

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche
Scientifique
Université Ibn Khaldoun – TIARET



Faculté des Sciences de la Matière
Département de Physique

Mémoire

Présenté par :

SAFA Nacira

Pour obtenir le diplôme de

Master

Filière : Physique

Spécialité : Nano-physique

Thème :

Résolution numérique de l'équation de type dérive-diffusion et l'équation
de Poisson: Application à l'étude d'une jonction PN

Soutenu le :

Devant le jury:

M^r BOUADI Mohammed	Grade MCA	President
M^r AMMARI Abdelkader	Grade MCB	Examineur
M^r YANALLAH Khelifa	Grade Pr	Encadreur

ANNEE UNIVERSITAIRE 2018/2019

REMERCIEMENTS :

Avant tout, je remercie ALLAH le tout puissant de m'avoir donné le courage, la volonté, la santé et la patience de mener à terme ce présent travail.

J'exprime toute ma profonde gratitude, ma profonde reconnaissance et mes sincères remerciements à mon directeur de mémoire Monsieur le Professeur YANALLAH Khelifa.

Je tiens également à remercier Monsieur BOUADI Mohammed Maître de Conférence A à L'université Ibn Khaldoun d'avoir accepté de présider le jury d'examen de ma soutenance.

Je remercie vivement Monsieur AMMARI Abdelkader, Maître de Conférence B à L'université Ibn Khaldoun Tiaret qui ma fait l'honneur de siéger à ce jury.

Sans oublier ma famille qui m'a été d'un grand soutien tout au long de mes années d'études.

Enfin, je tiens à remercier toutes les personnes qui ont contribué à la réussite de ce travail.

Table des matière

INTRODUCTION GENERALE	8
CHAPITRE I.	11
I.1. INTRODUCTION.....	12
I.2. STRUCTURE DES SEMI-CONDUCTEURS.....	12
I.3. LES PROPRIETES ELECTRIQUES DES SEMI-CONDUCTEURS.....	13
I.3.1. Conductivité électrique	13
I.4. LES MECANISMES DE RECOMBINAISON ET LA DUREE DE VIE.....	15
I.4.1. Recombination SRH (Schokley-Read-Hall).....	16
I.4.2. Recombinaison Auger	17
I.4.3. Recombinaison Radiative.....	18
I.4.4. Recombinaison en surface.....	19
I.5. L'EQUATION DE NEUTRALITE D'UN SEMI-CONDUCTEUR.....	20
I.6. LE SEMI-CONDUCTEUR INTRINSEQUE.....	20
I.7. LES SEMI-CONDUCTEURS EXTRINSEQUES	22
I.8. UN SEMI-CONDUCTEUR NON DEGENERE	23
I.9. UN SEMI-CONDUCTEUR DEGENERE	24
I.10. STRUCTURE DE BANDES D'ENERGIES.....	24
I.11. GAP DIRECT ET INDIRECT	25
I.11.1. Gap direct :	25
I.11.2. Gap indirect.....	26
I.12. INTERACTION RAYONNEMENT - SEMI-CONDUCTEUR	26
I.12.1. Absorption fondamentale	26
I.12.2. Emission spontanée	26
I.12.3. Emission stimulée	27
I.13. LA STRUCTURE DE BANDE DE CONDUCTION ET BANDE DE VALENCE DES SEMI- CONDUCTEURS ET CONCEPT DE LA BANDE INTERDITE (GAP).....	27
I.14. LA JONCTION P-N:	28
I.14.1. Les type des jonctions :	29
I.14.2. Jonction non polarisée :	30
I.14.3. Jonction polarisée en direct :	32
I.14.4. Jonction polarisée en inverse :	33
I.15. CONCLUSION	34
CHAPITRE II.....	35

II.1. INTRODUCTION	36
II.1.1. Equations différentielles partielles.....	36
II.1.2. Solution à une équation différentielle partielle	37
II.2. MODELES DES PDE.....	37
II.2.1. Classification des PDE.....	37
II.2.2. Chemins caractéristiques.....	38
II.2.3. Domaine de dépendance et d'influence	40
II.2.4. Conditions initiales et limites.....	41
II.3. NOTATION DISCRETE.....	42
II.4. FONDAMENTAUX.....	42
II.4.1. Théorème de Taylor	43
II.4.2. Théorème de Taylor appliqué à la méthode des différences finies (FDM).....	43
II.4.3. Approximation par différence finie simple à un dérivé	43
II.5. CONSTRUIRE UNE BOITE A OUTILS DE DIFFERENCE FINIE.....	44
II.6. ÉQUATIONS HYPERBOLIQUES	47
II.6.1. Equation dérive linéaire 1D	48
II.6.2. Conception du schéma	48
II.7. RESOLUTION D'UNE EQUATION DE DERIVE	51
II.7.1. Schéma du premier ordre upwind	51
II.7.2. Schéma Leapfrog	52
II.7.3. Le nombre de Courant.....	53
II.8. RESOLUTION DE L'EQUATION DE DERIVE-DIFFUSION EN UNE DIMENSION.....	54
II.8.1. Discrétisation de l'équation de continuité.....	54
II.8.2. Résolution de l'équation de continuité par le schéma de Scharfetter et Gummel.....	55
II.9. DISCRETISATION DE L'EQUATION DE POISSON.....	57
II.10. CONCLUSION.....	59
CHAPITRE III.....	60
III.1. INTRODUCTION.....	61
III.2. RESULTATS POUR LE SCHEMA DE DERIVE LINEAIRE SIMPLE.....	61
III.2.1. Cas d'un profil triangulaire :.....	62
III.2.2. Cas d'un profil rectangulaire (discontinuité) :.....	65
III.2.3. La résolution d'une équation de dérive-diffusion par la méthode de Scharfetter-Gummel	68
III.3. MODELE DE DERIVE-DIFFUSION D'UNE JONCTION PN	70

III.3.1. Organigramme de résolutions des équations de continuité couplées à l'équation de Poisson.....	72
III.4. RESULTAT DE SIMULATION 1D –MODELISATION DE LA DIODE PN.....	73
III.5. CONCLUSION	77
CONCLUSION GENERALE	78
RÉFÉRENCE BIBLIOGRAPHIQUE	80

Liste des Figure

Figure I-1: représentation sur un plan de structure cubique (Fd3m).....	12
Figure I-2: Conductivité électrique a température ambiante de quelques corps solides	14
Figure I-3: la variation de la conductivité d'un matériau semi-conducteur en fonction de la température et la pureté : (a) peu d'impuretés, (b) cas normal, (c) beaucoup d'impuretés	15
Figure I-4:Le processus de recombinaison Schokley-Read-Hall	17
Figure I-5:Mécanisme de recombinaison Auger. L'excès d'énergie issu de la recombinaison peut être transféré à un électron (a) ou à un trou (b)	18
Figure I-6: Génération d'électrons et des trous dans un semi-conducteur intrinsèque	21
Figure I-7: Génération thermique de porteur de charge dans un semi-conducteur dopé par un donneur.....	22
Figure I-8: Diagramme de bondes d'énergie de semi-conducteurs.....	25
Figure I-9: (a) semiconductor a gap direct, (b) semiconductor a gap indirect	26
Figure I-10: Interaction rayonnement semi-conducteur.....	27
Figure I-11:structure de bande dans les semi-conducteurs (cas du Si) bande de valence, bande de conduction et bande interdite	28
Figure I-12: Un exemple du jonction P-N.....	29
Figure I-13 : <i>Jonction non polarisée</i>	31
Figure I-14: diagramme des charges.....	31
Figure I-15:. Jonction polarisée en direct.....	32
Figure I-16 : Jonction polarisée en direct.....	33
Figure I-17 : Le diagramme d'énergie de la jonction polarisée en inverse	34
Figure II-1 : La trajectoire comme caractéristique pour une équation de dérive	40
Figure II-2: Domain de dépendance (lignes horizontale) et région d'influence (lignes verticales) des PDE : (a) : Elliptique. (b) : parabolique. (c) : hyperbolique	41
Figure II-3 : Gabarit pour le schéma Upwind	52
Figure II-4Gabarit pour le schéma Leapfrog.....	53
Figure II-5: Discrétisation de l'équation de continuité.....	55
Figure II-6 : le schéma de Scharfetter-Gummel.....	56
Figure III-1: Les schémas leapfrog et upwind dans le cas d'une résolution de 300 points. A gauche la solution. A droite le \log_{10} de l'erreur.	63

Figure III-2 : Les schémas leapfrog et upwind dans le cas d'une résolution de 3000 points. A gauche la solution. A droite le \log_{10} de l'erreur	64
Figure III-3: Les schémas leapfrog et upwind dans le cas d'une résolution de 300 points. A gauche la solution. A droite le \log_{10} de l'erreur	65
Figure III-4 Les schémas leapfrog et upwind dans le cas d'une résolution de 3000 points. A gauche la solution. A droite le \log_{10} de l'erreur	67
Figure III-5: La méthode de Scharfetter-Gummel.	69
Figure III-6: l'erreur entre la solution numérique (Scharfetter-Gummel) et analytique.....	70
Figure III-7: Schéma de l'algorithme de résolution dans le cas équilibré	73
Figure III-8: Profil de bande de conduction à l'équilibre.....	75
Figure III-9: Densité d'électrons et de trous à l'équilibre.....	75
Figure III-10: Le champs électrique à l'équilibre	76
Figure III-11: Le potentiel électrique à l'équilibre.....	76
Figure III-12: Densité de charge totale à l'équilibre	77

Introduction Générale

En physique des semi-conducteurs, Une jonction PN est la juxtaposition d'un semi-conducteur type N et un semi-conducteur type P issus d'un même cristal. La différence des densités de donneurs et d'accepteurs varie brutalement d'une valeur négative dans la région P à une valeur positive dans la région N. Lorsque la région dopée P est mise en contact avec la région N, les électrons et les trous diffusent spontanément de part et d'autre de la jonction, produisant ainsi une zone de déplétion où la concentration en porteurs libres est quasiment nulle. Alors qu'un semi-conducteur dopé est un bon conducteur, la jonction empêche quasiment le passage du courant électrique. La largeur de la zone de déplétion varie avec la tension appliquée de part et d'autre de la jonction. Plus cette zone est courte, plus la résistance de la jonction est faible. La caractéristique $I(V)$ de la jonction, qu'est un élément très important, est donc fortement non linéaire.

L'étude des jonctions PN particulièrement la modélisation numérique a de grandes utilités pratiques dans la compréhension des phénomènes physiques qui se manifestent dans les dispositifs à semi-conducteurs. En effet, la modélisation numérique des jonctions PN est toujours un sujet d'actualité et d'intérêt colossal.

La difficulté de la modélisation du transport électronique dans les semi-conducteurs est lié à la grande diversité des modèles physiques. Le point de départ de beaucoup de modèles est l'équation de continuité de particules chargées de type dérive-diffusion qui décrit le phénomène de transport de charges. L'intérêt dans la modélisation des semi-conducteurs est de minimiser les études expérimentales afin de réduire le coût. Pour cette fin, il est important que les erreurs des calculs soient minimales et réalisables en un temps raisonnable. Pour cette raison, une partie importante de la recherche sur les jonctions PN s'intéresse aux schémas numériques qui permettent la résolution de l'équation de continuité de type dérive-diffusion ainsi que l'équation de Poisson. Dans cet objectif, le but de ce travail est de tester trois schémas numériques (Upwind, Leapfrog et Scharfetter et Gummel) pour la résolution des équations de continuité et ceci afin d'exploiter un code numérique d'une jonction PN qui se base sur le schéma numérique Scharfetter et Gummel.

Suivant les visés de ce travail le mémoire se divise en trois chapitres :

Le premier chapitre est dédié à une étude bibliographique générale des semi-conducteurs et quelques de leurs propriétés électroniques.

Le chapitre II présente les algorithmes numériques (Upwind, Leapfrog et Scharfetter et Gummel) permettant la résolution numérique des équations de continuité de type dérive diffusion des particules chargées.

Dans la première partie du chapitre III, des tests numériques contraignants sont effectués sur les algorithmes numériques (Upwind, Leapfrog et Scharfetter et Gummel) pour la résolution des équations de continuité de types dérive-diffusion. Ces tests vont nous permettre de connaître le schéma numérique le plus performant et le plus adapté pour la résolution des équations de continuité. Dans la deuxième partie de ce chapitre nous avons déterminé les densités des électrons et des trous ainsi que le champ électrique en exécutant un code qui se base l'algorithme de Scharfetter et Gummel.

Chapitre I.

I.1. Introduction

En 23 Décembre 1947 Bell Labs a présenté la première démonstration d'un semi-conducteur, il s'agit d'un transistor p-n-p. En 1959 la même société a présenté le premier MOSFET [1]. Ce dernier a conduit à une révolution dans la fabrication des circuits intégrés basée sur les semi-conducteurs. Depuis, les semi-conducteurs sont omniprésents dans notre vie quotidienne. L'évolution technologique n'a jamais cessé de croître. Néanmoins, même les transistors les plus récents partagent avec leur ancêtre le même principe physique [1] qu'on va dévoiler dans ce chapitre.

I.2. Structure des semi-conducteurs

Les semi-conducteurs se situent entre les métaux (conducteurs) et les isolants (non conducteurs). La structure du silicium et de germanium est la même que celle du diamant. Chaque atome est lié à 4 voisins placés aux sommets d'un tétraèdre par une liaison covalente : ces éléments sont « tétravalents ». La figure suivante correspond à une représentation sur un plan de la structure. Les traits figurent les électrons de valence.

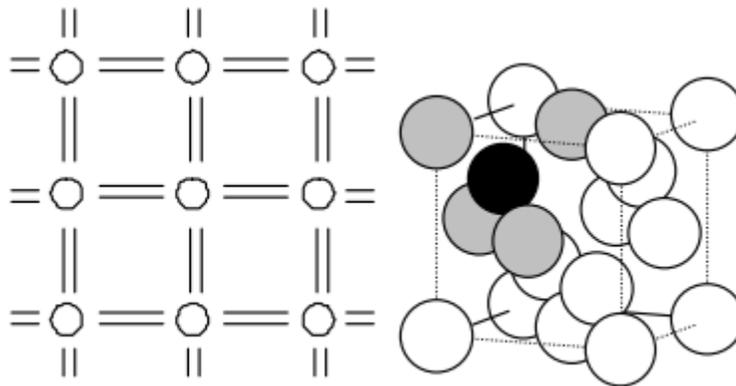


Figure I-1: représentation sur un plan de structure cubique (Fd3m)

La théorie des bandes appliquée aux semi-conducteurs amène à considérer une bande de valence entièrement pleine qui est séparée d'une bande de conduction par une bande interdite distante de l'énergie ΔE

Si on apporte une énergie thermique ou lumineuse suffisante à un électron, il peut passer de la bande de valence à la bande de conduction avec une probabilité P proportionnelle à $e^{-\Delta E / kT}$, ΔE est l'écart en énergie séparant les deux bandes ; T la température absolue ; $k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$ est la constante de Boltzmann.

Pour $T = 300 \text{ K}$, $kT = 0,0025 \text{ eV}$, le diamant a une $\Delta E = 7 \text{ eV}$; le silicium $\Delta E = 1,12 \text{ eV}$; le germanium $\Delta E = 0,7 \text{ eV}$.

Dans un semi-conducteur, ΔE est assez faible pour permettre, à température ambiante, le passage d'un petit nombre d'électrons de la bande de valence vers la bande de conduction.

I.3. Les propriétés électriques des semi-conducteurs

I.3.1. Conductivité électrique

Les semi-conducteurs ont une conductivité qui est au milieu entre les isolants et les conducteurs. Dans un matériau semi-conducteur, deux types de porteurs sont responsable de la conduction : les électrons et les trous. La conductivité électrique est donnée par l'expression :

$$\sigma(T) = q(n\mu_n(T) + p\mu_p(T)) \quad (\text{I-1})$$

Dans (I.1), on peut noter la relation direct et forte entre la conductivité et la température. En plus, la conductivité dépend aussi de la radiation électromagnétique, champs magnétique et toute forme d'irradiation et autre phénomène. Ce qui rend l'application des semi-conducteur polyvalente et très intéressante.

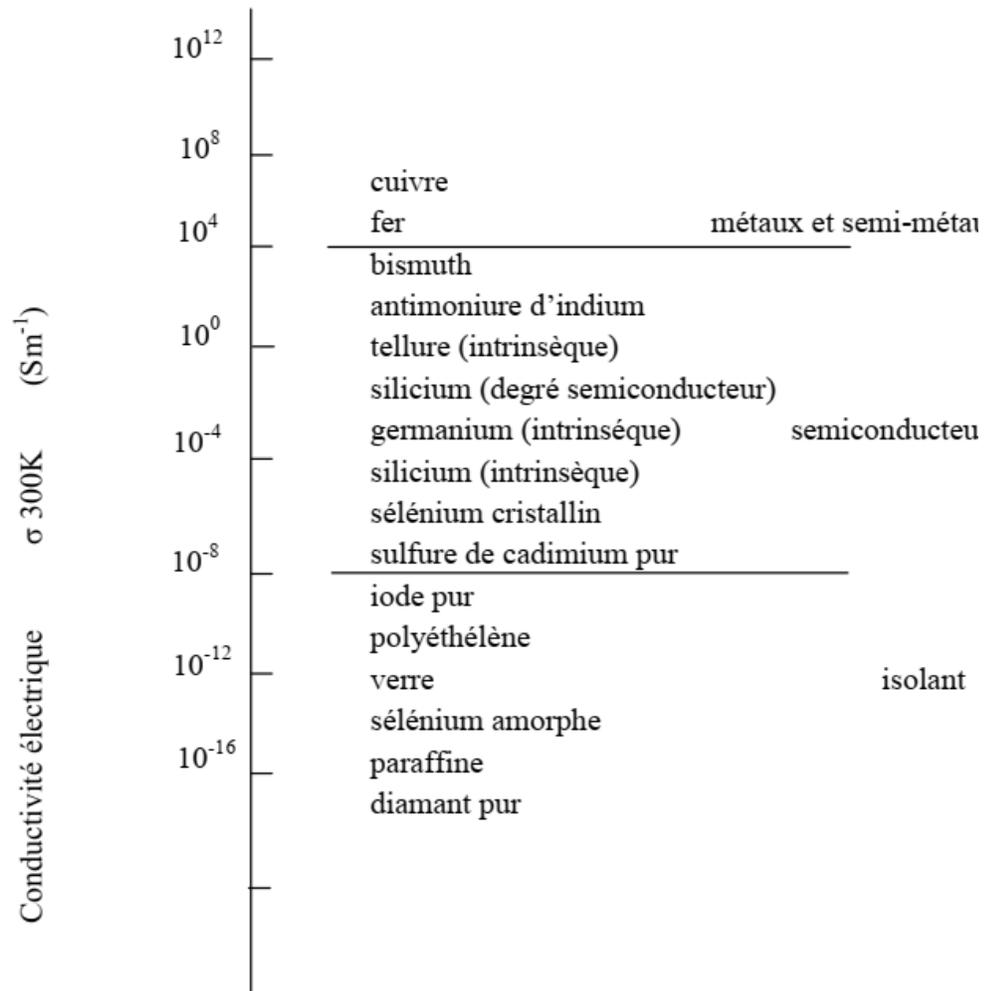


Figure I-2: Conductivité électrique à température ambiante de quelques corps solides [2]

La nature isolante des semi-conducteurs les rends polarisable. Si on applique un champ électrique a un semi-conducteur, ce dernier sera le siège d'un champ électrique interne. Dans ce cas la permittivité diélectrique ϵ devient un paramètre macroscopique déterminant. Donc, on peut définir un matériau semi-conducteur comme un corps solide polarisable et capable de conduire l'électricité.

a) *Effet de la température sur la conduction électrique*

La figure I.3 donne l'allure de la variation de la conductivité d'un matériau semi-conducteur en fonction de la température. Cette variation suit une loi qui est spécifique au semi-conducteur. Selon l'état de la pureté du matériau, la conductivité d'un semi-conducteur augmente d'une façon exponentielle avec l'augmentation de la température,

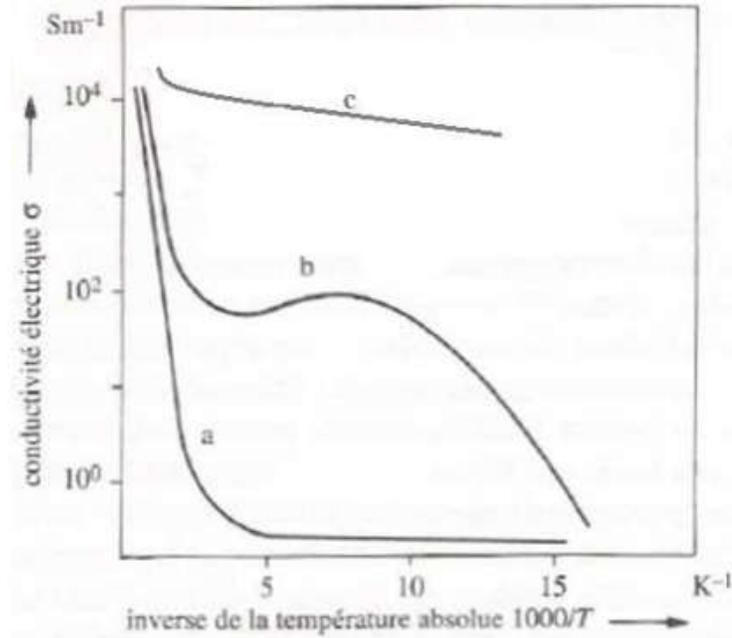


Figure I-3: la variation de la conductivité d'un matériau semi-conducteur en fonction de la température et la pureté : (a) peu d'impuretés, (b) cas normal, (c) beaucoup d'impuretés [2].

A basse température, une variation de la forme [2]:

$$\sigma \sim e^{\left(-\frac{E}{kT}\right)} \quad (\text{I-2})$$

fait intervenir une énergie d'activation E de l'ordre de quelques dixièmes d'électronvolts. Dans cette expression, T est la température absolue et k la constante de Boltzmann.

La figure I.3 montre l'effet de la pureté du matériau sur la variation de la conductivité en fonction de la température. Ainsi, un matériau pur (courbe a) nécessite une température élevée pour être conducteur. Alors qu'un matériau qui contient beaucoup d'impureté (courbe c) est conducteur même sous une faible température.

I.4. Les mécanismes de recombinaison et la durée de vie

Dans un semi-conducteur, la génération est la création des paires électrons-trous lors du passage d'un électron de la bande de valence à la bande de conduction. La recombinaison est le processus inverse où on perd le pair électron-trous avec une émission d'une énergie excédentaire sous forme d'un phonon ou photons.

Le temps moyen pour lequel un pair généré se recombine est appelé durée de vie des porteurs minoritaires τ . La valeur de ce paramètre peut être déterminée, pour le silicium de type p ou n, à partir du taux de recombinaison U .

$$\tau = \frac{\Delta n}{U} \quad (\text{I-3})$$

Où Δn (Δp) est la densité d'électrons (de trous) en excès.

Plusieurs mécanismes de recombinaison interviennent simultanément, en volume et en surface. Alors on définit la durée de vie effective qui tient compte de l'ensemble de ces mécanismes.

I.4.1. Recombination SRH (Schokley-Read-Hall)

Le processus de recombinaison Schokley-Read-Hall est schématisé sur la figure I-4 [3]. Ce processus fait appel à des niveaux d'énergie voisins du milieu du gap (niveaux appelés pièges, dus à certains défauts cristallins ou à la présence de certaines impuretés dans le cristal) qui facilitent la recombinaison des porteurs par un mécanisme en deux étapes. Un électron de la bande de conduction va d'abord se relaxer sur un niveau d'énergie intermédiaire lié à un défaut. Ensuite, une deuxième relaxation va lui permettre de se recombiner avec un trou de la bande de valence. L'efficacité de ce processus dépend de la densité des niveaux profonds et par suite, de la qualité du matériau utilisé et de sa technologie d'élaboration. La recombinaison Schokley-Read-Hall est modélisée par [3]:

$$R_{SRH} = \frac{pn - n_{ie}^2}{\tau_{p0} [n + n_{ie} \exp(\frac{E_t - E_i}{kT_L})] + \tau_{n0} [p + n_{ie} \exp(\frac{-(E_t - E_i)}{kT_L})]} \quad (\text{I-4})$$

Où E_t est la position énergétique des états de piège, E_i est le niveau de Fermi dans le semi-conducteur intrinsèque, τ_{n0} , τ_{p0} sont respectivement la durée de vie pour les électrons et les trous, n_{ie} est la concentration intrinsèque, k est la constante de Boltzmann et T_L la température en Kelvin.

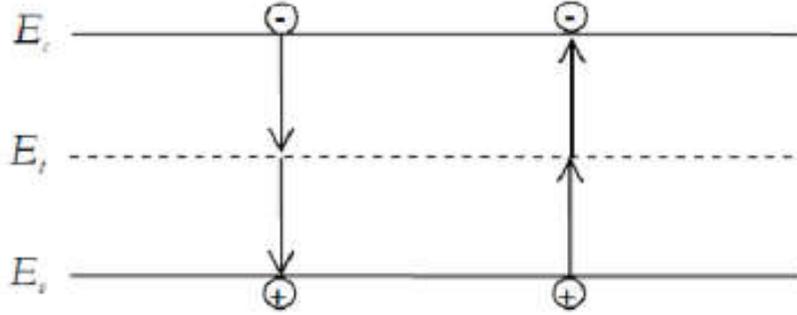


Figure I-4:Le processus de recombinaison Schokley-Read-Hall [3]

La dépendance de la durée de vie du modèle SRH avec la température est donnée par les deux relations de Klaassen's.

$$\tau_{n0}^{-1} = (\tau_{ksrhn}^{-1} + C_{ksrhn} n) \left(\frac{300}{T_L} \right)^{G_{ksrhn}} \quad (I-5)$$

$$\tau_{p0}^{-1} = (\tau_{ksrhp}^{-1} + C_{ksrhp} p) \left(\frac{300}{T_L} \right)^{G_{ksrhp}}$$

Où n est la concentration d'impureté totale. Aussi la dépendance de la durée de vie avec le dopage est donnée par les relations de Scharfetter.

$$\tau_n(N) = \tau_{n.min} + \frac{\tau_{n.max} - \tau_{n.min}}{1 + \left(\frac{N}{N_{n.ref}} \right)^\gamma} \quad (I-6)$$

$$\tau_p(N) = \tau_{p.min} + \frac{\tau_{p.max} - \tau_{p.min}}{1 + \left(\frac{N}{N_{p.ref}} \right)^\gamma}$$

Où $\tau_{n.max}$, $\tau_{n.min}$, $\tau_{p.max}$, $\tau_{p.min}$ sont les valeurs maximales et minimales de la durée de vie des électrons et des trous respectivement, $N_{n.ref}$, $N_{p.ref}$ est le niveau de référence du dopage pour lequel

$$\tau_n(N_{ref}) = \frac{\tau_{n.max} + \tau_{n.min}}{2}, \tau_p(N_{ref}) = \frac{\tau_{p.max} + \tau_{p.min}}{2}.$$

I.4.2. Recombinaison Auger

Le processus de recombinaison Auger est représenté sur la figure (I-5). L'excès d'énergie issu de la recombinaison d'un électron de la bande de conduction et d'un trou de la bande de

valence peut être transféré à une troisième particule libre, électron ou trou. Ces charges sont considérées comme des particules quasi libres, n'interagissant pas entre elles. La recombinaison Auger est modélisée en utilisant l'expression suivante :

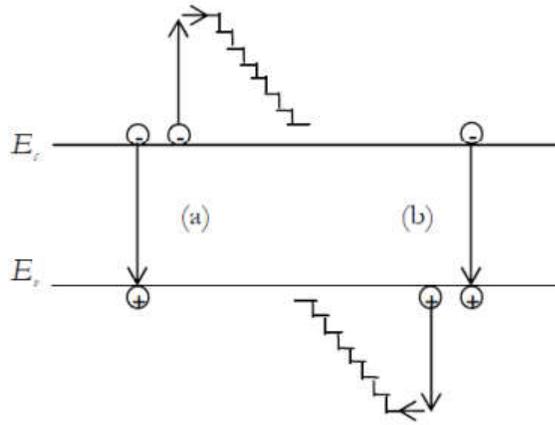


Figure I-5: Mécanisme de recombinaison Auger. L'excès d'énergie issu de la recombinaison peut être transféré à un électron (a) ou à un trou (b) [3]

Où $C_{Aug,n}$ et $C_{Aug,p}$ sont les coefficients Auger pour les électrons et les trous. La recombinaison est dite radiative ou avec émission de photons, si l'énergie des particules qui se recombinent est émise sous forme d'énergie de photons. La recombinaison par effet Auger appartient au type de la recombinaison non radiative où l'énergie libérée par la recombinaison de deux particules est transférée à une troisième particule qui devient alors une particule « chaude ». Cette particule « chaude » cède son énergie supplémentaire au réseau au cours d'une série de collisions.

I.4.3. Recombinaison Radiative

La recombinaison radiative correspond à la recombinaison d'un électron de la bande de conduction avec un trou de la bande de valence, avec émission d'un photon d'énergie proche de celle du gap du matériau (processus inverse de la photo génération) [3]. Le mécanisme de recombinaison radiative est un processus dominant dans les semi-conducteurs à gap direct comme le GaAs. Pour le silicium à gap indirect, ce mécanisme est relativement rare du fait que cette transition ne peut avoir lieu qu'avec l'assistance d'un photon. En plus de ces trois mécanismes l'énergie de recombinaison des particules peut être transféré au gaz électrique (recombinaison plasmique). Dans le cas où un électron et un trou forment d'abord un exciton, la recombinaison est

dite excitonique. L'évolution des processus de recombinaison radiative, photonique ou par effet Auger dépend du mécanisme de transition d'un électron de la bande de conduction à la bande de valence. Si l'électron et le trou recombinent par collision directe on dira que la recombinaison est intrinsèque ou inter bande. La recombinaison intrinsèque se manifeste principalement dans les matériaux à faible largeur de bande interdite, inférieur à 0,2 à 0,3 eV. Lorsque la largeur de la bande interdite est supérieure à 0,5 eV, la recombinaison s'effectue par l'intermédiaire des niveaux localisés dans la bande interdite. Ces niveaux particuliers sont couramment appelés des niveaux-pièges de recombinaison.

I.4.4. Recombinaison en surface

La surface d'un semi-conducteur est un lieu où les recombinaisons sont particulièrement nombreuses, en raison des liaisons non satisfaites des atomes de surface et autre défauts caractéristiques à température (T=300°K). Les recombinaisons en surface avant et arrière inhérents aux densités de dopages selon la relation suivante :

$$S = S_0 \left(\frac{N}{N_{set}} \right)^\alpha \quad (I-7)$$

S_0 , N_{set} et α dépendent du traitement de la surface et de la passivation. Par exemple pour une oxydation thermique d'une couche de silicium de type **n**, α est de **1** et N_{set} est de **10¹⁸ cm⁻³**. La passivation est l'ajout d'une couche de **SiO₂** en surface pour limiter les recombinaisons en surface et combler les liaisons cassées (en surface) lors de la découpe du semi-conducteur. Le taux de recombinaison en surface est donné par l'expression suivante [3] :

$$R_{surf} = \frac{pn - n_i^2}{\tau_p^{eff} [p + n_{ie} \exp(\frac{E_t - E_i}{kT_L}) + \tau_n^{eff} [n + n_{ie} \exp(\frac{-(E_t - E_i)}{kT_L})]]} \quad (I-8)$$

$$\text{Où } \frac{1}{\tau_n^{eff}} = \frac{1}{\tau_n^i} + \frac{d_i}{A_i} S_n, \quad \frac{1}{\tau_p^{eff}} = \frac{1}{\tau_p^i} + \frac{d_i}{A_i} S_p$$

τ^{eff} est la durée de vie effective, les paramètres d_i et A_i sont la longueur et l'épaisseur de l'interface. S_n S_p sont les vitesses de recombinaison pour les électrons et les trous respectivement par défaut, $S_n = S_p = 0$ cm/s [3].

I.5. L'équation de neutralité d'un semi-conducteur

Le calcul de la grandeur F (niveau de Fermi) s'effectue en faisant appel à l'équation dite de neutralité. Supposons tout d'abord que le semi-conducteur est dopé avec des éléments donneurs et accepteurs en concentration N_d et N_a . L'ionisation thermique fait naître dans le semi-conducteur un certain nombre d'électrons et de trous libres. Les porteurs de charge libre qui apparaissent proviennent aussi bien de l'ionisation des atomes d'impureté que de l'excitation thermique des atomes du semi-conducteur. « La charge totale de toutes les particules chargées contenues dans le cristal tout entier ainsi que dans chacune de ses parties de faible volume doit être nulle » ceci est la condition de neutralité, valable pour tout corps solide dénué de charge électrique résultante.

$$n + n_d - p - p_a = N_d - N_a \quad (\text{I-9})$$

La fonction de distribution des électrons pour les états d'impureté doit être de la forme :

$$f = \frac{1}{\frac{1}{g_i} e^{\frac{E_i - F}{kT}} + 1} \quad (\text{I-10})$$

où g_i degré de dégénérescence de l'état d'impureté i .

Si $E_i = E_d$ correspond à un centre donneur, $g_i = 2$,

$$f = \frac{1}{\frac{1}{2} e^{\frac{E_d - F}{kT}} + 1} \quad (\text{I-11})$$

Si $E_i = E_a$ correspond à un centre accepteur, $g_i = 1/2$;

$$f = \frac{1}{2e^{\frac{E_a - F}{kT}} + 1} \quad (\text{I-12})$$

I.6. Le semi-conducteur intrinsèque

Un semi-conducteur ne renfermant aucune impureté ($N_d = N_a = 0$) est dit intrinsèque. L'équation de neutralité correspondante est :

$$n - p = 0 \text{ ou } n = p \quad (\text{I-13})$$

Cette équation signifie que lorsqu'un électron quitte la bande de valence, il se produit dans cette dernière un trou et, de ce fait, dans un semi-conducteur intrinsèque le nombre de trous et toujours égal au nombre d'électrons (Figure.I.6).

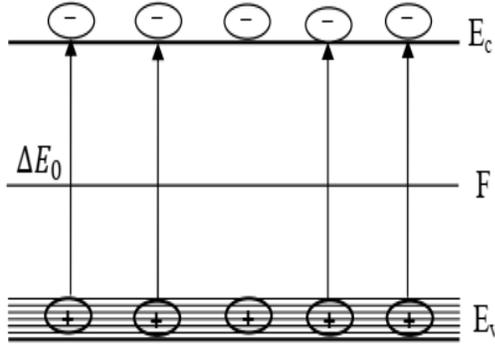


Figure I-6: Génération d'électrons et des trous dans un semi-conducteur intrinsèque

Le niveau de fermi est indépendant de la température et se situe presque au milieu de la bande interdite.

$$F = \frac{E_v + E_c}{2} + \frac{3}{4} kT \log\left(\frac{m_h}{m_e}\right) \quad (I-14)$$

A l'équilibre thermique, les densités totales d'électrons dans la bande de conduction et des trous dans la bande de valence sont données par les expressions suivantes.

$$\begin{aligned} n &= N_c e^{-\frac{E_c - F}{kT}} = N_c e^{-\frac{\Delta E_0}{2kT}} \\ p &= N_v e^{-\frac{F - E_v}{kT}} = N_v e^{-\frac{\Delta E_0}{2kT}} \end{aligned} \quad (I-15)$$

Où : N_c et N_v sont respectivement la densité effective d'états des électrons dans la bande de conduction et la densité effective d'états des trous dans la bande de valence.

La concentration des porteurs de charge intrinsèques est définie par l'équation (I.16).

$$n_i = n = p = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{\Delta E_0}{2kT}} \quad (I-16)$$

I.7. Les semi-conducteurs extrinsèques

On peut modifier de façon considérable la concentration de porteurs de charge d'un semi-conducteur intrinsèque en lui ajoutant de faibles quantités d'atomes astucieusement choisis et que l'on appelle impuretés dopantes ou tout simplement dopants. On obtient alors un semi-conducteur extrinsèque ou dopé.

Selon la nature des atomes introduits, soit le nombre d'électrons devient très supérieur au nombre de trous et le semi-conducteur est appelé de type n, soit le nombre de trous devient très supérieur à celui des électrons et le semi-conducteur est appelé de type p. nous allons expliquer le phénomène de dopage et ses conséquences sur le nombre d'électrons et de trous ainsi que sur la position du niveau de Fermi (niveau statistique moyen) dans le semi-conducteur.

Considérons un semi-conducteur dopé, par exemple, avec une impureté de type donneur de sorte que $N_d \neq 0$ et $N_a = 0$. L'équation de neutralité (I.14) s'écrit alors :

$$n + n_d - p = N_d \text{ où bien } n = p + N_d^+ \quad (\text{I-17})$$

Cette dernière équation signifie que l'apparition des électrons libres est due d'une part aux transitions de la bande de valence, ce qui conduit à la création de p trous libres et d'autre part aux transitions du niveau d'impureté, ce qui produit N_d^+ ions d'impureté (Figure I.7).

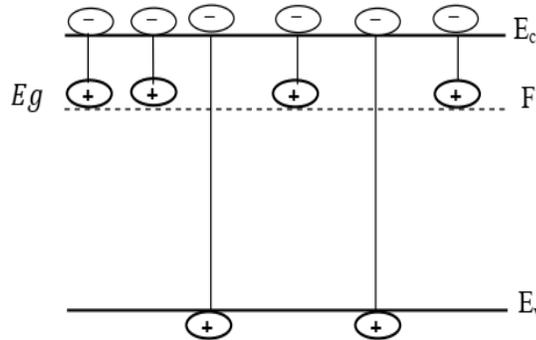


Figure I-7: Génération thermique de porteur de charge dans un semi-conducteur dopé par un donneur

Dans le semi-conducteur non dégénéré il suffit de déterminer la concentration des porteurs de charge d'un seul type :

$$np = n_i^2 = N_c N_v e^{-\frac{\Delta E_0}{kT}} \quad (I-18)$$

Reprenons l'équation (I.16), comme les électrons libres apparaissent grâce à l'ionisation de l'impureté et à l'excitation thermique du semi-conducteur lui-même, le rôle respectif de ces deux processus est différent selon la température.

Pour faire passer un électron de la bande de valence à la bande de conduction, on doit dépenser une énergie égale à la largeur de la bande interdite ΔE_0

Tandis que la transition d'un électron du niveau d'impureté vers la bande de conduction ΔE_d qui est notablement plus petite que la largeur de la bande interdite, de ce fait, aux basses températures ce sont les transitions d'électrons du niveau d'impureté qui seront prédominantes : $p \ll N_d^+ = N_d$, cette inégalité subsiste jusqu'à ce que tous les atomes de l'impureté seront ionisés. Quand la température croît l'ionisation des atomes d'impureté progresse, puis l'accroissement de la concentration n des électrons deviendra égal à l'accroissement de la concentration p des trous : $p \ll N_d^+$

I.8. Un semi-conducteur non dégénéré

Dans un semi-conducteur non dégénéré les concentrations des électrons et des trous se calculent à l'aide des équations suivantes :

$$\begin{aligned} n &= N_c e^{-\frac{E_c - F}{kT}} \\ p &= N_v e^{-\frac{F - E_v}{kT}} \\ n &= \frac{E_v - F}{kT} < -1 \end{aligned} \quad (I-19)$$

Où $F > E_v + kT$

Dans un semi-conducteur non dégénéré le produit de la concentration des électrons par la concentration des trous ne dépend pas de la position de niveau de Fermi.

$$np = N_c N_v e^{-\frac{\Delta E_0}{kT}} \quad (I-20)$$

On dit qu'un semi-conducteur n'est pas dégénéré lorsque le niveau de Fermi se trouve à une distance supérieure à kT au-dessous de E_c ou au-dessus de E_v . Autrement dit, dans un semi-conducteur non dégénéré le niveau de Fermi se situe dans la bande interdite.

I.9. Un semi-conducteur dégénéré

Pour un semi-conducteur complètement dégénéré on a :

$$n = \frac{E_v - F}{kT} > 5 \quad \text{où} \quad F < E_v - 5kT \quad (\text{I-21})$$

Ce qui montre que dans un semi-conducteur complètement dégénéré le niveau de Fermi doit se situer à l'intérieur de la bande de valence à une distance supérieure à $5kT$ au-dessous du haut de la bande.

Si le niveau de Fermi est disposé à plus de $5kT$ au-dessous de E_c , la concentration des électrons ne dépend plus de la température :

$$n = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{2m_d^*}{h^2} \right)^{3/2} (F - E_c)^{3/2} \quad (\text{I-22})$$

Lorsque le niveau de Fermi est disposé à plus de $5kT$ au-dessous de E_v , la concentration des trous ne dépend plus de la température :

La concentration correspondante des trous est donnée par l'équation (I.23),

$$p = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{2m_{pd}^*}{h^2} \right)^{3/2} (E_v - F)^{3/2} \quad (\text{I-23})$$

I.10. Structure de bandes d'énergies

Dans un atome un électron est soumis à un potentiel coulombien créée par le noyau et le nuage électronique qui est constitué par les autres électrons. Il ne peut occuper que des états quantiques bien définis et distincts les uns des autres. Ces états sont caractérisés par des niveaux d'énergie bien définis auxquels sont associées des fonctions d'onde.

Chaque système quantique est caractérisé par des fonctions d'ondes ψ qui sont les solutions de l'équation de Shrodinguer :

$$\frac{2m}{h}(E - V)\Psi = 0 \quad (\text{I-24})$$

Dans le cas de l'atome isolé la solution de l'équation de Schrödinger n'existe que pour des valeurs discrètes d'énergie $E_1, E_2, E_3, \dots, E_n$. Dans un solide cristallin les noyaux sont disposés en réseaux réguliers, les orbitales sont remplacées par des ondes de Bloch [4] et les couches sont remplacées par des bandes d'énergie permises séparées par d'autres bandes interdites. Une bande permise comporte un nombre considérable de niveaux d'énergie comparable au nombre d'atomes dans le cristal, les niveaux d'énergie des électrons de valence et le niveau d'énergie d'ionisation génèrent ainsi deux bandes d'énergies permises particulièrement intéressantes, la bande de valence et la bande de conduction, séparées par une bande dépourvue de niveaux permis, nommée bande interdite (Figure I.8).

La particularité de ces bandes permises tient au fait que les électrons peuvent circuler librement dans toute la maille cristalline et ainsi générer des courants de conduction électrique (s'agissant d'électrons partagés par les atomes du réseau cristallin)

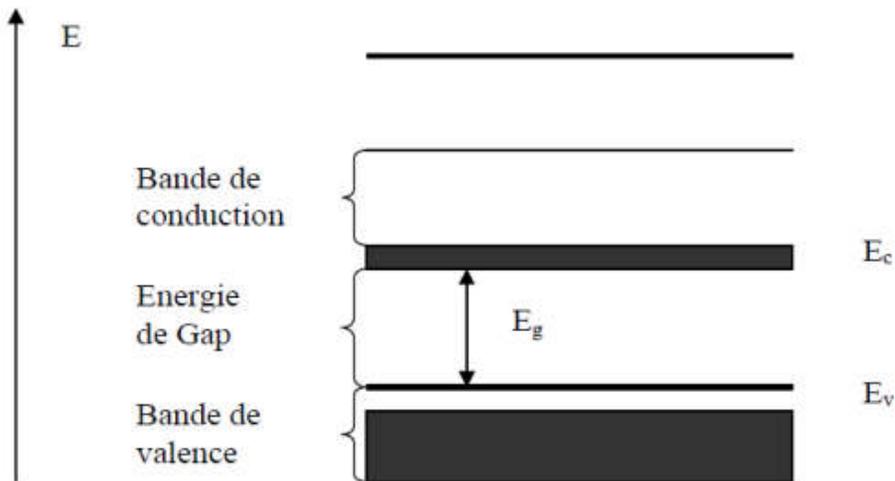


Figure I-8: Diagramme de bandes d'énergie de semi-conducteurs

I.11. Gap direct et indirect

I.11.1. Gap direct :

Un semi-conducteur est à gap direct si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande conduction peuvent correspondre au même vecteur d'onde k voire la figure (I.9.a).

I.11.2. Gap indirect

Un semi-conducteur est à gap indirect si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction ne correspondent pas au même vecteur d'onde k voire la figure (I.9.b). La distinction entre les semi-conducteurs à gap direct et indirect est très importante notamment dans les processus radiatifs. Les processus d'absorption ou d'émission ont considérablement plus d'importance dans les semi-conducteurs à gap direct que dans les semi-conducteurs à gap indirect [5]

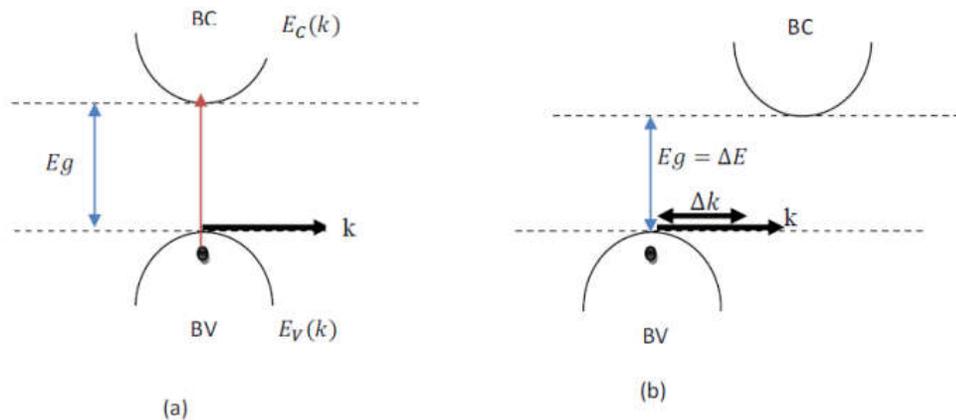


Figure I-9: (a) semi-conducteur à gap direct, (b) semi-conducteur à gap indirect

On remarque, que dans un semi-conducteur à gap direct un électron du haut de la BV qui acquière une énergie E_g passe dans la BC sans changer de quantité de mouvement ce qui n'est pas le cas dans un semi-conducteur à gap indirect [6].

I.12. Interaction rayonnement - semi-conducteur

L'interaction du rayonnement avec les électrons d'un semi-conducteur se manifeste selon trois processus (Figure I.10) :

I.12.1. Absorption fondamentale

Lorsque le photon absorbé provoque un saut d'électron d'un état occupé de la bande de valence vers un état vide de la bande conduction, on dit qu'il y a absorption.

I.12.2. Emission spontanée

Lorsqu'un électron de la bande de conduction retombe spontanément sur un état vide de la bande de valence, il y a émission spontanée.

I.12.3. Emission stimulée

Le photon absorbé induit la transition d'un électron de la bande de conduction vers un état vide de bande de valence avec émission d'un photon, cela induit à la recombinaison radiative d'une paire électron-trou. Le photon émis a même phase et même direction que le photon incident ; l'émission est dite stimulée.

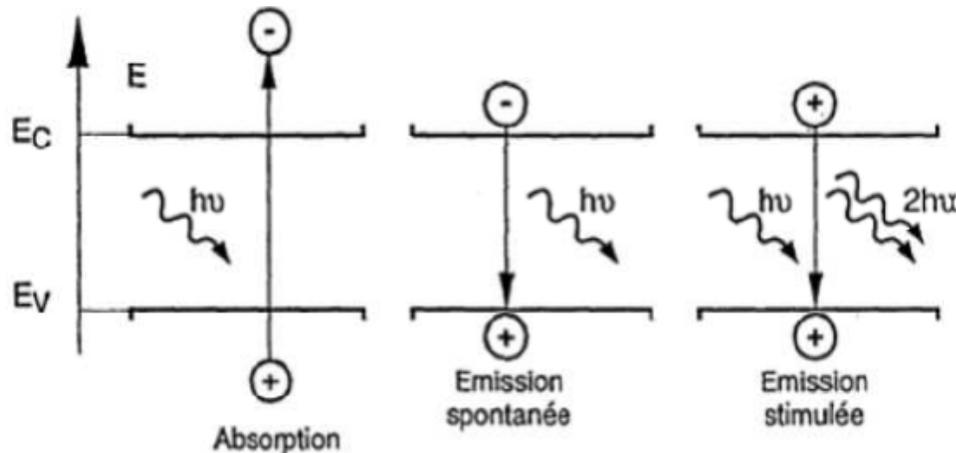


Figure I-10: Interaction rayonnement semi-conducteur

I.13. La structure de bande de conduction et bande de valence des semi-conducteurs et concept de la bande interdite (gap)

Dans un atome isolé, les électrons occupent des niveaux discrets d'énergie. Lorsque la distance entre deux atomes est de l'ordre atomique, distance interatomique ($d \approx \text{Å}$), les niveaux d'énergie sont dédoublés. Dans le cas de plusieurs atomes cas des cristaux ou des particules à caractère massif, la dégénérescence des niveaux d'énergie forme des bandes d'énergie. Dans les semi-conducteurs, ces bandes d'énergie sont appelées bandes de valence (BV) et bande de conduction (BC).

La formation des bandes ,bande de valence et bande de conduction ,s'explique du fait que la distance interatomique (d) diminue les niveaux d'énergie atomiques , par exemple l'atome isolé de silicium d'électrons de valence $3s^2 3p^2$,se couplent pour former $4N$ états électroniques dans la bande de valence et $4N$ états électroniques dans la bande de conduction (N est le nombre d'atomes).en effet ,lorsque la distance diminue les états se donnent naissance à N états liants occupes par N électrons et N états anti liants occupes et $3N$ états anti liants vides .

Dans le cas de silicium massif (cristal), la distance a_0 correspond au paramètre de maille. À cette distance les deux bandes (BC) et (BV) sont séparées par une bande interdite (BI) de largeur E_g

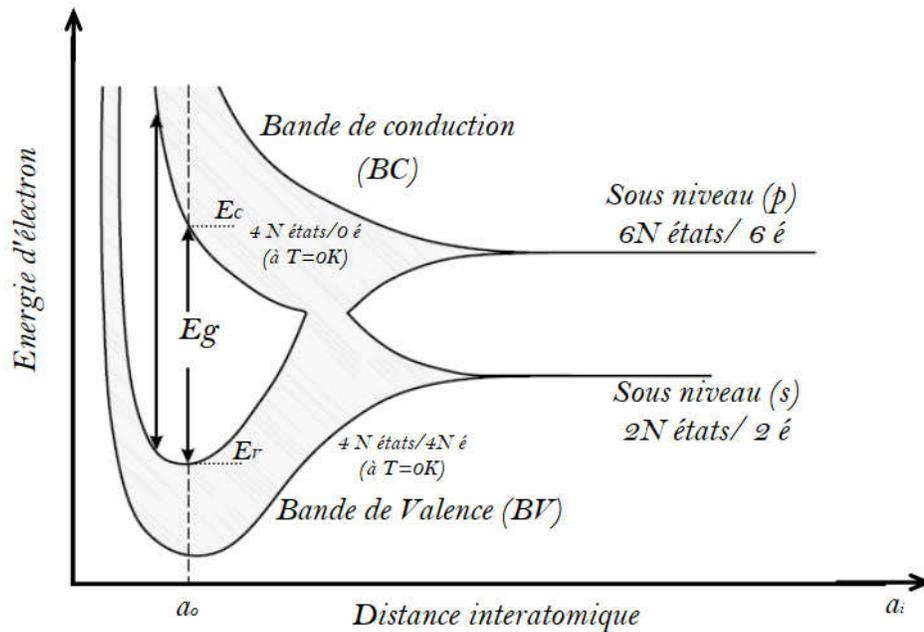


Figure I-11: structure de bande dans les semi-conducteurs (cas du Si) bande de valence, bande de conduction et bande interdite

À température zéro absolue (0K), la bande supérieure (bande de conduction) est vide et la bande inférieure (bandes de valence) est complètement pleine. Cette condition est réalisée pour les éléments de la colonne IV tel que le silicium et le germanium. Il est bien clair que le nombre d'électrons périphériques (4 é) est égal à la moitié du nombre d'états disponibles (8 états). Cette condition peut être réalisée aussi pour les semi-conducteurs composés binaires, ternaires ou même quaternaires.

I.14. La jonction P-N:

Une jonction P-N est créée par la mise en contact d'un semi-conducteur dopé deux côtés s'éloignent de la jonction, bloquant ainsi le passage du courant à son niveau N et d'un semi-conducteur dopé P [5]. La jonction entraîne l'égalisation des niveaux de Fermi par décalage des bandes. Si l'on applique une tension positive du côté de la région P, les porteurs majoritaires positifs (les trous) sont repoussés vers la jonction. Dans le même temps, les porteurs majoritaires négatifs du côté N (les électrons) sont attirés vers la jonction. Arrivés à la jonction, soit les porteurs se recombinent (un électron tombe dans un trou) en émettant un photon éventuellement visible (LED),

soit ces porteurs continuent leur course au travers de l'autre semi-conducteur jusqu'à atteindre l'électrode opposée : le courant circule, son intensité varie en exponentielle de la tension.

Si la différence de potentiel est inversée, les porteurs majoritaires des deux côtés s'éloignent de la jonction, bloquant ainsi le passage du courant à son niveau. Ce comportement asymétrique est utilisé notamment pour redresser le courant alternatif.

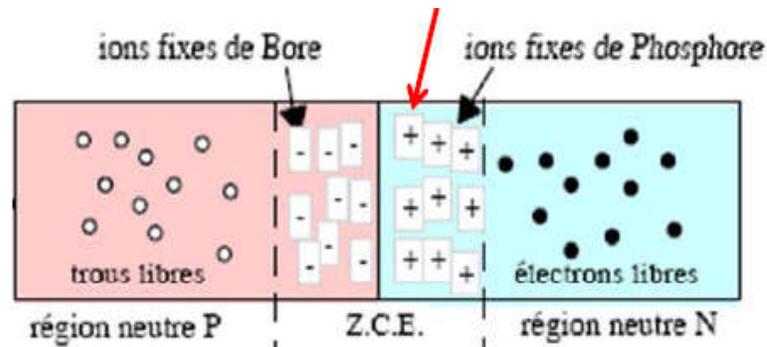


Figure I-12: Un exemple du jonction P-N.

I.14.1. Les type des jonctions :

Une jonction représente la transition entre deux corps semi-conducteurs ou conducteurs de nature différente. Elle est caractérisée par le phénomène de diffusion des porteurs de charge. Dans le domaine de l'électronique, on rencontre :

- Les jonctions PN, mise en contact de semi-conducteurs dopés en impuretés de type P et de type N avec une concentration voisine,
- Les jonctions P+ N ou N+ P où une zone est beaucoup plus dopée que l'autre.
- Les jonctions P+ P ou N+ N représentant des transitions de densité de dopage,
- Les jonctions métal-semi-conducteur dopé utilisées dans certains composants comme Les diodes Schottky. [6].

Autres types de diodes :

- Diode électroluminescente « Light Emitting Diode (LED) »
- Diode Schottky
- Diode capacitive, Diode à effet tunnel, Piles solaires (piles photovoltaïque)
- Diode signal ou de commutation

- Diode de redressement
- Diodes en pont (pont de diodes)
- Diode Zener, Diode Vari cap (Varactor)

I.14.2. Jonction non polarisée :

La jonction PN est une région de faible épaisseur d'un monocristal dans laquelle la conductivité passe plus ou moins graduellement de la zone P (dont la concentration en porteurs mobiles est $p = N_A$) vers la zone N (dont la concentration est $n = N_D$), en passant par une zone de recombinaison où $n = p = n_i$ (concentration du semi-conducteur intrinsèque) [7]

La figure suivante représente qualitativement la mise en contact de deux matériaux semi-conducteurs dopés respectivement en P et en N Deux remarques s'imposent :

Au niveau de la jonction des deux matériaux P et N, il y a recombinaison des trous et des électrons libres par diffusion, laissant une zone dépourvue de charges mobiles (appelée aussi zone de transition, zone intrinsèque, zone de charge d'espace ou zone de déplétion) dans laquelle subsistent des ions fixes positifs et négatifs. Il y a alors présence d'un champ électrique moyen E_i .

En dehors de cette zone neutre, nous trouvons des charges libres majoritaires et minoritaires (infiniment plus de majoritaires que de minoritaires à la température ambiante) telles que :

Dans la zone P, les trous positifs libres sont majoritaires alors que les électrons sont minoritaires.

Dans la zone N, c'est l'inverse : les électrons sont majoritaires alors que les trous positifs mobiles sont minoritaires.

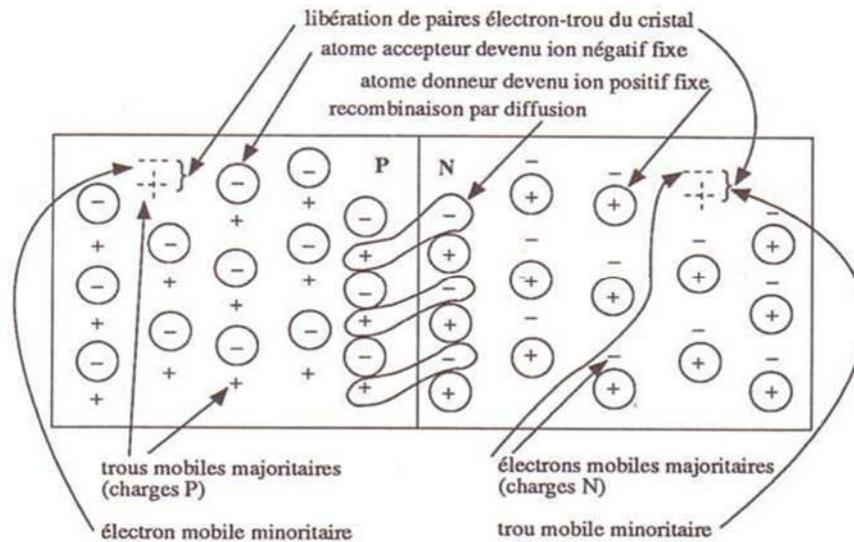


Figure I-13 : Jonction non polarisée.

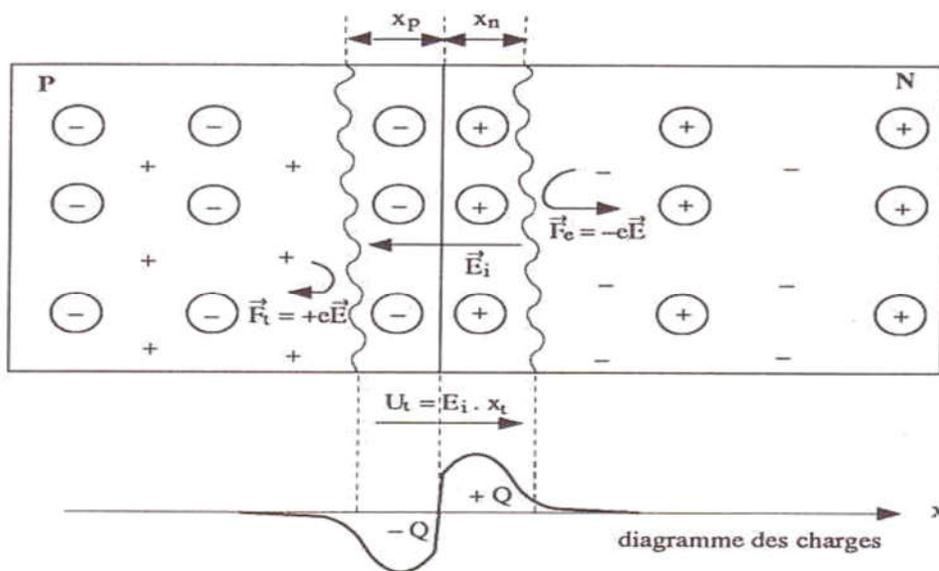


Figure I-14: diagramme des charges. [3]

La présence du champ électrique E_i traduit :

-Un ralentissement de diffusion à cause des forces de répulsion $F = qE_i$ où q représente la charge des électrons et des trous libres.

-Une différence de potentiel de jonction, aussi appelé potentiel de contact

$$U_t = E_{imoy} x_t \quad (I-25)$$

Où E_{imoy} représente le champ électrique moyen et x_t la largeur de la zone de transition. Cette largeur est d'autant plus faible que le dopage est important. (Présence d'ions fixes de plus en plus nombreux repoussant fortement les charges mobiles.)

I.14.3. Jonction polarisée en direct :

Lorsqu'une jonction est polarisée en direct par une tension U , le champ électrique extérieur attire les électrons de la zone N vers la zone P et les trous positifs de la zone P vers la zone N. Il s'ensuit une diminution de la zone de transition et une augmentation du courant de diffusion I_D à cause du moindre besoin d'énergie pour vaincre le nouveau champ E_i .

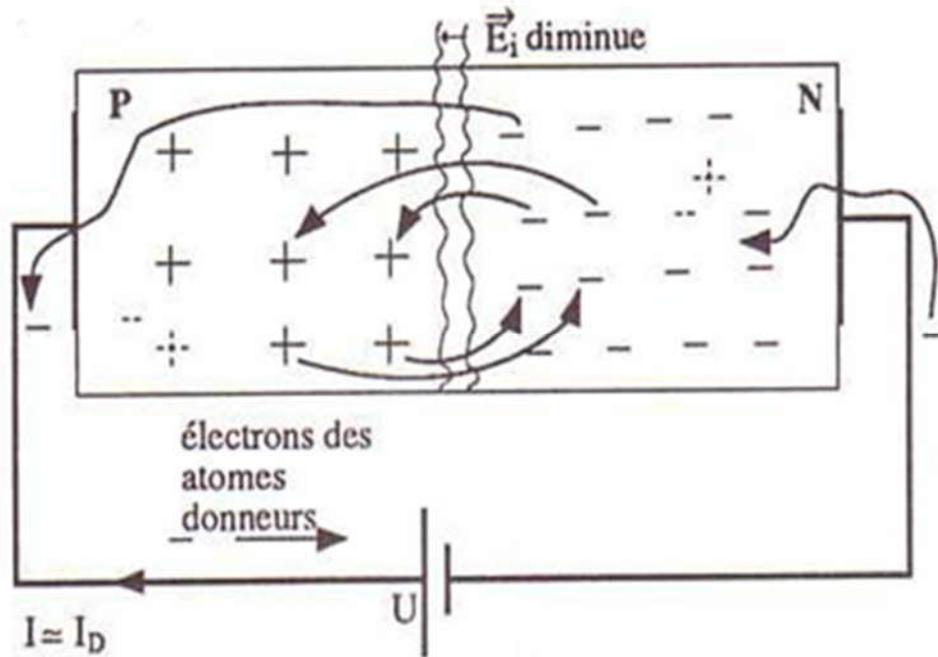


Figure I-15: Jonction polarisée en direct.

Le diagramme d'énergie de la jonction polarisée en direct est représenté sur la figure suivante. Il y a abaissement du diagramme d'énergie de la zone P d'une valeur qU .

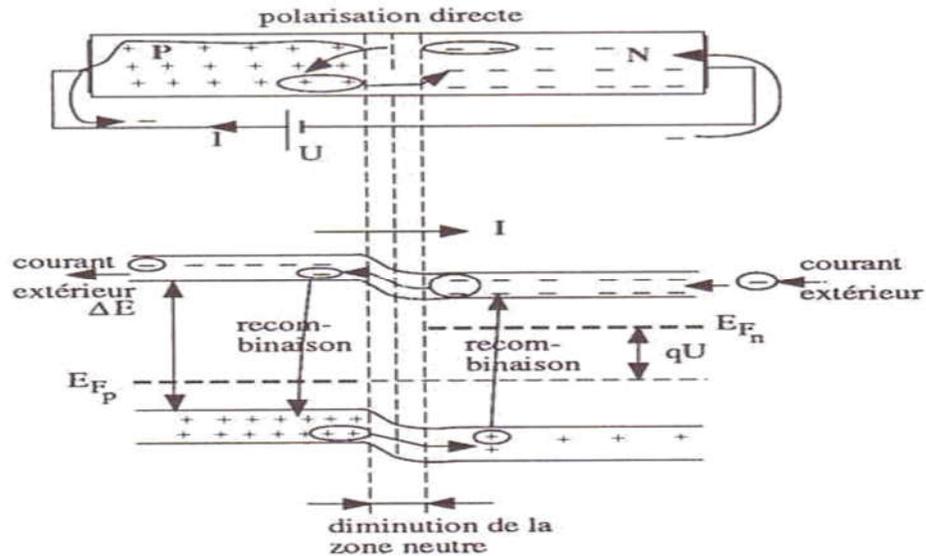


Figure I-16 : Jonction polarisée en direct.

I.14.4. Jonction polarisée en inverse :

Le champ électrique extérieur repousse les électrons de la zone N et les trous positifs de la zone P. La barrière de potentiel s'élargit et le courant de diffusion I_D devient nul.

Théoriquement, le seul courant inverse est le courant de saturation I_S correspondant au déplacement des charges minoritaires des zones N et P attirées par le champ électrique. En pratique, il faut aussi considérer le courant dû aux paires électron-trou créées thermiquement dans la zone de transition et le courant de fuite de surface.

Le diagramme d'énergie de la jonction polarisée en inverse est représenté sur la Figure I-17.

Il y a élévation du diagramme d'énergie de la zone P d'une valeur $-qU$.

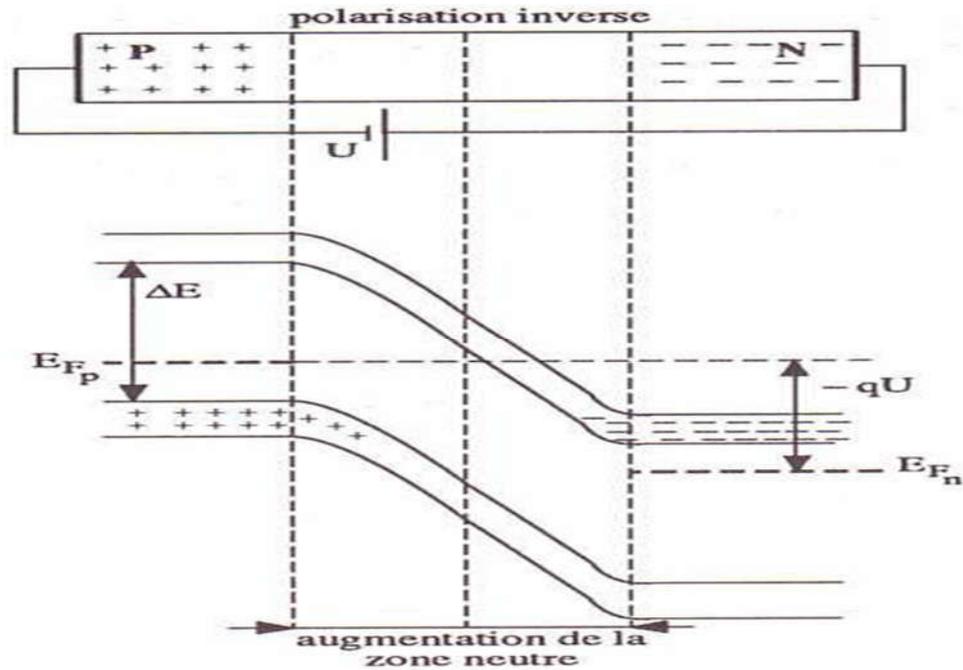


Figure I-17 : Le diagramme d'énergie de la jonction polarisée en inverse .[7]

I.15. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté les notions fondamentales de physique du semi-conducteur. Il ne s'agit pas d'une présentation complète, mais plutôt par le biais de rappels de souligner les paramètres physiques et électriques importants qui entrent en jeu dans l'étude des semi-conducteurs. Précisément, nous avons exposé certains résultats issus de la littérature comme la notion de bandes d'énergie, les statistiques de distribution, formation de la jonction PN...etc.

Chapitre II.

II.1. Introduction

Les équations différentielles sont les modèles mathématiques les plus courants et les plus importants en sciences et en génie. De nombreux phénomènes dans la nature peuvent être décrits mathématiquement par des fonctions variables et paramètres indépendants. Notamment donnée par une fonction de position et de temps.

Une PDE typique survient lorsque l'on étudie les débits tels que la densité, la concentration, la chaleur, etc. En mettant en place un modèle d'équation différentielle et en choisissant des méthodes numériques appropriées, ces problèmes physiques peuvent être résolus. Et cela nous aide à explorer plus en profondeur les concepts à l'aide de logiciels et de programmes adéquats. De nos jours, on parle de calcul scientifique et son but est de simuler des processus en sciences et en ingénierie.

Ce chapitre fournit une introduction à la méthode des différences finies (Finite Difference Method FDM) pour résoudre les équations aux dérivées partielles PDE (Partial Difference Equation PDE). Outre des détails FDM spécifiques, des concepts généraux tels que la stabilité, les conditions aux limites, la vérification et la validation sont présentés.

II.1.1. Equations différentielles partielles

L'équation suivante est un exemple de PDE :

$$a(t, x, y)u_t + b(t, x, y)u_x + c(t, x, y)u_{yy} = f(t, x, y) \quad (\text{II-1})$$

où,

- t, x, y sont les variables indépendantes (souvent le temps et l'espace)
- a, b, c et f sont des fonctions connues des variables indépendantes,
- u est la variable dépendante et est une fonction inconnue des variables indépendantes.
- Nous utiliserons la lettre majuscule U pour désigner la solution analytique (exacte) de la PDE et la lettre minuscule u pour désigner la solution numérique (approximative).
- Les dérivées partielles sont désignées par des indices :

$$u_t = \frac{\partial u}{\partial t}, u_x = \frac{\partial u}{\partial x}, u_{yy} = \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad (\text{II-2})$$

L'ordre d'une PDE est l'ordre de sa dérivée la plus élevée. Une PDE est linéaire si U et toutes ses dérivées partielles n'apparaissent qu'à la première puissance et il n'existe aucun produit impliquant plus d'un de ces termes. (II.1) est du second ordre et linéaire. La dimension d'une PDE est le nombre de variables spatiales indépendantes qu'il contient. (II.1) est 2D si x et y sont des variables spatiales.

II.1.2. Solution à une équation différentielle partielle

Résoudre une PDE signifie trouver la fonction inconnue U . Une solution analytique (c'est-à-dire exacte) d'une PDE est une fonction qui satisfait la PDE et satisfait également toutes les limites et / ou conditions initiales données avec la PDE. La plupart des PDE d'intérêt n'ayant pas de solutions analytiques, une procédure numérique doit être utilisée pour trouver une solution approximative. L'approximation est faite à des valeurs discrètes des variables indépendantes et le schéma d'approximation est mis en œuvre via un programme informatique. Le FDM (Finite Difference Methode) remplace toutes les dérivées partielles et autres termes de la PDE par des approximations. Après quelques manipulations, un schéma de différences finies (FDS) est créé à partir duquel la solution approchée est obtenue. La FDM dépend fondamentalement du théorème de Taylor, Qu'on va détailler ultérieurement.

II.2. Modèles des PDE

Les PDE décrivent bon nombre des lois naturelles fondamentales (par exemple, la conservation de la masse), décrivant ainsi un large éventail de phénomènes physiques. Les exemples incluent l'équation de Laplace pour la conduction thermique en régime permanent, l'équation de dérive-diffusion pour le transport de particules, les équations de Maxwell pour les ondes électromagnétiques, les équations de Navier-Stokes pour l'écoulement des fluides et bien d'autres encore. L'intérêt principal dans ce mémoire est de résoudre les l'équations de type dérive-diffusion ainsi que l'équation de Poisson.

II.2.1. Classification des PDE

Les problèmes physiques sont régis par de nombreuses équations aux dérivées partielles différentes. Quelques problèmes sont régis par une seule PDE. De nombreux problèmes sont régis par un système PDE. La classification des PDE s'explique le plus facilement pour les PDE de second ordre. En conséquence, dans ce qui suit, les PDE non homogène de second ordre quasi-

linéaire (c'est-à-dire linéaire dans la dérivée d'ordre le plus élevé) dans deux variables indépendantes [c.-à-d.(II-3)] sont classés.

L'équation différentielle partielle non homogène de deuxième ordre à deux variables indépendantes est:

$$Af_{xx} + Bf_{xy} + Cf_{yy} + Df_x + Ef_y + Ff = G \quad (\text{II-3})$$

La classification de l'équation (II-3) dépend du signe du discriminant, $B^2 - 4AC$, comme suit :

$B^2 - 4AC$	Classification
Negatif	Elliptique
Zero	Parabolique
Positif	Hyperbolique

La terminologie elliptique, parabolique et hyperbolique choisie pour classer les PDE reflète l'analogie entre la forme du discriminant $B^2 - 4AC$, pour les PDE et la forme du discriminant, $B^2 - 4AC$, qui classe les sections coniques. Les sections coniques sont décrites par l'équation algébrique générale du second ordre

$$Ax^2 + Bxy + Cy^2 + Dx + Ey + F = 0 \quad (\text{II-4})$$

II.2.2. Chemins caractéristiques

La classification d'une PDE est fortement liée aux caractéristiques de la PDE.

Les caractéristiques sont des hypersurfaces à $(n-1)$ dimensions dans un hyperespace à n dimensions qui possèdent des caractéristiques très spéciales. Le préfixe hyper est utilisé pour désigner les espaces de plus de trois dimensions, c'est-à-dire les espaces xyzt, ainsi que les courbes et les surfaces à l'intérieur de ces espaces. Dans l'espace à deux dimensions, ce qui est le cas considéré ici, les caractéristiques sont des chemins (courbes, en général) dans le domaine de la solution le long desquels l'information se propage. En d'autres termes, les informations se propagent dans tout le domaine de la solution le long des chemins de caractéristiques.

Les discontinuités dans les dérivées de la variable dépendante (si elles existent) se propagent également le long des chemins de caractéristiques. Si une PDE possède des caractéristiques réelles, les informations se propagent selon ces caractéristiques. Si aucune caractéristique réelle n'existe, il n'y a pas de chemin privilégié pour la propagation de l'information. Par conséquent, la présence ou l'absence de caractéristiques a un impact significatif sur la solution d'une PDE (par des méthodes analytiques et numériques).

Un exemple physique simple peut être utilisé pour illustrer la signification physique des chemins caractéristiques. La dérive est le processus par lequel une propriété physique est propagée (c'est-à-dire dérivé) dans l'espace par le mouvement du support occupant l'espace. L'écoulement de fluide est un exemple courant de dérive. La dérive d'une propriété d'une particule fluide dans une dimension est régie par l'équation de dérive.

$$f_t + uf_x = 0 \quad (\text{II-5})$$

Où u est la vitesse de dérive. Une particule fluide en mouvement transporte (convecte) sa masse, son impulsion et son énergie lorsqu'elle se déplace dans l'espace. La position $x(t)$ de la particule de fluide est liée à sa vitesse $u(t)$ par la relation

$$\frac{dx}{dt} = u \quad (\text{II-6})$$

La trajectoire de la particule fluide, appelée sa trajectoire, est donnée par

$$x = x_0 + \int_{t_0}^t u(t) dt \quad (\text{II-7})$$

La trajectoire est illustrée à la Figure II-1. Le long de la ligne de trajectoire, l'équation de dérive [c.-à-d. (II-5)] peut être écrit comme :

$$f_t + uf_x = f_t + \frac{dx}{dt} f_x = \frac{df}{dt} = 0 \quad (\text{II-8})$$

Qui peut être intégré pour donner $f = \text{constant}$. Par conséquent, la propriété de fluide f est dérivée le long de la ligne de trajectoire, qui est la trajectoire caractéristique associée à l'équation de dérive. L'équation (II-6), généralement appelée équation caractéristique, est l'équation

différentielle du trajet caractéristique. La signification physique de la trajectoire (c'est-à-dire le chemin caractéristique) en tant que chemin de propagation de la propriété du fluide

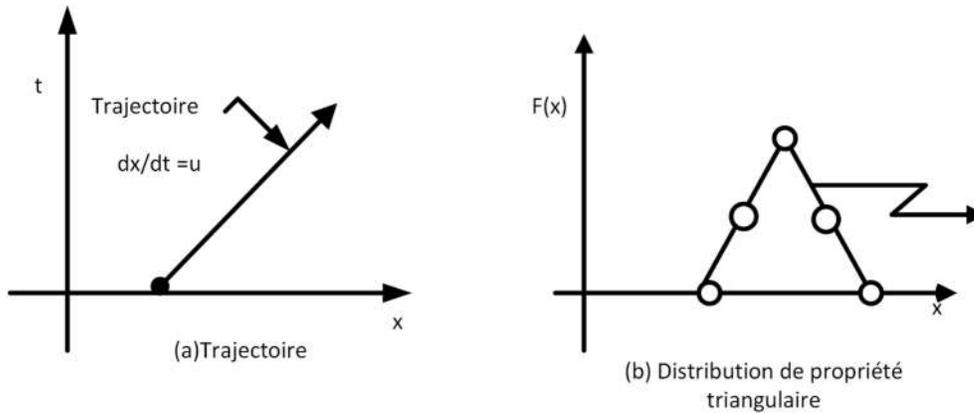


Figure II-1 : La trajectoire comme caractéristique pour une équation de dérive

f est assez apparente pour la dérive des fluides. L'équation (II-8), généralement appelée équation de compatibilité, est l'équation différentielle qui s'applique le long du chemin caractéristique.

II.2.3. Domaine de dépendance et d'influence

La présence de chemins caractéristiques dans le domaine de la solution conduit aux concepts de domaine de dépendance et d'influence[8]. Considérons un point P dans le domaine de la solution, $D(x, y)$. Le domaine de dépendance du point P est défini comme la région du domaine de la solution dont dépend la solution au point P, $f(x_p, y_p)$. En d'autres termes, $f(x_p, y_p)$ dépend de tout ce qui s'est passé dans le domaine de la dépendance. La gamme d'influence du point P est définie comme la région du domaine de la solution dans laquelle la solution $f(x, y)$ est influencée par la solution au point P. En d'autres termes, $f(x_p, y_p)$ influence la solution de tout points dans le domaine d'influence[8].

Rappelons que les PDE paraboliques et hyperboliques ont des chemins caractéristiques réels. Par conséquent, ils ont des domaines de dépendance et des domaines d'influence spécifiques. Les PDE elliptiques, par contre, n'ont pas de trajectoires caractéristiques réelles. Par conséquent, ils n'ont pas de domaines de dépendance spécifiques ni de marges d'influence. En effet, l'ensemble du domaine de solution d'une PDE elliptique est à la fois le domaine de dépendance et le domaine

d'influence de chaque point du domaine de solution. La Figure II-2 illustre les concepts de domaine de dépendance et de domaine d'influence pour les PDE elliptiques, paraboliques et hyperboliques.

Contrairement au PDE de second ordre que nous venons de décrire, une seule PDE de premier ordre est toujours hyperbolique.

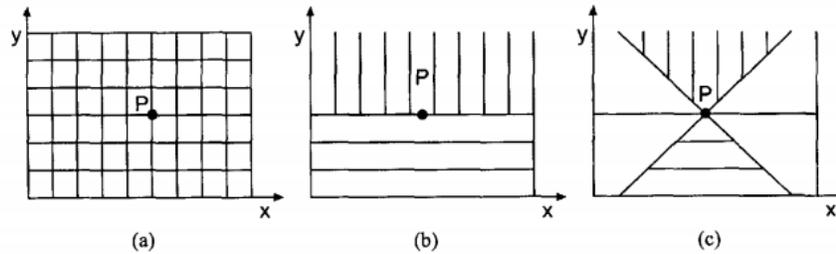


Figure II-2: Domain de dépendance (lignes horizontales) et région d'influence (lignes verticales) des PDE : (a) : Elliptique. (b) : parabolique. (c) : hyperbolique

II.2.4. Conditions initiales et limites

Les PDE nécessitent des conditions initiales (Initial Condition IC) et des conditions aux limites (Boundary Condition BC) appropriées pour définir ce que l'on appelle un problème bien posé[9]. Si trop de conditions sont spécifiées, il n'y aura pas de solution. Si trop peu de conditions sont spécifiées, la solution ne sera pas unique. Si les CI / BC sont spécifiés au mauvais endroit ou au mauvais moment, la solution ne dépendra pas en douceur des CI / BC et de petites erreurs dans les CI / BC entraîneront des changements importants dans la solution. C'est ce qu'on appelle un problème mal posé[10]. Les PDE rencontrées dans la pratique sont souvent non linéaires et multidimensionnelles et ne peuvent pas être réduites aux simples formes dites canoniques (elliptique, parabolique et hyperbolique). Toutefois, nous devons comprendre les propriétés de la solution de ces modèles de PDE simples avant de tenter de résoudre des PDE plus complexes.

Un PDE elliptique de second ordre nécessite une condition de limite sur U en chaque point de la limite. Ainsi, ces problèmes sont appelés problèmes de valeur limite (Boundary Value BV). Le BC peut être une valeur de U sur la limite ou la valeur de sa dérivée.

Les équations paraboliques linéaires nécessitent des CI au moment du début initial (généralement $t = 0$) et un BC à chaque extrémité du domaine spatial (par exemple aux extrémités du barreau chauffé).

Les équations hyperboliques techniquement linéaires nécessitent des CI et autant de BC.

Pour les problèmes d'équilibre en régime permanent, les conditions auxiliaires consistent en des conditions aux limites sur toute la frontière du domaine de la solution fermée. Trois types de conditions aux limites peuvent être imposés :

1. Condition limite de Dirichlet : la valeur de la fonction est spécifiée.

f est spécifié sur la limite.

2. Condition limite de Neumann: La valeur de la dérivée normale à la limite est spécifiée.

$\frac{\partial f}{\partial n}$ est spécifiée sur la limite

3. Condition limite mixte: une combinaison de la fonction et de sa dérivée normale est spécifiée sur la limite.

$af + b \frac{\partial f}{\partial n}$ est spécifiée sur la limite

L'un des types de conditions aux limites ci-dessus doit être spécifié en chaque point de la limite du domaine de la solution fermée. Différents types de conditions aux limites peuvent être spécifiés sur différentes parties des limites

II.3. Notation discrète

Les indices désignent des points discrets dans l'espace et exposent les niveaux discrets dans le temps. Par exemple, $u_{i,j}^n$ désigne la solution numérique au point de la grille (i, j) dans une région 2D au niveau temporel n .

II.4. Fondamentaux

La méthode des différences finies (FDM) fonctionne en remplaçant la région sur laquelle les variables indépendantes de la PDE sont définies par une grille finie (également appelée maillage) de points auxquels la variable dépendante est approchée. Les dérivées partielles dans la PDE à chaque point de la grille sont approximées à partir des valeurs voisines en utilisant le théorème de Taylor.

II.4.1. Théorème de Taylor

Soit $U(x)$ qui a n dérivées continues sur l'intervalle (a, b) . Pour $u_n < x_0, x_0 + h < b$,

$$U(x_0 + h) = U(x_0) + hU_x(x_0) + h^2 \frac{U_{xx}(x_0)}{2!} + \dots + h^{n-1} \frac{U_{(n-1)}(x_0)}{(n-1)!} + o(h^n) \quad (\text{II-9})$$

Où,

$$U_x = \frac{dU}{dx}, U_{xx} = \frac{d^2U}{dx^2}, \dots, U_{(n-1)} = \frac{d^{n-1}U}{dx^{n-1}}$$

- $U_x(x_0)$ est la dérivée de U par rapport à x évaluée à $x = x_0$.
- $O(h^n)$ est un terme d'erreur.

L'interprétation habituelle du théorème de Taylor dit que si nous connaissons la valeur de U et les valeurs de ses dérivées au point x_0 , nous pouvons écrire l'équation pour sa valeur au point (proche) $x_0 + h$.

Cette expression contient une quantité inconnue qui est écrite sous la forme $O(h^n)$ et prononcée 'ordre h à n '. Si nous éliminons le terme $O(h^n)$ dans (c'est-à-dire que nous tronquons le côté droit de), nous obtenons une approximation de $U(x_0 + h)$. L'erreur dans cette approximation est $O(h^n)$.

II.4.2. Théorème de Taylor appliqué à la méthode des différences finies (FDM)

Dans le FDM, nous connaissons les valeurs U aux points de la grille et nous voulons remplacer les dérivées partielles dans la PDE que nous résolvons par des approximations à ces points de la grille. Nous faisons cela en interprétant d'une autre manière. Dans le FDM, x_0 et $x_0 + h$ sont des points de grille et $U(x_0)$ et $U(x_0 + h)$ sont connus. Cela nous permet de réorganiser l'équation pour obtenir des approximations dites de différences finies (FD) en dérivées qui ont des erreurs $O(h^n)$.

II.4.3. Approximation par différence finie simple à un dérivé

Tronquer après le premier terme dérivé donne,

$$U(x_0 + h) = U(x_0) + hU_x(x_0) + O(h^2) \quad (\text{II-10})$$

Réarranger (II-10) donne,

$$U_x(x_0) = \frac{U(x_0+h) - U(x_0)}{h} + \frac{O(h^2)}{h} = \frac{U(x_0+h) - U(x_0)}{h} + O(h) \quad (\text{II-11})$$

Négliger le terme $O(h)$ donne,

$$U_x(t_n) = \frac{U(x_0+h) - U(x_0)}{h} \quad (\text{II-12})$$

(II-12)est appelée approximation FD du premier ordre de $U_x(x_0)$ puisque l'erreur d'approximation $=O(h)$, qui dépend de la première puissance de h . Cette approximation est appelée approximation FD directe car nous partons de x_0 et avançons jusqu'au point x_0+h . h est appelé la taille du pas ($h > 0$).

II.5. Construire une boîte à outils de différence finie

Nous construisons maintenant des approximations FD communes aux dérivées partielles communes. Pour simplifier, supposons que U ne soit fonction que de deux variables, t et x . Nous allons approximer les dérivées partielles de U par rapport à x . Puisque t est maintenu constant, U est effectivement une fonction de la variable unique x . Nous pouvons donc utiliser la formule de Taylor où les termes dérivés ordinaires sont maintenant des dérivées partielles et les arguments sont (t, x) au lieu de x . Finalement, nous remplacerons la taille de pas h par Δx (pour indiquer un changement de x) de sorte que devienne,

$$U(t, x_0 + \Delta x) = U(t, x_0) + \Delta x U_x(t, x_0) + \frac{\Delta x^2}{2!} U_{xx}(t, x_0) + \dots + \frac{\Delta x^{n-1}}{(n-1)!} U_{(n-1)}(t, x_0) + O(\Delta x^n) \quad (\text{II-13})$$

II-13)

Tronquer(II-13) sur $O(x^2)$ donne,

$$U(t, x_0 + \Delta x) = U(t, x_0) + \Delta x U_x(t, x_0) + O(\Delta x^2) \quad (\text{II-14})$$

Nous dérivons maintenant quelques approximations FD de dérivées partielles. Réarranger(II-14) donne,

$$U_x(t, x_0) = \frac{U(t, x_0 + \Delta x) - U(t, x_0)}{\Delta x} - \frac{O(\Delta x^2)}{\Delta x}$$

$$\therefore U_x(t, x_0) = \frac{U(t, x_0 + \Delta x) - U(t, x_0)}{\Delta x} - O(\Delta x) \quad (\text{II-15})$$

L'équation (II-15) est valable en tout point (t, x_0) . Dans les schémas numériques permettant de résoudre les PDE, nous sommes limités à une grille de valeurs x discrètes, x_1, x_2, \dots, x_N et de niveaux discrets $t_0 = t_0, t_1, \dots$. Nous supposons un espacement de grille constant, Δx , en x , de sorte que $x_{i+1} = x_i + \Delta x$. L'évaluation de l'équation (II-15) pour un point (t_n, x_i) sur la grille donne,

$$U_x(t_n, x_i) = \frac{U(t_n, x_{i+1}) - U(t_n, x_i)}{\Delta x} - O(\Delta x) \quad (\text{II-16})$$

Nous allons utiliser la notation commune en indice / exposant, dans

$$U_i^n = U(t_n, x_i) \quad (\text{II-17})$$

De sorte que laisser tomber le terme d'erreur $O(\Delta x)$, (II-16) devient,

$$U_x(t_n, x) \approx \frac{U_{i+1}^n - U_i^n}{\Delta x} \quad (\text{II-18})$$

(II-18)est l'approximation de différence en avant du premier ordre de $U_x(t_n, x_i)$ que nous avons déduite précédemment en approximation de(II-12). Nous dérivons maintenant une autre approximation FD de $U_x(t_n, x_i)$. Remplacement de Δx par $-\Delta x$ dans

(II-14) donne,

$$U(t, x_0 - \Delta x) = U(t, x_0) - \Delta x U_x(t, x_0) + O(\Delta x^2) \quad (\text{II-19})$$

Evaluer(II-19) en (t_n, x_i) et réorganiser comme précédemment,

$$U_x(t_n, x_i) \approx \frac{U_i^n - U_{i-1}^n}{\Delta x} \quad (\text{II-20})$$

(II-20)est l'approximation différentielle vers l'arrière de premier ordre de $U_x(t_n, x_i)$.

Nos deux premières approximations FD sont du premier ordre dans x , mais nous pouvons augmenter l'ordre (et ainsi rendre l'approximation plus précise) en prenant plus de termes dans la série de Taylor comme suit. Tronquer(II-13) en $O(\Delta x^3)$, puis remplacer Δx par $-\Delta x$ et soustraire cette nouvelle expression de (II-13) et évaluer à (t_n, x_i) donne, après une manipulation algébrique,

$$U_x(t_n, x_i) \approx \frac{U_{i+1}^n - U_{i-1}^n}{2\Delta x} \quad (\text{II-21})$$

(II-21)est appelée l'approximation FD de différence centrale de second ordre de $U_x(t_n, x_i)$.

Nous pourrions construire des approximations FD de l'ordre supérieur de U_x en prenant encore plus de termes de la série de Taylor, mais nous nous arrêterons aux approximations du second ordre des dérivées du premier ordre.

De nombreuses PDE d'intérêt contiennent des dérivées partielles de second ordre (et supérieures) ; nous devons donc en déduire des approximations. Nous limiterons notre attention aux dérivées partielles homogènes du second ordre, c.-à-d. U_{xx} .

Tronquer (II-13) en $O(x^4)$ donne,

$$U(t, x_0 + \Delta x) = U(t, x_0) + \Delta x U_x(t, x_0) + \frac{\Delta x^2}{2!} U_{xx}(t, x_0) + \frac{\Delta x^3}{3!} U_{xxx}(t, x_0) + O(\Delta x^4) \quad (\text{II-22})$$

Remplacer Δx par $-\Delta x$ dans (2.9a) donne,

$$U(t, x_0 - \Delta x) = U(t, x_0) - \Delta x U_x(t, x_0) + \frac{\Delta x^2}{2!} U_{xx}(t, x_0) - \frac{\Delta x^3}{3!} U_{xxx}(t, x_0) + O(\Delta x^4) \quad (\text{II-23})$$

Ajouter(II-22) et (II-23) donne,

$$U(t, x_0 + \Delta x) + U(t, x_0 - \Delta x) = 2U(t, x_0) + \Delta x^2 U_{xx}(t, x_0) + o(\Delta x^4) \quad (\text{II-24})$$

Evaluer(II-24) en (t_n, x_i) et utiliser notre notation discrète donne,

$$U_{i+1}^n + U_{i-1}^n = 2U_i^n + \Delta x^2 U_{xx}(t_n, x_i) + O(\Delta x^4) \quad (\text{II-25})$$

Réarranger (II-25) et laisser tomber le terme d'erreur $O(x^2)$ donne,

$$U_{i+1}^n + U_{i-1}^n = 2U_i^n + \Delta x^2 U_{xx}(t_n, x_i) + O(\Delta x^4) \quad (\text{II-26})$$

(II-26)est l'approximation FD de différence homogènes de second ordre de $U_{xx}(t_n, x_i)$.. Ces résultats sont rassemblés dans le Tableau II-1 pour constituer une boîte à outils d'approximation

FD. Les approximations FD des dérivées partielles par rapport à t sont dérivées de la même manière et sont incluses dans le Tableau II-1.

Tableau II-1: Table des opérateur différence finie pour les PDE

PDE	Approximation FDM	Type	Ordre
$\frac{\partial U}{\partial x} = U_x$	$\frac{U_{i+1}^n - U_i^n}{\Delta x}$	En avant	Un dans x
$\frac{\partial U}{\partial x} = U_x$	$\frac{U_i^n - U_{i-1}^n}{\Delta x}$	En arrière	Un dans x
$\frac{\partial U}{\partial x} = U_x$	$\frac{U_{i+1}^n - U_{i-1}^n}{2\Delta x}$	Centrée	Deux dans x
$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = U_{xx}$	$\frac{U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n}{\Delta x^2}$	Symétrique	Deux dans x
$\frac{\partial U}{\partial t} = U_t$	$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t}$	En avant	Un dans t
$\frac{\partial U}{\partial t} = U_t$	$\frac{U_i^n - U_i^{n-1}}{\Delta t}$	En arrière	Un dans t
$\frac{\partial U}{\partial t} = U_t$	$\frac{U_i^{n+1} - U_i^{n-1}}{2\Delta t}$	Centrée	Deux dans t
$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = U_{tt}$	$\frac{U_i^{n+1} - 2U_i^n + U_i^{n-1}}{\Delta t^2}$	Symétrique	Deux dans t

La boîte à outils FD ci-dessus peut être utilisée pour créer un schéma de différences finies (FDS) permettant d'obtenir la solution approximative d'un grand nombre de PDE en remplaçant simplement chaque dérivée partielle par une approximation FD appropriée.

II.6. Équations hyperboliques

Les équations hyperboliques décrivent de nombreux phénomènes (transitoires) dépendant du temps (par exemple, un écoulement de fluide) et sont caractérisées par une vitesse de propagation des informations (souvent appelée « vitesse de l'onde »). Par conséquent, les valeurs des solutions futures ne peuvent être affectées que par les valeurs passées dans un voisinage limité.

Nous examinerons les résultats numériques du schéma FD simple pour résoudre l'équation dérive linéaire 1D, ce qui conduira à une série de questions de base sur les schémas numériques en général.

II.6.1. Equation dérive linéaire 1D

L'équation de dérive linéaire (également appelée équation de transport) peut être utilisée dans un modèle de divers phénomènes tels que le déplacement d'un polluant dans une rivière ou le déplacement d'une interface air / eau à l'intérieur d'une méthode numérique sophistiquée (par exemple la méthode du volume de fluide). Nous examinons la version la plus simple de cette équation. Dans une dimension spatiale, l'équation de dérive linéaire est la suivante :

$$U_t + vU_x = 0 \quad (\text{II-27})$$

Ici, les variables indépendantes sont t (temps) et x (espace). La variable dépendante U est une fonction de t et x .

Une PDE en elle-même ne donne pas un modèle complet d'un problème particulier. En plus de la PDE, nous devons donner les conditions initiales et / ou limites correctes pour la variable dépendante pour le problème particulier. Soit la condition initiale pour U dans (II-27) être,

$$U(0, x) = f(x) \quad (\text{II-28})$$

C'est-à-dire que la valeur initiale de U est donnée sur le domaine spatial par une fonction connue $f(x)$. Pour le moment, nous supposerons que le domaine spatial est infini afin de pouvoir ignorer toutes les conditions aux limites.

II.6.2. Conception du schéma

Nous concevrons des schémas FD pour résoudre l'équation de dérive linéaire 1D (II-27). Premièrement, nous introduisons quelque notations compacte utile.

$$\text{Soit } \partial_t \text{ décrit } \frac{\partial}{\partial t}, \partial_{tt} \text{ décrit } \frac{\partial^2}{\partial t^2} \text{ et } \partial_{tx} \text{ décrit } \frac{\partial^2}{\partial t \partial x} .$$

Alors (II-27) peut être écrit,

$$\partial_t U + v \partial_x U = 0 \quad (\text{II-29})$$

$$\therefore \partial_t U = -v \partial_x U \quad (\text{II-30})$$

Par définition,

$$\partial_{tt} U = \partial_t (\partial_t U) \quad (\text{II-31})$$

Utiliser (II-30) et (II-31) donne,

$$\partial_t U + v \partial_x U = 0 \quad (\text{II-32})$$

$$\partial_{tt} U = \partial_t (-v \partial_t U)$$

$$= -v \partial_t (\partial_x U)$$

$$= -v \partial_{xt} U$$

$$= -v \partial_{tx} U$$

$$= -v \partial_x (\partial_t U)$$

$$= -v \partial_x (-v \partial_x U)$$

$$= v^2 \partial_{xx} U$$

Nous pouvons maintenant concevoir des schémas FD pour résoudre l'équation (II-27).

Pour x fixe, l'expansion de Taylor de $U(t + \Delta t, x)$ sur l'ordre 3 donne,

$$U(t + \Delta t, x) = U(t, x) + \Delta t U_t + \frac{\Delta t^2}{2!} U_{tt} + O(\Delta t^3) \quad (\text{II-33})$$

qui, en notation opérateur, est,

$$U(t + \Delta t, x) = U(t, x) + \Delta t \partial_t U + \frac{\Delta t^2}{2!} \partial_{tt} U + O(\Delta t^3) \quad (\text{II-34})$$

En utilisant (II-30) et (II-33), les dérivées partielles par rapport à t peuvent être remplacées par des dérivées partielles par rapport à x pour donner,

$$U(t + \Delta t, x) = U(t, x) + \Delta t v \partial_x U + \frac{\Delta t^2}{2!} v^2 \partial_{xx} U + O(\Delta t^3) \quad (\text{II-35})$$

Laisser,

$$L_x(\Delta t) = 1 - \Delta t v \partial_x + \frac{\Delta t^2}{2} v^2 \partial_{xx} \quad (\text{II-36})$$

Ensuite, (II-32) peut être écrit,

$$U(t + \Delta t, x) = L_x(\Delta t)U(t, x) + O(\Delta t^3) \quad (\text{II-37})$$

$L_x(\Delta t)$ est un opérateur de marche différentiel. Pour concevoir des schémas FD à résoudre (II-40), nous redéfinissons simplement $L_x(\Delta t)$ (en remplaçant chaque dérivée partielle continue par une approximation en différences finies (notée par δ_x, δ_{xx}) pour donner,

$$L_x(\Delta t) = 1 - \Delta t v \delta_x + \frac{\Delta t^2}{2} v^2 \delta_{xx} \quad (\text{II-38})$$

$L_x(\Delta t)$ est maintenant un opérateur de différence. Différents choix d'approximation de FD pour δ_x, δ_{xx} donnent lieu à différents schémas de marche dans le temps de FD. Le schéma général de marche dans le temps FD (second ordre dans le temps) pour l'équation de dérive linéaire 1D (II-40) peut maintenant être écrit ainsi :

$$u_i^{n+1} = L_x(\Delta t)u_i^n \quad (\text{II-39})$$

Ceci est écrit en entier,

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \Delta t v \delta_x u_i^n + \frac{\Delta t^2}{2} v^2 \delta_{xx} u_i^n \quad (\text{II-40})$$

u_i^n est l'approximation de la solution exacte $U(t_n, x_i)$ au $i^{\text{ème}}$ point de la grille et au $n^{\text{ème}}$ pas de temps.

II.7. Résolution d'une équation de dérive

II.7.1. Schéma du premier ordre upwind

Les différences upwind sont également appelées différences upstream. Numériquement, ce terme indique que nous utilisons des différences en arrière en ce qui concerne la direction d'où provient l'information. Les différences upwind ne sont utilisées que pour les termes de dérive, jamais pour les termes de diffusion. La figure présente une interprétation graphique des différences upwind appliquée à l'équation de dérive. Le schéma qui en résulte s'appelle le schéma upwind.

Dans notre boîte à outils FD, nous choisissons:

$\delta_x u_i^n = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}$ et $\delta_{xx} u_i^n = 0$. L'équation (II-40) devient,

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{v\Delta t}{\Delta x}(u_i^n - u_{i-1}^n) \quad (\text{II-41})$$

Ce schéma est appelé schéma upwind car il utilise la solution numérique au point de la grille $(x_{j-1}; t^n)$, qui se situe au vent de $(x_j; t^{n+1})$.

Le schéma est de premier ordre dans le temps et de premier ordre dans l'espace

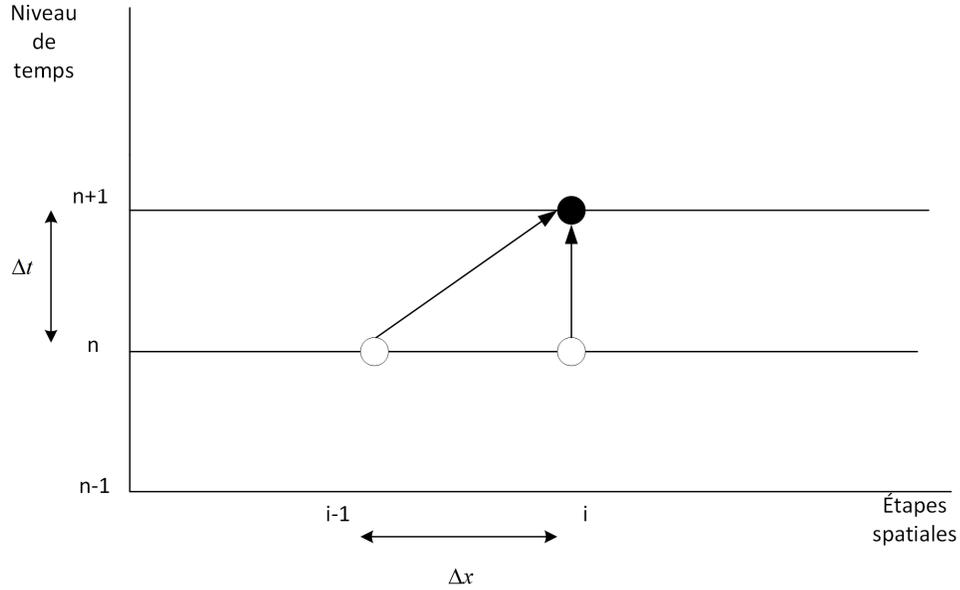


Figure II-3 : Gabarit pour le schéma Upwind

II.7.2. Schéma Leapfrog

Le schéma upwind dans la section précédente n'est précis qu'au premier ordre. Pour des problèmes pratiques, cependant, la précision du premier ordre est souvent insuffisante. Il existe divers systèmes qui donnent des résultats d'ordre supérieur. Le schéma leapfrog (appelle aussi saut mouton) de deuxième ordre dans le temps et dans l'espace.

Dans le cas upwind on utilise les données au niveau temporel actuel (n) pour passer au niveau temporel suivant (n+1). Cette approche peut être étendue aux schémas multi-niveaux en effectuant des approximations de Taylor à $t-\Delta t$ et en utilisant une manipulation algébrique, comme nous le verrons maintenant. Remplacer Δt par $-\Delta t$ dans (II-33) donne,

$$U(t - \Delta t, x) = U(t, x) - \Delta t U_t + \frac{\Delta t^2}{2!} U_{tt} + O(\Delta t^3) \quad (\text{II-42})$$

Soustraire (II-33) dans (II-42) donne,

$$U(t + \Delta t, x) - U(t - \Delta t, x) = 2\Delta t U_t + O(\Delta t^3) \quad (\text{II-43})$$

En notation opérateur, c'est

$$U(t + \Delta t, x) - U(t - \Delta t, x) = 2\Delta t \partial_x U + O(\Delta t^3) \quad (\text{II-44})$$

En utilisant (II-30) cela devient,

$$U(t + \Delta t, x) - U(t - \Delta t, x) = -2\nu \Delta t \partial_x U + O(\Delta t^3) \quad (\text{II-45})$$

En supprimant le terme d'erreur, en remplaçant l'opérateur différentiel par l'opérateur différentiel et en utilisant la notation discrète habituelle, on obtient le schéma FD général,

$$u_i^{n+1} = u_i^{n-1} - 2\nu \Delta t \delta_x u \quad (\text{II-46})$$

En (II-46) nous choisissons $\delta_x u_i^n = \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x}$ Pour donner,

$$u_i^{n+1} = u_i^{n-1} - \frac{\nu \Delta t}{\Delta x} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) \quad (\text{II-47})$$

C'est le schéma Leap-Frog et il a le gabarit suivant.

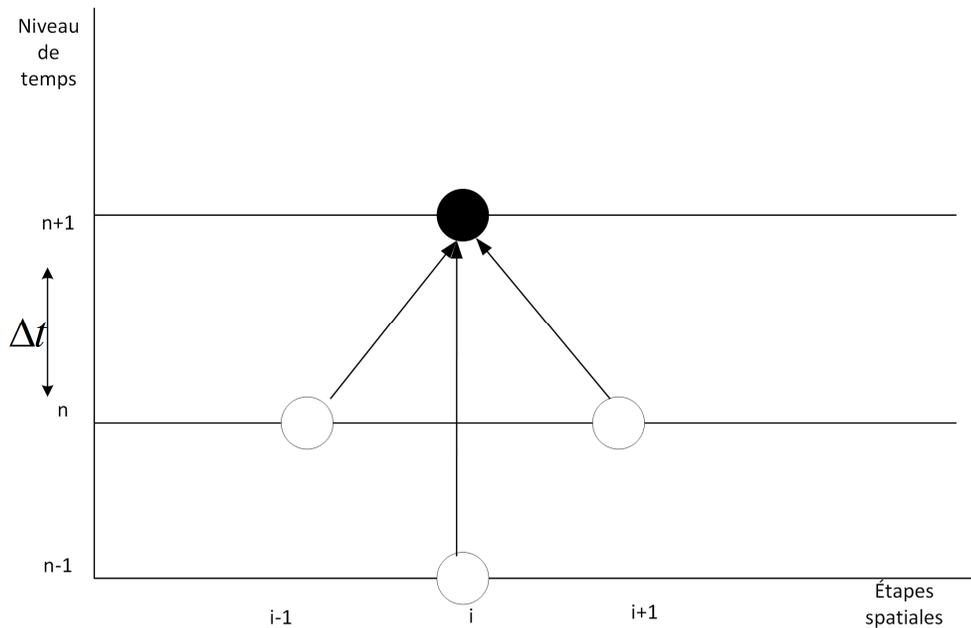


Figure II-4 Gabarit pour le schéma Leapfrog

II.7.3. Le nombre de Courant

Dans les deux schémas on aperçoit l'apparition du terme $c = u \frac{\Delta t}{\Delta x}$ que l'on appelle la condition de Courant–Friedrichs–Lewy.

Le nombre de Courant est un nombre non dimensionnel qui joue un rôle central dans la solution numérique des équations hyperboliques. Si nous imaginons des particules se déplaçant à la vitesse U , nous pouvons considérer C comme distance, mesurée en points de la grille, par laquelle une particule se déplace dans un incrément de temps t .

Pour l'équation de dérive unidimensionnelle discrétisée à l'aide du schéma upwind au premier ordre, la condition CFL exige que, pour la stabilité

$$CFL \equiv \frac{|u| \Delta t}{\Delta x} \leq 1.$$

II.8. Résolution de l'équation de dérive-diffusion en une dimension

Dans ce mémoire le problème de dérive-diffusion est traité. On va principalement résoudre l'équation de dérive-diffusion suivante :

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial J(x, t)}{\partial x} = 0 \quad (\text{II-48})$$

Où n est la densité d'électron et $j = -D \frac{\partial n}{\partial x} - \mu E n$ (on va revenir à cette équation au prochain chapitre).

L'équation (II-48) est appelée l'équation de continuité. Elle a une importance majeure dans plusieurs domaines. Dans le cas de domaine de semi-conducteur [11] cette équation est non linéaire due du fait que la vitesse de dérive des porteurs des charge est couplée à la densité via l'équation de poisson.

$$\frac{d^2 V}{dx^2} = -\frac{q}{\varepsilon} (p - n + N_d - N_a) \quad (\text{II-49})$$

N_d représente la concentration des électrons N_a représente la concentration des trous.

II.8.1. Discrétisation de l'équation de continuité

L'équation (II-49) se discrétise sous la forme [12]:

$$\frac{n_i^{k+1} - n_i^k}{\Delta t} + \frac{J_{i+1/2}^k - J_{i-1/2}^k}{\Delta x} = 0 \quad (\text{II-50})$$

Dans la relation (II-51), les exposants de l'équation(II-51) k et $k+1$ représentent respectivement les instants t et $t+\Delta t$. $J_{i+1/2}$ est le flux moyen entre la cellule i et la cellule $i+1$ (voir figure II-5), et $J_{i-1/2}$ est le flux moyen entre la cellule i et la cellule $i-1$.

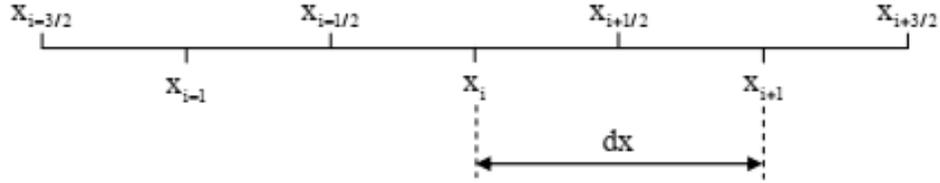


Figure II-5: Discrétisation de l'équation de continuité

$$n_i^{k+1} = n_i^k + \Delta t \frac{J_{i+1/2}^k - J_{i-1/2}^k}{\Delta x} \quad (\text{II-51})$$

Dans (II-52) la valeur de n_i^{k+1} est calculée à partir du point président n_i^k et des $J_{i+1/2}^k$ et $J_{i-1/2}^k$ qui représente les flux au milieu de deux cellules adjacentes. Les valeurs de n^k sont obtenues à partir de proche en proche à partir de l'instant initial t_0 et les conditions initiales.

Les valeurs du flux au centre des cellules élémentaires peuvent s'obtenir (voire Figure II-5) de différentes manières.

La difficulté principale au niveau de l'établissement d'un schéma numérique repose sur la détermination optimale du flux qui doit nécessairement s'exprimer en termes de combinaison linéaire des densités n_i^k situées de part et d'autre de x_i .

II.8.2. Résolution de l'équation de continuité par le schéma de Scharfetter et Gummel

Dans ce qui suit, nous allons présenter la discrétisation de l'équations de continuité en utilisant le schéma Scharfetter et Gummel [13], car ce schéma présente une stabilité numérique forte et appréciable. En 1969 Scharfetter et Gummel [13] ont proposé un schéma a flux exponentiel pour résoudre l'équation de dérive-diffusion.

Contrairement au maillage des schémas précédents, on va ajouter des points au milieu des points considéré. Le point $i-1/2$ est le milieu de la cellule comprise entre les points $i-1$ et i ; tandis

que $i+1/2$ est le milieu de la cellule comprise entre les points i et $i+1/2$ (Figure II-6). On va considérer que la variation du champ est linéaire entre deux nœuds adjacents.

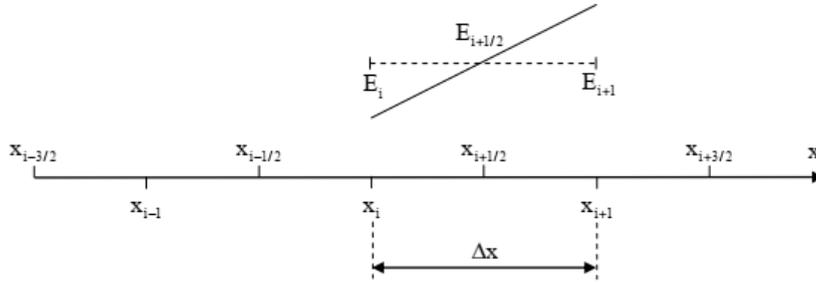


Figure II-6 : le schéma de Scharfetter-Gummel

Pour obtenir l'expression du flux aux frontières de la cellule, soit $J_{i+1/2}$, on suppose qu'entre deux nœuds consécutifs i et $i+1$; le champ E , le coefficient de diffusion D , et le flux J sont constants et égaux à $E_{i+1/2}$, $D_{i+1/2}$, et $J_{i+1/2}$. [12]. En considérant ces approximations la solution de l'équation de continuité de courant ($j = -D \frac{\partial n}{\partial x} - \mu E n$) est donnée par l'expression suivante :

$$n(x,t) = \left[n_i - \frac{J_{i+1/2}}{D_{i+1/2}} \int_0^{\xi} e^{\alpha \xi'} d\xi' \right] e^{-\alpha \xi} \quad (\text{II-52})$$

$$\Delta x = x_{i+1} - x_i \text{ et } \xi = (x - x_i) / \Delta x \quad (\text{II-53})$$

Si on pose $x=x_{i+1}$ (donc $\xi = 1$), on peut calculer le flux par la formule suivante :

$$J_{i+1/2} = \frac{D_{i+1/2}}{\Delta x I_0} (n_i - e^{\alpha} n_{i+1}) \quad (\text{II-54})$$

$$\alpha = \frac{\mu \cdot \Delta x \cdot E_{i+1/2}}{D_{i+1/2}} \text{ et } I_0 = \frac{e^{\alpha} - 1}{\alpha} \quad (\text{II-55})$$

Après avoir déterminé les flux $J_{i+1/2}$ et $J_{i-1/2}$, le calcul de la densité de particules chargées est effectué en remplaçant (II-52) dans (II-51).. Donc on obtient le système d'équations à matrice tri-diagonale suivante :

$$n_{x_{i-1/2},j,K}^{K+1} \left[\frac{1}{\Delta x_i \Delta x^-} \frac{A_1^- \exp(A_1^-)}{1 - \exp(A_1^-)} \right] + n_{x_{i,j,K}}^{K+1} \left[\frac{1}{\Delta t} - \frac{1}{\Delta x_i \Delta x^+} \frac{A_1^- \exp(A_1^-)}{1 - \exp(A_1^-)} - \frac{1}{\Delta x_i \Delta x^-} \frac{A_1^-}{1 - \exp(A_1^-)} \right] + n_{x_{i+1/2},j,K}^{K+1} \left[\frac{1}{\Delta x_i \Delta x^+} \frac{A_1^+}{1 - \exp(A_1^+)} \right] = \frac{n_{x_{i,j,K}}^K}{\Delta t}$$

(II-56)

Où

$$A_1^+ = -\frac{W_{i+1/2,j,K}}{D_{i+1/2,j,K}} \Delta x^+$$

$$A_1^- = -\frac{W_{i-1/2,j,K}}{D_{i-1/2,j,K}} \Delta x^-$$

$$\Delta x_- = x_i - x_{i-1}, W_{i-1/2} = W_{i+1/2} \text{ et } D_{i+1/2} = D_{i-1/2}$$

$$W_{i-1/2} = (W_i + W_{i-1} - \Delta W_v) / 2$$

Telle que W est la vitesse de dérive $W_{i+1/2} = (W_i + W_{i-1} + \Delta W_v) / 2$

$$\Delta W_v = \frac{h_v}{\Delta x} (W_{i+1} - W_i)$$

Où : $h_v = \sqrt{\frac{\varepsilon 2 D_{k+1/2} \Delta x}{|W_{k+1} - W_k|}}$ est la distance entre les nœud virtuel [12].

L'expression (56) montre que la densité n_i^k connue à l'instant k et fonction de n_{i-1}^{k+1}, n_i^{k+1} et n_{i+1}^{k+1} inconnus à l'instant $k+1$. Ce système d'équations implicite est de la forme suivante :

$$a_i n_{x_{i-1/2},j,K}^{K+1} + b_i n_{x_{i,j,K}}^{K+1} + c_i n_{x_{i+1/2},j,K}^{K+1} = d_i \quad (\text{II-57})$$

Le système d'équations (57) est donc un système linéaire à matrice tri-diagonale qui peut être résolue par l'algorithme de Thomas [14].

II.9. Discrétisation de l'équation de poisson

Dans le cas non dégénéré et dans des conditions d'équilibre, les expressions explicites des densités d'électrons et de trous sont substituées dans l'équation de Poisson pour donner (II-49). Qui est appelée équation de Poisson non linéaire en raison des termes non linéaires impliquant V sur le côté droit. Ici $V = (E_F - E_i)/q$, où E_F est le niveau de Fermi à l'équilibre supposé être le niveau de référence zéro. De plus, l'équation peut être mise à l'échelle en utilisant la longueur intrinsèque de

Debye pour la coordonnée spatiale x et la tension thermique V_T pour le potentiel V . L'équation non linéaire de Poisson 1D peut alors être écrite sous la forme

$$\frac{d^2V}{dx^2} = -\frac{en_i}{\varepsilon} \left(e^{-\frac{V}{V_T}} - e^{\frac{V}{V_T}} + \frac{C}{n_i} \right) \quad (\text{II-58})$$

où $C = N_d - N_a$. L'équation de Poisson non linéaire à l'équilibre peut être résolue avec la procédure de quasi-linéarisation suivante :

1. Choisissez une estimation initiale du potentiel $V = V^{\text{old}}$.
2. Ecrivez le potentiel à l'étape suivante comme $V^{\text{new}} = V^{\text{old}} + \delta$ et remplacez-le par l'équation (II-52) pour résoudre V^{new} ce qui va donner :

$$\begin{aligned} \frac{d^2V^{\text{new}}}{dx^2} &= -\frac{en_i}{\varepsilon} \left(e^{-\frac{V^{\text{old}}}{V_T}} - e^{\frac{V^{\text{old}}}{V_T}} + \frac{C}{n_i} \right) + \frac{en_i}{\varepsilon} \delta \left(e^{-\frac{V^{\text{old}}}{V_T}} - e^{\frac{V^{\text{old}}}{V_T}} \right) \\ \frac{d^2V^{\text{new}}}{dx^2} - \frac{en_i}{\varepsilon V_T} \left(e^{-\frac{V^{\text{old}}}{V_T}} - e^{\frac{V^{\text{old}}}{V_T}} \right) V^{\text{new}} &= -\frac{en_i}{\varepsilon} \left(e^{-\frac{V^{\text{old}}}{V_T}} - e^{\frac{V^{\text{old}}}{V_T}} + \frac{C}{n_i} \right) - \frac{en_i}{\varepsilon V_T} \left(e^{-\frac{V^{\text{old}}}{V_T}} - e^{\frac{V^{\text{old}}}{V_T}} \right) V^{\text{old}} \\ \delta &= V^{\text{new}} - V^{\text{old}} \end{aligned} \quad (\text{II-59})$$

3. Ensuite, nous normalisons les variables. Le potentiel V est normalisé avec la tension thermique V_T , la concentration de la porteuse est normalisée avec la concentration de la porteuse intrinsèque et le maillage est normalisé avec la longueur de Debye intrinsèque.
4. En utilisant maintenant la discrétisation par différences finies et un maillage uniforme, nous pouvons écrire l'équation ci-dessus sous une forme matricielle $AV^{\text{new}} = f$. En développant la dérivée seconde apparaissant à (II-59) à l'aide d'un schéma de différence central, la forme en différences finies de l'équation de Poisson linéarisée 1D est la suivante :

$$\left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_i \rightarrow \frac{V_{i+1} - 2V_i + V_{i-1}}{\Delta^2} \rightarrow a_i V_{i-1} + b_i V_i + c_i V_{i+1} = f_i \quad (\text{II-60})$$

Où :

i : le numéro de la maille, Δ : la longueur de la maille, $f_i = e^{V_i^{\text{old}}} + e^{-V_i^{\text{old}}}$

En comparant les termes des côtés gauche et droit de l'équation (II-60), nous voyons que $a_i = c_i = 1/\Delta^2$ et $b_i = -[(2/\Delta^2) + (e^{V_i^{old}} + e^{-V_i^{old}})]$

II.10. Conclusion

Nous avons commencé ce chapitre par donner un aperçu bibliographique sur les équations différentielles partielles, leurs classifications et la méthode des différences finies (FDM) pour les résoudre ces équations différentielles. Ensuite, nous avons présenté les algorithmes numériques Leapfrog, Upwind et Scharfetter et Gummel qui permettent la résolution de l'équation de continuité de type dérive-diffusion ainsi que l'algorithme numérique de résolution de l'équation de Poisson. Dans le chapitre suivant, des expériences numériques vont être effectuées sur les différentes méthodes numériques citées dans ce chapitre, pour la résolution de l'équation de continuité de type dérive-diffusion.

Chapitre III.

III.1. Introduction

Généralement pour prouver la performance d'un schéma numérique, des tests numériques doivent être effectuées. Dans notre cas nous allons procéder a des tests numériques en suivant l'évolution d'une densité initiale dont on connaît déjà la solution. Il s'agit de la propagation d'un profil de densité multiformes ; rectangulaire, triangulaire et gaussien. Dans ce qui suit, nous allons effectuer des tests numériques sur les algorithmes Leapfrog, Upwind et Scharfetter utilisés dans ce travail. Ces tests vont nous permettre de déterminer l'algorithme le plus performant qui peut être utilisé pour la simulation d'une jonction PN. Un schéma numérique adapté à la modélisation d'une jonction PN et des gradients de densité doit répondre aux critères donnés par Bessières [15], et Flitti [16]:

- La conservation des profils de densité des particules chargées, exprimée par l'équation de continuité (II-48), doit être assurée par le schéma que l'on va adopter (caractère conservatif);
- Les profils des densités propagés doivent être monotones c'est-à-dire que le profil calculé par le schéma numérique doit garder la même forme ou varier très peu par rapport à la forme qu'il avait initialement lorsque l'équation (II-48) est résolue avec un terme source égal à zéro ;
- L'algorithme doit être non dispersif pour ne pas générer des oscillations parasites et assurer la positivité de la solution numérique pour éviter les valeurs de densités négatives (positivité de la solution c'est-à-dire des densités) ;
- Le schéma numérique ne doit pas être diffusif (la diffusion numérique doit être minimale) ;
- Le schéma numérique doit pouvoir traiter l'évolution des profils comportant des variations spatiales brusques ;
- Le schéma numérique doit pouvoir restituer rapidement la solution.

III.2. Résultats pour le schéma de dérive linéaire simple

Les résultats des méthodes numérique schéma FD simple du chapitre II est donnée pour une plage de paramètres. Dans tous les cas, le même profil de condition initial donné par l'équation (II.19) a été utilisé et le domaine de calcul, $[0, 1]$, a été discrétisé par $N = 300$ et 3000 points équidistants. Il y a une brève discussion des résultats dans chaque cas.

III.2.1. Cas d'un profil triangulaire :

La Figure III-1 présente la solution numérique dans le cas d'une distribution initiale triangulaire. Le schéma upwind est numériquement stable bien qu'il souffre de la diffusion numérique. Tandis que le schéma leapfrog présente des petites oscillations numériques sur la face gauche de la solution.

Dans ce qui suit, on calcule l'Erreur Relative Moyenne (ERM) pour les deux schémas par la relation :

$$ERM = \frac{1}{nx} \sum_{i=1}^{nx} \left| \frac{n_i^{calculée} - n_i^{analytique}}{n_i^{analytique}} \right| \quad (\text{III-1})$$

En considérant les erreurs globales en termes de \log_{10} de l'erreur absolue, la Figure III-1 est produite. Le graphique montre que, lorsque le temps augmente, l'erreur moyenne augmente également. Cela indique qu'au fur et à mesure que la solution avance, l'erreur numérique augmente. Il montre également que la précision globale du schéma Leapfrog est bien supérieur au schéma upwind.

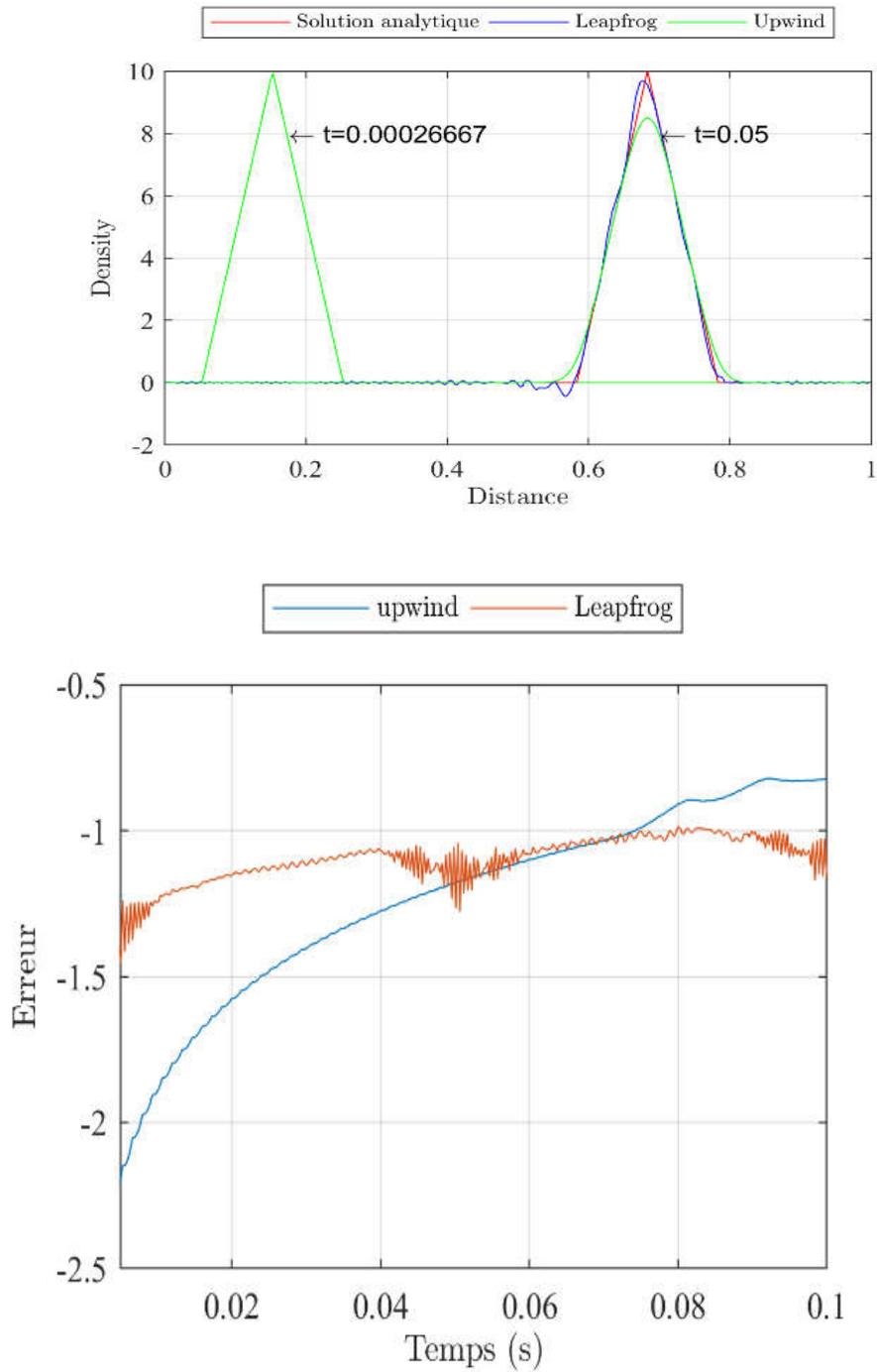


Figure III-1: Les schémas leapfrog et upwind dans le cas d'une résolution de 300 points. A gauche la solution. A droite le \log_{10} de l'erreur.

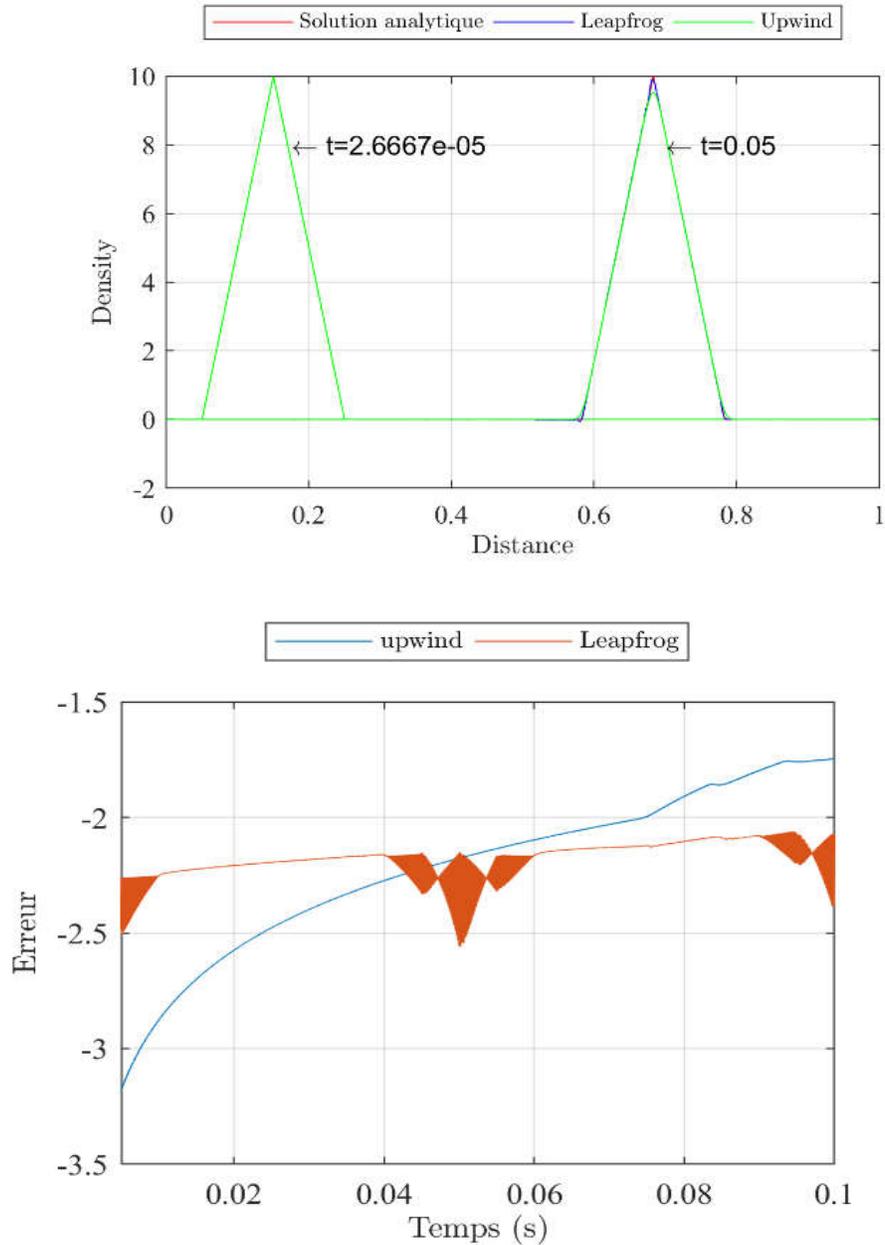


Figure III-2 : Les schémas leapfrog et upwind dans le cas d'une résolution de 3000 points. A gauche la solution. A droite le \log_{10} de l'erreur

Dans la Figure III-2, Nous apprécions l'avantage de l'utilisation d'une grille plus fine. En augmentant le nombre de point de 300 à 3000 (tout en gardant la même longueur) l'erreur est drastiquement réduite de l'ordre de 10^{-1} à $10^{-2.1}$. On remarque aussi que les deux phénomènes de dispersion et d'oscillation numérique ont considérablement réduits.

III.2.2. Cas d'un profil rectangulaire (discontinuité) :

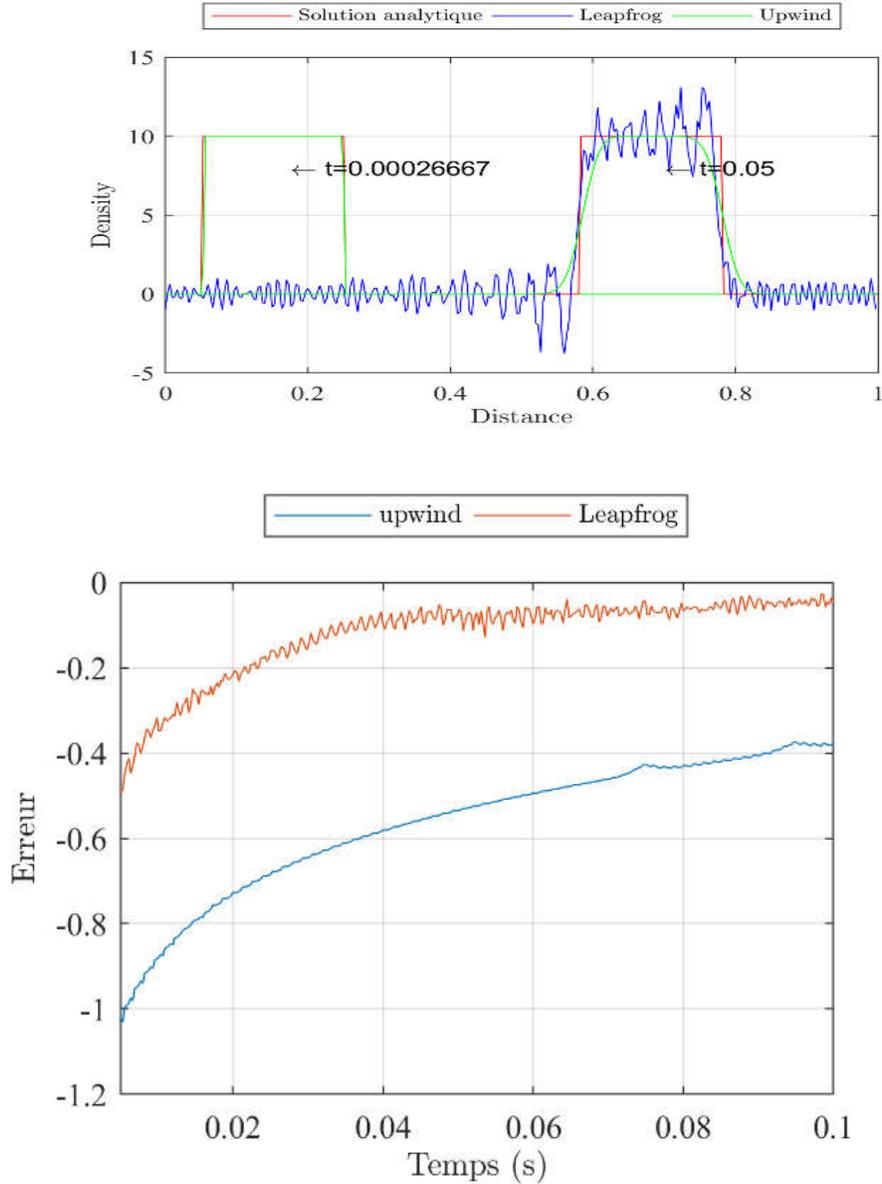


Figure III-3: Les schémas leapfrog et upwind dans le cas d'une résolution de 300 points. A gauche la solution. A droite le \log_{10} de l'erreur

Suivant la Figure III-3 nous pourrions conclure que le schéma de Leapfrog représente une méthode numérique polyvalente efficace et précise pour la résolution de l'équation de dérive. C'est effectivement le cas, à condition que nous nous limitons à des formes de densité relativement lisses. Malheureusement, le système Leapfrog a des mauvaises performances lorsque on a des variations brusques aux extrémités du profil. Ceci est illustré sur la Figure III-3, qui montre un calcul dans lequel le schéma de Leapfrog est utilisé pour suivi l'évolution

d'une impulsion de forme carrée. On peut voir que des oscillations parasites sont générées à la fois sur les deux extrémités avant et arrière de la forme carrée. Il s'avère que tous les schémas de différences centrales pour résoudre l'équation de dérive souffrent d'un problème similaire[10].

Dans le cas du schéma upwind, Il n'y a aucune oscillation parasite générée aux extrémités avant et arrière de la forme carrée. D'autre part, la forme carrée montre des signes de dispersion. Malheureusement, il n'y a pas de schéma de différenciation connu qui soit à la fois non dispersif et capable de bien gérer les forts gradients de densité.

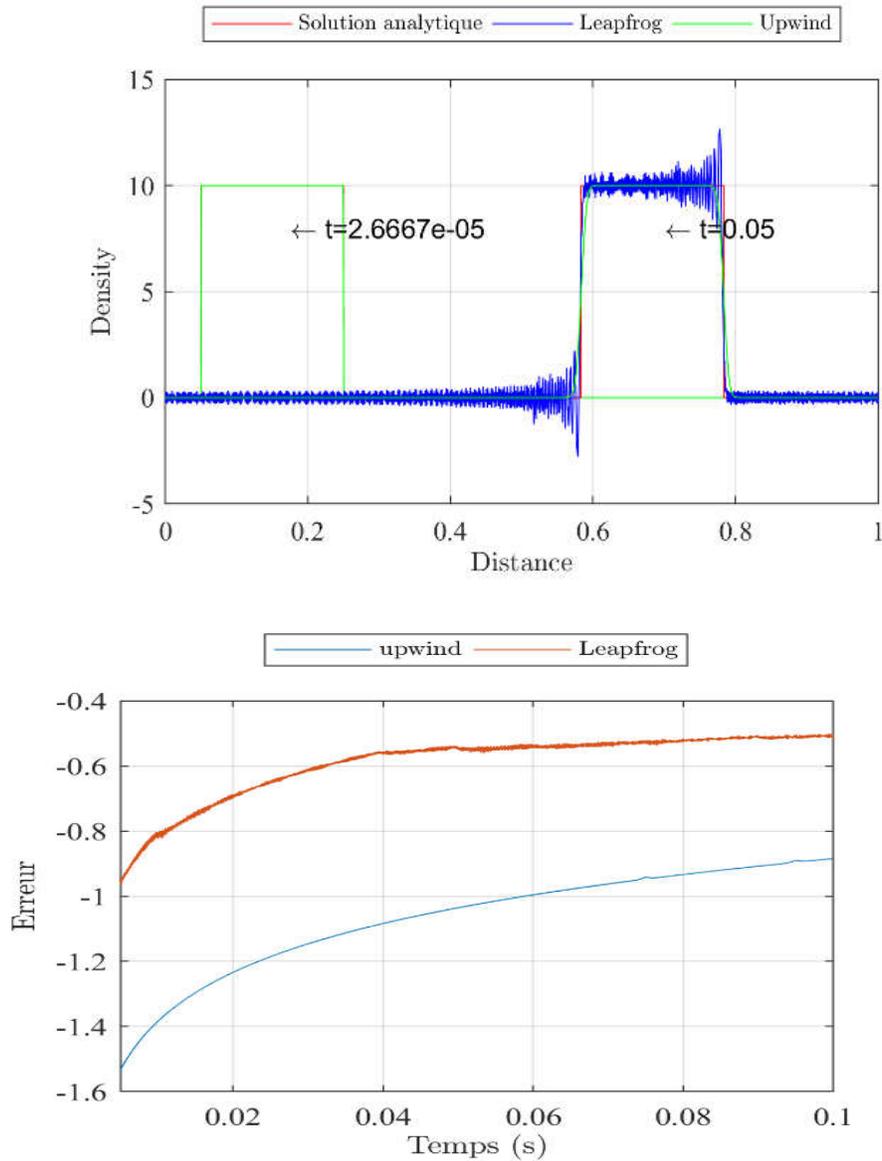


Figure III-4 Les schémas leapfrog et upwind dans le cas d'une résolution de 3000 points. A gauche la solution. A droite le \log_{10} de l'erreur

Dans le cas d'une densité discontinue, le schéma upwind est clairement avantageux. Le graph d'erreur de la Figure III-3 et la Figure III-4 confirme la supériorité de la méthode upwind face à la méthode de leapfrog. En utilisant une grille de 300 points, l'erreur sous upwind est de l'ordre de $10^{-0.4}$ contre $10^{-0.05}$ pour la méthode de leapfrog (un exposant plus grand signifie une erreur plus réduite). Dans le cas de 3000 points, l'erreur est réduite dans les deux cas, mais upwind garde toujours son avantage face au leapfrog.

III.2.3. La résolution d'une équation de dérive-diffusion par la méthode de Scharfetter-Gummel

Dans ce qui suit, nous allons tester la performance du Schéma Scharfetter-Gummel SG en appliquant un test, similaire à celui proposé par Kulikovsky [12]. Ce test consiste à suivre l'évolution spatio-temporelle de la densité initiale utilisée de forme gaussienne et dont le profil à un instant quelconque est une forme donnée par l'expression suivante :

$$n(x) = n_0 \left(\frac{\sigma_0}{\sigma} \right)^2 e^{-\frac{(x-x_t)^2}{\sigma^2}} \quad (\text{III-2})$$

Où :

$$n_0 = 10, \sigma_0 = \frac{X_b - X_a}{5}, \sigma = \sqrt{4Dt + \sigma_0^2}, x_t = V_d \cdot t$$

La vitesse de dérive V_d est prise égale à 100 cm/s

L'équation (III-1) est une solution approchée de l'équation de continuité de type dérive-diffusion suivante :

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial V_d n(x,t)}{\partial x} = 0 \quad (\text{III-3})$$

Il est important de noter que dans cette équation on néglige l'effet du terme de diffusion.

La solution analytique (III-2) de l'équation de dérive-diffusion va permettre de valider la solution numérique issue du schéma numérique Scharfetter Gummel ou le déplacement va se faire de droite à gauche.

Dans la Figure III-5 on peut remarquer la nature « diffusive » de la solution analytique, l'amplitude diminue avec le passage du temps. On peut remarquer aussi que la solution numérique en utilisant la méthode de Scharfetter Gummel suit, en profil, la solution analytique ; mais néanmoins elle présente une dispersion numérique.

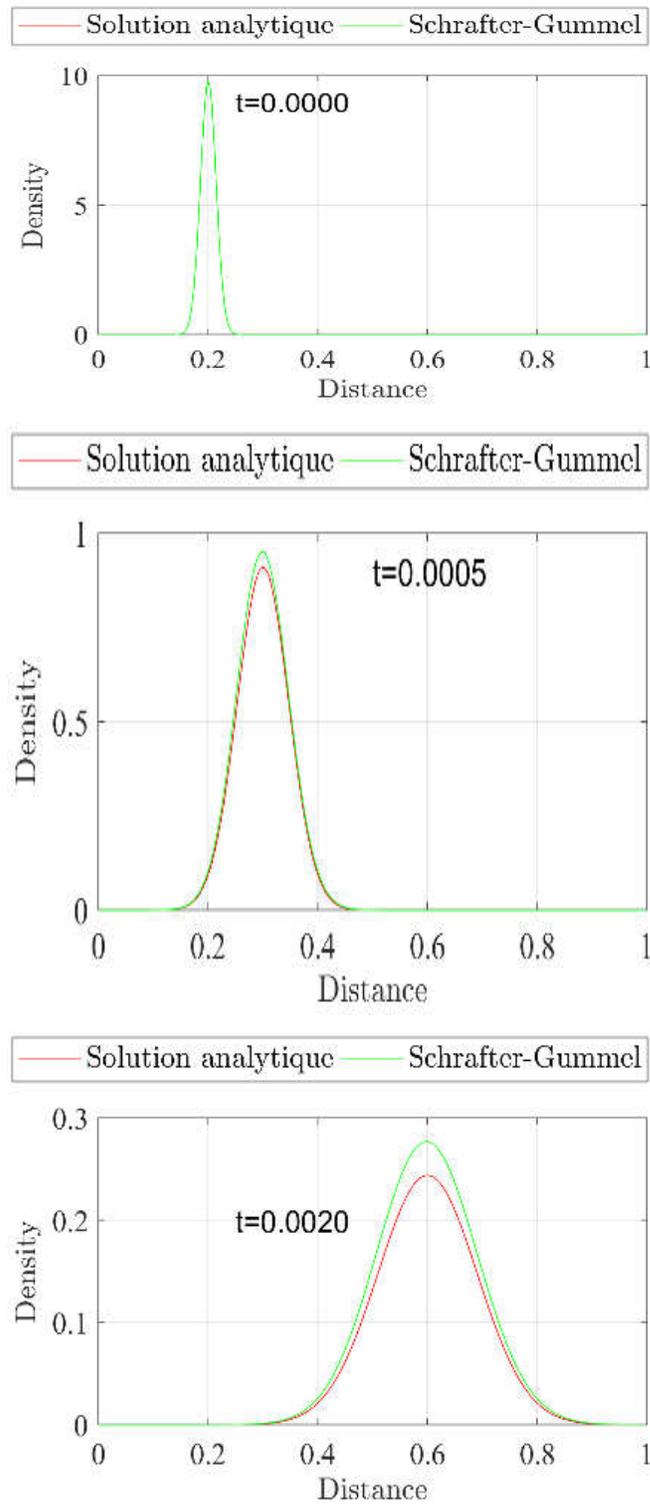


Figure III-5: La méthode de Scharfetter-Gummel.

Pour analyser d'avantage les performances de la méthode de Scharfetter-Gummel, le \log_{10} de l'erreur est tracé dans Figure III-6.

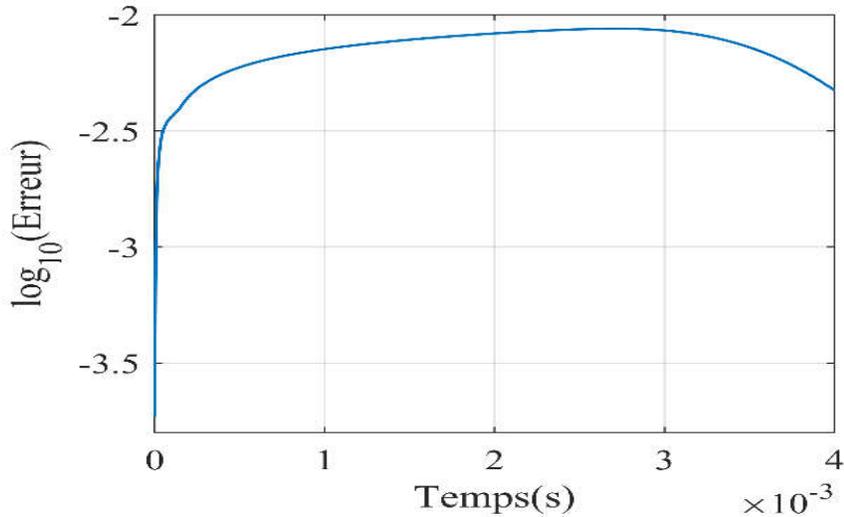


Figure III-6: l'erreur entre la solution numérique (Scharfetter-Gummel) et analytique

Dans Figure III-6 on peut apprécier la méthode de Scharfetter-Gummel, l'erreur est maintenue sous l'ordre de 10^{-2} .

III.3. Modèle de dérive-diffusion d'une jonction PN

Maintenant nous allons exécuter un code d'une jonction PN [11] dont la résolution des équations de transport se base le schéma Scharfetter Gummel SG que nous venons de tester.

Les équations différentielles partielles qui gouvernent le comportement statique et dynamique des porteurs des charges dans une jonction sous l'effet d'un champ électrique externe peuvent être dérivées à partir de l'équation de transport de Boltzmann. Le mouvement des charges est contrôlé par le champ électrique et la diffusion qui est due au gradient de densité. Si on suppose que la réponse des porteurs de charge d'une variation du champ électrique est considérablement plus rapide que le changement du champ lui-même, alors on peut écrire l'équation de transport de semi-conducteur comme se suit [17]:

L'équation de Poisson (1), met en liaison la charge totale ρ avec la divergence du champ électrique \mathbf{E}

$$\epsilon_s \nabla \cdot \mathbf{E} = -\epsilon_s \nabla^2 V = \rho \quad (\text{III-4})$$

Où

$$\mathbf{E} = -\nabla V \quad (\text{III-5})$$

La charge totale est donnée par

$$\rho = -q(n - p + \Gamma) \quad (\text{III-6})$$

Où $\Gamma = N_D^+ - N_A^-$ est la concentration totale des impuretés. q est la charge électrique, n et p sont la densité des électrons et des trous. L'équation du courant donne la relation entre le comportement de la densité de charge et du champs électrique [17]:

$$\begin{aligned} J_n &= q \mu_n n E - q D_n \nabla n \\ J_p &= q \mu_p p E + q D_p \nabla p \end{aligned} \quad (\text{III-7})$$

Où μ_n et μ_p représente les mobilités des électrons et des trous respectivement et D_n et D_p sont les coefficients de diffusion. Les coefficients de la mobilité et la diffusion dépendent de la température, taux de dopage et du champs électrique.

Les équations de continuité des électrons et des trous sont données par

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} &= -\frac{1}{q} \nabla J_n - R + G \\ \frac{\partial p}{\partial t} &= \frac{1}{q} \nabla J_p - R + G \end{aligned} \quad (\text{III-8})$$

G et R représente le processus de génération et de recombinaison. Dans certains cas, le processus de génération est ignoré et on ne prend en compte que la recombinaison de Shockley-Read-Hall donne [18]:

$$R = \frac{pn - n_i^2}{\tau_p(n + n_i) + \tau_n(p + n_i)} \quad (\text{III-9})$$

Où τ_n τ_p et sont la durée de vie des électrons et des trous. :

Les conditions aux limites sont données par les conditions de neutralité et d'équilibre, soit :

$$pn = n_i^2 \quad (\text{III-10})$$

$$n - p + \Gamma = 0 \quad (\text{III-11})$$

Pour le potentiel on va utiliser la tension applique à l'anode V_a comme conditions aux limites de Dirichlet. Ainsi

$$V_{0,j+1} = V_{N+1,j+1} = V_a \quad (\text{III-12})$$

III.3.1. Organigramme de résolutions des équations de continuité couplées à l'équation de Poisson

L'approche macroscopique est celle que l'on va utiliser pour effectuer la modélisation de la jonction PN. Elle conduit, moyennant des hypothèses de fermeture spécifique du système d'équations pour les électrons et les trous à une formulation caractéristique dans laquelle figurent des grandeurs directement mesurables telle que la vitesse de dérive des particules et leurs coefficients de diffusion.

La Figure III-7 représentent la structure générale de l'organigramme. A l'entrée de l'organigramme, les conditions initiales sont connues, telles que la tension appliquée, la distance inter électrodes, la température, la forme initiale des densités d'électrons et de trous. On calcule le champ de charge d'espace par la résolution de l'équation de Poisson. On résout ensuite les équations de transport pour obtenir les densités des électrons et des trous. On utilise le schéma numérique de Scharfetter et Gummel. On connaît les densités des électrons et des trous, on recalcule le champ résultant de la somme du champ de charge d'espace et du champ géométrique, on relance à nouveau le calcul des densités et on s'arrête lorsque la convergence est atteinte. A la sortie de l'organigramme, on obtient les résultats qui décrivent la jonction PN (densité des électrons et des trous, champ électrique et densité de charge d'espace... etc.).

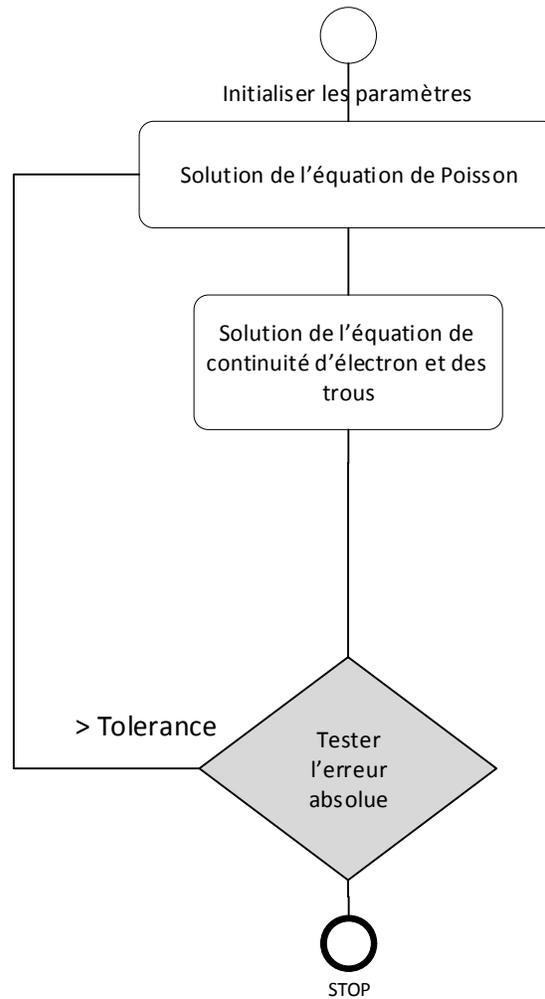


Figure III-7: Schéma de l'algorithme de résolution dans le cas équilibré

III.4. Résultat de simulation 1D –Modélisation de la diode pn

Dans cette section, nous donnons un exemple d'application du modèle de dérive-diffusion à la modélisation 1D d'une diode pn dans des conditions d'équilibre. Le programme est exécuté sous Matlab [19]. Puisqu'il s'agit d'un problème 1D, la décomposition de LU- qui est une méthode directe- est utilisée pour résoudre à la fois les équations de poisson 1D Poisson et de continuité des électron 1D et des trous. Les conditions de calculs sont les suivantes :

Tableau III-1: paramètre de la diode (jonction PN) simulé [11]

Paramètre	Description	Valeur
q	Charge	$1.602 \cdot 10^{-19}$ C
K_b	Le constant de Boltzman	$1.38 \cdot 10^{-23}$ J/K
ϵ	Permittivité diélectrique	$1.05 \cdot 10^{-12}$ F/cm
T	Température	300 K
L_p	Largeur de la zone de déplétion	0.766 μ m
N_i	Concentration en porteurs intrinsèques	$1.5 \cdot 10^{10}$ 1/cm ³
R_{Nc}	La densité effective d'états de la bande de conduction	$2.82 \cdot 10^{20}$
N_a	Concentration d'accepteur	10^{-16} m ⁻³
N_d	Concentration de donneur	10^{16} m ⁻³
μ_n	La mobilité des porteurs négative	88 m ² /Vs
μ_p	La mobilité des porteurs positives	543 m ² /Vs
τ_n	La durée de vie des électrons	10^{-7} s
τ_p	La durée de vie des trous	10^{-7} s

Les Figure III-8 à Figure III-12 illustrent le profil de la bande de conduction à l'équilibre, les concentrations en électrons et en trous, la densité de charge totale et le profil du champ électrique dans le cas de la diode du Tableau I.

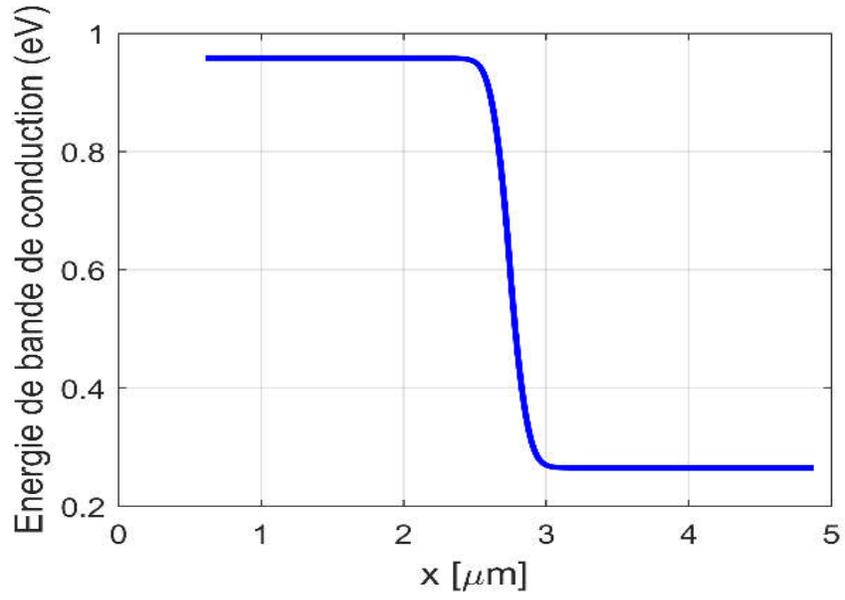


Figure III-8: Profil de bande de conduction à l'équilibre

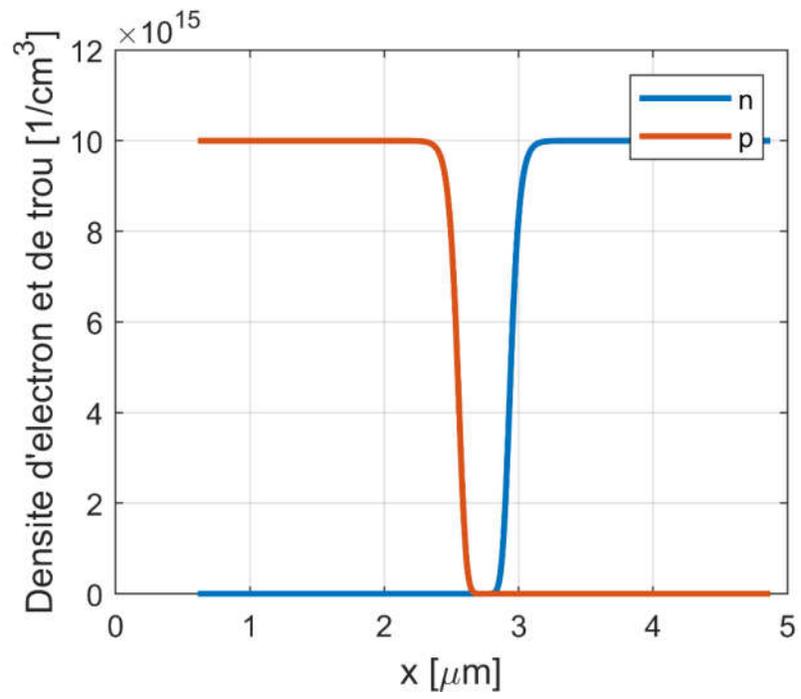


Figure III-9: Densité d'électrons et des trous à l'équilibre

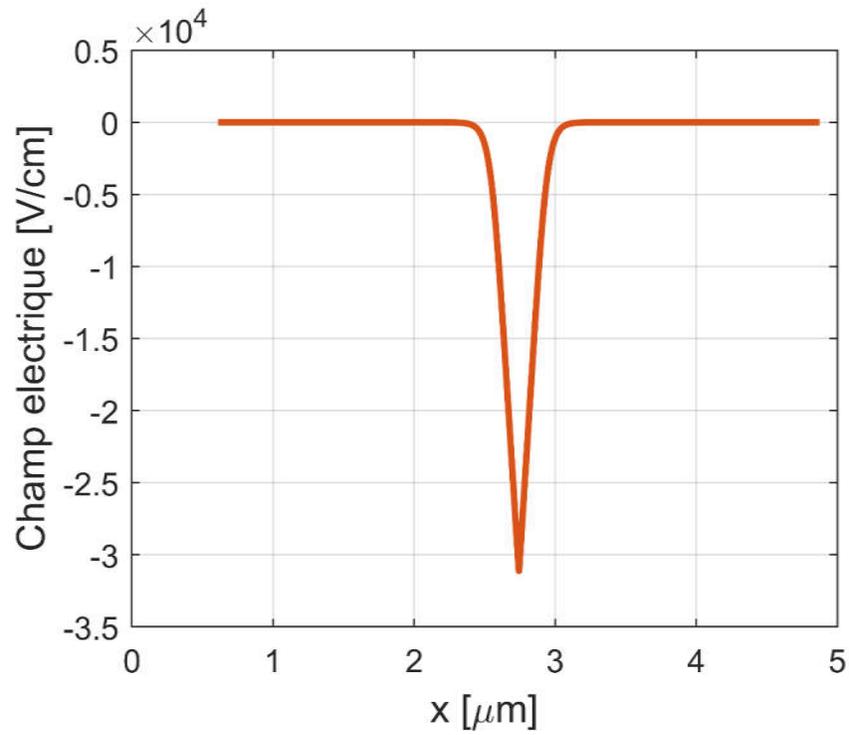


Figure III-10: Le champs électrique à l'équilibre

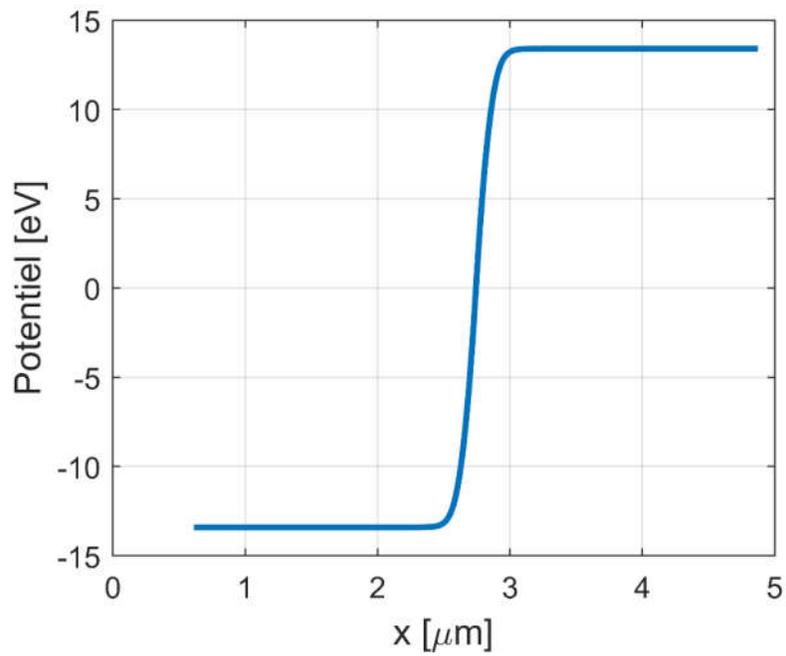


Figure III-11: Le potentiel électrique à l'équilibre

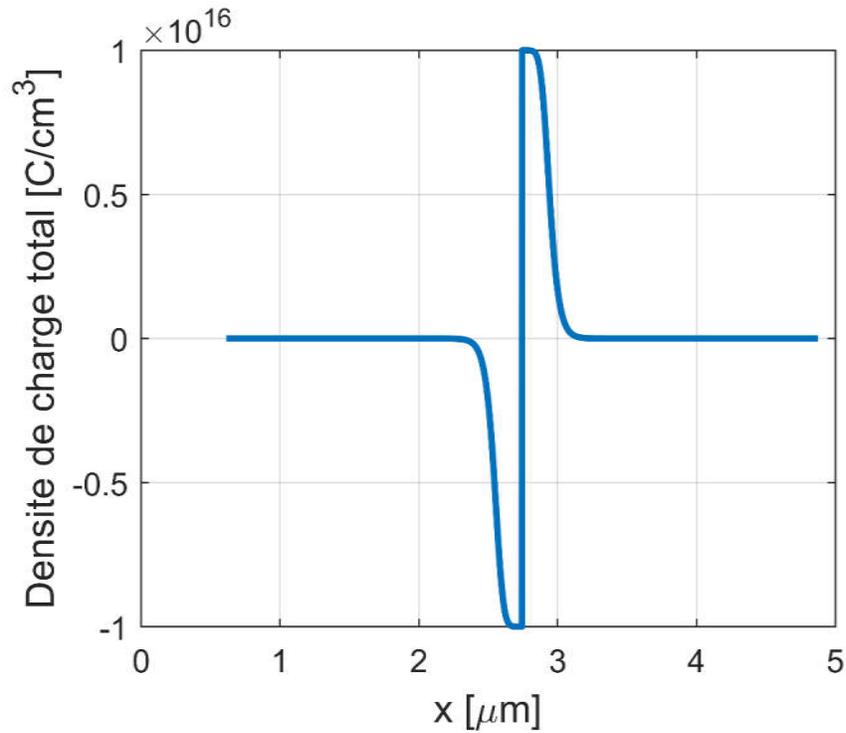


Figure III-12: Densité de charge totale à l'équilibre

III.5. Conclusion

Dans la première partie de ce chapitre nous avons réalisé des tests numériques contraignants effectués sur les algorithmes Upwind, Leapfrog et Scharfetter et Gummel. Ces expériences numériques concernent l'étude de la propagation d'un profil de densité rectangulaire et triangulaire pour les schémas Upwind, Leapfrog et gaussienne pour le schéma Scharfetter et Gummel avec des vitesses positives constantes. Ces tests nous ont permis de connaître la performance de méthode numérique Scharfetter et Gummel qu'est la plus adaptée pour la résolution de l'équation de continuité de type dérive-diffusion utilisée pour la modélisation d'une jonction PN. Dans la deuxième partie de ce chapitre nous avons exécuté un code de simulation d'une jonction PN qui se base sur la résolution des équations de continuité couplées à l'équation de Poisson. Ce test consiste à déterminer les densités des particules chargées (électron, trous), le champ électrique et d'autres paramètres dans jonction PN sous l'effet d'une tension continue. Cette expérience numérique a eu encore une fois le mérite de vérifier les performances de schéma numérique Shraffter et Gummel.

Conclusion Générale

Le travail présenté dans ce mémoire de Master est consacré à la programmation des méthodes numériques Upwind, Leapfrog et Scharfetter et Gummel afin de résoudre l'équation de continuité de type dérive-diffusion qui est l'élément essentiel dans la description du phénomène de transport de charges dans une jonction PN.

Tout d'abord, nous avons commencé ce mémoire par un aperçu sur les différents phénomènes physiques qui se manifestent dans les semi-conducteurs, ainsi que l'ensemble des équations qui régissent le fonctionnement d'une jonction PN en général.

Ensuite, nous avons présenté le modèle mathématique qui décrit la jonction PN en équilibre. Ce modèle se base sur la résolution des équations de continuités de particules chargées (électron et trous) couplées à l'équation de Poisson. La résolution de ces équations présente des difficultés informatiques liées au coût en espace mémoire, au temps de calculs et aux erreurs numériques. Dans ce contexte, nous avons testé trois algorithmes numériques (Upwind, Leapfrog et Scharfetter et Gummel). Ces tests consistent à suivre la propagation d'un profil de densité rectangulaire et triangulaire pour les algorithmes numériques Upwind, Leapfrog et Gaussienne pour l'algorithme Scharfetter et Gummel et le comparer avec la solution analytique afin de connaître la performance de chaque algorithme numérique.

Enfin, nous avons exploité un code de simulation d'une jonction PN qui se base sur l'algorithmes numériques Scharfetter et Gummel lors de la résolution des équations de continuité des charges. Cet exploit a permis de déterminer les densités des particules chargées (électron, trous), le champ électrique et l'énergie de bande d'une jonction PN sous l'effet d'une tension continue

En conclusion, les résultats trouvés montrent l'efficacité de l'algorithme Scharfetter et Gummel qu'est mieux opte pour la résolution des équations de continuité de type dérive-diffusion décrivant le transport des charges dans une jonction PN.

Référence bibliographique

- [1] R. G. Arns, “The other transistor: early history of the metal-oxide semiconductor field-effect transistor,” *Eng. Sci. Educ. J.*, vol. 7, no. 5, pp. 233–240, Oct. 1998.
- [2] F. Lévy, *Physique et technologie des semiconducteurs*. PPUR presses polytechniques, 1995.
- [3] M. Fazia, “Etude et simulation des structures photovoltaïques à base de chalcogénures de métaux de transition MX₂ (M = W, Mo; X = S, Se),” MEMOIRE DE MAGISTER, UNIVERSITE MOULOUD MAMMERI, TIZI-OUZOU, 2016.
- [4] “Onde de Bloch,” *Wikipédia*. 07-Jan-2019.
- [5] H. Kosina and S. Selberherr, “A hybrid device simulator that combines Monte Carlo and drift-diffusion analysis,” *IEEE Trans. Comput.-Aided Des. Integr. Circuits Syst.*, vol. 13, no. 2, pp. 201–210, Feb. 1994.
- [6] “Schottky Diode or Schottky Barrier Semiconductor Diode,” *Basic Electronics Tutorials*, 05-May-2019. .
- [7] “Dispositifs électroniques à semiconducteurs.” [Online]. Available: <https://wiki.epfl.ch/houdre/disp>. [Accessed: 11-Sep-2019].
- [8] J. W. Thomas, *Numerical Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [9] S. M. Ph.D, *Numerical Methods for Partial Differential Equations: Finite Difference and Finite Volume Methods*, 1 edition. Amsterdam: Academic Press, 2016.
- [10] D. R. Durran, *Numerical Methods for Wave Equations in Geophysical Fluid Dynamics*. New York: Springer-Verlag, 1999.
- [11] D. Vasileska and S. M. Goodnick, *Computational Electronics*. Morgan & Claypool Publishers, 2006.
- [12] A. A. Kulikovskiy, “A More Accurate Scharfetter-Gummel Algorithm of Electron Transport for Semiconductor and Gas Discharge Simulation,” *J. Comput. Phys.*, vol. 119, no. 1, pp. 149–155, Jun. 1995.
- [13] D. L. Scharfetter and H. K. Gummel, “Large-signal analysis of a silicon Read diode oscillator,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 16, no. 1, pp. 64–77, Jan. 1969.
- [14] *Parallel Computational Fluid Dynamics 1999*. Elsevier, 2000.
- [15] D. L. Book, Ed., *Finite-Difference Techniques for Vectorized Fluid Dynamics Calculations*. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 1981.
- [16] A. Flitti, A. Hennad, and N. Benaïred, “Résolution numérique de l’équation de dérive-diffusion : traitement d’un problème non-linéaire,” *Rev. Int. Technol. Avancées CDTA*, vol. 19, pp. 14–24, 2007.
- [17] S. Selberherr, *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices*. Springer-Verlag, 1984.
- [18] C. John, “Numerical Analysis of Semiconductor Devices,” *Ir. Math. Soc. Bull.*, vol. 23, no. December 1989, pp. 22–37, Dec. 1989.
- [19] “MATLAB - MathWorks.” [Online]. Available: <https://www.mathworks.com/products/matlab.html>. [Accessed: 10-Sep-2019].