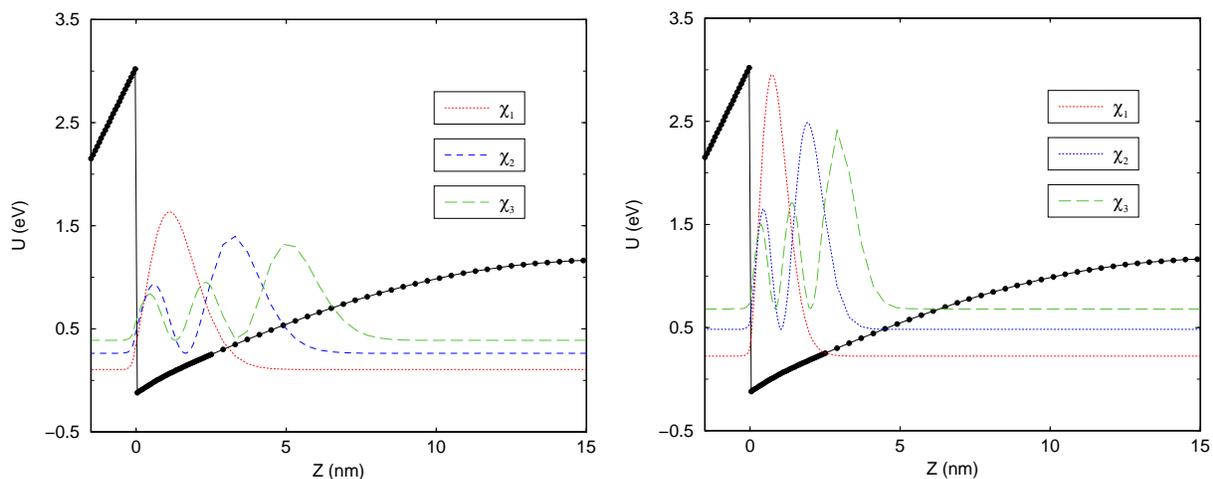


Figure 5.11: Profil du potentiel \hat{U} dans le canal en $x = 0$ et représentation de l'allure des trois premières fonctions propres dans le cas d'une masse effective transverse m_t^* (à gauche) et d'une masse effective longitudinale m_l^* . Chacune des fonctions propres a pour base la valeur de l'énergie propre qui lui est associée.

thermiques, était donnée par la formule (4.81). Contrairement à ces derniers dispositifs, dans le transistor MOSFET, le nombre de modes propagatifs sur les bords est très grand. En complément, le nombre de modes évanescents se doit d’être aussi très grand, car, dans ce cas, la zone active ne comporte qu’une très petite partie des guides d’onde.

Le calcul de la densité électronique (5.30) nécessite la résolution de trois types d’équations de Schrödinger associées aux fonctions d’onde $\psi^{ll}(x, z)$, $\psi^{lt}(x, z)$, et $\psi^{tt}(x, z)$. Dans notre cas test, à chaque pas d’itération sur le potentiel, le nombre de système linéaire (de taille $\mathcal{N}_{2,\Omega_0} = 14300$) qu’il nous faut résoudre en fonction de l’énergie est de l’ordre de ~ 1300 . Le coût numérique de la résolution du système Schrödinger/Poisson 2D du modèle quantique est donc très élevé. Les premiers résultats de calculs obtenus sur la densité électronique sur la figure 5.12, nous permettent d’effectuer une comparaison qualitative du modèle semi-classique (approximation Thomas-Fermi) et du modèle quantique complet.

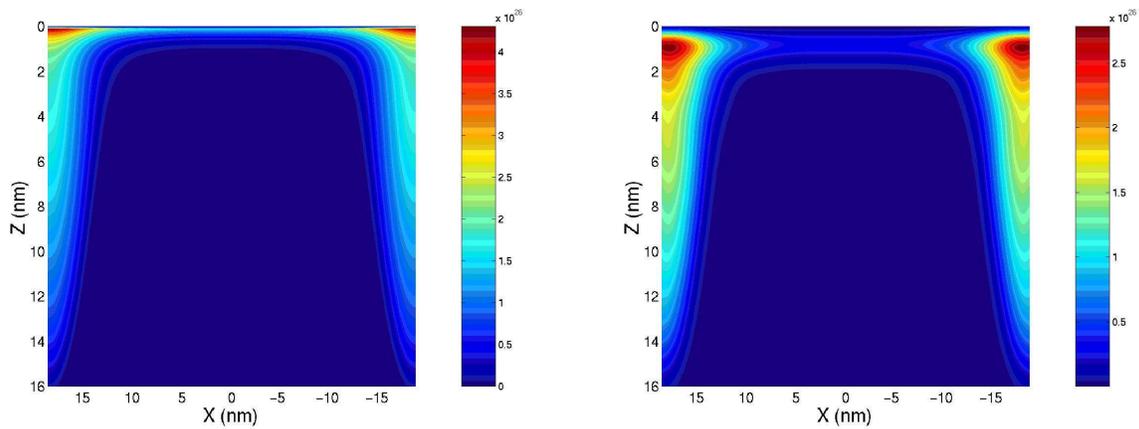


Figure 5.12: Représentation de la densité électronique dans le silicium en m^{-3} pour le modèle semi-classique (à gauche) et pour le modèle quantique.

Dans l’approche semi-classique, la majeure partie des électrons se situe à proximité de la couche d’Oxyde. Par ailleurs, celle-ci tend à surestimer les densités de charge accumulées. La densité électronique s’avère être plus étendue dans le canal avec l’approche quantique. Le phénomène de confinement transverse des électrons dans le canal y est nettement visible.

Remarque: afin d’assurer la stabilité numérique des simulations du modèle quantique, nous avons choisi dans ce cas d’utiliser des conditions aux bords de Neumann homogènes sur le potentiel sur les frontières avec les guides d’onde (réservoirs d’électrons).

Conclusion générale

L'objectif principal de ce travail de thèse concerne la modélisation et la simulation numérique du transport quantique balistique dans des dispositifs multidimensionnels à base de guides d'onde électronique ouverts. Ce modèle réaliste prend notamment en considération l'existence de potentiels mous dans les structures et les réactions de charge d'espace des électrons.

Dans le cas spécifique des dispositifs AlGaAs/GaAs, la modélisation mathématique nous a permis de présenter un modèle de transport quasi-3D qui, d'une part, réduit la dimensionnalité physique du gaz d'électrons en prenant en compte le confinement bidimensionnel des porteurs, et, d'autre part, présente des résultats identiques au modèle 3D complet avec un coût numérique réduit (*voir* l'exemple du stub électronique). Un code de calculs 3D baptisé NESSIE mettant en oeuvre une panoplie importante de méthodes numériques a été développé. Précisons que la résolution des systèmes Schrödinger/Poisson a été réalisée à l'aide d'une méthode de calcul implicite de Gummel. Le travail effectué sur ces dispositifs à guides d'onde électronique prend en compte de manière réaliste tous les aspects du transport électronique quand celui-ci est limité à un régime balistique. Les perspectives qui pourront nous permettre d'enrichir ce travail sont nombreuses :

- d'un point de vue numérique, il est possible de développer des méthodes de résolution rapide permettant de calculer le grand nombre d'équations de Schrödinger qui interviennent à chaque pas d'itération sur le potentiel électrostatique. Ces méthodes sont basées sur la décomposition spectrales de l'Hamiltonien.
- du point de vue de la physique, le code permet déjà d'effectuer de nombreux tests sur diverses structures complexes. En changeant les paramètres d'entrées du code, nous pouvons, d'une part, étudier les divers phénomènes physiques inhérents aux dispositifs à guides d'onde électronique, et, d'autre part, mettre en avant de possibles applications électroniques futures. Précisons que nous avons aussi la possibilité d'étudier l'influence d'un dopage non uniforme plus réaliste [89]. La partie réelle des valeurs propres issues de la décomposition spectrale de l'Hamiltonien nous permettra de localiser les états qui sont quasi-liés au système, et la partie imaginaire, de vérifier leur capacité de résonance [42]. Il est alors aussi possible d'étudier l'éventuelle apparition de phénomènes chaotiques dans les structures [86]. L'influence d'un champ magnétique est aussi envisageable [60, 87, 110]. Par ailleurs, avec l'augmentation de la température, la condition d'un régime balistique n'est plus satisfaite et nous devons tenir compte de la perte de cohérence des ondes suite à des interactions avec le réseau cristallin et/ou les impuretés. Signalons finalement que l'étude des composants en régime dynamique peut aussi être envisagée, certains travaux vont dans cette direction, citons par exemple [2, 13, 105].
- du point de vue de la modélisation mathématique, nous pouvons rendre compte des possibles phénomènes de collisions dans les structures en utilisant l'équation de maîtresse de Pauli présentée en [45, 46]. D'une façon générale, l'apport des mathématiques appliquées dans le travail de modélisation des phénomènes physiques est essentiel comme nous l'avons constaté dans cette thèse avec la dérivation du modèle quasi-3D. Le travail théorique de l'existence et l'unicité des solutions de ce modèle, est actuellement à l'étude [93].

Les simulations numériques montrent cependant que les écarts d'énergie entre les modes

propagatifs sont insuffisants si l'on projette d'opérer à des températures au dessus de celle de l'hélium liquide. Par conséquent, pour que ces types de dispositifs puissent pallier à ces limitations et passer au stade des applications, il semble nécessaire d'explorer d'autres voies de recherche technologique (par exemple la croissance sur marche...). Le code de calcul général NESSIE pourra vraisemblablement, s'adapter de manière efficace à un grand nombre de structures 3D qui pourraient être envisagé (pour le moment toujours dans le cas d'un régime de transport balistique). A l'avenir, la miniaturisation des circuits électroniques rendra incontournable l'utilisation de nouveaux composants quantiques, et les principes de fonctionnement à interférences quantiques des dispositifs à guides d'onde électronique présentent des attraits théoriques évidents.

Dans le cas des dispositifs "nano-MOSFETs", notre étude n'en est qu'à ces débuts. Le principal problème provient cependant du traitement des conditions aux bords ouvertes. Le modèle bidimensionnel que nous avons développé qui prend en compte l'anisotropie du matériau, fait apparaître une double configuration de modes propagatifs en nombre très élevé sur les bords. En effet, ceci est dû au fait que nous avons assimilé des "petits" réservoirs à des guides d'onde électronique. Le coût numérique de ce modèle quantique complet s'avère donc très élevé. Comme perspective, nous pouvons envisager de développer des modèles qui tiennent compte à la fois de la nature semi-classique des électrons aux extrémités du composant, ainsi que leur nature quantique plus au centre avec le pincement dans le canal. Ces modèles qui proposent d'introduire des limites classique-quantiques, sont déjà à l'étude dans le cas unidimensionnel avec collisions [8, 41]. Les collisions avec les impuretés peuvent aussi être prises en compte.

Dans la course à la miniaturisation des composants électroniques, la simulation numérique représente un atout considérable dans l'analyse et la prospection des applications. Les disciplines théoriques étroitement liées de la physique, des mathématiques appliquées, de la modélisation numérique, et de l'électronique, font de l'électronique quantique un domaine d'étude riche et varié.

Annexes

Annexe A

Les conditions de quasi-équilibre sur les bords associées au modèle 3D pour les dispositifs AlGaAs/GaAs

En faisant l'hypothèse que les limites guides d'onde-zone active, notées Γ_j , se trouvent dans un état de quasi équilibre, nous supposons que tous les phénomènes de conduction liés aux électrons qui entrent ou qui sortent de Γ_j (rappelons que Γ_j se trouve dans le guide d'onde j) ne représentent alors qu'une petite perturbation pour le réservoir d'électrons associé au guide j . De plus, nous supposons que potentiel électrostatique le long du guide j est invariant par translation autour de Γ_j . Rappelons que si l'on applique un potentiel négatif sur les grilles, le gaz d'électrons bidimensionnel déserte les zones se trouvant sous ces grilles. Par conséquent, dans l'hypothèse de quasi-équilibre, les bords Γ_j peuvent s'interpréter comme les coupes transverses d'un fil quantique supposé infini, lequel possède une distribution d'énergie relative au réservoir d'électrons j .

Dans un premier temps, rappelons la définition (3.2)

$$\Gamma_j = \gamma_j \times]0, L_z[. \quad (\text{A.1})$$

Notons ensuite η_j la coordonnée longitudinale du guide j , telle que sur le bord Γ_j on obtient $\eta_j = 0$. Nous utilisons alors les coordonnées (ξ_j, z) comme coordonnées locales du domaine Γ_j , telles que $\xi_j \in \gamma_j$ et $z \in]0, L_z[$. Les domaines bidimensionnels Γ_j se situent sur les faces du composant (c'est à dire sur les faces du domaine Ω_0). Notons γ_T le bord de Γ_j en surface du composant quand $z = L_z$, on définit alors γ_{T_G} et γ_{T_0} , les parties de γ_T respectivement avec ou sans grille. Soit encore γ_B le bord de Γ_j quand $z = 0$, et γ_F les bords latéraux des domaines Γ_j . A titre d'exemple, dans les cas du stub et du coupleur quantique, présentés sur les figures A.1a et A.1c, les faces relatives au plan $x = 0$ et les différentes frontières des domaines Γ_j sont représentées respectivement sur les figures A.1b et A.1d.

Nous allons maintenant déterminer le potentiel électrostatique sur chacun des systèmes purement bidimensionnels Γ_j . Soit V_j , le potentiel électrostatique solution de l'équation

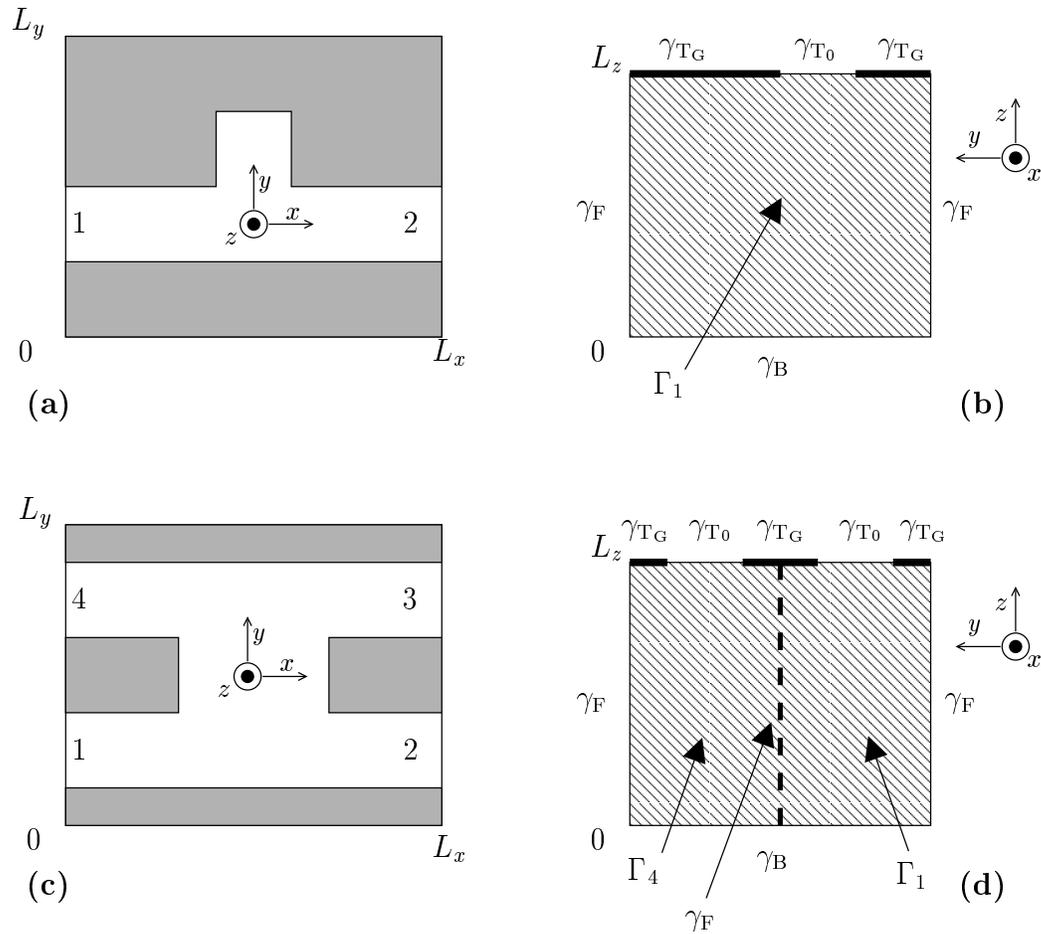


Figure A.1: Représentation du stub et du coupleur quantique en (a) et (c), ainsi que leur face relative au plan $x = 0$ respectivement en (b) et (d).

de Poisson dans Γ_j suivante :

$$-\nabla(\epsilon_r(z)\nabla V_j(\xi_j, z)) = \frac{q}{\epsilon_0}(-n[V_j](\xi_j, z) + N_D^+(\xi_j, z)) \quad \text{dans } \Gamma_j, \quad (\text{A.2})$$

où $N_D^+(\xi_j, z)$ est la densité de dopage de la couche AlGaAs, et $n[V_j](\xi_j, z)$ la densité électronique. Les conditions aux bords pour le potentiel électrostatique V_j peuvent s'explicitier à partir des conditions aux bords pour le potentiel V sur le domaine Ω_0 définies en (3.26). Dans le cas où un potentiel négatif est appliqué sur les grilles, les électrons sont principalement concentrés sous les zones privées de grilles en surface (*voir* Figure 3.4), et le potentiel est supposé invariant par translation sur les frontières γ_F (zones de très fort potentiel). On obtient alors

$$\begin{cases} V_j(\xi_j, z) = V_S & \text{sur } \gamma_{T_0}, \\ V_j(\xi_j, z) = V_S + V_G & \text{sur } \gamma_{T_G}, \\ (\nabla V_j \cdot \mathbf{n}_j) = 0 & \text{sur } \gamma_F \text{ et } \gamma_B, \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

avec \mathbf{n}_j normale extérieure au domaine Γ_j .

Le potentiel électrostatique dépend de manière auto-cohérente de la densité électronique. Le calcul de la densité peut être abordé soit par des considérations purement électrostatiques à partir de l'approximation de Thomas-Fermi, soit par une approche plus réaliste quantique à l'aide de l'équation de Schrödinger. Le calcul de la densité électronique suivant une approche semi-classique ayant été défini dans la présentation du modèle de transport 3D en (3.58), nous proposons maintenant de développer l'approche quantique Schrödinger/Poisson.

Comme indiqué sur l'exemple de la figure 3.4, les électrons sont concentrés dans un puits à l'interface du AlGaAs et du GaAs. La fonction d'onde relative à un électron d'énergie E dans Γ_j , notée χ_m^j , est donc solution de l'équation de Schrödinger 2D aux valeurs propres suivantes :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta_{\xi_j, z}\chi_m^j(\xi_j, z) + U_j(\xi_j, z)\chi_m^j(\xi_j, z) = E_m^j\chi_m^j(\xi_j, z) & \text{dans } \Gamma_j, \\ \chi_m^j(\xi_j, z) = 0 & \text{sur } \partial\Gamma_j, \\ \int_{\Gamma_j} \chi_m^j\chi_{m'}^j d\Gamma_j = \delta_{m, m'}, \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

où $U_j(\xi_j, z) = -qV_j(\xi_j, z) + E_c(z)$ (avec E_c l'énergie potentielle liée au bas des bandes de conduction des divers couches semi-conductrices) et où $\{\widehat{\chi}_m^j\}_{m \in \mathbb{N}^*}$ forme une base orthonormée de $L^2(\Gamma_j)$. On associe les fonctions propres $\widehat{\chi}_m^j$ à valeurs dans \mathbb{R} , aux valeurs propres réelles E_m^j .

Remarque: la résolution de l'équation (A.4) permet aussi d'obtenir la condition aux bords du modèle de transport 3D sur Ω_0 .

Nous avons adopté une approche semi-classique pour le calcul de la fonction d'onde dans la direction longitudinal du guide (η_j). Nous obtenons alors une onde plane du type $e^{ik\eta_j}$ ($k \equiv k_m^j$) (avec conditions aux bords périodiques). L'énergie E peut se décomposer comme

$$E(j, m, k) = E_m^j + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (\text{A.5})$$

Remarque: toujours d'après l'hypothèse de quasi équilibre, les guides j sont supposés infiniment longs et font partie intégrante, dans notre modèle, des réservoirs d'électrons qui leur sont associés. Par conséquent, nous tiendrons compte des deux sens de propagation suivant η_j pour k (conditions aux bords périodiques).

Pour le calcul de la densité électronique dans le guide j , nous utilisons un mélange statistique d'états ($e^{ik\eta_j} \chi_m^j$) relié à la distribution de Fermi-Dirac qui est associée au guide j

$$n[V_j](\xi_j, z) = 2 \sum_m \int_{\mathbb{R}} |\chi_m^j(\xi_j, z)|^2 f_{FD}(E(j, m, k) - \mu_j) \frac{dk}{2\pi}. \quad (\text{A.6})$$

On obtient encore après calculs

$$n[V_j](\xi_j, z) = \frac{2}{\pi} \left(\frac{2m^*}{\beta \hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_m |\chi_m^j(\xi_j, z)|^2 G(\beta(\mu_j - E_m^j)), \quad (\text{A.7})$$

où l'expression de $G(\eta_f)$ est donnée par

$$G(\eta_f) = \int_0^\infty \frac{1}{1 + \exp(\eta^2 - \eta_f)} d\eta. \quad (\text{A.8})$$

Remarque:

- les résultats de ce modèle écrit pour le fil quantique dans le cas d'une température nulle avec les deux approches semi-classique et quantique, peuvent se trouver dans [140].
- nous n'avons pas développé l'analyse mathématique du problème couplé Schrödinger/Poisson 2D fermé (où l'équation de Schrödinger est une équation aux valeurs propres). Remarquons simplement qu'il serait possible d'élargir pour le cas bidimensionnel, les résultats d'existence et d'unicité des solutions dans le cas d'un système Schrödinger/Poisson 1D fermé, qui ont été démontrés dans [84].

Annexe B

Les conditions de quasi-équilibre sur les bords associées au modèle quantique pour les dispositifs “nano-MOSFETs”

Avec l’hypothèse de quasi-équilibre sur les bords Γ_j ($j = 1, 2$), tous les phénomènes de conduction liés aux électrons (ou trous) qui entrent ou qui sortent de Γ_j ne représentent alors qu’une petite perturbation pour le réservoir d’électrons associé au guide j (c.a.d. la source ou le drain). Par conséquent, le potentiel électrostatique V_j sur le bord Γ_j assez loin de la zone dite active où les interférences quantiques sont prépondérantes, peut être supposé constant et invariant par translation autour de Γ_j (nous supposons que cette zone est réduite dans le cas du MOSFET étudié).

Le potentiel électrostatique V_j est solution de l’équation de Poisson 1D dans Γ_j suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{d}{dz}(\epsilon_r(z)\frac{d}{dz}V_j(z)) = \frac{q}{\epsilon_0}(-n[V_j](z) + p[V_j](z) + N_D^+(z) - N_A^-(z)) \quad \text{dans }]-l_z, L_z[, \\ V_j(z) = V_G \quad \text{en } z = -l_z, \\ \frac{d}{dz}V_j(z) = 0 \quad \text{en } z = L_z, \end{array} \right. \quad (\text{B.1})$$

où les conditions sur les bords sont déduites de (5.37).

Le potentiel électrostatique dépend de manière auto-cohérente de la densité électronique et de la densité de trous. Nous ne considérons pas les effets quantiques des trous (supposés négligeables), et le calcul de la densité des trous peut être abordé par une approche semi-classique à partir de l’approximation de Thomas-Fermi. Le calcul de la densité des électrons peut être réalisé soit par cette même approche semi-classique, soit par une approche quantique plus réaliste à l’aide de l’équation de Schrödinger. Le calcul de la densité des électrons et des trous suivant une approche semi-classique ayant été défini dans le chapitre 5 en (5.10) et (5.31), nous proposons maintenant de rappeler l’approche

quantique Schrödinger/Poisson pour les électrons qui a été développée dans [101].

Nous avons vu en (5.15) que les solutions des équations de Schrödinger 1D sur les bords Γ_j , sont les vecteurs propres $\chi_m^j(z)$ associés aux valeurs propres E_m^j . Rappelons que tous ces calculs sont effectués dans le cas général d’une configuration de masse effective (m_x^*, m_y^*, m_z^*) dans les directions x, y, z . Nous avons adopté une approche semi-classique pour le calcul de la fonction d’onde dans la direction x . Nous obtenons alors une onde plane du type $e^{ik_x x}$ solution de (5.19) muni de conditions aux bords périodiques. L’énergie E peut se décomposer comme

$$E(j, m, k_x, k_y) = E_m^j + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2M_x^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2 M_{x/y}^*}{2M_x^*} \quad (\text{B.2})$$

Pour le calcul de la densité électronique n_e^j sur Γ_j , nous utilisons un mélange statistique d’états ($e^{ik_x x} e^{ik_y y} \chi_m^j$) reliés à la distribution de Fermi-Dirac, laquelle est associée au guide j . Nous obtenons

$$n_e^j(z) = 2 \sum_m \int_{\mathbb{R}^2} |\chi_m^j(z)|^2 f_{FD}(E(j, m, k_x, k_y) - \mu_j) \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2}. \quad (\text{B.3})$$

Après calculs, on obtient encore

$$n_e^j(z) = \frac{1}{\pi \hbar^2 \beta} \sum_m \sqrt{(M_x^*)^2 (M_{x/y}^*)^{-1}} \ln \left\{ 1 + \exp(\beta(\mu_j - E_m^j)) \right\} |\chi_m^j(z)|^2. \quad (\text{B.4})$$

En fonction de la configuration des masses effectives considérées, nous avons utilisé les notations pour les fonctions d’ondes χ_m^j associées aux valeurs propres E_m^j suivantes :

- $\chi_m^{j,l}$ et $E_m^{j,l}$ pour une configuration (m_t^*, m_t^*, m_t^*)
- $\chi_m^{j,t}$ et $E_m^{j,t}$ pour une configuration (m_l^*, m_t^*, m_t^*) ainsi que pour une configuration (m_t^*, m_l^*, m_t^*)

La densité électronique sur Γ_j peut encore s’écrire avec (5.5)

$$n^j[V_j](z) = \frac{2}{\pi \hbar^2 \beta} \sum_m M_t^* \ln \left\{ 1 + \exp(\beta(\mu_j - E_m^{j,l})) \right\} |\chi_m^{j,l}(z)|^2 + \frac{2}{\pi \hbar^2 \beta} \sum_m \left(\frac{M_t^*}{\sqrt{M_{t/l}^*}} + \frac{M_t^*}{\sqrt{M_{l/t}^*}} \right) \ln \left\{ 1 + \exp(\beta(\mu_j - E_m^{j,t})) \right\} |\chi_m^{j,t}(z)|^2. \quad (\text{B.5})$$

Remarque: dans le cas de l’Oxyde ($z \leq 0$), m_x^* , m_y^* et m_z^* sont égaux à m^* , alors M_x^* , M_y^* et M_z^* , sont aussi égaux à m^* et $M_{k/k}^* = 1 \forall k$.

Remarque: rappelons que la densité de trous, calculés à partir d’un modèle semi-classique, est une fonctionnelle locale en z . Pour l’analyse mathématique du problème couplé Schrödinger/Poisson 1D fermé (où l’équation de Schrödinger est une équation aux valeurs propres), nous pouvons appliquer les résultats d’existence et d’unicité des solutions obtenus en [84].

Annexe C

Différentes méthodes de résolution numérique des systèmes couplés

Dans un cadre général, nous rappelons le système non-linéaire couplé sur le potentiel électrostatique V établi en (2.33) et valable pour tous les modèles physiques dans Ω_0

$$\left\{ \begin{array}{l} -\nabla(\epsilon_r(\mathbf{x})\nabla V(\mathbf{x})) + \frac{q}{\epsilon_0}\mathcal{G}[V](\mathbf{x}) = \frac{q}{\epsilon_0}(N_D^+(\mathbf{x}) - N_A^-(\mathbf{x})) \quad \text{dans } \Omega_0, \\ \text{avec conditions aux bords (2.4) sur } \partial\Omega_0 \text{ pour } V(\mathbf{x}), \end{array} \right. \quad (\text{C.1})$$

où dans le cas du modèle semi-classique, $\mathcal{G}[V]$ est une fonctionnelle densité de V locale en \mathbf{x} , et dans le cas du modèle quantique, c'est une fonctionnelle densité de V non locale en \mathbf{x} . Dans un premier temps, nous allons considérer deux méthodes standards de résolution numérique des systèmes non-linéaires que sont la méthode de relaxation et la méthode de Newton. Nous présenterons ensuite un schéma de calcul implicite du potentiel à l'aide des itérations de Gummel.

Méthode de relaxation

La méthode de relaxation est une méthode de résolution itérative définie par

$$\left\{ \begin{array}{l} V^{i+1}(\mathbf{x}) = V^i(\mathbf{x}) + \omega(V^*(\mathbf{x}) - V^i(\mathbf{x})), \quad \omega > 0, \\ V^0(\mathbf{x}) = V_{ini}(\mathbf{x}), \end{array} \right. \quad (\text{C.2})$$

où le potentiel V^* , est défini à chaque pas d'itération i (V^i est connu), par

$$\left\{ \begin{array}{l} -\nabla(\epsilon_r(\mathbf{x})\nabla V^*(\mathbf{x})) = -\frac{q}{\epsilon_0}\mathcal{G}[V^i](\mathbf{x}) + \frac{q}{\epsilon_0}(N_D^+(\mathbf{x}) - N_A^-(\mathbf{x})) \quad \text{dans } \Omega_0, \\ \text{avec conditions aux bords (2.4) sur } \partial\Omega_0 \text{ pour } V^*(\mathbf{x}). \end{array} \right. \quad (\text{C.3})$$

Remarque:

- le potentiel initial total V_{ini} est connu.
- la convergence de la méthode de relaxation dépend de la valeur du paramètre ω qui ne peut être déterminé que d'une manière empirique au vu des résultats de simulations numériques.
- cette méthode de relaxation souvent utilisée par les physiciens [133], s'est révélée peu efficace dans notre étude de dispositifs multidimensionnels, au vu de la dépendance fortement non-linéaire existant entre le potentiel et la densité.

Méthode de Newton

Nous utilisons la méthode de Newton dans le cas du modèle semi-classique Thomas-Fermi/Poisson où \mathcal{G} est une fonctionnelle densité de V locale en \mathbf{x} , définie en (2.34), (2.35), et (2.36). Posons

$$\mathcal{F}[V] = -\nabla(\epsilon_r(\mathbf{x})\nabla V) + \frac{q}{\epsilon_0}\mathcal{G}[V] - \frac{q}{\epsilon_0}(N_D^+ - N_A^-(\mathbf{x})). \quad (\text{C.4})$$

La méthode de Newton consiste à construire une suite $\{V^i\}$, telle que l'itéré V^{i+1} est calculé par

$$\begin{cases} (D_V\mathcal{F}[V])[V^{i+1}(\mathbf{x}) - V^i(\mathbf{x})] = -\mathcal{F}[V^i](\mathbf{x}), \\ V^0(\mathbf{x}) = V_{ini}(\mathbf{x}). \end{cases} \quad (\text{C.5})$$

La dérivée de \mathcal{F} par rapport à V et appliquée à V^* , peut alors s'écrire

$$(D_V\mathcal{F}(V))V^*(\mathbf{x}) = -\nabla(\epsilon_r(\mathbf{x})\nabla V^*(\mathbf{x})) + \frac{q}{\epsilon_0}(\mathcal{G}'[V])V^*(\mathbf{x}), \quad (\text{C.6})$$

où l'on note $\mathcal{G}'(V)$, la dérivée positive de $\mathcal{G}(V)$ par rapport à V . Cette dérivée peut s'écrire

$$\mathcal{G}'[V] = n'[V] - p'[V], \quad (\text{C.7})$$

avec $n'[V]$ et $p'[V]$ définis en (2.37) et (2.38). Ainsi, pour chacune des itérations i (V^i est fixé), nous avons à résoudre le système suivant :

$$\begin{cases} -\nabla(\epsilon_r(\mathbf{x})\nabla V^{i+1}(\mathbf{x})) + \frac{q}{\epsilon_0}(n'[V^i] - p'[V^i])V^{i+1}(\mathbf{x}) = \\ \frac{q}{\epsilon_0}\left((n'[V^i] - p'[V^i])V^i(\mathbf{x}) - n[V^i] + p[V^i] + N_D^+(\mathbf{x}) - N_A^-(\mathbf{x})\right) \quad \text{dans } \Omega_0, \\ \text{avec les conditions aux bords (2.4) sur } \partial\Omega_0 \text{ pour } V^{i+1}(\mathbf{x}). \end{cases} \quad (\text{C.8})$$

Méthode de calcul implicite : itérations de Gummel

La méthode des itérations de Gummel est souvent utilisée dans les modèles de Dérive-Diffusion [61]. Nous proposons d'étendre l'utilisation de cette méthode dans le cas multidimensionnel Schrödinger/Poisson où la fonctionnelle densité de V non locale en \mathbf{x} , est définie en (2.28). Tout d'abord, rappelons que le schéma de calcul explicite de résolution du potentiel électrostatique V est obtenu à travers la méthode de relaxation (C.2) dans le cas où le paramètre $\omega = 1$. Nous avons appréhendé la forte non-linéarité du système explicite au moyen d'un schéma de calcul implicite linéaire. Le système couplé (C.1) peut encore s'écrire

$$\left\{ \begin{array}{l} -\nabla(\epsilon_r(\mathbf{x})\nabla V(\mathbf{x})) + \frac{q}{\epsilon_0}\mathcal{G}[V](\mathbf{x}) \left(1 - \frac{V}{V_{ref}} + \frac{V}{V_{ref}}\right) = \frac{q}{\epsilon_0}(N_D^+(\mathbf{x}) - N_A^-(\mathbf{x})) \quad \text{dans } \Omega_0, \\ \text{avec les conditions aux bords (2.4) sur } \partial\Omega_0 \text{ pour } V(\mathbf{x}), \end{array} \right. \quad (\text{C.9})$$

où V_{ref} est un potentiel de référence. Un choix naturel pour V_{ref} est

$$V_{ref} = \frac{1}{q\beta}. \quad (\text{C.10})$$

A chaque pas d'itération i (V^i fixé), nous choisissons d'impliciter le schéma d'itération linéairement en V^{i+1} de telle manière que $\forall \mathbf{x}$ le terme en facteur de V^{i+1} reste positif. En effet, dans un cas général $\mathcal{G}[V]$ peut être soit positive, soit négative (la densité de trous est alors plus importante que la densité électronique). Nous écrivons alors ce schéma en utilisant une valeur absolue sur les fonctionnelles $\mathcal{G}[V]$ qui sont en facteur du terme V_{ref}^{-1} . On obtient

$$\left\{ \begin{array}{l} -\nabla(\epsilon_r(\mathbf{x})\nabla V^{i+1}(\mathbf{x})) + V_{ref}^{-1}\frac{q}{\epsilon_0}|\mathcal{G}[V^i](\mathbf{x})| V^{i+1}(\mathbf{x}) = V_{ref}^{-1}\frac{q}{\epsilon_0}|\mathcal{G}[V^i](\mathbf{x})| V^i(\mathbf{x}) \\ \frac{q}{\epsilon_0}(-\mathcal{G}[V^i](\mathbf{x}) + N_D^+(\mathbf{x}) - N_A^-(\mathbf{x})) \quad \text{dans } \Omega_0, \\ \text{avec conditions aux bords (2.4) sur } \partial\Omega_0 \text{ pour } V^{i+1}(\mathbf{x}). \end{array} \right. \quad (\text{C.11})$$

Remarque:

- le potentiel V^0 est initialement connu, tel que : $V^0 = V_{ini}$
- le terme valeur absolue en facteur de V^{i+1} assurera la coercivité de la forme bilinéaire qui apparaît dans la formulation variationnelle.

Annexe D

Compléments de calculs

Domaine	Element de base	Fonction de base	Espace polynomiale	Nombre de noeuds
3D, Ω_0	prisme	$\theta_{n,k}(\mathbf{x}) = w_n(x, y)\kappa_k(z)$	$\mathbb{P}_k(\mathbf{x}) = \mathbb{P}_1(x, y) \otimes \mathbb{P}_1(z)$	$\mathcal{N}_{3,\Omega_0} = \mathcal{N}_{2,\omega_0} * \mathcal{N}_{1,z}$
2D, ω_0	triangle	$w_n(x, y)$	$\mathbb{P}_1(x, y)$	\mathcal{N}_{2,ω_0}
2D, Γ_j	rectangle	$\vartheta_l(\xi_j, z)$	$\mathbb{Q}_1(\xi_j z) = \mathbb{P}_1(\xi_j) \otimes \mathbb{P}_1(z)$	$\mathcal{N}_{2,\Gamma_j} = \mathcal{N}_{1,\gamma_j} * \mathcal{N}_{1,z}$
1D, $]0, L_z[$	segment	$\kappa_k(z)$	$\mathbb{P}_1(z)$	$\mathcal{N}_{1,z}$
1D, γ_j	segment	$\kappa_k(\xi_j)$	$\mathbb{P}_1(\xi_j)$	\mathcal{N}_{1,γ_j}

Tableau D.1: Récapitulatif des éléments de la discrétisation des problèmes types sur les différents maillages.

$$\begin{aligned}
 b_{11} &= y_2 - y_3, & b_{12} &= x_3 - x_2 \\
 b_{21} &= y_3 - y_1, & b_{22} &= x_1 - x_3 \\
 b_{31} &= y_1 - y_2, & b_{32} &= x_2 - x_1
 \end{aligned}$$

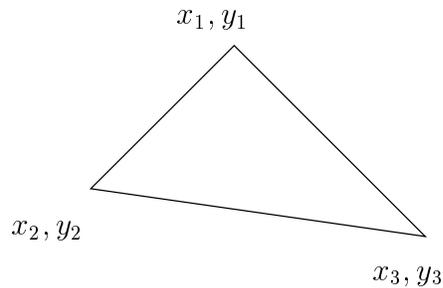


Tableau D.2: Coefficients b_{n1} et b_{n2} ($n = 1, 2, 3$) associés à l'élément de base pour le cas 2D (triangle).

	1D segment	2D triangle
$\int_{T_e} \omega_n \, d\mathbf{x}$	$\frac{h}{2}$	$\frac{\text{aire}(T_e)}{3}$
$\int_{T_e} \omega_n^2 \, d\mathbf{x}$	$\frac{h}{3}$	$\frac{\text{aire}(T_e)}{6}$
$\int_{T_e} \omega_n \omega_{n'} \, d\mathbf{x} \quad n \neq n'$	$\frac{h}{6}$	$\frac{\text{aire}(T_e)}{12}$
$\int_{T_e} (\nabla \omega_n)^2 \, d\mathbf{x}$	$\frac{1}{h}$	$\frac{b_{n1}^2 + b_{n2}^2}{4\text{aire}(T_e)}$
$\int_{T_e} \nabla \omega_n \nabla \omega_{n'} \, d\mathbf{x} \quad n \neq n'$	$-\frac{1}{h}$	$\frac{b_{n1}b_{n'1} + b_{n2}b_{n'2}}{4\text{aire}(T_e)}$
$\int_{T_e} f(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}$	$\frac{h}{2}(f_1 + f_2)$	$\frac{\text{aire}(T_e)}{3}(f_1 + f_2 + f_3)$
$\int_{T_e} f(\mathbf{x})\omega_n \, d\mathbf{x}$	$\frac{h}{3} \left(f_n + \frac{f_{n'}}{2} \right)$	$\frac{\text{aire}(T_e)}{6} \left(f_n + \frac{f_{n'}}{2} + \frac{f_{n''}}{2} \right)$
$\int_{T_e} f(\mathbf{x})\omega_n^2 \, d\mathbf{x}$	$\frac{h}{4} \left(f_n + \frac{f_{n'}}{3} \right)$	$\frac{\text{aire}(T_e)}{10} \left(f_n + \frac{f_{n'}}{3} + \frac{f_{n''}}{3} \right)$
$\int_{T_e} f(\mathbf{x})\omega_n \omega_{n'} \, d\mathbf{x} \quad n \neq n'$	$\frac{h}{12}(f_n + f_{n'})$	$\frac{\text{aire}(T_e)}{30} \left(f_n + f_{n'} + \frac{f_{n''}}{2} \right)$
$\int_{T_e} f(\mathbf{x})g(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}$	$\frac{h}{3} \left(f_1 + f_2 + \frac{f_1 g_2 + f_2 g_1}{2} \right)$	$\frac{\text{aire}(T_e)}{6} \left(\sum_n f_n g_n + \sum_n \sum_{n' \neq n} \frac{f_n g_{n'}}{2} \right)$

Tableau D.3: Divers résultats d'intégration sur un élément de base pour le cas 1D (segment) et pour le cas 2D (triangle). Dans tous les cas, ω représente une fonction de base \mathbb{P}_1 , et $f(\mathbf{x})$, $g(\mathbf{x})$ représentent des fonctions quelconques \mathbb{P}_1 sur l'élément de base. Les paramètres h et $\text{aire}(T_e)$ sont associés aux éléments de base respectivement, comme la longueur du segment de base T_e pour le cas 1D et l'aire du triangle T_e pour le cas 2D. L'indice n (ou n' , n'') des coefficients f_n et g_n représente le numéro local associé aux noeuds de l'élément de base ($n = 1, 2$ dans le cas 1D, et $n = 1, 2, 3$ dans le cas 2D). Finalement les coefficients b_{n1} et b_{n2} sont explicités sur le tableau D.

Bibliographie

- [1] T. Ando, A.B. Fowler, and F. Stern. Electronic properties of two-dimensional electron systems. *Rev. Mod. Phys.*, 54(2) :437, 1982.
- [2] A. Arnold. Numerical absorbing boundary conditions for quantum evolution equations. *VLSI design*, 6 :313, 1998.
- [3] A. Arnold., L. Horst, and P.F. Zweifel. A discrete-velocity stationary Wigner equation. *J. Math. Phys*, 41(11) :7167, 2000.
- [4] A. Arnold. and C. Ringhofer. An operator splitting method for the Wigner-Poisson problem. *SIAM J. Numer. Anal.*, 33(4) :1622, 1996.
- [5] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin. *Solid State Physics*. Holt, Reinhart and Winston, 1976.
- [6] F. Assad, Z. Ren, D. Vasileska, S. Datta, and M.S. Lundstrom. On the performance limits for silicon mosfets : A theoretical study. *IEEE Trans. Elec. Dev.*, 47 :232, 2000.
- [7] Y. Avishai and Y.B. Band. Quantum electronic conductance of a terminal junction. *Phys. Rev. Lett.*, 62(21) :2527, 1989.
- [8] N. Ben Abdallah. A hybrid kinetic-quantum model for stationary electron transport. *J. Stat. Phys.*, 90(3-4) :627, 1998.
- [9] N. Ben Abdallah. On a multidimensional Schrödinger-Poisson scattering model for semiconductors. *J. Math. Phys.*, 41(7) :4241, 2000.
- [10] N. Ben Abdallah and P. Degond. On a hierarchy of macroscopic models for semiconductors. *J. Math. Phys.*, 37(7) :3306, 1996.
- [11] N. Ben Abdallah, P. Degond, and Markowich A. On a one-dimensional Schrödinger-Poisson scattering model. *ZAMP*, 48 :135, 1997.
- [12] N. Ben Abdallah, P. Degond, and S. Génieys. An Energy-Transport model derived from the Boltzmann equation of semiconductors. *J. Stat. Phys.*, 84(1-2) :205, 1996.
- [13] N. Ben Abdallah and O. Pinaud. *Modélisation de l'évolution d'une diode à effet tunnel résonant sous l'effet d'une polarisation*. Rapport interne, Laboratoire de Mathématiques pour l'Industrie et la Physique, 2001.
- [14] B.A. Biegel. *Quantum electronic device simulations*. PhD thesis, Stanford university, 1997.
- [15] H. Brezis. *Analyse Fonctionnelle*. Masson, 1983.

- [16] J.A. Brum. Electronic properties of quantum-dot superlattices. *Phys. Rev. B*, 43(14) :12082, 1991.
- [17] M. Büttiker. Symmetry of electrical conduction. *IBM J. Res. Dev.*, 32(3) :317, 1988.
- [18] F.A. Buot. Mesoscopic physics and nanoelectronics : Nanoscience and nanotechnology. *Phys. Rep.*, 234(2,3) :73, 1993.
- [19] L. Burgnies. *Mécanismes de conduction en régime balistique dans les dispositifs électroniques quantiques*. Thèse de doctorat, Université des sciences et technologies de Lille, 1997.
- [20] L. Burgnies, O. Vanbésien, and D. Lippens. Transient analysis of ballistic transport in stublike quantum waveguides. *Appl. Phys. Lett.*, 71(6) :803, 1997.
- [21] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, and S. Pinhas. Generalized many-channel conductance formula with application to small rings. *Phys. Rev. B*, 31(10) :6207, 1985.
- [22] J.A. Carrillo, I. M. Gamba, O. Muscato, and C.W. Shu. Comparison of Monte Carlo and deterministic simulations of a silicon diode. *Proceeding, simulation of transport in transition regimes workshop, IMA*, 2001.
- [23] L.L. Chang, L. Esaki, and R. Tsu. Resonant tunneling in semiconductor double barriers. *Appl. Phys. Lett.*, 24 :593, 1974.
- [24] M. Chen, W. Porod, and D.J. Kirkner. Coupled finite element/boundary element method for semiconductor quantum devices with exposed surfaces. *J. Appl. Phys.*, 75(5) :2545, 1994.
- [25] C. Chevoir and B. Vinter. Scattering-assisted tunneling in double-barrier diodes : Scattering rates and valley current. *Phys. Rev. B*, 47(12) :7260, 1993.
- [26] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. *Mécanique Quantique I*. Hermann, Paris, 1973.
- [27] N.J. Collier and R.A. Cleaver. A novel dual-gate high electron mobility transistor using a split-gate structure. *Appl. Phys. Lett.*, 71(20) :2958, 1997.
- [28] S. Datta. Quantum devices. *Superlattices Microstruct.*, 6(1) :83, 1989.
- [29] S. Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press, 1995.
- [30] S. Datta and M.J. McLennan. Quantum transport in ultrasmall electronic devices. *Rep. Prog. Phys.*, 53 :1003, 1990.
- [31] S. Datta, M.R. Melloch, S. Bandyopadhyay, and M.S. Lundstrom. Proposed structure for large quantum interference effects. *Appl. Phys. Lett.*, 48(7) :487, 1986.
- [32] R. Dautrey and J.L. Lions. *Analyse Mathématique et Calcul Numérique*, volume 6. Masson, 1988. Nouvelle édition.
- [33] J.H. Davies. Electronic states in narrow semiconducting wires near threshold. *Semicond. Sci. Technol.*, 3 :995, 1988.
- [34] J.H. Davies. *The Physics of Low-dimensional Semiconductors : An Introduction*. Cambridge University Press, 1998.

- [35] P. Debray, O.E. Raichev, P. Vasilopoulos, M. Rahman, R. Perrin, and W.C. Mitchell. Ballistic electron transport in stubbed quantum waveguides : Experiment and theory. *Phys. Rev. B*, 61(16) :10950, 2000.
- [36] P. Degond. Mathematical modelling of microelectronics semiconductor devices : Some current topics on nonlinear conservation laws. *AMS/IP Stud. Adv. Math. Amer. Math. Soc. Providence RI*, 15 :77, 2000.
- [37] P. Degond, S. Génieys, and A. Jüngel. A system of parabolic equations in nonequilibrium thermodynamics including thermal and electrical effects. *J. Math. Pures Appl.*, 76 :991, 1997.
- [38] P. Degond, A. Jüngel, and P. Pietra. Numerical discretization of energy-transport models for semiconductors with non-parabolic band structure. *SIAM J. Sci. Comp.*, 22 :986, 2000.
- [39] P. Degond and C. Schmeiser. Macroscopic models for semiconductor heterostructures. *J. Math. Phys.*, 39 :1, 1998.
- [40] J.A. Del Alamo and C.C. Eugster. Quantum field-effect directional coupler. *Appl. Phys. Lett.*, 51(1) :78, 1990.
- [41] A. Elayyadi. Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées, Toulouse, en préparation.
- [42] C. L. Fernando and W. R. Frensley. An efficient method for the numerical evaluation of resonant states. *J. Appl. Phys.*, 76 :2881, 1994.
- [43] D. Ferry and H. Grubin. Modelling of quantum transport in semiconductor devices. *Solid State Phys.*, 49 :283, 1995.
- [44] D.K. Ferry and S.M. Goodnick. *Transport in Nanostructures*. Cambridge University Press, 1997.
- [45] M.V. Fischetti. Theory of electron transport in small semiconductor devices using the pauli master equation. *J. Appl. Phys.*, 83(1) :270, 1998.
- [46] M.V. Fischetti. Master-equation approach to the study of electronic transport in small semiconductor devices. *Phys. Rev. B*, 59(7) :4901, 1999.
- [47] M.V. Fischetti and S.E. Laux. Monte Carlo analysis of electron transport including band-structure and space-charge effects. *Phys. Rev. B*, 38 :9721, 1988.
- [48] C.A. Flory. Interferometric quantum wire switch. *J. Appl. Phys.*, 82(12) :6306, 1997.
- [49] W.R. Frensley. Wigner-function model of a resonant-tunneling semiconductor device. *Appl. Phys. Lett.*, 36(3) :1570, 1987.
- [50] W.R. Frensley. Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium. *Rev. Mod. Phys.*, 62 :745, 1990.
- [51] W.R. Frensley. *Heterostructures and Quantum Devices*. Academic Press, San Diego, 1994.
- [52] R.W. Freund. Conjugate gradient-type methods for linear systems with complex symmetric coefficient matrices. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 12(1) :425, 1992.

- [53] R.W. Freund. A transpose-free quasi-minimal residual algorithm for non-hermitian linear systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 14(2) :470, 1993.
- [54] H. Gajewski. On the uniqueness of solutions to the drift-diffusion model of semiconductor devices. *Math. Models Meth. Appl. Sci.*, 4 :121, 1994.
- [55] H. Gajewski and K. Gröger. On the basic equations for carrier transport in semiconductors. *J. Math. Anal. Appl.*, 113 :12, 1986.
- [56] I. Gamba and A. Jüngel. Positive solutions of singular equations of second order for quantum fluids. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 156 :183, 2001.
- [57] C. Gardner. The quantum hydrodynamic model for semiconductor devices. *SIAM, J. Appl. Math.*, 54 :409, 1994.
- [58] C. Gardner and C. Ringhofer. Numerical simulation of the smooth quantum hydrodynamic model for semiconductor devices. *Comp. Methods in Appl. Mech. and Eng.*, 181 :393, 2000.
- [59] H.L. Grubin and D.K. Ferry. Interfaces, boundaries and quantum device transport. *Semicond. Sci. Technol.*, 13 :A44, 1998.
- [60] B.Y. Gu, W.D. Sheng, X.H. Wang, and J. Wang. Electronic states and magneto-transport in quantum waveguides with nonuniform magnetic fields. *Phys. Rev. B*, 56(20) :13434, 1997.
- [61] H.K. Gummel. A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady state transistor calculations. *IEEE Trans. on Elec. Dev.*, 11(10) :455, 1964.
- [62] L. Guo, P. R. Krauss, and S.Y. Chou. Nanoscale silicon field effect transistors fabricates using imprint lithography. *Appl. Phys. Lett.*, 71(13) :1881, 1997.
- [63] J.J. Harris, C.T. Foxon, K.W.J. Barnham, D.E. Lacklison, J. Hewett, and C. White. Two-dimensional electron gas structures with mobilities in excess of $310^6 \text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$. *J. Appl. Phys.*, 61(3) :1219, 1986.
- [64] <http://www.mtl.mit.edu/Well>.
- [65] C.R. Huster. *Two-Dimensional Scattering Matrix Simulations of Si MOSFET's*. PhD thesis, Purdue university, 1999.
- [66] A. Jüngel. *Quasi-hydrodynamic semiconductor equations*, 2001. Progress in Nonlinear Differential Equations, Birkhäuser.
- [67] A. Jüngel and R. Pinnau. Global non-negative solutions of a nonlinear fourth-order parabolic equation for quantum systems. *SIAM J. Math. Anal.*, 32 :760, 2000.
- [68] O. Kavian. *Introduction à la théorie des points critiques*. Springer-Verlag, 1993.
- [69] G. Kirzenow. Resonant conduction in ballistic quantum channels. *Phys. Rev. B*, 39(14) :10452, 1989.
- [70] N.C. Kluksdahl, A.M. Kriman, D.K. Ferry, and C. Ringhofer. Self-consistent study of the resonant-tunneling diode. *Phys. Rev. B*, 39(11) :7720, 1989.
- [71] R. Landauer. Spatial variation of currents and field due to localised scatterers in metallic conduction. *IBM J. Res. Dev.*, 1 :223, 1957.
- [72] S. E. Laux and M. V. Fischetti. Transport models for advanced device simulation-truth or consequences? Technical report, IBM Res. Report, 1995.

- [73] S. E. Laux and M. V. Fischetti. Semiconductor device physics and the modeling of small semiconductor devices. Technical report, IBM Res. Report, 1996.
- [74] C.S. Lent and D.J. Kirkner. The quantum transmitting boundary method. *J. Appl. Phys.*, 67(10) :6353, 1990.
- [75] K.K. Likharev. Quantum electronic devices for future digital systems. Technical report, State University of New York, Stony Brook, 1995.
- [76] B. Lucquin and O. Pironneau. *Introduction au calcul scientifique*. Masson, 1997.
- [77] M.S. Lundstrom. Elementary scattering theory of the Si MOSFET. *IEEE Elec. Dev. Lett.*, 18 :361, 1997.
- [78] P. Markowich, C. Ringhofer, and C. Schmeiser. *Semiconductor equations*. Springer, 1990.
- [79] A. Messiah. *Mécanique Quantique I*. Dunod, Paris, 1958.
- [80] M.S. Mock. An initial value problem from semiconductor device theory. *SIAM J. Math. Anal.*, 5 :597, 1974.
- [81] F.J. Mustieles. Global existence of solutions of the nonlinear Boltzmann equation of semiconductor physics. *Rev. Mat. Iberoamericana*, 6(1-2) :43, 1990.
- [82] J.C. Nedelec and F. Starling. Integral equation method in a quasi-periodic diffraction problem for the time harmonic maxwell equation. *SIAM J. of Math. Anal.*, 22(6) :1679, 1991.
- [83] B. Nicero. <http://www-dinma.univ.trieste.it/nirftc/research/easymesh>.
- [84] F. Nier. *Etude mathématique et numérique des modèles cinétiques quantiques issus de la physique des semi-conducteurs*. Thèse de doctorat, Ecole polytechnique, 1991.
- [85] K. Nikolic and R. Sordan. Electronic transport in quantum waveguide systems with attached stubs. *Phys. Rev. B*, 58(15) :9631, 1998.
- [86] T. Ouchterlony. *Conductance in model mesoscopic structures*. PhD thesis, Linköping University, 1998.
- [87] J.J. Palacios and C. Tejedor. Mode-matching technique for transmission calculations in electron waveguides at high magnetic fields. *Phys. Rev. B*, 48(8) :5386, 1993.
- [88] T. Palm. Self-consistent calculations of an electron-wave Y-branch switch. *J. Appl. Phys.*, 74(5) :3551, 1993.
- [89] T. Palm. Effects of remote impurity scattering including donor correlations in a branching electron waveguide. *Phys. Rev. B*, 52 :11284, 1995.
- [90] T. Palm. *Theoretical studies of electron waveguide devices*. PhD thesis, Royal Institute of Technology, Stockholm, 1995.
- [91] L. Pfeiffer, K.W. West, H.L. Stormer, and K.W. Baldwin. Electron mobilities exceeding $10^7 \text{cm}^2/\text{vs}$ in modulation-doped *GaAs*. *Appl. Phys. Lett.*, 55(18) :1888, 1989.
- [92] F. G. Pikus and K. K. Likharev. Nanoscale field-effect transistors : an ultimate size analysis. *Appl. Phys. Lett.*, 71(25) :3661, 1997.
- [93] O. Pinaud. Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse, en préparation.

- [94] R. Pinnau and A. Unterreiter. The stationary current-voltage characteristics of the quantum drift-diffusion model. *SIAM J. Numer. Anal.*, 37(1) :211, 1999.
- [95] E. Polizzi and N. Ben Abdallah. Modeling of quantum ballistic transport in electron waveguide devices. *Proceeding, Mathematics in Industry in ECMI (European Consortium for Mathematics in Industry)*, Springer, 2001.
- [96] E. Polizzi, N. Ben Abdallah, O. Vanbésien, and D. Lippens. Space lateral transfer and negative differential conductance regimes in quantum waveguide junctions. *J. Appl. Phys.*, 87(12) :8700, 2000.
- [97] F. Poupaud. Diffusion approximation of the linear semiconductor Boltzmann equations : Analysis of the boundary layers. *Asymp. Anal.*, 4 :293, 1991.
- [98] F. Poupaud. Mathematical theory of kinetic equations for transport modelling in semiconductors : advances in kinetic theory and computing. *Ser. Adv. Math. Appl. Sci., World Sci. Publishing, River Edge, NJ*, 22 :141, 1994.
- [99] F. Poupaud and C. Ringhofer. Quantum hydrodynamic models in semiconductor crystals. *Appl. Math. Lett.*, 8 :55, 1995.
- [100] F. Poupaud and C. Schmeiser. Charge transport in semiconductors with degeneracy effects. *Math. Meth. Appl. Sci.*, 14 :301, 1991.
- [101] F. Rana, S. Tiwari, and D.A. Buchanan. Self-consistent modeling of accumulation layers and tunneling currents through very thin oxides. *Appl. Phys. Lett.*, 69(8) :1104, 1996.
- [102] M. Reed and B. Simon. *Methods of model mathematical physics*, volume 1-4. Academic Press, San Diego, 1980.
- [103] B. Ricco and M.Ya. Azbel. Physics of resonant tunneling. the one-dimensional double-barrier case. *Phys. Rev. B*, 29(4) :1970, 1984.
- [104] C. Ringhofer. Computational methods for semiclassical and quantum transport in semiconductor devices. *Acta Numerica*, 3 :485, 1997.
- [105] C. Ringhofer, D. Ferry, and N. Kluksdahl. Absorbing boundary condition for the simulation of quantum transport phenomena. *Transp. Theory and Stat. Phys.*, 18 :331, 1989.
- [106] S. Selberherr. *Analysis and simulation of semiconductor devices*. Springer, 1984.
- [107] W.D. Sheng. A novel quantum directional coupler based on II-shaped coupled electron waveguides. *J. Phys. D : Appl. Phys.*, 29 :3166, 1996.
- [108] W.D. Sheng. Quantum coherent networks : A theoretical study. *J. Appl. Phys.*, 81(9) :6210, 1996.
- [109] W.D. Sheng, B.Y. Gu, J. Wang, and J.B. Xia. Tunneling transmission in two quantum wires coupled by a magnetically defined barrier. *J. Appl. Phys.*, 82(12) :6083, 1997.
- [110] J.R. Shi and B.Y. Gu. Magnetoconductance oscillations of two parallel quantum wires coupled through a potential barrier. *Phys. Rev. B*, 55(15) :9941, 1997.

- [111] P.J. Simpson, D.R. Mace, C.J.B. Ford, I. Zailer, M. Pepper, D.A. Ritchie, J.E.F. Frost, M.P. Grimshaw, and G.A.C. Jones. Aharonov bohm effect and one-dimensional ballistic transport through two independent parallel channels. *Appl. Phys. Lett.*, 63(23) :3191, 1993.
- [112] C.G. Smith. Low-dimensional quantum devices. *Rep. Prog. Phys.*, 59 :235, 1996.
- [113] G.L. Snider, M.S. Miller, M.J. Rooks, and E.L. Hu. Quantized conductance in ballistic constrictions at 30 k. *Appl. Phys. Lett.*, 51(21) :2727, 1991.
- [114] F. Sols and M. Macucci. Circular bends in electron waveguides. *Phys. Rev. B*, 41(17) :11887, 1990.
- [115] F. Sols, M. Macucci, U. Ravaioli, and K. Hess. Theory for a quantum modulated transistor. *J. Appl. Phys.*, 66(8) :3892, 1989.
- [116] A.S. Spinelli and A. Benvenuti. Self-consistent 2-D model for quantum effects in n-MOS transistors. *IEEE Trans. on Elec. Dev.*, 45(6) :1342, 1998.
- [117] A.S. Spinelli, A. Benvenuti, S. Villa, and A. L. Lacaita. MOSFET simulation with quantum effects and nonlocal mobility model. *IEEE Elec. Dev. Lett.*, 20(6) :298, 1999.
- [118] Y. Sun, G. Kirzenow, A.S. Sachrajda, and Y. Feng. An electrostatic model of split-gate quantum wires. *J. Appl. Phys.*, 77(12) :6361, 1995.
- [119] A. Szafer and A.D. Stone. Theory of quantum conduction through a constriction. *Phys. Rev. Lett.*, 62(3) :300, 1989.
- [120] S.M. Sze. *Physics of Semiconductor Devices*. Wiley-Interscience, 1981.
- [121] H. Tachibana and H. Totsuji. Characteristics of quantum waveguide : Effects of finite confinement potential and geometrical deformations and comparison with simple theoretical approach. *J. Appl. Phys.*, 79(9) :7021, 1996.
- [122] R.P. Taylor. The role of surface-gate technology for AlGaAs/GaAs nanostructures. *Nanotechnology*, 5 :183, 1994.
- [123] R.P. Taylor, A.P. Milcolich, R. Newbury, C.P. Settmann, and T.M. Fromholh. Fractal transistors. *Semicond. Sci. Technol.*, 12 :1459, 1997.
- [124] E. Tekman and S. Ciraci. Novel features of quantum conduction in a constriction. *Phys. Rev. B*, 39(12) :8772, 1989.
- [125] S. Thompson, P. Packan, and M. Bohr. MOS scaling : transistor challenges for the 21st century. Technical report, Intel Technology journal Q3'98, 1998.
- [126] N. Tsukada, A.D. Wieck, and K. Ploog. Proposal of novel electron wave coupled devices. *Appl. Phys. Lett.*, 56(25) :2527, 1990.
- [127] B.J. Van Wees, H. Van Houten, C.W.J. Bennakker, J.G. Williamson, L.P. Kouwenhoven, D. Van der Marel, and C.T. Foxon. Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. Lett.*, 60 :848, 1988.
- [128] O. Vanbésien and D. Lippens. Theoretical analysis of a branch line quantum directional coupler. *Appl. Phys. Lett.*, 65(19) :2439, 1994.
- [129] O. Vanbésien and D. Lippens. Directional coupling in dual-branch electron-waveguide junctions. *Phys. Rev. B*, 52(7) :5144, 1995.

- [130] O. Vanbésien and D. Lippens. Quantum interference electronic switch. *Superlattices and Microstruct.*, 17(2) :197, 1995.
- [131] O. Vanbésien. *Aspects ondulatoires du transport dans les structures artificielles*. Thèse d'habilitation, Université des sciences et technologies de Lille, 1999.
- [132] O. Vanbésien. *Simulation et caractérisation électrique des diodes double barrière à effet tunnel résonnant*. Thèse de doctorat, Université des sciences et technologies de Lille, 1991.
- [133] B. Vinter. *Heterojunctions and Semiconductors Superlattices*. Springer, Berlin, 1986.
- [134] J. Wang, H. Guo, and R. Harris. Electron waveguide coupler : A four-terminal device. *Appl. Phys. Lett.*, 59(24) :3075, 1991.
- [135] A. Weisshaar, J. Lary, S.M. Goodnick, and V.K. Tripathi. Analysis and modeling of quantum waveguide structures and devices. *J. Appl. Phys.*, 70(1) :355, 1991.
- [136] J.O.J. Wesström. *Experimental and theoretical investigations of electron waveguide devices*. PhD thesis, Royal Institute of Technology, Stockholm, 1998.
- [137] J.O.J. Wesström. Self-gating effect in the electron Y-branch switch. *Appl. Phys. Lett.*, 82(12) :2564, 1999.
- [138] D.A. Wharam, T.J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J.E.F. Frost, D.G. Hasko, D.C. Peacock, D.A. Ritchie, and G.A.C. Jones. One-dimensional transport and the quantization of the ballistic resistance. *J. Phys. C.*, 21 :209, 1988.
- [139] H. Wu, D.W.L Sprung, J. Martorell, and S. Klarsfeld. Quantum wire with periodic serial structure. *Phys. Rev. B*, 44(12) :6351, 1991.
- [140] Z. Wu and P.P. Ruden. Self-consistent calculation of the electronic structure of semiconductor quantum wires : Semiclassical and quantum mechanical approaches. *J. Appl. Phys.*, 74(10) :6234, 1993.
- [141] G. Xu, Y. Yang, and P. Jiang. A theoretical investigation on the quantum field effect directional coupler. *J. Appl. Phys.*, 74(11) :6747, 1993.
- [142] H.Z. Zheng, H.P. Wei, D.C. Tsui, and G. Weimann. Gate-controlled transport in narrow $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ heterostructures. *Phys. Rev. B*, 34(8) :5635, 1986.