ch 200000 4

 N° d'ordre : 1668

50 376 1996 9

THESE



Présentée à

L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES DE LILLE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE

Spécialité : Electronique

par

Saïd SADRI

Simulation du Phénomène de Transport Perpendiculaire en Régime Statique dans des Hétérostructures à Puits Quantique par le Formalisme des Fonctions de Green

Soutenue Le 19 Janvier 1996 Devant La Commission d'Examen :

Président : Rapporteurs :

Membres :

G. SALMER P. DEYMIER A. KHATER L. DOBRZYNSKI D. LIPPENS P. TABOURIER J.M. WACRENIER

à ma mère, à mon père,

à mes soeurs et frères



Avant Propos

Les travaux présentés dans ce mémoire ont été préparés à l'Institut d'Electronique et Microélectronique du Nord (IEMN) dirigé par Monsieur le Professeur E. Constant.

J'exprime mes remerciements envers Monsieur le Professeur G. SALMER Directeur du Département Hyperfréquence et Semiconducteurs (DHS) de l'IEMN qui me fait l'honneur de présider le jury.

Monsieur le Professeur P. TABOURIER, de l'Université du Littoral a assuré la direction de ce travail, je l'en remercie pour son aide et ses conseils.

C'est un immense plaisir pour moi d'avoir comme rapporteur :

- Monsieur le Professeur P. DEYMIER, du "Departement of Material Science and Engineering" de l'Université d'Arizona, Tucson (U.S.A.)

- Monsieur le Professeur A. KHATER du Laboratoire de Physique des Matériaux de l'Université du Maine

Je tiens à les remercier profondément pour avoir accepter cette tâche et pour leur effort.

Que Monsieur le Professeur J.M. WACRENIER, de l'Université des Sciences et Technologies de Lille, trouve en ces lignes ma plus profonde gratitude pour l'intérêt qu'il a manifesté pour ce travail, pour son aide déterminante, pour les innombrables entretiens et discussions qu'il m'a accordés et bien sûr pour ses qualités humaines et gentilles. Je le remercie sincèrement pour avoir accepter de participer au jury d'examen de ce travail.

Je suis très touché par la présence dans mon jury de thèse de Monsieur L. DOBRZYNSKI, Directeur de recherche au CNRS, Laboratoire de Dynamique et Structures de Matériaux Moléculaires de l'Université des Sciences et Technologies de Lille. Je tiens à lui présenter mes plus vifs remerciements pour son aide et ses conseils, pour l'intérêt qu'il a manifesté pour ce travail, pour sa nature très humaine et gentille et pour m'avoir honorer de participer au jury.

Je remercie beaucoup Monsieur D. LIPPENS, Directeur de recherche au CNRS, Laboratoire Central de l'IEMN, pour avoir accepter de faire partie du jury et d'examiner ce travail. J'associe à ces remerciements tout le sympathique personnel du Laboratoire Central de l'Institut (LCI), en particulier Monsieur Pierre ARMANT pour leur aide directe ou indirecte et pour leur gentillesse.

Je suis aussi très reconnaissant envers tout le personnel du Centre Interuniversitaire de Traitement de l'Information (CITI), en particulier Monsieur B. SIX et Monsieur Y. TINNEL pour leur aide. Je les en remercie vivement.

Je ne saurais oublier tous mes collègues et amis qui ont, d'une manière ou d'une autre, contribué à ce travail en particulier François DESSENNE, Jean Luc THOBEL, Patrick NIKYEMA et Olivier VANBESIEN à qui je dois les résultats de simulation par Schrödinger. Je leur présente mes plus amicaux et sincères remerciements.



<u>Sommaire</u>

| Introduction générale | 1 |
|--|----|
| Charitra I | 6 |
| Chapure I | 6 |
| Formalisme de Keldysh-Kadanoff-Baym | |
| 1-Introduction | 6 |
| 2- Approche classique du phénomène de transport par l'équation de Boltzmann | 7 |
| 3- Introduction mathématique des fonctions de Green | 9 |
| 3-1- Transformées de Fourrier | 12 |
| 3-2- Propriétés de G ^{<} et G $^>$ | 12 |
| 4- Processus hors d'équilibre : Formalisme de Keldysh | 14 |
| 4-1- Contour Chronologique pour les fonctions de Green | 14 |
| 4-2- Equation de Dyson et fonction self-energie | 21 |
| 5- Obtention de l'équation de Transport quantique | 25 |
| 6- Conclusion | 27 |
| Chapitre II | |
| Formalisme de Wigner | |
| 1-Introduction | 29 |
| 2- Equation de transport pour la fonction de distribution de wigner | 30 |
| 2-1- Recherche de l'équation pour G ^{<} | 30 |
| 2-2 - Relation entre $G^{<}$ et la fonction de distribution de Wigner | 34 |
| 2-3 - Remarques | 36 |

| | Page |
|---|------|
| 3-Application au transport pérpendiculaire dans une diode à effet tunnel résonant | 37 |
| 3-1- Description et principe de fonctionnement de la structure | 37 |
| 3-2- Equation de Transport | 44 |
| 3-3- Conditions aux limites | 45 |
| 3-4- Discretisation du problème | 47 |
| 3-4-1- Obtention de l'équation de transport discrétisée | 47 |
| 3-4-2- Expressions des densités de porteurs et de courant | 52 |
| 3-5- Résultats Numériques | 54 |
| 3-5-1- Structure 28/45/28 Å | 54 |
| 3-5-2- Structure 50/50/50 Å | 62 |
| 3-5-3- Influence du nombre de points dans l'espace des k | 67 |
| 4- Conclusion | 80 |

Chapitre III

Modèle des fonctions self-énergies locales

| 1 - Introduction | | |
|--|----|--|
| 2 - Description de l'outil mathématique | | |
| 2-1- Fonctions self-énergies locales | 83 | |
| 2-2- Equation de transport pour $G^{\mathbf{R}}$ | 85 | |
| 2-3- Etablissement de l'expression du Courant | 86 | |
| a) Relation de continuité et découplage des énergies | 86 | |
| * Hypothèse de l'équilibre local | 88 | |
| * Une relation simple et importante entre τ_p et τ_ϕ | 90 | |
| b) Courant Terminal | 90 | |
| c) Composantes cohérente et incohérente du courant | 92 | |
| d) Régime linéaire | 93 | |
| e) Cas particulier : $T \rightarrow 0$ | 94 | |
| 2-4- Expression de la densité locale de charges | 95 | |
| 3 - Discretisation et mise au point de l'outil numérique pour un système 1-D | 95 | |
| 3-1- Modèle quasi 1-D | 96 | |
| a) Expressions des courants quasi 1-D | 96 | |
| b) Densité locale d'états quasi 1-D | 98 | |
| c) Expressions des densités locales de charges quasi 1-D | 99 | |

| | Page |
|--|------|
| 3-2- Calcul de $G_{1D}^{R}(z, z'; E)$ | 100 |
| 3-2-1-Calcul de l'équation matricielle de Dyson | 103 |
| 3-2-2- Fonction de Green pour un milieu homogène 1-D semi-infini | 107 |
| 3-2-3- Extension de la fonction de Green | 111 |
| 3-3- Expressions discrétisées des grandeurs physiques | 112 |
| 3-4- Organigrammes du calcul numérique | 119 |
| 4 - Résultats Numériques | 127 |
| 4-1- Régime linéaire (Modèle strict 1-D) | 127 |
| 4-1-1- Diode à simple Barrière de potentiel a) Etude de l'influence de τ_{ϕ} dans la barrière | 127 |
| Cas particulier des basses températures : $T \rightarrow 0$ | 128 |
| b) Cas où T $\neq 0$ | 132 |
| 1) Recherche du domaine d'énergie | 132 |
| 2) Etude de la densité d'états et de la densité de charges | 132 |
| 3) Caractéristiques de conduction I=f(Vapp) et | |
| potentiel chimique local | 138 |
| 4-1-2- Diode à double barrière de potentiel | 139 |
| a) Densité de charges en fonction du niveau de Fermi | 140 |
| b) Densité d'états | 140 |
| 4-2 - Régime d'équilibre local (Modèle quasi 1-D) | 148 |
| Etude d'une diode à double Barrière de potentiel | |
| 4-2-1- Comparaison avec l'approche de Wigner | 148 |
| 4-2-2- Structure 100/50/100 Å | 150 |
| 4-2-3- Structure 50/50/50 Å | 152 |
| a) Etude en fonction de la température T | 152 |
| b) Etude en fonction de τ_{ϕ} | 152 |
| 5 - Conclusions | 155 |
| Conclusion générale | 159 |

| 11.04 | | | | |
|-------|--|--|------|--|
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |

| Annexes | |
|--|-----|
| Annexe I | 162 |
| Notes sur la seconde quantifiaction | 162 |
| Annexe II | 167 |
| Discrétisation de l'équation de transport à masse effective variable | 167 |
| Annexe III | 170 |
| A) Calcul des fonctions self-énergies | 170 |
| B) Transformée de Fourier | 173 |
| C) Equation intégrale pour G ^{<} | 174 |
| D) Calculs de la densité de porteurs et de la densité d'états | 176 |
| E) Calcul de la densité de courant | 178 |
| a- Densité de courant | 178 |
| b- Calcul de la divergence de la densité de courant | 181 |
| F) Développement de Sommerfeld | 183 |
| G) Détails du calcul numérique | 185 |
| a) Fonction de Green G ^R quasi 1-D | 185 |
| b) Expression du courant quasi 1-D | 189 |
| c) Densité locale d'états quasi 1-D | 191 |
| d) Fonction de distribution quasi 1-D | 193 |
| e) Potentiel chimique local quasi 1-D | 194 |
| f) Densités locales de charges quasi 1-D | 196 |
| g) Passage de l'écriture continue à l'écriture discrète pour une | |
| fonction de Dirac | 198 |
| h) Equation matricielle de Dyson | 199 |
| i) Extension de la fonction de Green G ^R | 200 |

Références Bibliographiques

207

Page

Introduction Générale

Introduction générale

□ Pendant longtemps l'étude du transport électronique dans les semi-conducteurs a été de type classique, faisant appel par exemple à l'équation de transport de Boltzmann. Mais l'évolution de la technologie des semi-conducteurs permet une miniaturisation extrême des composants qui soulève des questions nouvelles concernant les outils théoriques convenables à ces échelles submicroniques voire ultrasubmicroniques (< 1000 Å).

Ainsi aux températures de travail ordinaires la longueur d'onde de de Broglie [Iafrate, 1988] des électrons traités dans l'approximation de la masse effective, est comparable aux dimensions de la zone active du composant. Les électrons manifestent alors un comportement ondulatoire. De plus la durée de transit dans cette zone est comprise entre 10⁻¹⁵ et 10⁻¹² secondes pour des électrons dont la vitesse typique est de l'ordre de 10⁷ cm/s. Ces données sont inférieures aux temps de relaxation du moment ou de l'énergie de l'électron, ce qui pose problème.

Un problème supplémentaire tient au fait que les porteurs constituent un système ouvert loin de l'équilibre.

Parallèlement à la nécessité de traiter ces difficultés et le comportement ondulatoire des porteurs dans des composants submicroniques de conception classique, se pose aujourd'hui le problème de traiter des composants de conception quantique.

Pour cette génération " à venir" dont le prototype est actuellement la diode à effet tunnel résonnant, les effets quantiques sont essentiels au fonctionnement et ne constituent pas des effets "parasites".

Dans ces conditions on voit mieux l'importance de développer une équation de transport quantique [Iafrate, 1985; Shah, 1988] constituant le support théorique d'une étude de la physique des composants pour leur optimisation sur le plan pratique.

□ L'objectif de ce travail est de mettre en place au niveau du laboratoire un outil de simulation pour composants quantiques. Nous limitons volontairement les moyens de calcul numérique affectés à cette tâche, au risque de limiter du même coup les possibilités prédictives des modèles ainsi traités. Ce choix délibéré correspond à la volonté de privilégier la facilité de mise en oeuvre de l'outil, sa souplesse d'utilisation, sa rapidité de réponse, lui fixant en quelque sorte une tâche de première ébauche de la solution. Cet objectif modeste est déjà difficile à atteindre même pour des hétérostructures à semi-conducteurs simples comme celles étudiées dans ce travail. En effet la modélisation d'un composant quantique relié à des contacts de polarisation, ne peut pas reposer en général sur le simple calcul d'une probabilité de transmission qui stipule la cohérence de phase de l'onde électronique. Dans la réalité, il y a lieu de considérer l'existence d'une zone d'accès qui fait tampon entre deux régions traitées de manières distinctes :

Une région du composant, à caractère quantique où la cohérence de phase est préservée.

Tune région à caractère classique (région des contacts) où la cohérence de phase est détruite. Cette région assimilée à un réservoir à l'équilibre est décrite par une fonction de distribution énergétique caractérisée à une température donnée, par un potentiel chimique.

La zone d'accès joue donc un rôle essentiel pour mettre en relation ces deux régions de façon réaliste (sinon satisfaisante), c'est à dire sans discontinuité de la densité de courant.

Pour traiter le problème nous utilisons deux approches quantiques bien différenciées mettant en jeu des fonctions de Green adaptées à la description des systèmes hors d'équilibre. Nous nous limitons toujours au cas du régime statique.

□ Les définitions, les propriétés de ces fonctions de Green font l'objet du chapitre I. En reprenant le formalisme de Keldysh -Kadanoff-Baym (KKB), on établit un système d'équations intégro-différentielles. Sa résolution donne les fonctions de Green G^R et $G^<$.

A partir de $G^{<}$ on accède aux grandeurs physiques d'intérêt : densité de charges, densité d'états quantiques et intensité de courant.

Nous utilisons alors le formalisme de Keldysh en traitant à part et de manière non perturbative le potentiel extérieur appliqué tandis que les diffusions interviennent par le biais de fonctions "self-energy". Le fait de considérer qu'elles sont nulles entraîne bien sûr une simplification considérable.

Cette simplification débouche sur l'équation de transport pour la fonction de Wigner qui n'est autre qu'une fonction dérivée de la fonction $G^{<}$. La résolution de l'équation de transport de Wigner pour une diode à effet tunnel résonnant fait l'objet du chapitre II. Il faut noter que la suppression du mécanisme de diffusion en particulier dans la zone d'accès rend le rôle de celle-ci plutôt inefficace. Il se limite à éloigner l'interface avec le contact de polarisation et la zone d'accès est alors le siège d'interférences quantiques.

Dans ces conditions il n'est pas surprenant que certains auteurs [Frensley, 1988; Kluksdahl, 1989] aient alors réintroduit un mécanisme dissipatif dans l'équation de Wigner, de manière purement phénoménologique et de ce fait peu satisfaisante.

Dans ce chapitre II nous montrons que le formalisme de Wigner utilisé dans des conditions très simplificatrices qui intègrent cependant les difficultés essentielles d'un modèle plus réaliste, ne prévoit pas de façon satisfaisante les grandes tendances du comportement expérimental des diodes à effet tunnel résonnant, en particulier celles à barrières "épaisses".

3

Notre étude consiste alors à mettre en évidence les difficultés du calcul numérique liées à ce modèle. Nous indiquons enfin la manière de remédier à ce problème en utilisant plus judicieusement la puissance de calcul disponible.

Dans le chapitre III, nous reprenons le traitement des structures typiques étudiées dans le chapitre II, à partir du formalisme de Keldysh en introduisant des fonctions "selfenergy" strictement locales pour prendre en compte les interactions et introduire de façon naturelle un temps de perte de cohérence de phase. Nous suivons en cela le travail original de S-Datta & al. Ce procédé couplé à la mise en oeuvre d'une fonction de distribution énergétique locale f(r;E), permet de calculer les grandeurs physiques intéressantes et en particulier le courant.

Sur le plan technique, le calcul numérique peut être allégé à différent niveaux dans les conditions suivantes :

au niveau du bouclage sur les énergies. Ce bouclage étant levé dans le cas d'une hypothèse d'équilibre local, moins forte que celle de régime linéaire et qui introduit le concept de potentiel chimique local. Il y a alors découplage énergétique.

 \mathscr{F} au niveau du traitement de la constante de temps de perte de cohérence de phase $\tau_{\phi}(r;E)$, qui peut être introduite comme un paramètre local indépendant de l'énergie, fixé à priori et non calculé de manière "self-consistent". Par ailleurs le calcul de la fonction de Green G^R joue un rôle essentiel. Le fait qu'une fois discrétisée, l'équation pilote pour G^R traitée dans l'approximation de la masse effective, s'écrive comme une matrice formellement semblable à celle qu'on peut obtenir dans l'approximation des liaisons fortes, nous permet d'exploiter les techniques de résolution déjà mises au point dans ce domaine. Ainsi nous détaillons comment traiter analytiquement et sans troncature l'influence des réservoirs "infinis" et limiter de ce fait le maillage pour le calcul numérique à la zone comprise entre ces deux réservoirs. L'intérêt de cette méthode, mise en oeuvre ici pour des modèles quasi 1-D persiste Pour les modèles quasi 1-D qui nous occupent il est possible d'exploiter l'invariance translationnelle dans le plan transverse (direction orthogonale à celle du transport) pour décrire le transport électronique dans le composant à partir d'une fonction de Green à caractère 1-D, plus simple à calculer.

Dans ce contexte, la présentation des résultats est alors organisée sur la base d'une analyse en régime linéaire et en régime d'équilibre local. Nous examinons l'effet de la température en particulier en utilisant comme indicateur la valeur du rapport des densités de courants J_{pic} et $J_{vallée}$.

Nous concluons enfin en examinant quels aspects positifs peuvent être retenus pour constituer une base à la poursuite de ce travail.

CHAPITRE I

Formalisme de Keldysh-Kadanoff-Baym

Chapitre I

Formalisme de Keldysh-Kadanoff-Baym

I-1 Introduction

Les approches classiques basées sur le concept de fonction de distribution définie dans l'espace des phases du système ne sont pas transposables à l'étude du transport quantique par suite de la non-commutativité des opérateurs de moment et de position imposée par le principe d'incertitude d'Heisenberg.

L'une des solutions à cette difficulté consiste à utiliser la fonction de Wigner (voir chapitre II), qui n'est est autre qu'une fonction de Green particulière. Le formalisme des fonctions de Green paraît en effet le plus apte à décrire des systèmes électroniques hors d'équilibre et à traiter les interactions par l'introduction d'une fonction "self-energy". Ces fonctions ont été développées par Kadanoff et Baym (1962) et par Keldysh (1964) et leurs formalismes sont équivalents. (Langreth, 1976 ; Jauho, 1991) La technique de Keldysh a pu être utilisée efficacement dans différents domaines tels que les supraconducteurs (Schmid, 1981), les quasi particules (Aronov & Gurevich, 1974 ; Aronov & al 1981), les électrons dans un métal (Fleurov & Kozlov, 1978), les effets d'interaction dans les métaux légèrement désordonnés (Altshuler & Aronov, 1978a, 1979a, 1979b), le gaz de Fermi (Lifshitz & Pitaevskii, 1981), des problèmes de physique de surface (Blandin & al, 1976), l'effet d'inélasticité sur le courant tunnel entre les métaux normaux (Caroli & al, 1971), les conducteurs quasi-1D (Artemenko & Volkov, 1981a, 1981b), des collisions nucléaires (Danielewicz, 1984) etc. (Rammer & Smith, 1986)

Nous nous proposons donc de l'appliquer au transport perpendiculaire dans les hétérostructures à effet tunnel résonnant. Nous allons présenter les principaux éléments du Formalisme de Keldysh permettant d'établir une équation cinétique pour les porteurs.

I-2- <u>Approche Classique du phénomène de transport par l'équation de</u> <u>Boltzmann</u>

- L'équation de Boltzmann constitue la limite classique vers laquelle doit tendre une équation de transport quantique. De ce point de vue, elle garde donc un intérêt dans le contexte quantique qui nous occupe ici. Le rappel de certaines conditions de validité de l'équation de Boltzmann permet de préciser les frontières de la limite classique.

Si f(r,p,t)dr est la probabilité de trouver un électron ayant le quasimoment $p=\hbar k$ dans un volume dr centré en r à l'instant t, on a f(r,p,t) comme solution pour l'équation cinétique suivante encore appelée équation de transport de Boltzmann :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \upsilon \cdot \nabla_r f + F \cdot \nabla_p f = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}}$$
(I-2-1)

et F = q E est la force subie par les électrons soumis au champ électrique appliqué E au point r à l'instant t

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \sum \{ f(r,p',t)[1-f(r,p,t)]w(p',p) - f(r,p,t)[1-f(r,p',t)]w(p,p') \}$$
(I-2-2)

où w(p,p') est le taux de transition de l'état p et p' et il dépend du détail du mécanisme de diffusion [Jones,- 1973], par exemple la diffusion électron-phonons ou électron-impuretés, etc.

La simplicité apparente des expressions précédentes ne doit pas faire oublier l'existence de certains problèmes :

1) Dans les situations où la variation spatiale du champ électrique appliqué aux porteurs est significative sur une distance de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde de de Broglie, l'équation de Boltzmann cesse de décrire correctement le transport.

2) La représentation employée traite les électrons en les considérant essentiellement comme des quasiparticules libres, qui ne sont qu'occasionnellement diffusées par les phonons, impuretés, imperfections, etc, mais qui autrement ne sont pas affectées entre les collisions. Pourtant les électrons interagissant avec les potentiels additionnels dus à leur voisinage voient leur fonction $\varepsilon(p)$ altérée et par là leur vitesse modifiée.

3) L'hypothèse selon laquelle les diffusions sont locales et instantanées s'avère criticable puisque les potentiels de diffusion sont en réalité étendus dans l'espace et les collisions non instantanées. Pendant les processus de diffusion un électron voit alors son énergie changer car il est accéléré par la force F. De ce fait la supposition selon laquelle les effets de champ et les effets de collision peuvent être traités indépendamment n'est pas entièrement exacte. Une telle supposition perd sa validité dès que le changement d'énergie due à l'action du champ sur la durée de collision τ_c (c'est à dire : $Fv\tau_c$) est de l'ordre de grandeur de l'énergie moyenne des électrons ε .

4) Le taux de transition est généralement calculé en supposant que les diffusions sont incohérentes et non multiples ce qui peut cesser d'être le cas où il y a plus d'une diffusion sur une longueur d'onde de de Broglie.

5) L'interaction électron-électron pour les systèmes denses peut être significative.

Autrement dit la théorie de transport de Boltzmann est basée sur la validité de l'approximation adiabatique et la théorie de la perturbation. Elle considère les électrons comme des particules libres qui étant dans des états presque stationnaires possèdent un moment k bien défini. Les effets de la non-stationnarité étant alors supposés être produits par l'altération de la périodicité du cristal parfait par les imperfections, impuretés et phonons. Les collisions, en particulier avec les phonons, sont supposées d'être indépendantes et ayant lieu simultanément dans l'espace et le temps, donc engendrant de faibles et rares diffusions le long des états { k }. Tout champ électrique appliqué est traité comme étant faible et à variations spatialles lentes et son effet est uniquement d'accélérer les porteurs au travers les états de moment sans changement d'énergie ou interférant avec les processus de diffusion. Or dans les dispositifs nanométriques, le champ électrique et le taux de diffusion peuvent tous les deux atteindre de très grandes valeurs (Shichijo & Hess, 1981). Dans ces régimes, spécialement lorsqu'on cherche à étudier des processus tels qu'ionisation d'impact et l'injection de porteurs dans les isolants, nous ne pouvons plus espérer que chaque collision individuelle ait lieu avant que les autres processus prennent place et donc il y a une interférence avec eux. Par conséquent les limites de l'applicabilité de la théorie de Boltzmann sont ainsi dépassées et il faudrait que le phénomène de transport dans les dispositifs nanométriques soit considéré d'un point de vu complètement quantique, puisque le fait de négliger la relation d'incertitude peut engendrer des résultats erronés. (Barker, 1980)

Deux autres effets quantiques importants apparaissant comme conséquences de la relation d'incertitude position-moment et la durée de vie finie sont l'élargissement collisionel et l'effet du champ intracollisonel qui devraient être pris en compte lors d'un traitement complet du transport quantique. (Barker; 1973; Capasso, 1981; Reich & al, 1983)

Un élargissement collisionel reflétant la durée de vie finie des porteurs interagissant avec les impuretés, phonons, etc entraîne la violation de l'hypothèse du modèle de la masse effective selon

laquelle il n'y a qu'une relation unique entre l'énergie du porteur : $\varepsilon_K = \hbar \quad \omega$ et son vecteur d'onde K ($\varepsilon_K = \hbar^2 K^2 / 2m$). $\hbar \omega$ et K doivent désormais être considères comme des variables indépendantes et la relation entre elles sera décrite par la fonction de densité spectrale A(K, ω). (Mahan, 1981 ; Kadanoff & Baym, 1962)

L'effet du champ intracollisionel provient du fait que durant une collision, le porteur est accéléré par le champ et que cette durée ne peut plus être considérée comme instantanée. (Barker, 1973; Thornber, 1971 & 1978). Cet effet qui peut même avoir lieu dans un régime semi-classique s'accentue et devient significatif dans les dispositifs submicroniques caractérisés par une durée de collision moyenne et des temps de libre parcours moyen qui ne sont pas négligeables en comparaison au temps de transit au travers du dispositif (Zwanzig, 1961; Hajdu & Keiter, 1967). Ceci peut produire une augmentation de l'énergie de seuil des phonons lors d'une émission ou d'une absorption (Barker, 1980).

Ces considérations et les limitations énumérées impliquent donc la nécessité d'une formulation quantique du transport permettant d'éviter les obstacles de la théorie de Boltzmann.

I-3 - Introduction mathématique des fonctions de Green

-Dans le cadre du formalisme de la *seconde quantification* [annexe 1], et dans le mode de *description de Heisenberg*, on définit l'opérateur *complexe* de champ de particules (Mahan-1981), et son conjugué hermitique agissant au point " r " et à l'instant " t " par les relations suivantes :

$$\Psi(\mathbf{r},\mathbf{t}) = \sum_{\mathbf{s}} \alpha_{\mathbf{s}}(\mathbf{t}) \ \varphi_{\mathbf{s}}(\mathbf{r}) \tag{I-3-1a}$$

$$\Psi^{+}(r, t) = \sum_{s} \alpha^{+}_{s}(t) \ \phi^{*}_{s}(r)$$
 (I-3-1b)

où α_s (t) et α_s^+ (t) sont respectivement les opérateurs d'*annihilation* et de *création* d'une particule dans l'état propre (s) à l'instant "t " qui vérifient les relations de commutation suivantes (Mahan-1981) :

$$[\alpha_{s}(t), \alpha_{s'}(t)] = 0$$
 (I-3-2a)

$$[\alpha^{+}_{s}(t), \alpha^{+}_{s'}(t)] = 0$$
 (I-3-2b)

$$[\alpha_{s}(t), \alpha^{+}{}_{s'}(t)] = \alpha_{s}(t) \alpha^{+}{}_{s'}(t) \pm \alpha^{+}{}_{s'}(t) \alpha_{s}(t) = \delta_{s's}$$
(I-3-2c)

où les signes négatifs (-) dans ces relations, se réfèrent aux bosons, et les signes positifs (+) aux fermions.

D'autre part $\phi_s(r)$ désigne la fonction d'onde du système dans l'état propre (s) au point " r " et $\phi *_s(r)$ est son complexe conjugué. On peut montrer que les opérateurs de champ Ψ et Ψ^+ vérifient les relations suivantes :

$$[\Psi(\mathbf{r},\mathbf{t}),\Psi(\mathbf{r},\mathbf{t})]=0 \tag{I-3-3a}$$

$$[\Psi^{+}(r,t),\Psi^{+}(r,t)] = 0$$
 (I-3-3b)

$$[\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{t}), \Psi^{+}(\mathbf{r}', \mathbf{t}')] = \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{t}) \Psi^{+}(\mathbf{r}', \mathbf{t}') \pm \Psi^{+}(\mathbf{r}', \mathbf{t}') \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{t}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$
(I-3-3c)

On définit la *fonction de Green à une particule ou propagateur causal* par la moyenne thermodynamique du produit des opérateurs de champ :

$$G(r_1, t_1; r_2, t_2) = (\frac{1}{i\hbar}) < T[\Psi(r_1, t_1)\Psi^+(r_2, t_2)] >$$
(I-3-4)

ou en notation abrégée, en prenant $x_1 = (r_1, t_1)$ et $x_2 = (r_2, t_2)$:

$$G(x_1; x_2) = (\frac{1}{i\hbar}) < T[\Psi(x_1)\Psi^+(x_2)] >$$
 (I-3-5)

T est *l'opérateur chronologique de Wick* (Kadanoff-Baym, 1962; Mahan, 1981) qui a pour effet de ranger les opérateurs Ψ et Ψ^+ dans un ordre tel que la variable temps croisse de droite à gauche (autrement dit la propagation s'effectue toujours du passé vers l'avenir). En outre dans le cas d'un gaz de fermions (cas des électrons), l'opération s'accompagne d'un changement de signe chaque fois que l'on permute les deux opérateurs par rapport à l'ordre de référence indiqué dans les crochets . Ainsi :

$$T[\Psi(x_1) \Psi^+(x_2)] = \begin{cases} \Psi(x_1) \Psi^+(x_2) & \text{si} \quad t_1 > t_2 \\ \pm \Psi^+(x_2) \Psi(x_1) & \text{si} \quad t_1 < t_2 \end{cases}$$

(avec : (+) : bosons ; (-): fermions)

On remarque que si les opérateurs commutent, alors leur ordre chronologique n'a pas d'importance et T n'est appliqué qu'aux opérateurs qui à des instants différents ne commutent pas (Mahan, 1981) La fonction de Green à une particule a une signification physique directe. Elle décrit la propagation de la perturbation (ou de la modification élémentaire) imposée au système de particules en équilibre, par l'addition ou l'extraction d'une particule, d'où son appellation de " *propagateur* ". En d'autre termes, G est l'amplitude de probabilité pour qu'en ayant ajouté à l'état de base (= état fondamental), une particule en (r_2, t_2) , on la retrouve en (r_1, t_1) sans autre modification de l'état de base .[Nozières, 1963]

Par exemple lorsque $t_1 > t_2$, $\Psi^+(x_2)$ agit en premier produisant une perturbation au point $x_2 = (r_2, t_2)$ où on introduit une particule dans le système. Cette perturbation se propage jusqu'à t_1 , instant auquel une nouvelle particule est extraite du système au point " r_1 " ramenant ainsi le système à l'équilibre. Par contre lorsque $t_1 < t_2$, $\Psi(x_1)$ agit en premier et la perturbation produite par l'extraction d'une particule au système au point (r_1, t_1) se propage jusqu'à " t_2 ", instant auquel une nouvelle particule au système au point (r_1, t_1) se propage jusqu'à " t_2 ", instant auquel une nouvelle particule au système au point " r_2 " en établissant l'équilibre, met fin à la perturbation.

Par ailleurs, en complément de définition de la fonction de Green à une particule on peut définir les *fonctions de corrélation* suivantes [Kadanoff-Baym, 1962] :

$$G^{>}(x_{1}; x_{2}) = (\frac{1}{i\hbar}) < \Psi(x_{1}) \Psi^{+}(x_{2}) >$$
 (I-3-6)

$$G^{<}(x_{1}; x_{2}) = \pm \left(\frac{1}{i\hbar}\right) < \Psi^{+}(x_{2}) \Psi(x_{1}) >$$
 (I-3-7)

(avec : (+) : bosons ; (-) : fermions)

En effet, pour t_1 , t_2 réels on peut écrire :

$$G(x_1; x_2) = \begin{cases} G^{>}(x_1; x_2) & \text{si } t_1 > t_2 \\ G^{<}(x_1; x_2) & \text{si } t_1 < t_2 \end{cases}$$

On remarque qu'en absence de champs externes, dans le cas d'un système homogène présentant une *invariance translationnelle* dans l'espace et le temps, $G^>$ et $G^<$, ne sont en fait fonctions que de la différence des coordonnées spatiales (r_1 - r_2) et temporelles (t_1 - t_2) [Abrikosov, 1964; Meijer; Kadanoff-Baym, 1962; Kittel, 1983] :

$$G(x_1; x_2) = G(|r_1 - r_2|; |t_1 - t_2|)$$
(I-3-8)

Et on note alors, si : $r = r_1 - r_2$; $t = t_1 - t_2$

$$G(r;t) = G(|r_1-r_2|; |t_1-t_2|)$$
(I-3-9)

I-3-1- Transformées de Fourier

- On introduit les transformées de Fourier de G(r,t) suivantes [Kittel, 1967; Mills, 1969,p110] :

→ par rapport à la variable d'espace :

$$G(k,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3r \ e^{-ikr} G(r,t)$$
 (I-3-10)

et son inverse :

$$G(r,t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3k \, e^{ikr} \, G(k,t)$$
 (I-3-11)

→ par rapport à la variable de temps :

$$G(k, \varepsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \, e^{i\varepsilon t/\hbar} \, G(k, t)$$
 (I-3-12)

et son inverse :

$$G(k,t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \, e^{-i\epsilon t/\hbar} \, G(k,\epsilon)$$
 (I-3-13)

I-3-2- Propriétés de G[<](r,t) et G[>](r,t)

- L'opérateur densité de particules peut s'écrire sous la forme : [Abrikosov, 1964]

$$n(r, t) = \Psi^+(r, t) \Psi(r, t)$$
 (I-3-14)

Or l'extraction puis l'addition immédiate d'une particule au point (r,t) mesure la densité de particules en ce point, l'opérateur nombre total de particules est donc :

N(t) =
$$\int_{-\infty}^{+\infty} dr \ \Psi^+(r,t).\Psi(r,t)$$
 (I-3-15)

Mais la transformée de l'opérateur de champ $\Psi(r,t)$ s'écrit :

$$\Psi(\mathbf{k},\varepsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{r} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{t} \ e^{-\mathbf{i}\mathbf{k}\mathbf{r}+\mathbf{i}\varepsilon\mathbf{t}/\hbar} \Psi(\mathbf{r},\mathbf{t})$$
(I-3-16)

 Ψ (k, ε) est un opéateur qui annihile une particule ayant le vecteur d'onde k et l'énergie ε . G[<](k, ε) par définition peut être identifié à la *densité moyenne de particules* du système ayant le vecteur d'onde k et l'énergie ε :

$$G^{<}(k,\varepsilon) = \langle n(k,\varepsilon) \rangle$$

En effet d'après (I-3-14) on a :

$$< n (r, t) > = < \Psi^{+}(r, t) \Psi(r, t) > = \pm i\hbar G^{<}(rt; rt)$$
$$= \pm i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi\hbar} \frac{d^{3}k}{(2\pi)^{3}} G^{<}(k, \epsilon)$$
(I-3-17)

D'autre part on peut montrer que [Kadanoff-Baym, 1962], $G^{>}(k,\varepsilon)$ représente la *densité d'états* disponibles pour l'addition d'une particule ayant le moment k et l'énergie ε . En effet $G^{>}(k,\varepsilon)$ est proportionnel à une probabilité de transition moyenne pour les processus au cours desquels l'addition d'une particule de vecteur d'onde k, augmente l'énergie du système de ε . Cette probabilité de transition mesure la densité d'états disponibles pour l'addition d'une telle particule.

Par ailleurs la densité de courant peut être reliée à $G^{<}$ par la relation suivante : [Jauho & al 1984]

$$J(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2im^{*}} (\nabla_{\mathbf{r}} - \nabla_{\mathbf{r}'}) < \Psi^{+}(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}', t) > = = (\frac{\pm \hbar}{2m^{*}}) \lim_{\mathbf{r}' \to \mathbf{r}} ((\nabla_{\mathbf{r}} - \nabla_{\mathbf{r}'}) G^{<}(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t))$$
(I-3-18)

I-4 - Processus hors d'équilibre : Formalisme de Keldysh

- La méthode la plus courante pour calculer la fonction de Green $G(t_1, t_2)$ du système consiste à mettre en oeuvre une technique de traitement perturbatif basée sur la séparation dans l'Hamiltonien total H d'un terme d'interaction H_{int} selon la relation suivante

$$H(t) = H_0 + H_{int}(t)$$
 (I-4-1)

où H_0 est l'Hamiltonien du système non perturbé représentant les particules libres, et H_{int} (t) est l'Hamiltonien de perturbation traduisant l'effet d'interactions.

La méthode consiste alors à écrire G sous la forme d'un développement en fonction de H_{int} qui peut s'écrire de manière diagrammatique. Les conditions de mise en oeuvre sont compliquées si l'application du terme d'interaction ne peut être considérée comme adiabatique (Théorème de Gell Mann - Low). C'est le cas si cette application entraîne un effet d'irréversibilité pour le système ou lorsqu'il passe en état de déséquilibre et ne peut plus rester décrit par la fonction d'onde propre de H_0 . représentant l'état fondamental non perturbé. Dans ces conditions la méthode diagrammatique peut malgré tout être préservée en utilisant le formalisme de Keldysh basé sur le concept d'opérateur chronologique sur un contour.

I-4-1- Contour Chronologique pour les fonctions de Green

□ La dynamique d'un système hors d'équilibre est dépendante de la direction du temps donc dans ce paragraphe afin d'alléger les écritures nous utilisons une notation abrégée pour l'argument (x,t) des fonctions en écrivant uniquement la variable temporelle "t". De plus les présentations sont limitées au cas des fermions.

A température nulle, la fonction de Green à temps réel peut s'écrire : [Blandin, 1976]

$$G(t_1, t_2) = -\frac{i}{\hbar} < \psi(0) \mid T[\Psi(t_1) \cdot \Psi^+(t_2)] \mid \psi(0) >$$
 (I-4-2)

où les *opérateurs fermions* $\Psi(t_1)$ et $\Psi^+(t_2)$ sont écrits dans la *représentation d'Heisenberg* et $\psi(0)$ représente l'état propre fondamental de l'Hamiltonien total du système H.

On note qu'initialement, l'état fondamental de H n'est pas connu. Par contre l'Hamiltonien H_0 est généralement choisi de telle manière qu'on puisse connaître ses valeurs propres et ses états propres. Son état propre fondamental est noté φ_0 . Nous devons donc déterminer la fonction d'onde inconnue $\psi(0)$ à partir de la fonction d'onde connue φ_0 car à température nulle la seule fonction d'onde d'intérêt spécial est la fonction d'onde de l'état fondamental. De ce fait nous exprimons dans la représentation d'interaction la fonction de Green précédemment définie dans la représentation d'Heisenberg. Tous les opérateurs ont donc la même forme que les opérateurs d'Heisenberg pour le système non perturbé (= sans interaction) correspondant, tandis que la fonction d'onde vérifie l'équation de Schrödinger avec un Hamiltonien H_{int} (t) . La possibilité d'utiliser les opérateurs " libres " constitue le grand avantage de cette représentation. [Abrikosov, 1964]

Dans la *représentation d'interaction* (opérateurs tildés) la dépendance temporelle de l'opérateur $\tilde{\Psi}(t_1)$ est gouvernée par H₀ : [Mahan, 1981; Blandin, 1976]

$$\tilde{\Psi}(t_1) = e^{iH_0 t_1} \Psi(t_1) e^{-iH_0 t_1}$$
(I-4-3)

et celle de la fonction d'onde est donnée par :

$$\tilde{\psi}(t_1) = e^{iH_0} t_1 e^{-iH_1} \psi(0)$$
 (I-4-4)

D'autre part dans cette représentation, l'état $\tilde{\psi}(t_2)$ évolue selon : [Martin & Rothen, 1990]

$$\tilde{\Psi}(t_1) = U(t_1, t_2) \, \tilde{\Psi}(t_2)$$
 (I-4-5)

où l'opérateur d'évolution $U(t_1,t_2)$ qui gouverne l'évolution temporelle des états peut s'écrire :

$$U(t_{1},t_{2}) = T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_{2}}^{t_{1}} \tilde{H}_{int}(\tau) \, d\tau \right]$$
 (I-4-6)

Utilisant le *théorème de Gell-Mann et Low* (1951)[Martin & Rothen, 1990] qui relie les deux états fondamentaux $\psi(0)$ et φ_0 au zéro absolu, on peut obtenir l'expression de $G(t_1,t_2)$ dans la représentation d'interaction définie par :[Blandin, 1976; Abrikosov, 1964; Caroli, 1971]

$$G(t_1, t_2) = -\frac{i}{\hbar} < 0 | S^+ T [\tilde{\Psi}(t_1) \tilde{\Psi}^+(t_2) S] | 0 >$$
 (I-4-7)

où S est l'opérateur de diffusion ,dont les éléments de matrice donnent les amplitudes de probabilité des divers processus de diffusion mise en jeu [Martin & Rothen; 1990]

$$S = \lim_{t_1 \to +\infty} \lim_{t_2 \to -\infty} U(t_1, t_2)$$
(I-4-8)

ou encore [Kittel TQS p439; Chou, p3] :

$$S = S(+\infty, -\infty) \equiv U(+\infty, -\infty)$$
(I-4-9)

$$S^{-1} = S^{+} = S(-\infty, +\infty) \equiv U(-\infty, +\infty)$$
(I-4-10)

On suppose que l'interaction est " déclenchée " de façon adiabatique à partir de $t_2 = -\infty$ et cesse d'être appliquée à $t_1 = +\infty$. Ainsi pour $t_2 = -\infty$, $\phi_0 = |0\rangle \equiv |\tilde{\psi}(-\infty)\rangle$ [Mahan, 1981]

Il est clair que l'état fondamental d'un système ,c'est à dire l'état dans lequel l'énergie est minimum, est nécessairement non dégénéré. Selon les principes généraux de la mécanique quantique [Landau & Lifshitz, Quant. Meca.1958], un système dans un état stationnaire non dégénéré ne peut pas faire de transition vers un autre état sous l'action d'une perturbation infiniment lente. On peut alors conclure qu'en absence d'effets irréversibles, *le théorème adiabatique* implique que S | 0 > ne diffère de | 0 > que par un facteur de phase $e^{i\alpha}$:[Abrikosov,1964; Kittel, 1983; Mahan, 1981]

$$S \mid 0 \rangle = e^{i\alpha} \mid 0 \rangle \tag{I-4-11a}$$

$$<0|S^{+}=e^{i\alpha}<0|=<0|e^{-i\alpha}$$
 (I-411b)

où le réel α représente le facteur de phase due aux fluctuations du vide [Chou, 1985]. On constate qu'il est alors possible de se débarrasser du facteur S⁺ dans (I-4-7) et d'écrire la fonction de Green à une particule sous la forme :

$$G(t_1, t_2) = -\left(\frac{i}{\hbar}\right) \frac{< 0 \mid T\left[\tilde{\Psi}(t_1)\tilde{\Psi}^+(t_2) S(+\infty, -\infty)\right] \mid 0>}{< 0 \mid S(+\infty, -\infty) \mid 0>}$$
(I-4-12)

On remarque que cette expression est une généralisation de la fonction de Green à une particule (Kadanoff-Baym, 1962; Mahan, 1981) écrite dans la représentation d'interaction pour des systèmes évoluant dans l'intervalle de temps [t_1 , t_2] en présence d'un potentiel scalaire extérieur. Dans la représentation d'interaction, toutes les dépendances vis à vis de ce potentiel sont explicitées dans le facteur S, et les opérateurs de champs sont les mêmes qu'en absence du potentiel extérieur. En outre lorsque $H_{int}(t) = 0$ la matrice S est égale à l'unité (S = 1) et donc $G(t_1, t_2) = G_0(t_1, t_2)$ qui est la fonction de Green du système non perturbé ou propagateur libre.

L'usage du théorème de Wick permet en général d'évaluer le énième terme du développement de $G(t_1,t_2)$ en série de perturbation. Il donne en effet un procédé systématique de réduction de ce terme à des produits contenant un seul ψ et un seul ψ^+ (Kittel, 1983). Abrikosov & al exposent en détail ce problème du développement d'une fonction en série de perturbations.

Lorsque l'évolution du système est irréversible les équations (I-4-11) et (I-4-12) ne sont plus valables car le système ne reste pas dans l'état fondamental après l'application de la perturbation à $t_1 = +\infty$. Toutefois l'équation (I-4-7) en tant que moyenne sur les états de base reste encore correcte (Blandin, 1975), et il est possible de généraliser la technique des diagrammes. La procédure a été proposé par Keldysh. Cet auteur a suggéré que le chemin d'intégration temporelle intervenu dans le calcul de la matrice S devienne une boucle sur le temps qui permette de ramener le système dans son état initial non perturbé (= sans interaction) < 0 | à $t_1 = -\infty$. Le chemin d'intégration présenté dans la Fig (I-1) va donc de $-\infty$ à $+\infty$ et repart ensuite de nouveau vers $-\infty$. On definit alors une matrice S_c généralisée le long de la boucle ou du contour fermé : [Chou, 1985]

$$S_{c} = T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{c} \tilde{H}_{int}(\tau) d\tau \right]$$
(I-4-13)

et $G(t_1,t_2)$ s'écrit :

$$G(t_1, t_2) = -\frac{i}{\hbar} < 0 | T_c [\tilde{\Psi}(t_1) \tilde{\Psi}^+(t_2) S_c] | 0 >$$
 (I-4-14)

où T_c est un opérateur d'ordonnancement temporel opérant sur le *contour chronologique C* composé d'une *branche positive* notée " + " allant de $-\infty$ à $+\infty$ et d'une *branche négative* notée " - " allant de $+\infty$ à $-\infty$. Par ailleurs tout instant indice " - " de la branche négative est postérieur à un instant quelconque indicé " +" de la branche positive.



FIG I-1. Représentation du contour " C "

Dans l'expression précédente :

$$S_{c} = S(-\infty, +\infty) S(+\infty, -\infty)$$
(I-4-15)

où tous les termes de temps provenant de $S(-\infty, +\infty)$ se trouvent sur la branche positive et ceux provenant de $S(+\infty, -\infty)$ sur la branche négative ou la branche décroissante.

Il devient alors possible de calculer (I-4-14) à l'aide des techniques diagrammatiques usuelles, sachant que les temps de la branche négative sont postérieurs aux temps situés sur la branche positive, nous aurons alors quatre fonctions de Green connues sous le nom des *fonctions de Green du contour chronologique* [Chou, 1985; Rammer & Smith, 1986]



où en explicitant nous avons pour les fermions :

$$G^{+-} = G^{<}(t_{1}, t_{2}) = -\frac{i}{\hbar} < 0 | T_{c} [\tilde{\Psi}(t_{1+})\tilde{\Psi}^{+}(t_{2-})] | 0 >$$

$$= \frac{i}{\hbar} < 0 | \tilde{\Psi}^{+}(t_{2})\tilde{\Psi}(t_{1})| 0 >$$

$$(I-4-16)$$

$$G^{-+} = G^{>}(t_{1}, t_{2}) = -\frac{i}{\hbar} < 0 | T_{c} [\tilde{\Psi}(t_{1-})\tilde{\Psi}^{+}(t_{2-})] | 0 >$$

$$= -\frac{i}{\hbar} < 0 | \tilde{\Psi}(t_1) \tilde{\Psi}^+(t_2) | 0 >$$
 (I-4-17)

$$G^{++} = G^{c}(t_{1}, t_{2}) = -\frac{i}{\hbar} < 0 | T_{c} [\tilde{\Psi}(t_{1+}) \tilde{\Psi}^{+}(t_{2+})] | 0 >$$

$$= -\frac{i}{\hbar} < 0 | T [\tilde{\Psi}(t_{1}) \tilde{\Psi}^{+}(t_{2})] | 0 >$$
(I-4-18)

$$G^{--} = \tilde{G}^{c}(t_{1}, t_{2}) = -\frac{i}{\hbar} < 0 | T_{c} [\tilde{\Psi}(t_{1-})\tilde{\Psi}^{+}(t_{2-})] | 0 >$$
$$= -\frac{i}{\hbar} < 0 | \hat{T} [\tilde{\Psi}(t_{1-})\tilde{\Psi}^{+}(t_{2-})] | 0 >$$
(I-4-19)

où T est l'opérateur chronologique arrangeant les temps de $-\infty$ à $+\infty$ et \hat{T} est l'opérateur anti-chronologique arrangeant les temps de $+\infty$ à $-\infty$.

En *utilisant les définitions* ci-dessus on peut alors établir les relations suivantes entre ces fonctions [Mahan, 1992] :

$$G^{c}(t_{1},t_{2}) = \theta(t_{1}-t_{2})G^{>}(t_{1},t_{2}) + \theta(t_{2}-t_{1})G^{<}(t_{1},t_{2})$$
(I-4-20)

$$G^{\bar{c}}(t_1, t_2) = \theta(t_1 - t_2)G^{<}(t_1, t_2) + \theta(t_2 - t_1)G^{>}(t_1, t_2)$$
(I-4-21)

où $\theta(t)$ est la fonction de saut vérifiant la relation : [Chou, 1985]

$$\theta(t_1 - t_2) + \theta(t_2 - t_1) = 1 \tag{I-4-22}$$

On peut alors en déduire une relation qui lie ces quatre fonctions : [Landau & Lifchitz T10, 1979; Blandin, 1976]

$$G^{\circ} + G^{\bar{\circ}} = G^{<} + G^{>}$$
 (I-4-23)

Ou encore les relations de conjugaison antihermitiques suivantes :[Landau & Lifchitz T10, 1979]

$$G^{c}(t_{1}, t_{2}) = -(G^{\bar{c}}(t_{2}, t_{1}))^{*}$$
(I-4-24)

$$G^{<}(t_{1}, t_{2}) = -(G^{>}(t_{2}, t_{1}))^{*}$$
 (I-4-25a)

$$G^{>}(t_1, t_2) = -(G^{<}(t_2, t_1))^{T}$$
 (I-4-25b)

On peut définir alors une fonction de Green matricielle de la forme :[Craig, 1968; Chou, 1985; Caroli, 1971b, Rammer, 1986; Mills 1969]

$$G(t_1, t_2) \Rightarrow G = \begin{pmatrix} G^{++} & -G^{+-} \\ G^{-+} & -G^{--} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G^{\circ} & -G^{\circ} \\ G^{\circ} & -G^{\circ} \end{pmatrix}$$
(I-4-26)

où les élements G_{ij} sont choisis de telle sorte que les points (+) correspond aux indices 1 et les points (-) aux indices 2 de la matrice.

Parmi les quatre fonctions définies ci-dessus, il n'y a que deux qui sont indépendantes à savoir $G^{<}$ et $G^{>}$ et elles peuvent même être reliées par l'expression suivante : [Keldysh, 1961; Landau & Lifchitz T10, 1979]

$$[G^{<}(r_{1}t_{1}; r_{2}t_{2}) - G^{>}(r_{1}t_{1}; r_{2}t_{2})] = -i\delta(r_{1}-r_{2})$$
(I-4-27)

La transformation canonique de la matrice G introduit une nouvelle matrice G dont les éléments sont trois nouvelles fonctions de Green : avancée G^A , retardée G^R et fonction de corrélation F:

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{G}^{\mathrm{A}} \\ \mathbf{G}^{\mathrm{R}} & \mathbf{F} \end{pmatrix}$$
(I-4-28)

Les fonctions $G^{<}$, $G^{>}$, G^{c} et $G^{\overline{c}}$, *par définition*, étant reliées par la relation (I-4-23) on peut alors établir les relations suivantes :[Chou, 1985; Caroli, 1971b]

 $G^{A} = G^{c} - G^{>} = G^{<} - G^{\bar{c}}$ (I-4-29)

$$G^{R} = G^{c} - G^{<} = G^{>} - G^{\bar{c}}$$
 (I-4-30)

$$F = G^{c} + G^{\bar{c}} = G^{>} + G^{<}$$
 (I-4-31)

ou encore en utilisant les paires de relations (I-4-30 et I-4-20) et (I-4-29 et I-4-21) respectivement on peut écrire : [Rammer, 1986]

$$G^{R}(t_{1},t_{2}) = -\theta(t_{1}-t_{2}) \left\{ G^{<}(t_{1},t_{2}) - G^{>}(t_{1},t_{2}) \right\}$$
(I-4-32)

$$G^{A}(t_{1},t_{2}) = \theta(t_{2} - t_{1}) \left\{ G^{<}(t_{1},t_{2}) - G^{>}(t_{1},t_{2}) \right\}$$
(I-4-33)

donc nous obtenons trois fonctions et puisque G^A et G^R sont conjuguées hermitiques :[Mahan, 1981]

$$G^{A}(t_{1}, t_{2}) = (G^{R}(t_{2}, t_{1}))^{*}$$
(I-4-34)

il ne reste alors que deux fonctions indépendantes .

Il faut remarquer que la fonction de Green d'un système hors d'équilibre est définie de façon analogue dans le cas d'équilibre . La différence tient à ce que la *valeur moyenne* (désignée par le symbole $< | \dots | >$) est maintenant calculée sur un état quantique quelconque du système et non obligatoirement sur l'état fondamental comme dans le cas de l'état d'équilibre . Dans un système hétérogène hors d'équilibre , la fonction de Green à une particule dépend des deux paires de variables $x_1 = (r_1, t_1)$ et $x_2 = (r_2, t_2)$ séparément et non seulement de leur différence ($x_1 - x_2$) comme dans le cas de l'équilibre [Landau & lifchitz T10, 1979].

I-4-2- Equation de Dyson et Fonction "self-energy"

- Si l'on appelle $G_0(t_1, t_2)$ la fonction de Green *non perturbée* (dans notre cas = en absence d'interaction mais en présence du champ extérieur), en introduisant l'équation de Dyson on peut relier cette fonction à la fonction de Green *perturbée* (= hors d'équilibre en présence d'interactions), $G(t_1, t_2)$:

$$G(t_1, t_2) = G_0(t_1, t_2) + \int_{-\infty}^{+\infty} dt_3 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_4 G_0(t_1, t_3) \Sigma(t_3, t_4) G(t_4, t_2)$$
(I-4-35)

Ces fonctions étant définies sur le contour C , possèdent chacune quatre expressions différentes symbolisées par les notations : <, >, c, \overline{c} . On peut alors en utilisant les notations matricielles

donner une expression *condensée* de l'équation intégrale de Dyson où le produit de deux fonctions implique une intégration sur les variables t_3 et t_4 :

$$G = G_0 + G_0 \Sigma G \tag{I-4-36}$$

où Σ (t₁, t₂) représente la fonction "self-energy" traduisant les différents types d'interaction dans le système. Etant définie sur le contour C, la grandeur Σ possède donc quatre composantes différentes comme G(t₁,t₂) et on peut l'écrire sous forme matricielle suivante :

$$\Sigma(t_1, t_2) \implies \varSigma = \begin{pmatrix} \Sigma^{\circ} & -\Sigma^{<} \\ \Sigma^{>} & -\Sigma^{\bar{\circ}} \end{pmatrix}$$
(I-4-37)

Les différents élements de cette matrice sont liés par :

$$\Sigma^{c}(t_{1},t_{2}) = \left[\theta(t_{1}-t_{2}) \Sigma^{>}(t_{1},t_{2}) + \theta(t_{2}-t_{1}) \Sigma^{<}(t_{1},t_{2})\right]$$
(I-4-38)

$$\Sigma^{\bar{c}}(t_1, t_2) = \left[\theta(t_2 - t_1) \ \Sigma^{>}(t_1, t_2) + \theta(t_1 - t_2) \ \Sigma^{<}(t_1, t_2)\right]$$
(I-4-39)

En utilisant l'équation de Dyson (I-4-35) et la *condition* (I-4-23) on peut démontrer la relation suivante qui lie les quatre fonctions "self-energy" $\Sigma^{<}$, $\Sigma^{>}$, Σ° , Σ° et qui satisfait les deux relations ci-dessus : [Landau T10, 1979]

$$\Sigma^{c} + \Sigma^{\overline{c}} = (\Sigma^{>} + \Sigma^{<})$$
 (I-4-40)

ou encore après une transformation canonique sur Σ réduisant le nombre de fonctions indépendantes celle-ci devient : [Caroli, 1971a, Landau & Lifchitz T 10, 1979]

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \Omega & \Sigma^{R} \\ \Sigma^{A} & 0 \end{pmatrix}$$
(I-4-41)

En utilisant la relation (I-4-40) qui lie les quatre fonctions "self-energy" on peut aussi établir les relations suivantes :

$$\Sigma^{R} = \Sigma^{\circ} - \Sigma^{<} = \Sigma^{>} - \Sigma^{\overline{\circ}}$$
(I-4-42)

$$\Sigma^{A} = \Sigma^{c} - \Sigma^{>} = \Sigma^{<} - \Sigma^{\overline{c}}$$
(I-4-43)

$$\Omega = \Sigma^{c} + \Sigma^{\overline{c}} = \Sigma^{>} + \Sigma^{<}$$
(I-4-44)

En outre en utilisant des paires de relations (I-4-38 et I-4-42) et (I-4-39 et I-4-43) respectivement on peut montrer que :

$$\Sigma^{\mathbb{R}}(t_1, t_2) = \theta(t_1 - t_2) \left\{ \Sigma > (t_1, t_2) - \Sigma^{<}(t_1, t_2) \right\}$$
(I-4-45)

$$\Sigma^{A}(t_{1},t_{2}) = \theta(t_{2}-t_{1}) \left\{ \Sigma^{<}(t_{1},t_{2}) - \Sigma^{>}(t_{1},t_{2}) \right\}$$
(I-4-46)

avec la relation de conjugaison hermitique donnée par :

$$\Sigma^{R}(t_{1},t_{2}) = \left(\Sigma^{A}(t_{2},t_{1})\right)^{*}$$
(I-4-47)

En comparant les relations (I-4-29) à (I-4-32) et (I-4-42) à (I-4-44) correspondant respectivement aux élements des matrices **G** et Σ , on constate que l'emplacement des fonctions *avancées* et *retardées* ainsi que F et Ω est interchangé. Ceci vient du fait que les quantités $\Sigma^{<,>}$ contrairement aux fonctions Σ^{c} et $\Sigma^{\bar{c}}$ possèdent un facteur (-1).

La nouvelle représentation de l'équation de Dyson lors de cette transformation canonique nous permet d'en définir les différentes composantes [Blandin, 1976] :

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}_0 + \mathbf{G}_0 \Sigma \mathbf{G}$$
 (I-4-48)

donc :

$$G^{R} = G_{0}^{R} + G_{0}^{R} \sum^{R} G^{R}$$
(I-4-49)

$$G^{A} = G_{0}^{A} + G_{0}^{A} \Sigma^{A} G^{A}$$
(I-4-50)

$$F = F_0 + G_0^R \Omega G^A + F_0 \Sigma^A G^A + G_0^R \Sigma^R F$$
 (I-4-51)

Par conséquent nous obtenons trois équations mais le nombre d'équations indépendantes est en réalité égal à deux puisque les fonctions G^A et G^R sont conjuguées hermitiques et l'équation pour l'une peut être obtenue à partir de l'autre . La signification physique de G^R et F est bien différente. En effet d'une manière générale G^A et G^R caractérisent les propriétés dynamiques des particules du système considéré tandis que F caractérise leur distribution statistique. Lors de la prise en compte des interactions, les fonctions G^A et G^R , dépendent indirectement de la distribution des particules, mais le fait que $G^{<,>}(t_1,t_2)$ et $F(t_1,t_2)$ pris aux instants coïncidents $t_1 = t_2$ déterminent la distribution des particules, découle directement de leurs définitions. On peut donc dire que les fonctions F et $G^{<,>}$ représentent essentiellement la fonction de distribution pour les particules, écrites sous différentes formes. [Keldysh, 1961] Pour compléter notre exposé des diverses relations entre les différentes fonctions de Green il est

rour completer notre expose des diverses relations entre les differentes fonctions de Green il est intéressant d'établir certaines *relations intégrales* en utilisant les notations de Langreth [1972;1976], dans lesquelles le produit de fonctions représente des intégrales multiples sur des variables intermédiaires en r et t.

En remplaçant les diverses matrices correspondantes dans la relation (I-4-36) on peut écrire :

$$G^{c} = G_{0}^{c} + G_{0}^{c} \left[\Sigma^{c} G^{c} - \Sigma^{<} G^{>} \right] - G_{0}^{<} \left[\Sigma^{>} G^{c} - \Sigma^{\overline{c}} G^{>} \right]$$
(I-4-52)

$$G^{<} = G_{0}^{<} + G_{0}^{c} \left[\Sigma^{c} G^{<} - \Sigma^{<} G^{\overline{c}} \right] - G_{0}^{<} \left[\Sigma^{>} G^{<} - \Sigma^{\overline{c}} G^{\overline{c}} \right]$$
(I-4-53)

$$G^{>} = G_{0}^{>} + G_{0}^{>} \left[\Sigma^{c} G^{c} - \Sigma^{<} G^{>} \right] - G_{0}^{\overline{c}} \left[\Sigma^{>} G^{c} - \Sigma^{\overline{c}} G^{>} \right]$$
(I-4-54)

$$G^{\overline{c}} = G_0^{\overline{c}} + G_0^{>} \left[\Sigma^c G^{<} - \Sigma^{<} G^{\overline{c}} \right] - G_0^{\overline{c}} \left[\Sigma^{>} G^{<} - \Sigma^{\overline{c}} G^{\overline{c}} \right]$$
(I-4-55)

En utilisant la propriété de commutation entre opérateurs dans la relation (I-4-48) :

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}_0 + \mathbf{G}_0 \Sigma \mathbf{G} = \mathbf{G}_0 + \mathbf{G} \Sigma \mathbf{G}_0$$
 (I-4-56)

et en tenant compte du fait que :

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}_0 + \mathbf{G} \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{G}_0 = (1 + \mathbf{G} \boldsymbol{\Sigma}) \mathbf{G}_0$$

On obtient alors :

$$\mathbf{G}_{0} = (1 + \mathbf{G} \Sigma)^{-1} \mathbf{G}$$
 (I-4-57)
On peut alors modifier l'écriture des expressions (I-4-52 à 55). A l'aide des relations (I-4-29 à 31), (I-4-42 à 44) et (I-4-49 à 51) on a alors :

$$G^{c} = \left[1 + G^{R} \Sigma^{R}\right] G_{0}^{c} \left[1 + \Sigma^{A} G^{A}\right] + G^{R} \Sigma^{\overline{c}} G^{A}$$
(I-4-58)

$$\mathbf{G}^{<} = \left[1 + \mathbf{G}^{\mathsf{R}} \Sigma^{\mathsf{R}}\right] \mathbf{G}_{0}^{<} \left[1 + \Sigma^{\mathsf{A}} \mathbf{G}^{\mathsf{A}}\right] + \mathbf{G}^{\mathsf{R}} \Sigma^{<} \mathbf{G}^{\mathsf{A}}$$
(I-4-59)

$$\mathbf{G}^{>} = \left[1 + \mathbf{G}^{\mathsf{R}} \Sigma^{\mathsf{R}}\right] \mathbf{G}_{0}^{>} \left[1 + \Sigma^{\mathsf{A}} \mathbf{G}^{\mathsf{A}}\right] + \mathbf{G}^{\mathsf{R}} \Sigma^{>} \mathbf{G}^{\mathsf{A}}$$
(I-4-60)

$$G^{\bar{c}} = \left[1 + G^{R} \Sigma^{R}\right] G^{\bar{c}}_{0} \left[1 + \Sigma^{A} G^{A}\right] + G^{R} \Sigma^{c} G^{A}$$
(I-4-61)

Dans le cas d'un système homogène en régime stationnaire les arguments des fonctions de Green et des self-energies dans ces équations dépendent seulement de la différence (x_1-x_2) et leur transformée de Fourier dépend seulement de (k,ω) . Ces équations après la transformée de Fourier ne sont que des quantités algébriques qui peuvent facilement être résolues. Différents auteurs ont déjà étudié ce type de système et le lecteur peut se référer aux travaux de G.D.Mahan (1987) pour de plus amples informations.

I-5 - Obtention de l'équation de transport quantique

Dans le paragraphe 2, nous avons vu que $G^{<}$ (ou $G^{>}$) permet de calculer les quantités macroscopiques mesurables qui nous intéressent telles que la densité de courant J(r), la densité de charges n(r). Par conséquent il nous faut d'abord calculer $G^{>}$ ou $G^{<}$ afin d'accéder aux informations recherchées. Or ces deux fonctions étant liées par la relation (I-4-25 a,b), nous n'avons alors besoin que de calculer l'une d'entre elles et d'en déduire la deuxième. Nous allons donc dans la suite présenter une équation cinétique de transport permettant de calculer $G^{<}$ qui est une fonction de corrélation contenant les informations concernant la densité de courant et la densité de particules.

Nous avons vu que pour un système en équilibre ou hors d'équilibre, l'équation de Dyson s'écrit sous forme matricielle suivante :

$$G(x_1, x_2) = G_0(x_1, x_2) + \int_{-\infty}^{+\infty} dx_3 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_4 G_0(x_1, x_3) \Sigma(x_3, x_4) G(x_4, x_2)$$

où x = (r, t)

Considérons une structure arbitraire dans laquelle la propagation des électrons est décrite par un Hamiltonien monoélectronique de la forme :

$$H_0(x) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + e \upsilon(x)$$
 (I-5-1)

où m^{*} est la masse effective. Le potentiel scalaire v(x) contient le potentiel de Hartree obtenu à partir d'une solution " self-consistent " de l'équation de Poisson . Il inclut la courbure des bandes due aux effets de charges d'espace et le potentiel extérieur , la discontinuité des bandes due aux hétérojonctions ainsi que toutes les sources de diffusion élastique telles les impuretés , les défauts et les effets de frontières .

En utilisant la propriété suivante : [Mahan,1987]

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0(x)) G(x) = \delta^4(x)I = \delta^3(r)\delta(t)I$$
 (I-5-2)

où I est la matrice unité ; faisons agir l'opérateur $\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - H_0(x_1)\right]$ sur les deux membres de l'équation de Dyson :

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t_{1}} - H_{0}(x_{1})\right]G(x_{1},x_{2}) = \delta^{4}(x_{1}-x_{2})I + \int_{-\infty}^{+\infty} dx_{3}\left[\Sigma(x_{1},x_{3})G(x_{3},x_{2})\right] \quad (I-5-3)$$

Les deux composantes nécessaires de la matrice G pour le développement de l'équation de transport sont $G^{<}$ et G^{R} . En utilisant les paires de relations (I-4-25 et I-4-38) pour $G^{<}$ et (I-4-27 et I-4-41) pour G^{R} les équations respectives s'écrivent alors :

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t_{1}} - H_{0}(x_{1})\right]G^{<}(x_{1},x_{2}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_{3}\left[\sum^{c}(x_{1},x_{3})G^{<}(x_{3},x_{2}) - \sum^{<}(x_{1},x_{3})G^{\bar{c}}(x_{3},x_{2})\right]$$
(I-5-4)

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1} - H_0(x_1)\right]G^R(x_1, x_2) = \delta^4(x_1 - x_2) + \int_{-\infty}^{+\infty} dx_3\left[\sum^R(x_1, x_3)G^R(x_3, x_2)\right]$$
(I-5-5)

L'équation (I-5-4) est une équation cinétique intégro-différentielle générale de transport quantique pour le propagateur $G^{<}$. Sa résolution ne peut se faire que de façon "self-consistent" puisque $G^{<}$ intervient aussi au second membre. Or ceci complique extrêmement la résolution de cette équation qui dépend de la forme des fonctions "self-energy".

En effet en utilisant les relations (I-4-29) et (I-4-34)), on peut faire apparaître uniquement G^R dans le noyau de l'intégrale (I-5-4).

Le calcul préalable de G^R à partir de (I-5-5) permet donc le calcul de $G^{<}$ par résolution de (I-5-4).

Jusqu'ici nous n'avons fait aucune approximation et les expressions ci-dessus et en particulier (I-5-4) et (I-5-5) sont *exactes*. Mais pour pouvoir traiter les termes de diffusion nous serons alors obligés de faire des *approximations sur les fonctions "self-energy"*, pour faciliter la tâche de résolution.

A partir du formalisme général de Keldysh, nous développons dans ce travail deux modèles ou deux méthodes qui ont été présentées dans la littérature sous des formes diverses.

Partant de l'équation générale (I-5-4), étant donné la complexité du traitement des termes de son second membre, pour la première méthode en supposant le transport balistique nous allons omettre les termes "self-energy" traduisant les effets de diffusion et d'interaction au second membre. Puis en utilisant la relation qui lie $G^{<}$ à la fonction de distribution de Wigner par une transformation de Weyl, on établira l'équation de transport pour la fonction de Wigner f (R, k). La résolution de cette équation nous permettra par la suite d'obtenir J(r) et n(r) à partir de f (R, k). Cette méthode est plutôt connue sous le nom de formalisme de Wigner et l'étude des interactions dans ce formalisme est faite de façon phénoménologique par l'introduction d'un terme approprié.

Dans la deuxième méthode qu'on appellera le *modèle de fonctions "self-energy" locales* nous allons développer les termes sous intégrale du 2nd membre de (I-5-4). En supposant une forme explicite pour les fonctions "self-energy" et tenant compte de la relation qui lie la fonction de corrélation $G^{<}$ à G^{A} on établira une équation pour G^{R} qui tenant compte des interactions nous permettra de calculer directement les quantités physiquement mesurables. L'avantage de cette méthode par rapport à la première réside dans le fait que l'on travaille avec des variables position-energie au lieu des variables position-moment afin d'éviter les contraintes du principe d'incertitude d'Heisenberg.

I-6- Conclusion

Dans ce chapitre après avoir rappelé les limitations de l'approche classique du phénomène de transport par l'équation de Boltzmann nous avons exposé le traitement de ce phénomène par les fonctions de Green.

Nous avons défini les fonctions de Green à l'équilibre, leurs transformées, et leurs propriétés concernant les quantités physiques mesurables. Par la suite nous avons présenté le *Formalisme de Keldysh* pour le traitement des *processus hors d'équilibre* et défini les différentes fonctions de Green du *contour chronologique* et les relations qui les lient. Et enfin nous avons établi l'expression d'une équation cinétique de transport pour la fonction de Green $G^{<}$.

Etant donné les difficultés rencontrées lors de la résolution de cette équation intégro-différentielle, pour la suite de ce travail nous exposerons deux modèles différents pour traiter les systèmes hétérogènes et hors d'équilibre en nous limitant au cas du *régime statique*.

Dans le chapitre 2 concernant la première méthode que nous appellerons le Formalisme de Wigner, en supposant le transport balistique, nous allons omettre tous les termes de diffusion et donc par-là le second membre de l'équation cinétique de transport pour $G^{<}$. En utilisant la relation qui lie la fonction de corrélation $G^{<}$ à la fonction de distribution de Wigner nous établissons une équation de transport pour celle-ci dont la résolution nous permettra de calculer les densités de charge et de courant.

Le troisième chapitre est ensuite consacré à l'exposition de la deuxième méthode appelée le *modèle* des fonctions "self-energy" locales du traitement hors d'équilibre . En faisant quelques approximations sur la forme des fonctions "self-energy" nous allons alors calculer les termes du second membre et en profitant de la relation qui lie $G^{<}$ et G^{R} , résoudre l'équation pour G^{R} et en déduire directement les quantités physiques recherchées n(r) et J(r).

CHAPITRE II

Formalisme de Wigner

Chapitre II

Formalisme de Wigner

II-1- Introduction

- Dans le précédent chapitre nous avons introduit une équation cinétique intégro-différentielle générale de transport quantique pour $G^{<}$. Dans ce chapitre en supposant le *transport balistique* nous allons *omettre* les termes de diffusion ou d'interaction au second membre de cette équation.

Dans le but d'établir une équation de transport pour la fonction de distribution de Wigner, dans une première étape nous présentons une équation balistique pour la fonction de Green $G^{<}$ puis en montrant la relation entre la fonction de distribution de Wigner f (R,k,T), et cette fonction on va établir l'équation de transport pour f (R,k,T) et la possibilité d'en déduire les différentes quantités physiques mesurables telles J(r), n(r). Ces équations étant tridimensionnelles et fonctions du temps, donc à priori difficiles à traiter dans cet état, nous allons alors pour la suite du travail nous consacrer à l'étude d'un *modèle unidimensionnel* en *régime statique*.

En appliquant ce modèle au *transport perpendiculaire*, nous présentons en bref la description et le fonctionnement des hétérostructures et la raison du choix d'une application à une diode à effet tunnel résonnant constituée d'un système à double barrière de potentiel. Puis nous discutons des conditions aux limites et du traitement des contacts. Ensuite nous exposons une méthode pour la discrétisation du problème et l'obtention des équations discrétisées.

En étudiant ce système en régime statique nous verrons l'influence des différents paramètres sur le rapport des courants pic et vallée tels que la largeur des barrières et la température.

Enfin, nous concluons sur les limitations de ce formalisme et sur ses apports ou ses avantages par rapport à l'étude des systèmes quantiques par l'équation de Schrödinger et le calcul des

fonctions d'ondes. Nous expliquons ensuite les raisons qui nous amènent à rechercher une méthode plus fiable pour l'étude des systèmes quantiques et à utiliser le modèle de *fonctions self-énergies locales* dans le chapitre suivant.

II-2 - <u>Equation de transport pour la fonction de distribution de</u> <u>Wigner</u>

II-2-1- <u>Recherche de l'équation pour G</u><

- En négligeant les effets d'interaction traduits par les termes selfénergies Σ au 2nd membre de l'équation générale de transport [I-5-4] nous avons :

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1} - H_0(x_1)\right]G^{<}(x_1, x_2) = 0$$
 (II-2-1)

d'une manière semblable pour la variable $x_2 = (r_2, t_2)$ on a :

$$\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial t_2} - H_0(x_2)\right]G^{<}(x_1, x_2) = 0$$
 (II-2-2)

La soustraction de ces deux relations nous permet d'écrire :

$$\left[i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t_1}+\frac{\partial}{\partial t_2}\right)-H_0(x_1)+H_0(x_2)\right]G^{<}(x_1,x_2)=0$$

Dans le cas général d'une masse effective variable on peut expliciter les Hamiltoniens par [P. Enders, 1987; Schrödinger, 1926]:

$$H_0(x_1) = H_0(r_1, t_1) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial r_1} \left(\frac{1}{m(r_1)} \frac{\partial}{\partial r_1} \right) + \upsilon(r_1, t_1)$$
(II-2-3)

$$H_0(\mathbf{x}_2) = H_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{t}_2) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2} \left(\frac{1}{\mathbf{m}(\mathbf{r}_2)} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2} \right) + \upsilon(\mathbf{r}_2, \mathbf{t}_2)$$
(II-2-4)

où $\upsilon(r_1,t_1)$ et $\upsilon(r_2,t_2)$ représentent les effets du potentiel extérieur appliqué et du potentiel cristallin ΔE_c .

donc :

$$\left[i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t_{1}}+\frac{\partial}{\partial t_{2}}\right)-\frac{\hbar^{2}}{2}\left\{\frac{\partial}{\partial r_{1}}\left(\frac{1}{m(r_{1})}\frac{\partial}{\partial r_{1}}\right)-\frac{\partial}{\partial r_{2}}\left(\frac{1}{m(r_{2})}\frac{\partial}{\partial r_{2}}\right)\right\}-e\left[\upsilon(r_{1},t_{1})-\upsilon(r_{2},t_{2})\right]\right]G^{<}(r_{1}t_{1},r_{2}t_{2})=0$$
(II-2-5)

soit en utilisant la transformée de Weyl (ou Wigner-Weyl) [Moyel, 1949; Levinson, 1970; Balescu, 1975]

| $r = r_1 - r_2$ | | $\int t = t_1 - t_2$ |
|--|-----|---|
| $\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r_1} + \mathbf{r_2}}{\mathbf{r_1} + \mathbf{r_2}}$ | • • | $\begin{cases} T = \frac{t_1 + t_2}{t_1 + t_2} \end{cases}$ |
| 2 | | l ¹ 2 |

;

ainsi :

$$\begin{cases} r_1 = \mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2} \\ r_2 = \mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2} \end{cases}$$

$$\nabla_{1} = \frac{\partial}{\partial r_{1}} = \frac{\partial}{\partial R} \frac{\partial R}{\partial r_{1}} + \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial r_{1}}$$

$$= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial R} + \frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{2} \nabla_{R} + \nabla_{r}$$

$$;$$

$$\nabla_{2} = \frac{\partial}{\partial r_{2}} = \frac{\partial}{\partial R} \frac{\partial R}{\partial r_{2}} + \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial r_{2}}$$

$$= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial R} - \frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{2} \nabla_{R} - \nabla_{r}$$

 $\begin{cases} t_1 = T + \ \frac{t}{2} \\ t_2 = T - \ \frac{t}{2} \end{cases}$

$$\frac{\partial}{\partial t_1} = \frac{\partial}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t_1} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial T} \qquad ; \qquad \qquad \frac{\partial}{\partial t_2} = \frac{\partial}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t_2} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial T}$$

:
$$\left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\partial}{\partial t_2}\right) = \frac{\partial}{\partial T}$$

d'où par substitution et en posant :

$$\frac{1}{m^{-}(R,r)} = \left(\frac{1}{m(R+\frac{r}{2})} - \frac{1}{m(R-\frac{r}{2})}\right)$$
(II-2-6)

$$\frac{1}{m^{+}(R,r)} = \left(\frac{1}{m(R+\frac{r}{2})} + \frac{1}{m(R-\frac{r}{2})}\right)$$
(II-2-7)

on obtient alors :

$$\begin{split} \left[i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial T}\right) &= -\frac{\hbar^{2}}{2} \left\{ \frac{1}{4} \left(\frac{\partial}{\partial R} \frac{1}{m^{-}(R,r)}\right) \frac{\partial}{\partial R} + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{m^{-}(R,r)}\right) \frac{\partial^{2}}{\partial R^{2}} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial R} \frac{1}{m^{+}(R,r)}\right) \frac{\partial}{\partial r} + \right. \\ &+ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m^{+}(R,r)}\right) \frac{\partial}{\partial R} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial r} \frac{1}{m^{+}(R,r)}\right) \frac{\partial}{\partial R} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m^{+}(R,r)}\right) \frac{\partial}{\partial R} \frac{\partial}{\partial r} + \\ &+ \left(\frac{\partial}{\partial r} \frac{1}{m^{-}(R,r)}\right) \frac{\partial}{\partial r} + \left(\frac{1}{m^{-}(R,r)}\right) \frac{\partial^{2}}{\partial r^{2}} \right\} - e \left[\upsilon(R + \frac{r}{2}; T + \frac{r}{2}) - \upsilon(R - \frac{r}{2}; T - \frac{t}{2})\right] \right] G^{<}(R,r;t,T) \\ &\left. \{II-2-8\} \right\} \end{split}$$

Par ailleurs on peut écrire :

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{m^{-}(\mathbf{R},\mathbf{r})} \right) = \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{m(\mathbf{r}_{1})} - \frac{1}{m(\mathbf{r}_{2})} \right) = \frac{\partial}{\partial r_{1}} \frac{\partial r_{1}}{\partial r} \left(\frac{1}{m(\mathbf{r}_{1})} \right) - \frac{\partial}{\partial r_{2}} \frac{\partial r_{2}}{\partial r} \left(\frac{1}{m(\mathbf{r}_{2})} \right)$$

$$= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial r_{1}} \frac{1}{m(\mathbf{r}_{1})} + \frac{\partial}{\partial r_{2}} \frac{1}{m(\mathbf{r}_{2})} \right]$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \left(\frac{1}{m^{+}(\mathbf{R},\mathbf{r})} \right) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \left(\frac{1}{m(\mathbf{r}_{1})} + \frac{1}{m(\mathbf{r}_{2})} \right) = \frac{\partial}{\partial r_{1}} \frac{\partial r_{1}}{\partial \mathbf{R}} \left(\frac{1}{m(\mathbf{r}_{1})} \right) - \frac{\partial}{\partial r_{2}} \frac{\partial r_{2}}{\partial \mathbf{R}} \left(\frac{1}{m(\mathbf{r}_{2})} \right)$$

$$= \left[\frac{\partial}{\partial r_{1}} \frac{1}{m(\mathbf{r}_{1})} + \frac{\partial}{\partial r_{2}} \frac{1}{m(\mathbf{r}_{2})} \right]$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\frac{1}{m^{-}(\mathbf{R},\mathbf{r})} \right) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \left(\frac{1}{m^{+}(\mathbf{R},\mathbf{r})} \right)$$
(II-2-9)

d'où :

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\frac{1}{\mathbf{m}^{-}(\mathbf{R},\mathbf{r})} \right) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \left(\frac{1}{\mathbf{m}^{+}(\mathbf{R},\mathbf{r})} \right)$$
(II-2-9)

De la même manière on peut démontrer que :

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{m^{+}(\mathbf{R}, \mathbf{r})} \right) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \left(\frac{1}{m^{-}(\mathbf{R}, \mathbf{r})} \right)$$
(II-2-10)

ce qui nous permet d'écrire; en divisant les deux membre par in :

$$\left[\left(\frac{\partial}{\partial T} \right) + \frac{\hbar}{2i} \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial R} \frac{1}{m^{-}(R,r)} \right) \frac{\partial}{\partial R} + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{m^{-}(R,r)} \right) \frac{\partial^{2}}{\partial R^{2}} + \left(\frac{\partial}{\partial R} \frac{1}{m^{+}(R,r)} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \left(\frac{1}{m^{+}(R,r)} \right) \frac{\partial}{\partial R} \frac{\partial}{\partial r} + \left(\frac{1}{m^{-}(R,r)} \right) \frac{\partial^{2}}{\partial r^{2}} \right\} - e \left[\upsilon \left(R + \frac{r}{2}; T + \frac{r}{2} \right) - \upsilon \left(R - \frac{r}{2}; T - \frac{t}{2} \right) \right] \right] G^{<}(R,r;t,T) = 0$$

En utilisant les propriétés de transformée de Fourier d'une *dérivée* et d'un *produit* de deux fonctions, la transformée de Fourier des deux membres de cette équation par rapport à la variable " r " nous donne l'équation de transport pour la fonction $G^{\leq}(R,k,t,T)$:

$$\frac{\partial}{\partial T}G^{<}(\mathbf{R},\mathbf{k};\mathbf{t},T) = \hbar \int \frac{d\mathbf{k}'}{8\pi} \mathbf{M}_{1}(\mathbf{R},\mathbf{k}-\mathbf{k}')\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}G^{<}(\mathbf{R},\mathbf{k}';\mathbf{t},T) - \hbar \int \frac{d\mathbf{k}'}{4\pi} \mathbf{k}' \mathbf{M}_{2}(\mathbf{R},\mathbf{k}-\mathbf{k}')G^{<}(\mathbf{R},\mathbf{k}';\mathbf{t},T) + \hbar \int \frac{d\mathbf{k}'}{16\pi} \mathbf{M}_{3}(\mathbf{R},\mathbf{k}-\mathbf{k}') \left[\frac{\partial^{2}}{\partial \mathbf{R}^{2}} - 4\mathbf{k}'^{2}\right] G^{<}(\mathbf{R},\mathbf{k}';\mathbf{t},T) - \hbar \int \frac{d\mathbf{k}'}{4\pi} \mathbf{k}' \mathbf{M}_{4}(\mathbf{R},\mathbf{k}-\mathbf{k}')\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} G^{<}(\mathbf{R},\mathbf{k}';\mathbf{t},T) - \frac{1}{\hbar} \int \frac{d\mathbf{k}'}{2\pi} \mathbf{V}(\mathbf{R},\mathbf{k}-\mathbf{k}';\mathbf{t},T) G^{<}(\mathbf{R},\mathbf{k}';\mathbf{t},T)$$
(II-2-11)

où les noyaux sont définis par les relations suivantes :

$$M_{1}(\mathbf{R},\mathbf{k}-\mathbf{k}') = 2\int_{0}^{\infty} d\mathbf{r} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \left(\frac{1}{\mathbf{m}^{-}(\mathbf{R},\mathbf{r})}\right) \sin\left[(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}\right]$$
(II-2-12a)

$$M_{2}(\mathbf{R},\mathbf{k}-\mathbf{k}') = 2\int_{0}^{\infty} d\mathbf{r} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \left(\frac{1}{\mathbf{m}^{+}(\mathbf{R},\mathbf{r})}\right) \cos[(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}]$$
(II-2-12b)

$$M_{3}(R, k-k') = 2\int_{0}^{\infty} dr \left(\frac{1}{m^{-}(R, r)}\right) \sin[(k-k')r]$$
(II-2-12c)

$$M_{4}(R, k-k') = 2\int_{0}^{\infty} dr \left(\frac{1}{m^{+}(R, r)}\right) \sin[(k-k')r]$$
(II-2-12d)

$$V(R, k - k') = 2 \int_0^\infty dr \left[\upsilon \left(R + \frac{r}{2}; T + \frac{t}{2} \right) - \upsilon \left(R - \frac{r}{2}; T - \frac{t}{2} \right) \right] \sin[(k - k')r] \quad (II-2-12e)$$

Il s'agit d'une équation de transport *balistique dépendante du temps*, avec la prise en compte de la variation de la masse effective. Ces résultats correspondent bien à ceux établis par Tsuchiya [Tsuchiya, 1991].

II-2-2- <u>Relation entre G[<]et la fonction de distribution de Wigner</u>

Dans une description classique ou semi-classique du transport on suppose que la position et la vitesse (ou le moment) d'une particule peuvent être définies simultanément et l'équation de Boltzmann est exprimée en termes de la fonction de distribution f(r,v,t). Par suite du principe d'incertitude cette fonction n'a pas d'équivalent quantique directe et il est nécessaire de prendre une certaine moyenne (coarse grain averaging) afin d'enlever les effets dues au principe d'incertitude d'Heisenberg. La technique permettant ceci avait d'abord été suggérée par Wigner et la fonction de distribution résultante est appelée la fonction de distribution de Wigner $f(k,\omega; r,t)$ [Wigner, 1932; Mahan, 1987].

Par ailleurs $G^{<}$ étant proportionnelle à une densité de particules, elle a donc le caractère d'une fonction de distribution. On peut alors obtenir la fonction de distribution de Wigner à partir de $G^{<}$. La transformée de Fourier de $G^{<}$ (R,r;t,T) par rapport aux variables relatives r et t nous donne :

$$G^{<}(\mathbf{R},\mathbf{k};\varepsilon,\mathbf{T}) = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{t} \ e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r}-(\varepsilon/\hbar)\mathbf{t})} \left[G^{<}(\mathbf{R},\mathbf{r};\mathbf{t},\mathbf{T})\right]$$
(II-2-13)

Cette fonction peut être considérée comme la densité de particules ayant le vecteur d'onde k et l'énergie ε au point R,T. La fonction de distribution de Wigner f(R,k,T) peut être définie par la relation suivante :

$$f(\mathbf{R},\mathbf{k},\mathbf{T}) = \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \left[i \ \mathbf{G}^{<}(\mathbf{R},\mathbf{k};\varepsilon,\mathbf{T}) \right]$$
(II-2-14)

A partir de (II-2-11), l'équation de transport pour la fonction de distribution de Wigner dans le cas d'une masse effective variable s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T} f(\mathbf{R},\mathbf{k};T) &= \hbar \int \frac{d\mathbf{k}'}{8\pi} M_1(\mathbf{R},\mathbf{k}-\mathbf{k}') \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} f(\mathbf{R},\mathbf{k}';T) \\ &- \hbar \int \frac{d\mathbf{k}'}{4\pi} \mathbf{k}' M_2(\mathbf{R},\mathbf{k}-\mathbf{k}') f(\mathbf{R},\mathbf{k}';T) \\ &+ \hbar \int \frac{d\mathbf{k}'}{16\pi} M_3(\mathbf{R},\mathbf{k}-\mathbf{k}') \left[\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}^2} - 4\mathbf{k}'^2 \right] f(\mathbf{R},\mathbf{k}';T) \\ &- \hbar \int \frac{d\mathbf{k}'}{4\pi} \mathbf{k}' M_4(\mathbf{R},\mathbf{k}-\mathbf{k}') \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} f(\mathbf{R},\mathbf{k}';T) \\ &- \frac{1}{\hbar} \int \frac{d\mathbf{k}'}{2\pi} V(\mathbf{R},\mathbf{k}-\mathbf{k}';t,T) f(\mathbf{R},\mathbf{k}';T) \end{aligned}$$
(II-2-15)

Dans le cas où l'on néglige la variation de la masse effective : $m(r_1) = m(r_2) = m^*$; les termes $M_1(R,k-k')$, $M_2(R,k-k')$, et $M_3(R,k-k')$, s'annulent et $M_4(R,k-k')$ devient égal à $(4\pi/m^*).\delta(k-k')$, où $\delta(k-k')$ est la fonction delta de Dirac, et m* la masse effective . L'équation ci-dessus dans ce cas se réduit alors à l'équation *conventionnelle* de transport suivante :

$$\left\{\hbar\frac{\partial}{\partial T} + \frac{\hbar}{m^*}k\nabla_R\right\}f(R,k;T) + \frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dk'}{2\pi}V(R,k-k';T)f(R,k';T) = 0 \quad (\text{II-2-16})$$

La fonction de Wigner, f(R,k,T) est une fonction *réelle* et de façon similaire à la fonction de distribution classique, elle permet de calculer les quantités macroscopiques densité de particules et densité de courant. En effet en intégrant membre à membre (II-2-15), par rapport à k on obtient l'équation de conservation du nombre de particules, ce qui permet de définir :

a) La densité de particules :

$$n(R,T) = \int \frac{dk}{2\pi} f(R,k;T)$$
 (II-2-17)

b) La densité de courant

$$J(R,T) = e \int \frac{dk}{2\pi} \frac{\hbar k}{m(R)} f(R,k;T) \qquad (II-2-18)$$

c) Le nombre de particules de caractéristiques (k,T)

$$N(k,T) = \int dR f(R,k;T)$$
 (II-2-19)

II-2-3- <u>Remarques</u>

Solution de voir emarquons au passage que la fonction de Wigner peut être reliée à la matrice de densité. L'équation de transport correspondante est obtenue à partir de transformée de Weyl de l'équation de mouvement de Von Neumann pour la *matrice de densité*. On aboutit à l'équation de Liouville quantique [Frensley,1987]. Mais contrairement à la matrice de densité , la fonction de distribution de Wigner ne peut pas être considérée comme l'analogue quantique de la fonction de distribution classique puisqu'elle n'est généralement pas définie positive. Autrement dit elle peut prendre des valeurs négatives dans l'espace des phases là où il y a des interférences quantiques .

Bien que la fonction de distribution de Wigner (FDW) soit réelle, elle n'est pas une densité de probabilité mais plutôt une *quasi probabilité*.

 $rac{1}{5}$ D'autre part on peut remarquer que la différence entre G[<] et la FDW réside dans le fait que la FDW est définie comme fonction de deux positions et un temps tandis que la fonction de Green G[<] est fonction de deux positions et deux temps , c'est à dire G[<] (r₁t₁, r₂t₂) ou G[<] (r,t; R,T) en coordonnées du centre de masse.

De plus puisque $G^{<}$ est une fonction de corrélation , la fonction de Wigner incorpore donc automatiquement toutes les corrélations spatiales .

 \clubsuit Le changement de coordonnées que nous avons introduit par la *transformation de Weyl* consiste à changer les coordonnées indépendantes (r_1 , r_2), en coordonnées diagonale R et antidiagonale r. Ce type de changement est aussi, par certains auteurs appelé changement en *coordonnées de masse* et R représente les coordonnées de *centre de masse* et r les *coordonnées relatives*. Cette terminologie créant une fausse impression de traiter un problème à deux corps, nous avons alors retenu l'usage du terme " transformé de Weyl ".

Il faut noter de plus que la fonction f(R;k) peut être paradoxalement non nulle dans une région où les fonctions d'ondes et la densité de probabilité sont nulles. Ceci est inévitable lorsque les électrons résident dans une région concave, comme illustré sur la figure ci-dessous [Kriman & al, 1991]



Illustration de la nature non locale de la fonction de Wigner. Pour un électron confiné dans une région convexe (région hachurée), il y a des points hors du domaine d'occupation pour lesquels la fonction de Wigner paraît être non nulle. Ces points correspondent aux coordonnées du centre de masse de l'électron

A titre indicatif il peut être utile d'exprimer la fonction de Wigner en fonction de G[>] :

$$f(R,k;T) = 1 + \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \left[iG^{>}(R,k;\epsilon,T) \right]$$
 (I-2-20)

II-3- <u>Application au transport perpendiculaire dans une diode à</u> <u>effet tunnel résonnant</u>

II-3-1- Description et principe de fonctionnement de la structure

- Les hétérostructures faisant l'objet d'étude de ces deux dernières décennies en physique du solide sont constituées de deux matériaux semi-conducteurs dont les *mailles cristallines* se raccordent presque parfaitement mais dont les propriétés électroniques sont différentes. L'exemple typique en est la paire Arséniure de Gallium et d'Aluminium (GaAs, $Ga_{1-x} Al_x As$). Le système $Ga_{1-x} Al_x As$ présente un bon accord de maille avec le GaAs puisque la variation relative des paramètres de maille ($\frac{a_{Ga_{1-x}}Al_x As - a_{GaAs}}{a_{GaAs}}$) est au plus de l'ordre de 0.1% [Mathieu, 1987;p552].



a)



b)

figure 1 : Bandes d'énergies et formation de l'hétérojonction AlGaAs/GaAs. L'AlGaAs est à gauche et le GaAs à droite. E_F désigne le niveau de Fermi, E_C le bas de la bande de conduction, E_V le haut de la bande de valence, E_g la largeur de la bande interdite et ϕ est l'énergie nécessaire pour arracher un électron du niveau de Fermi (ionisation). a) les deux matériaux sont séparés l'un de l'autre. b) les niveaux de Fermi s'alignent et les bandes se courbent quand les matériaux sont en contact. D'après le modèle d'Anderson.

De manière quantitative les variations des bandes interdites pour $Ga_{1-x} Al_x As$ sont données par [Adachi, 1985] :

Eg Γ = 1.424 + 1.247 x(eV)pour $0 \le x \le 0.45$ Eg Γ = 1.424 + 1.247 x + 1.147(x - 0.45)²(eV)pour $0.45 \le x \le 1$

La largeur de la bande interdite du matériau $Ga_{1-x} Al_x As$ est une fonction croissante de la quantité x d'aluminium. Pour une proportion d'Aluminium pas trop élevée ($x \le 0.4$), les mailles cristallines de ces deux matériaux peuvent être considérés comme identiques [Monemar,1976]. De plus les techniques modernes de fabrication des dispositifs comme l'épitaxie par jet moléculaire (MBE : Molécular Beam Epitaxy) permettent de contrôler la fabrication de ces cristaux à la couche atomique près et de réaliser des interfaces planes quasiparfaites .

Les propriétés électroniques de ces deux matériaux différent donc essentiellement par *la largeur de la bande interdite* qui est plus élevée dans le $Ga_{1-x} Al_x As$ (dit *matériau à grand "gap"*) que dans le GaAs (dit *matériau à petit "gap"*). Par conséquent, au niveau de la jonction ou de l'interface entre matériaux, il apparaît des *discontinuités* sur les bandes de valence et de conduction entraînant des *courbures des bandes* d'énergie. Il se forme alors un *puits de potentiel* au niveau de la bande de conduction (*figure 1*).

Si l'on s'intéresse à la discontinuité des bandes, il semble maintenant bien établi que pour x < 0.4 la *discontinuité de bande de conduction* entre les matériaux GaAs et Ga_{1-x} Al_x As correspond à 60% de la discontinuité de bande interdite [Monemar, 1976].

Dans le cas d'un dopage du matériau à grand gap $(Ga_{1-x} Al_x As)$, les charges mobiles de ce semiconducteur, c'est à dire les électrons, sont transférés dans le puits de potentiel du côté du matériau à faible bande interdite. Ils s'*accumulent* sur une très faible épaisseur le long de l'interface. Le maximum de la fonction d'ondes électroniques se situe à moins de 100 Å de l'interface de la jonction (*figure 2*).

Dans le travail qui suit, *nous ne considérons que la bande de conduction* pour laquelle la valeur de la discontinuité de potentiel d'interface dépend linéairement de la proportion x d'Aluminium dans le Ga_{1-x} Al_x As

Ces hétérostructures permettent de réaliser dans les dispositifs électroniques des sauts abrupts de l'énergie potentielle. En alternant des couches de chaque matériau, $Ga_{1-x} Al_x As$ et GaAs, on peut donc créer à volonté des puits ou des barrières de potentiel, dont la largeur est de quelque dizaines d'Angströms. A cette échelle les électrons se comportent comme des particules quantiques c'est à dire comme des ondes et on parle alors du comportement ondulatoire des électrons. Toutes les études faites dans ce domaine ces dernières années ont



figure 2 : Diagramme d'énergie de l'hétérojonction AlGaAs/GaAs.

40

visé à mettre à profit les effets quantiques pour fabriquer des dispositifs plus performants ou possédant des propriétés nouvelles.

Les modèles proposés par les physiciens pour l'étude de ces hétérojonctions reposent sur un découplage entre le comportement des électrons dans la *direction perpendiculaire aux plans des différentes couches* où interviennent les effets quantiques et le mouvement *parallèle à l'interface* qui peut être décrit par la mécanique classique.

Dans le *cadre de cette thèse* nous nous sommes essentiellement intéressés aux aspects du transport dans une *diode à effet tunnel résonnant* où le mouvement des électrons est perpendiculaire aux hétérojonctions. L'effet tunnel intervenant directement dans le mouvement des électrons, on a besoin donc d'un modèle quantique pour le traitement du phénomène de transport dans ces dispositifs. Les caractéristiques de conduction I=f(V) de ce composant présentent une *allure fortement non linéaire* et très particulière mise à profit pour la réalisation de certains circuits électroniques.

Les premières études sur l'effet tunnel résonant dans les hétérostructures semiconductrices ont été menées dès le début des années 70 et la première hétérostructure de type (GaAlAs / GaAs) a été effectivement proposé par R.Tsu et L.Esaki, qui ont démontré théoriquement qu'il était possible d'obtenir, en profitant des effets de résonance, une résistance différentielle négative (RDN) dans les caractéristiques de conduction des structures à multipuits quantiques. Mais ce n'est que quelques années plus tard, à partir de 1983, et grâce aux progrès technologiques, l'epitaxie par jet moléculaire principalement que la réalisation de composants présentant une RDN importante à température ambiante est devenue possible. La détection d'un signal à 2.5 THz par une diode à effet tunnel résonant, effectuée par Sollner en 1983 a donné un regain d'intérêt au sujet, tant au plan théorique qu'expérimental. En effet d'une part du fait de la combinaison des temps de passage dans les barrières et du piégeage dans le puits, l'inertie de l'effet tunnel résonant devrait se situer, à l'échelle du dixième de picoseconde traduisant ainsi un effet physique dont le temps de réponse est théoriquement un ordre de grandeur en dessous de celui des phénomènes physiques plus conventionnels (de transit, d'avalanche). Et d'autre part il devrait être possible d'obtenir, en raison de la sélectivité du phénomène, un rapport très important entre courant maximum (Jpic) et courant minimum (Jvallée).[Saint-Pol 1990]

Parallèlement et grâce aux études de matériaux [Sakaki,1985; Huang,1987; Sugiyama,1988, Broekaert,1988], de nombreuses propositions de composants nouveaux intégrant des structures à double barrière sont parues dans la littérature. Elle concernent aussi bien les dipôles avec pour objectifs principaux la génération, la multiplication, la détection d'ondes hyperfréquences aux fréquences millimétriques et submillimétriques que les tripôles dont les applications visent plus particulièrement la logique rapide [Shibatomi,1987, Sollner,1991]. Ainsi la diode à double barrière de potentiel s'impose comme le premier élément d'une famille de composants pour lesquels les phénomènes quantiques interviennent directement *en tant que principe de fonctionnement* et non plus comme élément perturbateur ou l'imitatif des performances.

Pour plus de précision on peut se réferer à l'article de synthèse de Lippens & al (1989), concenant les effets à tunnel résonnant dans les structures à double barrière.

De façon classique la diode à effet tunnel résonnant est composée d'une zone active non dopée où sont alternées des couches de Ga_{1-x} Al_x As et de GaAs, constituant l'ensemble double barrière-puits de potentiel et de deux zones d'accès en GaAs fortement dopées permettant la réalisation des contacts ohmiques. Ainsi un électron se déplaçant sous l'effet d'une polarisation extérieure doit traverser les zones classiquement interdites (barrières de potentiel). Les électrons se déplacent alors perpendiculairement au plan des couches et évoluent donc dans un potentiel de double barrière représenté sur la <u>figure 3</u>



Fig. 3. - Structure schématisée d'une diode à effet tunnel résonant où EF est le niveau de Fermi des semiconducteurs dégénères par le dopage et constituant les accès. NID indique les régions Non Intentionnellement Dopées

Les barrières ont une largeur de quelques dizaines d'angströms. Elle sont donc suffisamment minces pour que les électrons puissent les traverser par effet tunnel (Messiah, T2, 1965; Landau, 1974; Bohm, 1951). Le puits de potentiel séparant les barrières a approximativement la

même largeur et il existe dans cette zone des états *quasi-liés* dont le niveau d'énergie dépend essentiellement de la largeur du puits .

Le principe de fonctionnement peut se comprendre à l'aide de la <u>figure 4</u>. En absence de polarisation, à cause du confinement des porteurs dans le puits de potentiel leur énergie est quantifiée. Les barrières de potentiel étant minces il en résulte que la probabilité de passage par effet tunnel à travers ces barrières n'est pas négligeable. Du fait de l'alignement du niveau de Fermi de la couche émettrice d'accès avec le premier niveau discret du puits sous l'influence d'une polarisation extérieure des porteurs *commencent* à franchir la double barrière par effet tunnel, ce qui se traduit par une augmentation de plus en plus importante du courant qui théoriquement atteint son maximum lors de l'alignement du bas de la bande de conduction avec le niveau résonant du puits(effet de résonance correspondant au courant maximum ou courant pic). A plus forte tension les niveaux d'énergie se désadaptent entraînant une chute brutale des valeurs de courant (correspondant au courant minimum ou courant vallée). Ainsi des pics successifs peuvent être observés à chaque niveau d'énergie discret du puits quantique. Mais si l'augmentation continuelle de la polarisation entraîne la transparence de la deuxième barrière par l'abaissement de sa hauteur en dessous du bas de la bande de conduction le courant recommence à augmenter traduisant la caractéristique de conduction d'une diode classique.



Fig. 4. - Principe de fonctionnement d'une diode double barrière à effet tunnel résonant

Dans ces figures le niveau de Fermi se trouve dans la bande de conduction à cause de la dégénérescence des semiconducteurs des couches d'accès fortement dopées.

C'est donc grâce au phénomène de résonance que la caractéristique courant- tension d'une diode à effet tunnel résonnant présente une allure fortement non linéaire traduisant l'existence d'une résistance différentielle (dV/dI) négative.

Ici les effets quantiques régissent entièrement le transport des électrons à travers la doublebarrière. Il ne peut donc être décrit que par un modèle quantique. Cela a suscité chez les physiciens un regain d'intérêt pour l'équation de Wigner qui décrit un tel modèle (Frensley, 1987; Ravaioli & al, 1985; Kriman & al, 1987; Kluksdahl & al, 1988)

II-3-2- Equation de Transport

Hypothèses

- Dans l'ensemble du travail, sauf mention contraire, nous allons admettre les hypothèses simplificatrices suivantes :

Nous considérons une structure à double barrière constituée de couches semiconductrices dont les dimensions transverses sont infinies. Cela revient à négliger les effets de bords. En outre les transitions entre les différents matériaux seront modélisées par des interfaces abruptes.

Seul le transport des électrons est pris en compte, dans la mesure où les trous sont minoritaires dans la plupart des applications. Ainsi la modélisation de la seule bande de conduction sera nécessaire. Le profil de cette bande est fixé par la somme d'un potentiel électrique appliqué et du potentiel cristallin discontinu, fixé par la géométrie de la structure.

Le formalisme de la masse effective est applicable y compris pour des hétérostructures de quelques couches atomiques d'épaisseur. La masse effective des électrons m* sera prise identique à celle définie dans le matériau à 3 dimensions et partout égale à celle du matériau GaAs.

Enfin nous considérons que cette masse ne dépend pas de l'énergie.

Le transport dans les directions parallèle et perpendiculaire aux couches sera considéré comme totalement indépendant. De cette manière, l'Hamiltonien du système peut être scindé en deux opérateurs, dont seul le terme décrivant la fonction de Wigner suivant la direction de croissance sera exploité. Par ailleurs nous négligeons la variation de la largeur de la bande interdite en fonction de la température ainsi que celle de la position du niveau de Fermi dans les zones d'accès.

Compte tenu de ces hypothèses, dans le cas d'un traitement *unidimensionnel* du problème en *régime statique* l'équation de transport (II-2-16) s'écrit alors :

$$\left\{\frac{\hbar}{m^*}k\nabla_R\right\}f(R,k) + \frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dk'}{2\pi}V(R,k-k')f(R,k') = 0 \qquad (II-3-1)$$

Le potentiel V(R, k-k') introduit les interférences quantiques prises en compte dans le formalisme de la fonction de distribution de Wigner. En faisant $\mathbf{K} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'$, on obtient :

$$V(\mathbf{R}, \mathbf{K}) = 2 \int_{0}^{+\infty} d\mathbf{r} \cdot \sin(\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) \left\{ e \left[\upsilon(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}) - \upsilon(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2}) \right] \right\}$$
(II-3-2)

Dans ces conditions on a par ailleurs:

a) La densité de particules

$$n(R) = \int \frac{dk}{2\pi} f(R,k) \qquad (II-3-3)$$

b) La densité de courant

$$J(R) = \int \frac{dk}{2\pi} \frac{\hbar k}{m^*} f(R,k) \qquad (II-3-4)$$

Avant de procéder à la discretisation de ces équations nous allons préciser les conditions aux limites traduisant les interactions entre le système étudié et les réservoirs auxquels il est connecté.

II-3-3- Conditions aux limites

- Le composant que nous cherchons à modéliser est un système ouvert muni de contacts ohmiques permettant de le relier à un système de polarisation. De ce fait la description précise et réaliste des conditions aux limites pour traiter le problème du transport dans le composant est une question difficile. La méthode simple que nous utilisons ici consiste à traiter un modèle de composant dont la zone centrale ou zone active siège des effets quantiques est pincée entre deux zones d'accès dont la fonction est de reculer la position des deux interfaces avec les contacts traités eux de manière classique. Le système de contacts est alors modélisé par deux réservoirs en équilibre décrits chacun par leur potentiel chimique et leur température. Ils possèdent pour le composant avec lequel ils sont en contact, la propriété d'un corps noir. Ils absorbent donc sans réflexion tout électron entrant. A l'inverse tout électron sortant possède des caractéristiques fixées par la fonction de distribution d'équilibre du réservoir.

La fonction de Wigner faisant intervenir le vecteur d'onde k d'un électron se prête bien à priori à un traitement basé sur la distinction du sens de traversée par cet électron de l'interface composant-électrode.

En prenant l'interface entre le système et le réservoir de gauche comme point R=0 et l'interface entre le système et le réservoir de droite comme point R=L, on peut alors écrire les conditions aux limites pour ce système comme suit :

| $f(0, k) = f_g(k)$ | si $k > 0$ | (II-3-5) |
|--------------------|------------|----------|
| $f(L,k) = f_d(k)$ | si $k < 0$ | (II-3-6) |

avec :

$$f_{g,d}(k) = \left(\frac{m *_{g,d}}{\pi \hbar^2} k_B T\right) Ln \left\{ 1 + \exp\left[-\frac{1}{k_B T} \left(\frac{\hbar^2}{2} \frac{k^2}{m *_{g,d}} - \mathcal{E}_{F_{g,d}} \right) \right] \right\}$$
(II-3-7)

où " d " et " g " désignent respectivement les réservoirs de droite et de gauche et " L " indique la longueur du système et $m_{g,d}^*$ et $(\mathcal{E}_F)_{g,d}$ indiquent respectivement la masse effective et le niveau de Fermi de chacun des réservoirs supposés tous deux à la température T. Ces conditions aux limites sont nécessaires à la stabilité des solutions de l'équation de transport dans la mesure où elles permettent la dissipation énergétique. Nous pouvons donc passer à la résolution du problème proprement dite.

II-3-4- Discrétisation du problème

II-3-4-1- Obtention de l'équation de transport discrétisée

- Notre problème comme la plupart des problèmes concernant les composants quantiques n'est pas soluble analytiquement. On doit donc avoir recours à une résolution numérique. Ce qui implique une discrétisation des variables et des équations mise en jeu. Dans notre cas il s'agit donc de discrétiser les variables : R, r, k, et les équations (II-3-1) et (II-3-2). L'équation de transport pour la fonction de Wigner est donc évaluée sur une grille bidimensionnelle (R,k) comme indiqué sur la figure 5. La fonction de Wigner f(R,k), est calculée aux noeuds de cette grille, internes au système c'est à dire compris dans l'espace de simulation délimité par l'interface avec le réservoir de gauche en R=0 et le réservoir de droite en R = L.



Fig. 5. - Schéma de discrétisation de l'équation de Wigner

Les variables R, r et les variables de calcul (R+r/2) et (R-r/2) de l'équation (II-3-2) doivent être définies sur un même réseau spatial. Dans ces conditions on définit au départ un pas ΔR pour R et on prend un pas $\Delta r = 2 \Delta R$ pour la variable r. Le pas ΔR est choisi suffisamment petit pour permettre une description précise des barrières de potentiel et une définition suffisante de la dérivée $\partial f(R,k)/\partial R$. Dans le cas d'une hétérojonction, le potentiel varie sur une distance de l'ordre de grandeur de quelques couches atomiques et il semble raisonnable de prendre ΔR correspondant à une distance interatomique soit $\Delta R = 0.565$ nm pour GaAs par exemple.

Ainsi :

$$\mathbf{R} \in \{0, \Delta \mathbf{R}, 2\Delta \mathbf{R}, 3\Delta \mathbf{R}; \dots, L\}$$

et le nombre de points du réseau selon R vaut :

$$N_{\mathbf{R}} = \frac{\mathbf{L}}{\Delta \mathbf{R}} + 1 \tag{II-3-8}$$

La grandeur V(R,k) définie dans (II-3-2) met en jeu la transformée de Fourier de V_R(r) avec :

$$V_{R}(r) = \upsilon(R + \frac{r}{2}) - \upsilon(R - \frac{r}{2})$$
 (II-3-9)

Dans cette opération, r et k sont des grandeurs conjuguées et leur discrétisation demande quelques précautions [E. Oran Brigham, 1974]. En effet le calcul de la transformée de Fourier discrète (TFD) de $V_R(r)$ pour R fixé implique de :

 \rightarrow Discrétiser r

- \rightarrow Tronquer le support d'intégration en r théoriquement infini pour le limiter à une longueur L_r
- → Discrétiser k

Les trois opérations doivent être <u>liées</u> de façon précise pour faire un calcul correct de V(R,k). En effet la discrétisation dans l'espace r introduit dans l'espace k une périodisation de la grandeur calculée V(R,k) avec risque de chevauchement important des contributions de périodes adjacentes (voir fig 6).



Fig.6. -Schéma de principe de périodisation d'une fonction dans l'espace k par sa discrétisation dans l'espace r

Pour limiter ce risque il convient de prendre Δr suffisamment petit.

Par ailleurs la troncature en r conduit à définir un domaine L_r . Ce fenêtrage en r se traduit par une perturbation sur V(R,k) d'autant plus marquée que L_r est petit.

Le fenêtrage en r est également en relation directe avec une discrétisation dans l'espace k et conduit à définir un pas $\Delta k = (2\pi)/L_r$.

Ainsi le choix de Δr et L_r fixe le nombre de points Nr de l'échantillonnage de $V_R(r)$ et fixe corrélativement Δk et Nk = Nr dans l'espace k.

Il faut noter également que la périodisation de $V_R(r)$ implique que l'on ait :

$$V_{R}(0) = V_{R}(L_{r})$$
 (II-3-10)

Cette condition n'est pas remplie à priori lorsqu'on polarise le système en appliquant une tension différente aux réservoirs en contact avec le système. On peut néanmoins dans ce cas, respecter la condition (II-3-10) en appliquant de manière purement technique dans le calcul de la TFD une "rampe de Nicolson"[1973]. Le procédé consiste à ajouter à $V_R(r)$ une rampe de potentiel linéaire dans le but de compenser le décalage entre les valeurs $V_R(0)$ et $V_R(L_r)$ qui résulte de l'application d'une différence de potentiel V extérieur.



Fig.7. - Application d'une rampe de Nicolson

On peut montrer qu'un tel procédé permet la périodisation de $V_R(r)$ sans apporter de perturbation au calcul de $V_R(r)$ pour l'ensemble des valeurs de k (sauf k=0), correspondant à l'échantillonnage défini selon les règles indiquées ci-dessus et pour ces valeurs là uniquement.

On note enfin que pour le calcul de TFD, on peut choisir L et L_r de façon indépendante, les contraintes pour chacune de ces quantités étant sans relation. On peut noter que le choix des domaines de variation pour les variables R et $r: 0 \le R \le L$ et $0 \le r \le L_r$ d'après (II-3-2) implique la prise en compte de corrélations système-système, système-réservoir et réservoir-réservoir [Frensley, 1987], comme on peut le constater en retournant aux variables r_1 et r_2 (voir plus haut transformée de Weyl).

En définitive compte tenu des remarques qui précédent la discrétisation de l'équation de transport de Wigner pour un problème à masse effective constante conduit aux relations suivantes :(voir annexe II pour le cas d'une masse effective variable)

$$V(R, k - k') = \frac{2}{N_k} \sum_{r}^{N_r} \sin\left[\left(k - k'\right)r\right] \left\{ e \left[\upsilon \left(R + \frac{r}{2}\right) - \upsilon \left(R - \frac{r}{2}\right) \right] \right\}$$
(II-3-11)

$$\frac{1}{\hbar}\sum_{k'} V(\mathbf{R}, \mathbf{k} - \mathbf{k'}) f(\mathbf{R}, \mathbf{k'}) = -\frac{\hbar}{m^* \Delta \mathbf{R}} k \begin{cases} f(\mathbf{R} + \Delta \mathbf{R}, \mathbf{k}) - f(\mathbf{R}, \mathbf{k}); & \mathbf{k} < 0 \\ f(\mathbf{R}, \mathbf{k}) - f(\mathbf{R} - \Delta \mathbf{R}, \mathbf{k}); & \mathbf{k} > 0 \end{cases}$$
(II-3-12)

Dans ces relations l'échantillonnage en k s'effectue avec un pas :

$$\Delta k = \frac{\pi}{N_k \Delta R}$$
(II-3-13)

sur une période L_k correspondant à la première zone de Brillouin. On a donc :

$$-\frac{\pi}{2\Delta R} \le k < \frac{\pi}{2\Delta R}$$
(II-3-14)

On peut noter que la relation (II-3-12) ne fait pas intervenir la valeur k = 0. Pour tenir compte de ce fait on prend :

$$k = \frac{\pi}{2\Delta R} \left\{ \frac{2m - N_k - 1}{N_k} \right\}$$
(II-3-15)

avec Nk pair et $m \in \{ 1, 2, 3, 4; ..., N_k \}$.

On enjambe ainsi la valeur k = 0, tout en ayant un échantillonnage de valeurs k symétriques sur la première zone de Brillouin.

L'écriture de (II-3-12) est celle d'un système linéaire d'équations pour les valeurs f(R,k). Elle peut prendre une forme matricielle :

$$A X = B \tag{II-3-16}$$

où X représente une matrice colonne de dimension $N_R .N_k$ contenant les valeurs f(R,k) de la fonction de distribution de Wigner. La matrice B, de même taille, contient les éléments relatifs aux conditions aux limites $f(L+\Delta R)$ pour k<0 et $f(-\Delta R)$ pour k>0. La matrice carrée A est une matrice tridiagonale avec des blocs de dimensions ($N_R .N_k$)²:

$$A = \begin{pmatrix} \begin{bmatrix} T + v \end{bmatrix}_{11} & \begin{bmatrix} T \end{bmatrix}_{12} & & & \cdots & & \\ \begin{bmatrix} T \end{bmatrix}_{21} & \begin{bmatrix} T + v \end{bmatrix}_{22} & \begin{bmatrix} T \end{bmatrix}_{23} & & & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \\ & & & \begin{bmatrix} T \end{bmatrix}_{i,j-1} & \begin{bmatrix} T + v \end{bmatrix}_{i=j} & \begin{bmatrix} T \end{bmatrix}_{i,j+1} & & & \\ & & & & \begin{bmatrix} T \end{bmatrix}_{i,j-1} & \begin{bmatrix} T + v \end{bmatrix}_{i=j} & \begin{bmatrix} T \end{bmatrix}_{i,j+1} & & & \\ & & & & \ddots & \ddots & & \\ & & & & & \begin{bmatrix} T \end{bmatrix}_{NR-1,NR-2} & \begin{bmatrix} T + v \end{bmatrix}_{NR-1,NR-1} & \begin{bmatrix} T \end{bmatrix}_{NR-1,NR} \\ & & & & & \begin{bmatrix} T \end{bmatrix}_{NR-1,NR-2} & \begin{bmatrix} T + v \end{bmatrix}_{NR-1,NR-1} & \begin{bmatrix} T \end{bmatrix}_{NR-1,NR} \end{pmatrix}$$

chacun des blocs [T] ou [T+V] de A; est une matrice de dimension $(N_k N_k)$ et les éléments V sont relatifs aux termes de potentiel V(**K**,R).

La matrice A à inverser est très creuse. A titre d'exemple, pour $N_R = 81$ et $N_k = 60$, un calcul simple montre que 296.400 des 23.619.600 éléments de A sont non nuls, soit à peine 1.25% des termes.

Il convient donc d'utiliser des algorithmes adaptés à ce type de matrice pour économiser l'espace mémoire.

II-3-4-2- Expressions des densités de porteurs et de courant

- La détermination de f (R,k) permet de calculer les densités de porteurs. La densité de porteurs est donnée par :

$$n(R) = \sum_{k} \frac{\Delta k}{2\pi} f(R,k) \qquad (II-3-17)$$

La relation de continuité discrétisée s'écrit :

$$\frac{\partial n(R)}{\partial t} = -\frac{1}{e} \frac{j(R + \frac{1}{2}\Delta R) - j(R - \frac{1}{2}\Delta R)}{\Delta R}$$
(II-3-18)

la densité de courant est calculée par :

$$J(R + \frac{1}{2}\Delta R) = \frac{e.\Delta k}{2\pi} \left[\sum_{k<0} \frac{\hbar k}{m^*} f(R + \Delta R, k) + \sum_{k>0} \frac{\hbar k}{m^*} f(R, k) \right]$$
(II-3-19)
$$J(R - \frac{1}{2}\Delta R) = \frac{e.\Delta k}{2\pi} \left[\sum_{k<0} \frac{\hbar k}{m^*} f(R, k) + \sum_{k>0} \frac{\hbar k}{m^*} f(R - \Delta R, k) \right]$$
(II-3-20)

L'équation de continuité en régime statique implique que la densité de courant est indépendante de la position.

II-3-5- Résultats Numériques

- Nous allons présenter les résultats numériques concernant les caractéristiques statiques d'une diode à double barrière de potentiel dont le fonctionnement a été décrit au paragraphe (II-3-1). Les calculs ont été effectués sans introduire de potentiel "self-consistent" en prenant $L = L_r$.

Nous commençons par traiter une structure dont les épaisseurs respectives des couches constituant la zone active sont 28/45/28 Angströms dont la fonction de Wigner est la mieux représentée par le modèle discret décrit ci-dessus.

Nous comparons nos résultats d'une part avec certains résultats théoriques déjà publiés dans la littérature et en particulier avec ceux obtenus par résolution de l'équation de Schrödinger.

Dans une étape suivante nous traitons une structure 50/50/50 Angströms afin de faire une comparaison relativement réaliste avec les résultats expérimentaux. Puis nous discutons de l'influence des paramètres du modèle sur les résultats numériques en particulier le choix du nombre de points de discrétisation N_k et N_r pour les deux variables conjuguées " k " et " r ". Cette discussion est complétée par le calcul et l'interprétation des caractéristiques d'une structure de dimension 100/50/100 Angströms. A partir de cette discussion nous présentons les difficultés liées en partie aux épaississements des barrières de potentiel et plus généralement les difficultés inhérentes au traitement de Wigner qui résultent essentiellement de la discrétisation du problème.

I-3-5-1- Structure 28/45/28 Å

- Il s'agit d'une diode symétrique pour laquelle nous avons adopté les paramètres suivants :



(a)



(b)

Figure 8. - Densité de courant (traits continus) et densité électronique au centre du puits de potentiel (trait discontinus) à 300K (fig.a) et 77K (fig.b) pour une structure 28/45/28 Å, $\Delta Ec=270$ meV, EF=85 meV; Nk=60; NR=81; Nr=40

The longueur totale de 451 Å repartie entre deux zones d'accès *dopées* de 175 Å et une zone active *non dopée* constituée de deux barrières en GaAs d'épaisseur 28 Å possédant une hauteur de 270 meV et d'un puits de potentiel en $Ga_{0.7} Al_{0.3} As$ de 45 Å d'épaisseur.

Tun niveau de Fermi égal à EF=85 meV correspondant à un dopage de l'ordre de 2.10¹⁸ cm⁻³.

The masse effective de 0.067 m_0 correspondant au bas de la bande de conduction de GaAs pour l'ensemble de la structure .

The parameter de maille cristallin dans le système de matériaux (Ga,Al)As. Ainsi étant donné la longueur totale choisie, nous avons un nombre de points de discrétisation dans l'espace direct égal à $N_R = 81$.

Ta largeur des niveaux d'énergie résonants et donc celle des pics de transmission étant fonction de la largeur des barrières de potentiel, le choix du nombre de points de discrétisation dans l'espace des k (ou l'espace des moments $P=\hbar k$) est fait de manière à couvrir le mieux possible ces niveaux élargis et donc à décrire convenablement la zone du pic de transmission correspondant. Nous avons adopté pour cela N_k=60 et un nombre de points Nr=40 dans l'espace réciproque.

The plus nous supposons qu'en absence de potentiel self-consistant, la chute de potentiel appliqué le long de la zone active (Barrière-puits de potentiel) est linéaire.

Nous avons résolu l'équation de transport discrétisée pour la fonction de distribution de Wigner par la méthode d'élimination Gaussienne qui requiert un stockage de mémoire proportionnel à $N_R N_k^3$.

L'utilisation d'une routine mathématique relative aux *matrices creuses* et *tridiagonales blocs*, ne tenant compte que des termes non nuls de la matrice, nous a permis de calculer chacun des points de la caractéristique J=f(Vapp) en un temps réel moyen de 30 secondes à l'aide d'un - calculateur HP 715/50.

Les <u>figures 8 a,b</u> représentent les caractéristiques de conduction J=f(Vapp) de la diode à T=300K (<u>fig a</u>) et à T=77K (<u>fig b</u>). Dans les deux cas de figure on constate l'existence d'une Résistance Différentielle Négative (= RDN) caractérisée par un courant maximum (dit courant pic) et un courant minimum (dit courant Vallée).

Le rapport du courant pic sur courant vallée caractérisant l'importance de la RDN est égal à 2 à 300K et 2.84 à 77K. Ces valeurs sont en accord avec les résultats théoriques déjà publiés dans la littérature (Frensley, 1987; Kluksdahl, 1989).

Les variations de la densité de porteurs au centre du puits de potentiel, reportées sur ces mêmes figures, indiquent le taux d'occupation de l'état résonant et montrent que le maximum



Figure 9 Profils de la fonction de distribution de Wigner et de la densité électronique associée calculés à T=300K, pour une structure 28/45/28 Å aux différents cas de polarisation : (a) à l'équilibre, (b) au potentiel pic, (c) au potentiel vallée



Figure 10. Profils de la fonction de distribution de Wigner et de la densité électronique associée calculés à T=77K, pour une structure 28/45/28 Å aux différents cas de polarisation : (a) à l'équilibre, (b) au potentiel pic, (c) au potentiel vallée



(a)



(b)

Figure 11. Profils de densité électronique en fonction de la position aux températures T=300K (fig.a) et T=77K (fig.b), à l'équilibre (traits discontinus gras); à la tension pic (traits discontinus); et à la tension vallée (traits continus), pour une structure 28/45/28 Å ΔEc=270 meV; EF=85 meV; NK=60; NR=81; Nr=40

de densité électronique dans le puits a lieu à un potentiel diffèrent du potentiel correspondant au courant maximum .

Les évolutions de la fonction de Wigner $f(\mathbf{R},\mathbf{k})$ et les profils de distribution de porteurs correspondants témoignent de la variation des effets d'interférence quantiques en fonction de la polarisation .(*figures 9 & 10*)

De fortes amplitudes de la fonction de Wigner dans les zones d'accès ; comme on peut le voir d'après les profils de porteurs ; sont révélatrices de la forte densité de porteurs dans ces zones due au dopage.

Des oscillations légères de $f(\mathbf{R},\mathbf{k})$ à l'équilibre (*figs 9a,10a*), traduisent de faibles effets d'interférences quantiques dans le puits de potentiel. Mais par contre sous l'effet d'une polarisation extérieure les oscillations prennent de plus en plus d'importance et atteignent leur maximum au potentiel pic où on constate alors un grand pic négatif en amont de la première barrière (*fig 9b,10b*).

Par ailleurs une augmentation de la densité de porteurs piégées dans le puits et leur tendance au déplacement au travers la deuxième barrière vers le collecteur peuvent être décelée. Ceci traduit la *dissymétrisation* de la double barrière sous l'effet de la polarisation (Ricco & Azbel, 1984).

L'augmentation de la polarisation aux valeurs supérieures au Vpic entraîne la *désadaptation* progressive du niveau d'énergie résonant du puits de potentiel par rapport au niveau d'énergie des électrons provenant de l'émetteur produisant ainsi la diminution de l'effet tunnel au travers la première barrière et par conséquent la diminution du courant qui atteint son minimum au potentiel vallée. Ceci se traduit par une forte diminution des effets d'interférences quantiques dans le puits et donc des oscillations de la fonction de Wigner (*fig 9c, 10c*). On se trouve alors dans une situation de quasi stabilité semblable à celle de l'état d'équilibre et le profil de f(R,k), en contraste avec le cas précèdent, ressemble plutôt au cas de figure de l'équilibre.

La représentation simultanée des variations de la densité de porteurs sur les *figures 11a,b* nous permet de mieux voir ces évolutions en fonction de la polarisation à 77K et 300K.

Comparaison avec Schrödinger

Schrödinger statique nous avons utilisé un logiciel déjà mis au point à l'IEMN par l'équipe de Didier Lippens. Les <u>figures 12a,b</u> représentent les variations J=f(Vapp) obtenues par les deux méthodes.


(a)



Figure 12. Comparaison des approches théoriques de Wigner (traits discontinus) et de Schrödinger (traits continus), à 300K (fig a) et 77K (fig b) pour une structure 28/45/28 Å ΔEc=270 meV; EF=85 meV; Nk=60; NR=81; Nr=40



(a)





Figure 13. : Densité de Courant (traits continus) et densité électronique au centre du puits de potentiel (traits discontinus) à 300K (fig a) et 77K (fig b), pour une structure 50/50/50 Å $\Delta E_c=270$ meV; EF=85 meV; Nk=60; NR=81; Nr=40

On constate que pour les mêmes paramètres de calculs (ΔE_c , E_F , m^{*},...), la densité de courant pic calculée par l'équation de Schrödinger est légèrement supérieure à celle calculée par la méthode de Wigner. Mais par contre la densité de courant vallée est bien plus faible. Les tensions correspondant aux courants pic et vallée sont pourtant sensiblement les mêmes. Le contraste en courant calculé par l'approche de Schrödinger est égal **3.89** à 300K et de **6.9** à

77K, contre les valeurs respectives de 2 et 2.84 calculées par l'approche de Wigner.

Ces résultats nous indiquent que la valeur du rapport courant pic sur courant vallée calculée par l'approche de Wigner à 300K semble être plus proche des valeurs expérimentales typiques comprises entre 1.5 à 1.8 pour des systèmes de matériaux semblables. Mais par contre à 77K l'approche de Wigner *sous-estime* les valeurs expérimentales mesurées qui sont comprises entre 6 et 8 (Sollner, 1983; Reed, 1986; Shewchuk, 1985; Thomas, 1989; Vanbesien, 1991a&b; Chevoir, 1992)).

En effet examinant le profil de la fonction f(R,k) de Wigner à 77K (*fig10*), on constate des oscillations insignifiantes dès l'équilibre dans les zones d'accès qui laissent à penser que celle-ci ne sont pas correctement calculées à cette température. De plus le calcul du profil de densité de porteurs indique que vraisemblablement il y a même une sous-estimation de la valeur de cette densité par rapport au niveau de Fermi imposée (EF=85 meV) qui correspond à un dopage des zones d'accès de l'ordre de $2x10^{18}/cm^3$

Il faut par ailleurs souligner que ces modèles sont trop simplifiés et que les *effets d'interaction* qui tendent à réduire le rapport courant pic sur courant vallée ainsi que la *chute ohmique dans les contacts* ont été négligés dans ces calculs. Il est clair que la prise en compte de tels phénomènes s'avère nécessaire pour une comparaison plus précise avec l'expérience.

II-3-5-2- Structure 50/50/50 Å

Pour pouvoir comparer nos résultats de calcul avec des mesures, il est nécessaire de travailler sur des composants moins "transparents" c'est à dire possédant des barrières de potentiel plus épaisses. Une structure typique est la structure 50/50/50 Å. Nous avons donc calculé sa caractéristique J=f(Vapp) et les résultats sont donnés sur les fig. 13.a et 13.b.

D'après les <u>figures 13a,b</u> nous constatons de très faibles effets de résistance différentielle négative aussi bien à la température ambiante qu'à 77K. Alors qu'à la température ambiante le contraste en courant calculé est de 1.14, à 77K on obtient une valeur égale à 1.44. Ces valeurs sont en très net décalage par rapport aux valeurs expérimentales respectivement voisines de 1.8 et 7, et nos calculs par l'approche de Wigner semblent sous-estimer sérieusement celles-ci. Et ceci malgré une légère amélioration apportée au niveau des valeurs numériques des densités de





Densité électronique (10¹⁸ cm⁻³)

10

(a)

2.5

1.5

0.5 0

2

1

0



(b**)**





20

Position (nm)

Figure 14. : Profils de la fonction de distribution de Wigner et de la densité électronique associée calculés à T=300K, pour une structure 50/50/50 Å aux différents cas de polarisation : (a) à l'équilibre, (b) au potentiel pic, (c) au potentiel vallée

_63

Vapp=120 meV

40

30

0.3

0.1

-0

-0.

-0.



Figure 15 : Profils de la fonction de distribution de Wigner et de la densité électronique associée calculés à T=77K, pour une structure 50/50/50 Å aux différents cas de polarisation : (a) à l'équilibre, (b) au potentiel pic, (c) au potentiel vallée



(a)



(b)

Figure 16. Profils de densité électronique en fonction de la position aux températures T=300K (fig.a) et T=77K (fig.b), à l'équilibre (traits discontinus gras); à la tension pic (traits discontinus); et à la tension vallée (traits continus), pour une structure 50/50/50 Å $\Delta Ec=270$ meV; EF=85 meV; NK=60; NR=81; Nr=40



(a)



(b)

Figure 17. Comparaison des approches théoriques de Wigner (traits discontinus) et de Schrödinger (traits continus), à 300K (fig a) et 77K (fig b) pour une structure 50/50/50 Å ΔEc=270 meV; EF=85 meV; Nk=60; NR=81; Nr=40

courant pic et vallée et leur rapport en prenant un point de discrétisation sur l'interface des barrières afin de mieux les définir . Ce problème est d'autant plus important que la prise en compte des interactions sur phonons , impuretés, etc ne fait que diminuer ce rapport et en particulier aux basses températures.

L'observation de l'évolution de la fonction $f(\mathbf{R},\mathbf{k})$ de Wigner et les profils de densité de porteurs correspondantes en fonction de la polarisation nous permettent de mieux comprendre la raison de ces anomalies. Il est simple de constater qu'en contraste avec la structure 28/45/28 Å (*fig 9 & 10*), les évolutions des fonctions $f(\mathbf{R},\mathbf{k})$ calculées au potentiel pic (*fig 14b & 15b*) ne reflètent pratiquement pas d'existence d'importants effets d'interférence quantique qui devraient normalement avoir leur maximum à cette polarisation par rapport aux cas d'équilibre (*fig 14a & 15b*) et du potentiel vallée (*fig 14c.& 15c*).

Par ailleurs les profils (fig_{16}) de densité de porteurs calculées indiquent de très faible variations dans le puits aussi bien à la température ambiante qu'à T=77K où on constate une fois de plus une sous-estimation des valeurs de densités électroniques calculées au niveau des accès par rapport au dopage initial de ces zones.

Comparaison avec Schrödinger

Des calculs semblables par la résolution de l'équation de Schrödinger statique nous donnent un contraste en courant égal à **3.32** à la température ambiante et une valeur de **29.7** à 77K. Contrairement à l'approche précédente par Wigner on constate une *surestimation* de ces quantités ; surtout à basse température; vis-à-vis des relevés expérimentaux.

Par ailleurs les caractéristiques J(V) obtenues à partir d'une étude avec la fonction de Wigner ou avec l'équation de Schrödinger sont *qualitativement* très différentes (fig17). Ce n'est pas le cas avec la structure 28/45/28 Å (fig. 12). Les potentiels correspondant aux courants maximum et minimum ne sont plus les mêmes. De plus aussi bien à la température ambiante que à 77K, les densités de courant pic et vallée calculées par l'approche de Wigner sont plus importantes.

Il semble donc bien qu'avec des barrières plus épaisses se pose de façon plus aigue la question de l'alignement du niveau énergétique des électrons incidents et celui du niveau résonant dans le puits. Certains auteurs (Frensley,1990; Mains&al,1988; Wu, 1994; Buot & Jensen, 1989a&b,1990a&b) ont mis en cause l'effet de la transformée de Weyl ou ont étudié l'effet du calcul par approximation des différences finies de la fonction de Wigner f(R,k).

Afin d'étudier de manière plus précise cette question, nous examinons l'influence du nombre de points Nk dans l'espace k.

II-3-5-3- Influence du nombre de points dans l'espace des K

- Etant donné que la taille de la matrice A à traiter (relation II-3-16); dépend directement du choix du nombre de points de discrétisation en k, on a toujours tendance à

prendre un petit nombre de points Nk pour limiter l'importance des calculs à effectuer. Cet argument n'est pas le seul à prendre en compte comme l'indique le calcul des caractéristiques J(V) des deux structures 28/45/28 Å et 50/50/50 Å citées ci-dessus fait pour différentes valeurs de Nk en prenant Nr=40.

Les résultats obtenus sont rassemblés sur les fig. 18 à 21. On constate d'une manière générale que pour Nk < 50 les résultats de calculs sont très fluctuants. Ils deviennent plus cohérents pour Nk > 50 sans qu'il soit possible pourtant de dégager pour chaque structure à une température donnée, un comportement asymptotique en fonction de Nk.

En effet; on peut constater l'existence d'une instabilité remarquable au niveau de ces caractéristiques pour des valeurs de Nk < 50, caractérisée par la présence même des *densités* de courant négatives (figures 18 & 19).

Ce n'est qu'à partir de Nk=50 qu'on peut alors constater une tendance vers la stabilité des résultats et la présence de l'effet de la résistance différentielle négative caractérisée par des densités de courant maximum et minimum.

Alors que pour la structure 28/45/28 Å on relève ; à Nk=60; les plus grandes valeurs de densités de courant maximum et minimum et le meilleur contraste en courant (<u>fig 18 a & b</u>), pour la structure 50/50/50 Å on note un résultat un peu mitigé autour de Nk=50 et Nk=60. Bien que les plus fortes valeurs de densité de courant soient obtenus pour Nk=60 le contraste en courant s'avère meilleur pour Nk=50 où on relève la valeur de **6.54** contre **1.44** à 77K et une valeur de **2.23** contre **1.14** à 300K.(<u>fig.19a & b</u>)

Or l'examen des profils des porteurs (<u>figure 20</u>), calculés pour Nk=50 nous fait douter de la crédibilité des resultats numériques obtenus pour Nk=50. L'existence de l'instabilité de valeurs de densité de porteurs au niveau des accès d'une part et sa faible valeur calculée au potentiel pic par rapport au cas d'équilibre en sont des preuves incontournables.

Par ailleurs en ce qui concerne la structure 28/45/28 Å pour Nk=30 on peut aussi relever un meilleur contraste en courant égal à 3.13 contre 2.84 obtenu à 77K mais de la même manière que précédemment on peut légitiment douter de la crédibilité de ce résultat par l'examen des profils de f(R,k) et de la densité des porteurs (*figure 21*), qui comportent des oscillations sans aucune signification physique, aussi bien à l'équilibre que hors d'équilibre.

Il faut souligner que pourtant le calcul de la densité de courant dans tous les cas de figures est fait tout en vérifiant la relation de continuité en régime statique qui implique l'obtention d'une densité de courant indépendante de la position.

Ces constatations d'une part et les relevés expérimentaux d'autre part nous permettent de dire que pour la structure 28/45/28 Å bien qu'à basse température nous ayons une sous-estimation



Figure 18 : Influence du choix du nombre de points de discrétisation Nk dans l'espace des k pour une structure 50/50/50 Å à T=300K et T=77K ΔEc=270 meV; EF=85 meV; NR=81; Nr=40

<u>-</u>69

CHAPITRE II



Figure 19 : Influence du choix du nombre de points de discrétisation Nk dans l'espace des k pour une structure 28/45/28 Å à T=300K et T=77K ΔEc=270 meV; EF=85 meV; NR=81; Nr=40



Figure 20 : Influence du choix du nombre de points de discrétisation Nk=50 dans l'espace des k pour une structure 50/50/50 Å à T=77K (à gauche) et T=300 (à droite). $\Delta Ec=270 \text{meV}$, EF=85 meV, NR=81, Nr=40



Figure 21 : Influence du choix du nombre de points de discrétisation Nk=30 dans l'espace des k pour une structure 28/45/28 Å à T=77K. Avec ∆Ec=270meV, EF=85 meV, NR=81, Nr=40



Energie (meV)

Figure 23 . - Influence de la largeur des barrières sur la largeur du pic de coefficient de transmission

Ln (Transmission)

-35

'3

du contraste en courant le choix de la valeur Nk=60, vue les profils de f(R,k) et de la densité électronique associée, est un choix approprié. Mais par contre pour la structure 50/50/50 Å les résultats numériques pour Nk=60 étant en net décalage avec l'expérience on peut d'ors et déjà affirmer que ce paramètre doit être adapté plus convenablement à cette structure.

Il faut donc constater à ce stade que le choix d'un nombre de points Nk plus important ne suffit pas à obtenir un résultat optimal. Le fait que la largeur des niveaux résonnant du puits de potentiel soit fonction de l'épaisseur des barrières des potentiel entre en ligne de compte. Ce fait est illustré sur les figures 22 et 23.



fig. 22 : Schéma simplifié de distribution des points de discrétisation en k par rapport au niveau résonant du puits de potentiel et de la Variation de la largeur de ce niveau en fonction de la largeur des barrières où LB2 ≥ 2 LB1

Le phénomène tunnel résonant est d'autant plus sélectif que les barrières sont plus épaisses (Lippens & al 1989). Une mesure à mi hauteur de la *largeur du pic* de transmission permet de connaître la *largeur du niveau* d'énergie résonant correspondant qui caractérise cette sélectivité.

Donc plus les barrières sont épaisses plus cette largeur est petite et plus la résonance devient sélective et le pic difficile à détecter. Par conséquent lors d'une discrétisation en k (c'est à dire en énergie) il devient nécessaire d'adapter le nombre de points Nk ou le pas Δk afin de définir correctement le pic de transmission.

Or pour la structure 50/50/50 Å, le pas de discrétisation en k et le nombre de points Nk ne permettent pas d'avoir un "balayage" convenable du niveau résonant du puits (*figure 26*).

Il semble donc qu'avec ces paramètres les présents calculs exposent un état qui "enjambe" la situation optimale correspondant au maximum du pic de transmission, d'où le faible écart entre les densités de courant maximum Jp et minimum Jv.

La vérification de ce fait est facile si l'on prend le cas des barrières encore plus larges .



(a)



(b)

Figure 24 : Densité de Courant (traits continus) et densité électronique au centre du puits de potentiel (traits discontinus) à 300K (fig a) et 77K (fig b), pour une structure 100/50/100 Å $\Delta E_c=270$ meV; EF=85 meV; Nk=60; NR=81; Nr=40

Il suffit de doubler l'épaisseur des barrières pour y parvenir .En conservant la longueur totale du système précèdent et la largeur du puits nous avons doublé l'épaisseur des barrières formant une structure de dimension 100/50/100 Å . Les autres paramètres de calculs étant inchangés.

Comme nous l'avions prévu les allures des caractéristiques J(V) ne présentent plus aucune manifestation de résistance différentielle négative (*figure 24*) ni à la température ambiante ni à 77K. La densité de courant augmente de façon quasi-linéaire en fonction de la polarisation et la densité de charge dans le puits reste quasiment insensible à la variation de la polarisation (*figure 25*).

On peut estimer une fois de plus qu'à cause de l'insuffisance du nombre de points de discrétisation et le pas en k le pic de transmission ; devenu encore bien plus sélectif (fig 23); n'a pas pu être " détecté " et que les densité de courant calculées correspondent plutôt aux états loin de résonance.

Afin de mettre en évidence ce phénomène, nous avons tracé les coefficients de transmission en fonction de l'énergie à l'équilibre pour les trois structures énumérées ci-dessus. (*figures 26*). Dans le but d'utiliser les valeurs énergétiques correspondant aux différentes valeurs de k, nous utilisons la relation de dispersion $\mathcal{E} = (\hbar^2 k^2 / 2m^*)$.

Pour deux valeurs typiques Nk=60 et Nk=120, nous avons reporté les valeurs d'énergies correspondantes sur les courbes de transmission.

La répartition des valeurs énergétiques ou encore des valeurs de k au niveau des pics de transmission est très significative et dans les trois cas de figure elle est révélatrice du choix effectué et de son caractère plus ou moins judicieux.

Alors que pour la structure 28/45/28 Å, on positionne un point *très proche du maximum* du pic avec Nk=60, pour les deux autres structures ce choix entraîne un echantillonnage du pic plus médiocre de ce point de vue car le point en question se trouve moins bien situé et de ce fait les valeurs de coefficient de transmission correspondant sont bien plus faibles. Ceci explique les écarts énergétiques pour le rapport Jpic/Jvallée: contraste bon dans le cas de la structure 28/45/28 Å, faible dans le cas de la structure 50/50/50 Å, et pratiquement nul dans le dernier cas 100/50/100 Å.

Par ailleurs le doublage du nombre de points en k , Nk=120, et la distribution correspondante des points énergétiques correspondants sur les courbes de transmission sont à la fois révélatrice de plusieurs faits remarquables. Bien que pour les deux structures 50/50/50 Å et 100/50/100Å , cette augmentation du nombre de points permette de situer un point plus proche des pic correspondants dans le cas de structure 28/45/28 Å le point équivalent correspondant se trouve plus loin du pic par rapport au cas précèdent de Nk=60.

Ceci traduit d'une part le fait que l'augmentation du nombre de point en k permet de mieux définir le pic mais d'autre part on constate qu'un simple doublage du nombre de point en k ne



Figure 25 : Profils de la fonction de distribution de Wigner et de la densité électronique associée calculés à T=300K, (a) et T=77 (b) pour une structure 100/50/100 Å à l'équilibre



Energie (meV)



(b)

(a)

(c)

permet pas de rendre compte des effets due à un doublage de l'épaisseur des barrières et qu'il faut par conséquent penser à prendre beaucoup plus de points et probablement développer une lois exponentielle dans ce sens afin de pouvoir espérer d'avoir des résultats numériques acceptables. L'autre fait marquant de ce type d'augmentation du nombre de points, révélé dans le cas des barrières minces 28/45/28 Å, est que sans adaptation du pas de discrétisation Δk au type de structure étudiée on risque toujours de mal définir le pic de transmission et donc de contourner le phénomène de résonance.

Ces constatations confirment les prédictions précédentes selon lesquelles il faut adapter à la fois le nombre de points Nk et le pas Δk de discrétisation en fonction des structures étudiées et en occurrence en fonction de l'épaisseur de leurs barrières.

Or comme nous l'avions souligné en début de ce paragraphe, l'augmentation du nombre de points en k engendre un sérieux problème lié à la *grandeur de la matrice* dont les dimensions sont fonctions directes de Nk. On est par conséquent très vite confronté à un *problème matériel* lié à la limitation en *capacité de mémoire* du calculateur et à fortiori cela nous éloigne de notre objectif initial qui consistait à trouver un outil de calculs numériques gérable par un calculateur de bureau. On peut par exemple citer le fait que l'emploi d'une station de travail de type HP 715/50 comme celle utilisée pour effectuer la plupart des calculs énumérés ci-dessus reste inadéquat pour des valeurs de Nk > 80 et que nous avons été obligé de nous diriger vers le centre interuniversitaire du traitement informatique (CITI) de l'université de Lille I afin d'effectuer les calculs envisagés.

D'autre part le pas de discrétisation Δk (= $\pi/Nk.\Delta R$), étant inversement proportionnel au nombre de points Nk, nous n'avons pu jusqu'ici utiliser qu'un pas de discrétisation régulier et constant. Or comme nous l'avions remarqué plus haut il faut adapter ce pas selon le type de structure tout en variant le nombre de points Nk afin de pouvoir avoir un grand espoir de se positionner près du maximum du pic de transmission. Pour cela la seule solution serait de définir un pas très serré dans la région où le pic a lieu et de prendre un pas plus grand de part et d'autre de celui-ci. Autrement dit il faudrait penser à utiliser un pas de discrétisation variable. En d'autres termes d'une polarisation à l'autre il faudrait changer ce pas de manière à suivre le déplacement du niveau d'énergie résonant dans le puits de potentiel ou le déplacement du pic de transmission correspondant.

La mise en oeuvre de cette méthode n'est pas simple, si l'on considère le fait qu'actuellement nous ne traitons qu'un modèle unidimensionnel et qu'un outil numérique acceptable doit être évolutif vers un traitement à 2D ou 3D ; ceci peut difficilement être envisagé du fait des remarques faites ci-dessus.

II-4- Conclusion

- Dans ce chapitre nous avons présenté le formalisme de la fonction de Wigner; en tant que cas particulier du formalisme de Keldysh; et nous l'avons appliqué à l'étude du transport électronique dans une diode à effet tunnel résonant fonctionnant en régime statique. Après avoir établit l'équation de transport dans le cas général d'une masse effective variable, nous avons traité la question de la résolution numérique de cette équation en précisant les conditions aux limites.

Les résultats sont donnés pour un modèle de diode unidimensionnel avec une masse effective constante et une carte de potentiel non "self-consistent", fixée, à priori, de manière raisonnable. Par ailleurs les contacts qui permettent de polariser la diode sont assimilés à des réservoirs de particules à l'équilibre caractérisés chacun par une température et une fonction de distribution énergétique classique déterminée par un potentiel chimique.

Ces simplifications sont probablement une des causes des désaccords entre nos résultats et les résultats expérimentaux rapportés dans la littérature, en particulier ceux à température variable. Alors que les calculs faits à partir de la fonction de Wigner conduisent à *sous estimer* le rapport Ipic/Ivallée *aux basses températures*, des calculs faits dans des conditions analogues avec la méthode de Schrödinger conduisent à une forte *sur estimation* de ce rapport.

Une analyse plus poussée de nos résultats montre, qu'au delà d'une critique des simplifications du modèle, il convient de modifier la conduite des calculs, en particulier dans le cas des systèmes à barrières épaisses pour effectuer un échantillonnage en "k" adapté aux courbes de transmission présentant des pics de résonance de faible largeur énergétique.

En séparant ainsi ce qui relève strictement du traitement numérique, nous pensons avoir contribué à préciser les conditions d'un usage optimal de la fonction de Wigner. Ces conditions sont les suivantes :

Talcul préalable séparé de la transformée de Fourier V(R,k), par FFT (= transformée de Fourier rapide), sur un domaine en r suffisant pour éviter tout recouvrement parasite par effet de périodisation.

Tusage d'une rampe de Nicolson dans le cas d'une polarisation appliquée au système.

Thoix d'un pas variable en k adapté à la courbe de transmission du problème pour la résolution de l'équation de Wigner.

En dépit des améliorations attendues par la mise en oeuvre de cette stratégie, l'équation de transport de Wigner ne paraît pas assez souple pour inclure des modifications aptes à rendre le modèle plus prédictif. C'est là, pour nous, que réside en définitive son principal défaut.

De ce point de vue le formalisme des fonctions de Green est à priori plus prometteur. Ainsi, faute de résultats suffisamment probants <u>même en utilisant une masse effective variable et un</u> <u>potentiel self-consistent</u>, nous avons choisi de nous limiter à la présentation des cas les plus simples, et de ne pas étendre l'étude avec le formalisme de Wigner en alourdissant le calcul par d'autres complications. Nous suivons en cela notre objectif de départ consistant à travailler avec des moyens de calcul standard aptes à des simulations "légères" de composants.

Finalement il faut admettre que, bien que le formalisme de Wigner dans une approche purement cohérente, ne permette pas de rendre compte de l'ensemble des données expérimentales relatives à des structures à effet tunnel résonant, elle offre la possibilité de considérer la structure dans son ensemble (c'est à dire les zones d'accès + la zone active). Ce n'est pas le cas pour des traitements directs de l'équation de Schrödinger qui imposent des simulations séparées avec la difficulté du raccordement des solutions.

Par ailleurs la prise en compte des effets d'interactions par ces deux approches ne peut se faire que par l'introduction d'un facteur phénoménologique.

CHAPITRE III

Modèle des Fonctions "Self-energy" Locales

<u>Chapitre III</u>

Modèle des fonctions "self-energy" locales

III-1- Introduction

- L'introduction des fonctions "self-energy" locales dans les équations (I-5-4) et (I-5-5) pour le calcul couplé de G^R et G[<] correspond au modèle de Datta & al (S.Datta, 1990) qui fait suite aux travaux de Caroli & al (1971 a & b). Ce modèle permet de prendre en compte d'une manière générale, la diffusion des électrons et de définir en relation avec elle, un temps de perte de cohérence de phase τ_{ϕ} (r;E) qui est local et dépend de l'énergie.

Dans ce chapitre, nous utilisons le modèle de Datta pour reprendre l'étude des contacts et traiter l'ensemble composant-contacts.

Après avoir présenté les principaux éléments du formalisme, nous détaillons le calcul des expressions liées aux grandeurs physiques essentielles : densité d'états, densité de porteurs, courant. Nous montrons alors comment traiter de façon analytique l'influence des contacts considérés comme des réservoirs de taille infinie.

Nous présentons ensuite les résultats des calculs numériques en soulignant le fait qu'ils sont relatifs à un régime d'équilibre local et que τ_{ϕ} est traité comme un paramètre. Les simulations de composants faites dans ces conditions et en particulier celles de quelques modèles de diode à effet tunnel résonant sont confrontées aux résultats expérimentaux de la littérature.

III-2- Description de l'outil mathématique

III-2-1- Fonctions "self-energy" locales

-Le modèle de Datta repose sur la considération d'un hamiltonien monoélectronique total se décomposant en trois termes définis comme suit :

- H₀(r) Hamiltonien életronique écrit dans l'approximation de la masse effective m* :

$$H_0(r) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + e.v(r)$$
 (III-2-1)

Le terme de potentiel scalaire v(r) permet d'introduire la discontinuité des bandes due aux hétérojonctions, les courbures de bandes dues aux effets des charges d'espace (cas d'un potentiel "self-consistent" de l'équation de Poisson), ainsi que le potentiel appliqué extérieur

- H_R ; Hamiltonien d'un bain de diffuseurs à l'équilibre indicés par m :

$$H_R = \sum_m \hbar \omega_m (a_m^+ a_m + \frac{1}{2})$$
 (III-2-2)

où a_m^+ et a_m sont respectivement les opérateurs de création et d'annihilation pour l'oscillateur m.

- H_{int} ; l'Hamiltonien d'interaction électron-diffuseurs :

$$H_{int} = \sum_{m} U\delta^{3}(r - r_{m}) (a_{m}^{+} + a_{m})$$
(III-2-3)

où le facteur U traduit l'intensité de l'interaction supposée strictement locale. L'auteur du modèle généralise l'écriture de H_{int} (r) en passant à un continuum spectral et en introduisant une fonction $UJ_0(r; \hbar\omega)$ à la place de U.

Dans ces conditions, on a la relation de passage suivante :

$$\sum_{m} \Rightarrow \int d^{3}r \int d^{3}(\hbar\omega) J_{0}(r; \hbar\omega)$$
(III-2-4)

En traitant H_{int} (r) au premier ordre dans l'approximation de Hartree-Fock (Fetter-Walecka, 1978) on aboutit alors (voir annexe III-A) à l'expression des fonctions "self-energy" :

$$\Sigma^{>}(\mathbf{r},\mathbf{r}'; \mathbf{E}) = \frac{-i\hbar}{\tau_{n}(\mathbf{r}; \mathbf{E})} \,\delta^{3}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{III-2-5}$$

$$\Sigma^{<}(\mathbf{r},\mathbf{r}'; \mathbf{E}) = \frac{i\hbar}{\tau_{p}(\mathbf{r}; \mathbf{E})} \,\delta^{3}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{III-2-6}$$

$$\Sigma^{R}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\mathbf{E}) = \frac{\hbar}{2\pi} \,\delta^{3}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \,\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\mathbf{E}'}{\mathbf{E}-\mathbf{E}'+i\epsilon} \,\frac{1}{\tau_{\varphi}(\mathbf{r};\mathbf{E})} \tag{III-2-7}$$

soit :

$$\operatorname{Im}\left\{\Sigma^{R}(\mathbf{r},\mathbf{r}'; \mathbf{E})\right\} = \frac{-\hbar}{2\tau_{\varphi}(\mathbf{r};\mathbf{E})} \,\delta^{3}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{III-2-8}$$

$$\operatorname{Re}\left\{\Sigma^{R}(r,r'; E)\right\} = \sigma^{R}(r; E) \,\delta^{3}(r-r') \tag{III-2-9}$$

$$\sigma^{R}(r;E) = \frac{\hbar}{2\pi} P \int \frac{dE'}{(E-E')\tau_{\varphi}(r;E')}$$
(III-2-10)

où P représente la partie principale de l'intégrale.

avec :

$$\frac{1}{\tau_{n}(r;E)} = \frac{2\pi}{\hbar} \int dE' F(r; E'-E) p(r;E')$$
(III-2-11)

$$\frac{1}{\tau_{p}(r;E)} = \frac{2\pi}{\hbar} \int dE' F(r; E-E') n(r;E')$$
(III-2-12)

avec:
$$F(r;\epsilon) = U^2 J_0(r; |\epsilon|) \begin{cases} N(\epsilon) , \epsilon > 0 \\ N(|\epsilon|) + 1 , \epsilon < 0 \end{cases}$$
 (III-2-13)

où N(ϵ) est la fonction de distribution énergétique du type Bose-Einstein.

n(r;E) est la densité électronique et p(r;E) la densité de trous dans la bande de conduction. Les relations (III-2-11) et (III-2-12) introduisent respectivement les durées de vie des électrons et des trous au point r dans l'état d'énergie E. Par ailleurs (III-2-8) fait intervenir le temps $\tau_{\phi}(r;E)$ de perte de cohérence de phase défini à partir de la relation suivante :

$$\frac{1}{\tau_{\varphi}(r;E)} = \frac{1}{\tau_{n}(r;E)} + \frac{1}{\tau_{p}(r;E)}$$
(III-2-14)

Physiquement la quantité $\tau_{\phi}(r; E)$ représente le *temps de perte de cohérence de phase ou le temps de relaxation de phase*. C'est ce qui va représenter les interactions électron-phonons dans le modèle.

Il est intéressant de remarquer que la durée de relaxation de phase $\tau_{\phi}(r;E)$ n'est pas simplement égale à la durée de vie de l'électron $\tau_n(r;E)$ mais plutôt une combinaison parallèle des durées de vie de l'électron et du trou de la bande de conduction considérée. Pour en trouver une interprétation physique on peut se référer à l'ouvrage de Baym-Kadanoff (chap 4.4). Selon ces auteurs il y a une perte de cohérence de phase de la fonction de Green à une seule particule dès que l'électron additionnel perturbe l'évolution libre du bain d'oscillateurs et cela peut se produire de deux façons: 1) l'électron est diffusé de son état (= out-scattering) après une interaction avec le bain d'oscillateurs, ou, 2) l'électron est " empêché " ou freiné dans sa diffusion (= in-scattering) ; qui devrait avoir lieu par une interaction avec le bain d'oscillateurs; à cause du principe d'exclusion de Pauli qui postule un seul électron par état énergétique. Dans le premier cas le processus se déroule à un taux égal à (n/τ_n) tandis que le second s'effectue avec un taux (n/τ_p) traduisant enfin un bilan total du taux de rupture de phase égal à (n/τ_{ϕ}) .

III-2-2- Equation de transport pour GR

- En substituant la fonction \tilde{G}^{c} par la relation (I-4-29) et la fonction Σ^{c} par la relation (I-4-43) l'équation de transport (I-5-4) pour $G^{<}$ s'écrit après un changement de variable sous forme sivante:

$$\begin{bmatrix} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0(x) \end{bmatrix} G^{<}(x, x') = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x_3 \Big[\Sigma^{R}(x, x_3) G^{<}(x_3, x') + \Sigma^{<}(x, x_3) G^{R*}(x_3, x') \Big]$$

où x = (r, t)

où nous avons utilisé le fait que les deux fonctions G^r et G^a sont conjuguées hermitiques. (voir relation (I-4-34)).

La transformée de Fourier de l'équation (III-2-15) par rapport à (t₁-t₂) nous permet d'écrire :

$$\begin{bmatrix} E - H_0(r) \end{bmatrix} G^{<}(r, r'; E) - \int d^3 r_3 \Sigma^{R}(r, r_3; E) G^{<}(r_3, r'; E) = = \int d^3 r_3 \Sigma^{<}(r, r_3; E) G^{R^*}(r', r_3; E)$$
(III-2-16)

(III-2-15)

Il faut noter qu'en régime stationnaire les fonctions self énergies comme les fonctions de Green dépendent uniquement de la différence comme $(t - t_3)$. Donc les intégrales représentent le produit de convolution dans le domaine temps dont la transformée de Fourier est un produit simple dans le domaine énergie. (Voir annexe III-B)

Le choix du type d'interaction comme expliqué ci-dessus nous a permis de trouver des expressions explicites pour $\Sigma^{<}$ et Σ^{R} . La substitution de ces fonctions par leurs expressions respectives dans l'équation (III-2-16) nous donne l'équation de transport simplifiée suivante pour le propagateur $G^{<}$:

$$E - H_{0}(r) - \sigma^{R}(r; E) + \frac{i\hbar}{2\tau_{\phi}(r; E)} G^{<}(r, r'; E) = i\hbar \frac{G^{R^{*}}(r', r; E)}{\tau_{p}(r; E)}$$
(III-2-17)

A ce stade il suffit uniquement de connaître G^{R^*} afin de résoudre cette équation et ainsi accéder à la quantité recherchée $G^<$. Mais pour cela il nous suffit de calculer la fonction G^R à partir d'une équation appropriée. Une telle équation a déjà était établie dans le premier chapitre. Nous reprenons ci-dessous la relation (I-5-5):

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0(x)\right] G^R(x,x') - \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x_3 \left[\Sigma^R(x,x_3)G^R(x_3,x')\right] = \delta^4(x-x') \quad \text{(III-2-18)}$$

La transformée de Fourier de cette équation nous donne :(voir annexe III-B)

$$\left[E - H_0(r)\right] G^R(r,r';E) - \int_{-\infty}^{+\infty} d^3r_3 \left[\Sigma^R(r,r_3;E)G^R(r_3,r';E)\right] = \delta^3(r-r') \quad (\text{III-2-19})$$

En substituant la fonction Σ^{R} par son expression (relation III-2-7) nous obtenons alors l'équation de transport recherchée pour G^{R} :

$$\left[E - H_{0}(r) - \sigma^{R}(r; E) + \frac{i\hbar}{2\tau_{\varphi}(r; E)}\right]G^{R}(r, r'; E) = \delta^{3}(r - r')$$
(III-2-20)

En utilisant cette équation nous pouvons écrire la solution de l'équation (III-2-17) comme (voir annexe III-C) :

$$G^{<}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\mathbf{E}) = i\hbar \int d^{3}r_{3} \frac{G^{R}(\mathbf{r},\mathbf{r}_{3};\mathbf{E}) G^{R^{*}}(\mathbf{r}',\mathbf{r}_{3};\mathbf{E})}{\tau_{p}(\mathbf{r}_{3};\mathbf{E})}$$
(III-2-21)

III-2-3- Etablissement de l'expression du Courant

a) Relation de continuité et découplage des énergies

- Comme nous l'avons vu dans le premier chapitre la densité de courant s'obtient à partir des élements non diagonaux de la fonction de corrélation $G^{<}$ (voir annexe III-E-a) :

$$J(r;E) = -\frac{e\hbar}{4\pi m^*} \lim_{r \to r'} (\nabla - \nabla')G^{<}(r,r';E)$$
(III-2-22)

Or la fonction $G^{<}$ étant calculable à partir de la fonction de Green retardé G^{R} , il sera alors plus judicieux d'exprimer la densité de courant directement en fonction de celle-ci. Pour cela il suffit de substituer à $G^{<}$ son expression (III-2-21). Ainsi dans le cadre du modèle d'interaction choisi, on peut exprimer la densité de courant par la relation suivante :

$$J(r;E) = -\frac{ie\hbar^{2}}{4\pi m^{*}} \int \frac{d^{3}r'}{\tau_{p}(r';E)} x$$

$$x \left\{ \left[\nabla G^{R}(r,r';E) \right] G^{R^{*}}(r,r';E) - G^{R}(r,r';E) \left[\nabla G^{R^{*}}(r,r';E) \right] \right\}$$
(III-2-23)

Ainsi la connaissance de G^R nous permet de calculer directement la densité de courant sans avoir besoin de passer encore par la fonction de corrélation $G^<$.

Il est clair qu'en régime stationnaire la densité de courant à l'intérieur du système doit rester constante et independante de la position. Sa divergence dans ce cas est nulle.

La dérivée par rapport à r de la densité de courant (III-2-23) nous permet d'écrire : (annexe III-E-b)

$$\nabla J(r; E) = \frac{e\hbar}{2\pi} \int \frac{d^3r'}{\tau_p(r'; E)} \left[\frac{2\pi}{\hbar} N_0(r; E) \delta^3(r - r') - \left(\frac{\left| G^R(r, r'; E) \right|^2}{\tau_\phi(r; E)} \right) \right]$$
(III-2-24)

Or pour une même bande, en l'occurrence la bande de conduction, la densité d'états est donnée par :

$$N_0(r;E) = n(r;E) + p(r;E)$$
 (III-2-25)

mais puisque

$$n(r; E) = -\frac{i}{2\pi} G^{<}(r, r; E)$$
 (III-2-26)

en remplaçant la fonction $G^{<}$ par son expression (III-2-21) on obtient :

$$\nabla J(r; E) = e \left[\frac{n(r; E) + p(r; E)}{\tau_p(r; E)} - \frac{1}{\tau_{\phi}(r; E)} \frac{\hbar}{2\pi} \int d^3 r' \frac{\left| G^R(r, r'; E) \right|^2}{\tau_p(r'; E)} \right]$$
$$= e \left[\frac{n(r; E) + p(r; E)}{\tau_p(r; E)} - \frac{n(r; E)}{\tau_{\phi}(r; E)} \right]$$
(III-2-27)

mais compte tenu de la relation :(voir annexe III-A)

$$\frac{1}{\tau_{\varphi}(r;E)} = \frac{1}{\tau_{p}(r;E)} + \frac{1}{\tau_{n}(r;E)}$$
(III-2-28)

on peut écrire :

$$\nabla J(r; E) = e \left[\frac{p(r; E)}{\tau_p(r; E)} - \frac{n(r; E)}{\tau_n(r; E)} \right]$$
(III-2-29)

Le premier terme du second membre traduit le taux de diffusion des électrons *entrant* (ou trous sortant) dans l'état énergétique E tandis que le deuxième terme représente le taux de diffusion des électrons *sortant* (ou trous entrant) de cet état au même point r :

Lors du calcul de la densité de courant il est important que la *relation de continuité* suivante soit verifiée.

$$\nabla J(r) = \int dE \ \nabla J(r; E) = 0$$
(III-2-30)

Hypothèse de l'équilibre local

Si la distribution énergétique locale des électrons f(r;E) est de type Fermi-Dirac avec un *potentiel* chimique local $\mu(r)$ on se trouve alors dans l'hypothèse de l'équilibre local et on peut écrire :

$$\frac{n(r;E)}{N_0(r;E)} = f(r;E) = \frac{1}{e^{\frac{(E-e\mu(r))}{K_BT}} + 1}$$
 (III-2-31)

Il s'en suit que :

$$\frac{p(r;E)}{N_0(r;E)} = 1 - f(r;E)$$
(III-2-32)

Pour être clair, il faut souligner ici que d'une manière générale la densité de charge n(r;E) peut toujours se mettre sous forme du produit d'un certain facteur d'occupation f(r;E) et de la densité d'états correspondante N₀(r;E), mais dans ce cas-là la fonction f(r;E) n'est pas nécessairement de la forme Fermi-Dirac mentionnée ci-dessus et elle peut avoir une forme quelconque et donc définir une autre loi de distribution énergétique. Ce n'est que dans le cadre d'une hypothèse de l'équilibre local basée sur la définition d'un potentiel chimique local $\mu(r)$, comme nous l'avons fait, qu'on peut admettre une forme Fermi-Dirac pour la fonction f(r;E).

A l'équilibre ; en absence de polarisation exterieure; le potentiel chimique $\mu(r)$ est constant partout et égal à l'énergie du niveau de Fermi E_F . L'hypothèse ci-dessus est donc évidement valide .

On peut alors déduire de ces relations que :

$$n(r;E)p(r;E') / p(r;E)n(r;E') = e^{(E'-E)/K_{B}T}$$
(III-2-33)

par ailleurs compte tenu de la relation (III-2-13) on peut écrire :

$$F(r; E-E') / F(r; E'-E) = e^{(E'-E)/K_BT}$$
 (III-2-34)

et donc :

$$n(r;E) F(r; E'-E) p(r;E') = p(r;E) F(r; E-E') n(r;E')$$
(III-2-35)

ce qui par intégration par parties sur E' et compte tenu des expressions de (III-2-11) pour $\tau_n(r, E)$ et (III-2-12) pour $\tau_p(r, E)$ nous conduit à la relation suivante :

$$\frac{\mathbf{p}(\mathbf{r};\mathbf{E})}{\tau_{\mathbf{p}}(\mathbf{r};\mathbf{E})} = \frac{\mathbf{n}(\mathbf{r};\mathbf{E})}{\tau_{\mathbf{n}}(\mathbf{r};\mathbf{E})}$$
(III-2-36)

Ceci traduit le fait que *dans ces conditions* la fraction d'électrons qui *quittent* l'état énergétique E est *exactement compensée* par la fraction d'électrons qui *atteignent* cet état.

Par conséquent *pour chaque énergie* E la divergence de la densité de courant $\nabla J(r; E)$ représentant le <u>flux des porteurs</u> d'un état énergétique à un autre sera nulle. Ainsi on peut dire qu'il y a un découplage complet des énergies car $\nabla J(r; E) = 0$ quelque soit l'énergie E. Cela implique que les calculs dans le domaine énergétique E peuvent être effectués énergie par énergie et donc de façon indépendante. Par exemple le calcul de f(r; E) en fonction de l'énergie E peut se faire énergie par énergie sans s'occuper de couplage entre ces énergies et cela quelque soit la position r

\Box <u>Une relation simple et importante entre τ_{p} et τ_{o} </u>

- En ajoutant la quantité (n / τ_p) aux deux membres de cette relation et en utilisant les relations (III-2-25) et (III-2-28) nous obtenons :

$$\frac{\mathbf{n}(\mathbf{r};\mathbf{E})}{\tau_{\varphi}(\mathbf{r};\mathbf{E})} = \frac{\mathbf{N}_{0}(\mathbf{r};\mathbf{E})}{\tau_{p}(\mathbf{r};\mathbf{E})}$$
(III-2-37)

ou encore puisque :

$$n(r; E) = N_0(r; E) f(r; E)$$
 (III-2-38)

on peut alors établir une relation simple entre $\tau_p(r; E)$ et $\tau_{\phi}(r; E)$:

$$\frac{1}{\tau_{p}(r;E)} = \frac{f(r;E)}{\tau_{\varphi}(r;E)}$$
(III-2-39)

b) Courant Terminal

- En utilisant l'expression intégrale de la densité d'états suivante :(relation AIII-48, annexe III-D)

$$N_{0}(r;E) = \frac{\hbar}{2\pi} \int d^{3}r' \frac{\left|G^{R}(r,r';E)\right|^{2}}{\tau_{\phi}(r';E)}$$
(III-2-40)

et compte tenu de la relation (III-2-38) on peut écrire la relation (III-2-24) sous forme suivante :

$$\nabla J(r; E) = \frac{e\hbar}{2\pi} \int d^3r' \frac{|G^R(r, r'; E)|^2}{\tau_{\varphi}(r; E)\tau_{\varphi}(r'; E)} [f(r'; E) - f(r; E)]$$
(III-2-41)

Etant en régime stationnaire la densité de courant est constante à l'intérieur du système et nulle dans les contacts puisque le potentiel chimique y est constant. Ceci implique que la divergence de la densité de courant soit uniqument *non nulle à l'interface contact-système*.

Par conséquent ce n'est que dans les zones frontalières c'est à dire les interfaces système-contacts que le courant peut étre calculé et cela dans l'un ou l'autre des deux contacts et pour les points très proches des interfaces en question.

Le courant terminal I_i provenant d'un contact i est donc obtenu par le calcul du flux passant au travers de la surface S_i de celui-ci :

$$I(r;E) = -\nabla J(r;E)$$
(III-2-42)

$$I_i = \int dE \int_{r \in \Omega_i} I(r; E) d^3r \qquad (III-2-43)$$

En utilisant le théorème de la divergence appliqué au volume Ω_i du contact C_i on définit le courant terminal au travers de la surface S_i :

$$I_i(E) = \int_{\Omega_i} \nabla J(r; E) d^3 r = \int_{S_i} J(r; E) dS_i$$
 (III-2-44)

d'où :

$$I_{i} = \int dE \ I_{i}(E) = \int dE \ \int_{S_{i}} J(r; E) \ dS_{i}$$
 (III-2-45)

et finalement :

$$I_{i} = \frac{e}{h} \int dE \int_{\Omega_{i}} d^{3}r \int d^{3}r' \frac{\hbar^{2} \left| G^{R}(r,r';E) \right|^{2}}{\tau_{\varphi}(r;E)\tau_{\varphi}(r';E)} \left[f(r;E) - f(r';E) \right] \quad (\text{III-2-46})$$

soit encore sous une forme plus convenable :

$$I_{i} = \frac{e}{h} \int_{\Omega_{i}} d^{3}r \int d^{3}r' \int dE T(r,r'; E) [f(r; E) - f(r'; E)]$$
avec :
$$T(r,r'; E) = \frac{\hbar^{2} |G^{R}(r,r'; E)|^{2}}{\tau_{\phi}(r; E)\tau_{\phi}(r'; E)}$$
(III-2-47)

C'est le courant terminal calculé dans le contact " i ". Ce courant est <u>variable en fonction de la</u> <u>température</u> par le biais de la fonction de distribution f(r; E).

Pour calculer ces fonctions de distribution on peut utiliser une relation "self-consistent" qu'on obtient à l'aide de la relation (AIII-44) de l'annexe III-D. Il suffit d'utiliser la relation (III-2-38) et de remplacer $(1/\tau_p)$ par son expression (III-2-39). Ainsi on obtient :

$$f(r;E) = \int d^{3}r' \frac{\hbar^{2} |G^{R}(r,r';E)|^{2}}{2\pi N_{0}(r;E) \tau_{\phi}(r';E)} f(r';E)$$
(III-2-48)

c) Composantes cohérente et incohérente du courant

- Il est possible de distinguer les deux composantes du courant terminal en fonction du calcul de l'intégrale sur r'. En effet puisque :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d^{3}r' = \int_{r' \in cl} d^{3}r' + \int_{r' \in système} d^{3}r' + \int_{r' \in c2} d^{3}r'$$

$$= \int_{-\infty}^{N_{mn}} d^{3}r' + \int_{N_{mn}+1}^{N_{max}-1} d^{3}r' + \int_{N_{max}}^{+\infty} d^{3}r'$$
(III-2-49)

où c_1 et c_2 réferent respectivement aux volumes des contacts de gauche (dit contact 1) et de droite (dit contact 2). Alors on peut écrire :

$$I_{i} = \frac{e}{h} \int_{\Omega_{i}} d^{3}r \int d^{3}r' \int dE T(r,r'; E) [f(r; E) - f(r'; E)]$$

$$= \frac{e}{h} \int dE \int_{r \in cl} d^{3}r \int_{r' \in cl} d^{3}r' T(r,r'; E) [f(r; E) - f(r'; E)]$$

$$+ \frac{e}{h} \int dE \int_{r \in cl} d^{3}r \int_{r' \in système} d^{3}r' T(r,r'; E) [f(r; E) - f(r'; E)]$$

$$+ \frac{e}{h} \int dE \int_{r \in cl} d^{3}r \int_{r' \in c2} d^{3}r' T(r,r'; E) [f(r; E) - f(r'; E)]$$
(III-2-50)

Vu les conditions aux limites postulant un potentiel chimique constant et par là des valeurs de f(r;E) fixées dans les contacts, le premier terme de cette expression s'annule car r et r' se trouvent dans le contact 1 (noté c1) et donc f(r;E) = f(r';E). Les deux autres termes vont successivement nous donner les composantes incohérente et cohérente du courant:

$$I_{incoh} = \frac{e}{h} \int dE \int d^{3}r \int d^{3}r' T(r, r'; E) \left[f(r; E) - f(r'; E) \right]$$

$$I_{coh} = \frac{e}{h} \int dE \int d^{3}r \int d^{3}r' T(r, r'; E) \left[f(r; E) - f(r'; E) \right]$$
(III-2-51)
(III-2-51)

d) <u>Régime linéaire</u>

- A l'équilibre thermodynamique le potentiel chimique est independant de la position et donc constant partout. Par conséquent la fonction de distribution (ou la fonction d'occupation) f(r;E) se réduit à la fonction Fermi-Dirac puisque $\mu(r) = \mu_0$:

$$f(r;E) = f_{0}(E) = \frac{1}{e^{\frac{(E-e\mu_{0})}{K_{B}T}} + 1}$$
(III-2-52)

Comme on peut s'y attendre il est facile de constater que dans cette condition de fonctionnement et en absence du champ magnétique f(r;E) = f(r';E) et le courant donné par la relation (III-2-46/47) est nul. C'est la condition de *l'équilibre*.

Mais dans le cas d'un régime de fonctionnement **proche de l'équilibre** on se trouve dans le cadre d'une théorie *linéaire*. Celle-ci suppose que la fonction de distribution f(r;E) est proche de la fonction de distribution de l'équilibre $f_0(E)$ de telle manière qu'il soit possible de faire un développement limité en série de Taylor de f(r;E) autour de $\mu(r) = \mu_0$.

Ainsi en notant le fait que $(\partial / \partial \mu) = (-e \partial / \partial E)$ on peut écrire :

$$f(r; E) = f_0(E) + (-\partial f_0 / \partial E) e(\mu(r) - \mu_0)$$
(III-2-53)

d'où compte tenu d'un developpement semblable pour f(r'; E), l'on obtient l'expression du courant correspondante :

$$I_{i} = \frac{e^{2}}{h} \int_{\Omega_{i}} d^{3}r \int d^{3}r' T(r, r') \left[\mu(r) - \mu(r')\right]$$

avec :
$$T(r, r') = \int dE \frac{\hbar^{2} \left| G^{R}(r, r'; E) \right|^{2}}{\tau_{\varphi}(r; E) \tau_{\varphi}(r'; E)} \left(-\frac{\partial f_{0}}{\partial E} \right)$$
(III-2-54)

De la même manière que pour le cas général du paragraphe précédent on obtient pour les deux composantes du courant les expressions suivantes :

$$I_{incoh} = \frac{e^2}{h} \int_{r \in cl} d^3r \int_{r \in système} d^3r' T(r, r') [\mu(r) - \mu(r')]$$

$$I_{coh} = \frac{e^2}{h} \int_{r \in cl} d^3r \int_{r' \in c2} d^3r' T(r, r') [\mu(r) - \mu(r')]$$
(III-2-55)

Pour calculer le potentiel chimique il suffit de substituer le dévéloppement (III-2-53) dans la relation (III-2-48) en se limitant aux termes du 1er ordre et d'utiliser l'identité établie par la relation (III-2-40). Ainsi on obtient :

$$\mu(\mathbf{r}) = \frac{\int d^{3}\mathbf{r}' \ T(\mathbf{r},\mathbf{r}') \ \mu(\mathbf{r}')}{\int d^{3}\mathbf{r}' \ T(\mathbf{r},\mathbf{r}')}$$
avec :

$$T(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \int dE \ \frac{\hbar^{2} |G^{R}(\mathbf{r},\mathbf{r}';E)|^{2}}{\tau_{m}(\mathbf{r};E)\tau_{m}(\mathbf{r}';E)} \left(-\frac{\partial f_{0}}{\partial E}\right)$$
(III-2-56)

e) <u>Cas particulier</u> : $T \rightarrow 0$

- Dans le cas limite où la température atteint le zéro absolu le transport s'éffectue par les électrons dont l'énergie est proche du niveau de Fermi et l'on peut alors calculer la fonction de Green retardée G^R uniquement à cette énergie. Dans ces conditions l'équation de transport s'écrit :

$$\left[E_{F} - H_{0}(r) + \frac{i\hbar}{2\tau_{\phi}(r; E_{F})}\right]G^{R}(r, r'; E_{F}) = \delta^{3}(r - r')$$
(III-2-57)

où E_F est l'énergie du niveau de Fermi et bien sûr : $E_F = \mu_0$. Ainsi en utilisant la méthode d'intégration de Sommerfeld (voir annexe III-F), on peut écrire :
$$T(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \int d\mathbf{E} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{E}} \right) \frac{\hbar^2 \left| \mathbf{G}^{\mathbf{R}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\mathbf{E}) \right|^2}{\tau_{\varphi}(\mathbf{r};\mathbf{E})\tau_{\varphi}(\mathbf{r}';\mathbf{E})}$$

$$\approx \frac{\hbar^2 \left| \mathbf{G}^{\mathbf{R}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\mathbf{E}_{\mathbf{F}}) \right|^2}{\tau_{\varphi}(\mathbf{r};\mathbf{E}_{\mathbf{F}})\tau_{\varphi}(\mathbf{r}';\mathbf{E}_{\mathbf{F}})}$$
(III-2-58)

car (- $\partial f_0 / \partial E$) $\approx \delta$ (E-E_F).

III-2-4- Expression de la densité locale de charges

- Compte tenu de ce qui a été dit on peut établir une expression générale pour la densité de charges par le produit de la densité d'états et du facteur d'occupation :

$$n(r;E) = N_0(r;E) f(r;E)$$

où le facteur d'occupation f(r;E) est calculé par la relation (III-2-48) dans le cas général tandis que dans le cas d'un régime linéaire à partir de la relation (III-2-31) et le calcul du potentiel chimique local "self-consistent" comme expliqué ci-dessus (relation III-2-56).

Et la densité locale d'états est donnée par :(voir annexe III-D)

$$N_0(r; E) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Jm} G^R(r, r; E)$$
 (III-2-59)

En intégrant sur les énergies on peut obtenir la densité locale de charges :

$$n(r) = \int dE N_0(r; E) f(r; E)$$
 (III-2-60)

il faut souligner que l'évaluation de la fonction de distribution f(r;E) dans le cas d'un régime linéaire est basée sur le calcul "self-consistent" du potentiel chimique local (relation III-2-56). En régime non linéaire cette fonction s'obtient directement à partir d'un calcul "self-consistent" (relation III-2-48).

III-3- <u>Discrétisation et mise au point de l'outil numérique pour un</u> système 1-D

- Afin de faciliter les calculs numériques nous allons négliger a quantité $\sigma^{R}(r;E)$ constituant la partie réelle de la fonction "self-energy" Σ^{R} . En effet dans ce qui va suivre ce facteur $\sigma^{R}(r;E)$ n'aura pas d'effets qualitatifs importants sur nos développements ou nos résultats numériques et c'est pour diminuer le temps de calcul essentiellement au niveau des itérations sur les

énergies (voir relation (III-2-10)) que nous négligeons ce facteur. Pour plus de détails sur ce facteur on peut se reporter à l'article de " E. V. Anda & al, J. Phys. Condens. Matter 3,9087(1991) ".

III-3-1- Modèle quasi 1-D

- Nous venons de voir que le calcul de G[<] peut se résumer au calcul de G^R et que pour accéder aux quantités physiques qui nous intéressent telles que la densité locale de charges n(r) ou le courant il suffisait de calculer la fonction de Green retardée G^R (r,r';E). C'est la résolution de l'équation de transport (III-2-20) qui va nous permettre de calculer cette fonction. Cette équation est écrite pour un *milieu infini* du modèle à trois dimensions (dénotée 3D).

Nous supposons qu'il y a une *invariance translationnelle* dans le plan transverse (x, y). Ainsi le transport a lieu selon la direction longitudinale " z ".

La simulation d'un composant sous conditions d'une *invariance translationnelle dans le plan transverse* permet de calculer les quantités physiques à une dimension. Pour cela il suffit de faire une projection sur les états propres transverses et de moyenner chacune des équations envisagées sur la section transverse du composant. Le détail de ces opérations se trouve dans l'annexe (AIII-G). On montre dans cette annexe que les calculs pour le modèle quasi 1-D peuvent se résumer à une évalution des résultats obtenus par le traitement d'un problème strict 1D pour lequel il suffit de calculer la fonction $G_{1D}^{R}(z, z; E)$ solution de l'équation strict 1D de transport suivante :

$$\left[E - H_0(z) + \frac{i\hbar}{2\tau_{\varphi}(z; E)}\right] G_{1D}^R(z, z'; E) = \delta(z - z')$$
(III-3-1)

où l'Hamiltonien de la masse effective $H_0(z)$ est de la forme suivante :

$$H_{0}(z) = -\frac{\hbar^{2}}{2m^{*}} \frac{d^{2}}{dz^{2}} + |e|v(z)$$
(III-3-2)

Ainsi la version 1-D des différentes équations que nous allons employer pour nos calculs numériques sont les suivantes:

a) Expressions des Courants quasi 1-D

- On calcule le courant terminal dans le contact 1 par la relation suivante :

$$I_{1} = \frac{2\pi m^{*}e}{h^{3}} \int_{c_{1}} dz \int dz' \int dE \int_{-\infty}^{E} dE' \frac{\hbar^{2} |G_{1D}^{R}(z,z';E')|^{2}}{\tau_{\varphi}(z;E') \tau_{\varphi}(z';E')} [f(z;E) - f(z';E)]$$
(III-3-3)

ou encore :

$$I_{1} = \frac{e}{h} \int_{c_{1}} dz \int dz' \int dE T(z;z';E) [f(z;E) - f(z';E)]$$
(III-3-4)

avec :

$$T(z,z';E) = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \int_{-\infty}^{E} dE' \frac{\hbar^2 |G_{1D}^{R}(z,z';E')|^2}{\tau_{\varphi}(z;E') \tau_{\varphi}(z';E')}$$
(III-3-5)

où la fonction de distribution quasi 1-D est calculée par la relation "self-consistent" suivante:

$$f(z;E) = \frac{\int dz' T(z,z';E) f(z';E)}{\int dz' T(z,z';E)}$$
(III-3-6)

Composantes cohérente et incohérente du courant

$$I_{incoh} = \frac{e}{h} \int dE \int dz \int dz' T(z, z'; E) [f(z; E) - f(z'; E)]$$

$$I_{coh} = \frac{e}{h} \int dE \int dz \int dz' T(z, z'; E) [f(z; E) - f(z'; E)]$$
(III-3-7)

<u>Régime linéaire</u>

- De la même manière que ci-dessus on obtient les expressions quasi 1-D suivantes pour le courant et ses composantes :

$$I_{1} = \frac{e^{2}}{h} \int_{c1} dz \int dz' T(z, z') [\mu(z) - \mu(z')]$$
(III-3-8)
$$T(z, z') = \frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_{0}(E) \frac{\hbar^{2} |G_{1D}^{R}(z, z'; E)|^{2}}{\tau_{\phi}(z; E)\tau_{\phi}(z'; E)}$$
(III-3-9)

où $\mu(z)$, le potentiel chimique local quasi 1-D est donné par de la relation "self-consistent" suivante :

$$\mu(z) = \frac{\int dz' T(z, z')\mu(z')}{\int dz' T(z, z')}$$
(III-3-10)

ainsi les composantes correspondantes sont :

$$I_{\text{incoh}} = \frac{e^2}{h} \int_{z \in c1} dz \int_{z' \in système} T(z, z') \left[\mu(z) - \mu(z') \right]$$
(III-3-11)

$$I_{coh} = \frac{e^2}{h} \int_{z \in c1} dz \int_{z' \in c2} dz' T(z, z') \left[\mu(z) - \mu(z') \right]$$

<u>Cas particulier</u> : $T \rightarrow 0$

- Dans ce cas l'équation de transport quasi 1-D sera évaluée à $E=E_F$ et l'on a :

$$\left[E_{F} - H_{0}(z) + \frac{i\hbar}{2\tau_{\phi}(z; E_{F})}\right]G_{1D}^{R}(z, z'; E_{F}) = \delta(z - z') \qquad (III-3-12)$$

L'intégrale sur les énergies E étant supprimée par le développement de Sommerfeld alors le potentiel chimique local quasi 1-D nécessaire pour le calcul du courant par la relation (III-3-8) sera la suivante:

$$\mu(z) = \frac{\int dz' \ \mu(z') \int_{-\infty}^{E_{F}} dE' \ \frac{\left|G_{1D}^{R}(z, z'; E')\right|^{2}}{\tau_{\phi}(z; E') \ \tau_{\phi}(z'; E')}}{\int dz' \int_{-\infty}^{E_{F}} dE' \ \frac{\left|G_{1D}^{R}(z, z'; E')\right|^{2}}{\tau_{\phi}(z; E') \ \tau_{\phi}(z'; E')}}$$
(III-3-13)

b) Densité locale d'états quasi 1-D

$$N_{0}(z;E) = \frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \int_{-\infty}^{E} dE' N_{0}^{1D}(z;E')$$
(III-3-14)

BE)

CHAPITRE III

avec :

$$N_0^{1D}(z; E') = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_{1D}^R(z, z; E')$$
(III-3-15)

On remarque donc que cette densité a la même dimension qu'en 3-D c'est à dire (m⁻³), et que la densité locale d'états pour un système physique 3D peut être évaluée à partir d'un *modèle 1D strict* pour lequel on calcule $G_{1D}^{R}(z,z;E)$.

c) Expressions des densités locales de charges quasi 1-D

- Dans le cas général d'une théorie non linéaire la densité locale de charges se calcule par la relation suivante :

$$n(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE N_0(z; E) f(z; E)$$
(III-3-16)

où la fonction f(z;E) s'obtient de façon "self-consistent" par la relation (III-3-6).

Régime linéaire

- Dans le cas de l'équilibre local comme nous l'avions déjà signalé, la fonction d'occupation f(z;E) est du type Fermi-Dirac :

$$f(z; E) = \frac{1}{e^{(E-e\mu(z))/k_BT} + 1}$$

où $\mu(z)$, le potentiel chimique local 1-D doit être calculé de façon "self-consistent" par la relation (III-3-10) ou (III-3-13).

Or cette forme particulière de f(z;E) nous permet de trouver une expression plus simple pour la densité de charges qui sera très avantageuse pour le calcul numérique. En effet par une intégration par parties on peut éviter le calcul de l'intégrale sur E' imposé par N₀(z;E) (voir relation (III-3-14)) et ainsi gagner du temps. Le détail de ce calcul est donné dans l'annexe (AIII-G) et le resultat final est le suivant :

$$n(z) = \frac{m * K_{B}T}{2\pi\hbar^{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dE Ln \{1 + e^{-(E-e\mu(z))/k_{B}T}\} N_{0}^{1D}(z; E)$$
(III-3-17)

où la densité d'états strict 1-D est calculée par la relation (III-3-15).Il s'agit donc d'une densité locale de charges quasi 1-D en unité (m⁻³).

III-3-2- <u>Calcul de</u> $G_{1D}^{R}(z,z';E)$

-Dans le cas d'un *régime strict 1-D* l'équation de transport est donnée par les formules (III-3-1) et (III-3-2)

La résolution numérique de cette équation différentielle nécessite sa discrétisation selon les variables d'espace z et z'. La fonction de Green $G_{1D}^R(z,z'; E)$ devient alors une matrice $G_{1D}^R(m,n;E)$ où les indices m, n indiquent les sites du réseau discrétisé. Ainsi l'équation différentielle devient une équation matricielle :(voir annexe III-G-h)

$$\left[E I - \hat{H}\right] G_{1D}^{R}(m, n; E) = \frac{1}{a} \delta_{m n}$$
(III-3-18)

où δ_{mn} est le symbole de Kronecker.

En principe il suffirait alors d'inverser la matrice [EI - \hat{H}] pour obtenir $G_{1D}^{R}(m,n;E)$ en tous points. Mais puisque cette équation est établie pour un *milieu homogène 1-D infini* cela nécessite un peu plus d'attention lors de la discrétisation et de son application à un composant particulier.

- Considérons un réseau discret de points régulièrement espacés par un pas " a ":

m,n = -3 -2 -1 0 1 2 3 $\dots \qquad \bullet \qquad \dots$

fig. III.3.1. - Discrétisation d'une chaîne infinie 1-D d'atomes en un réseau de points

les sites du réseau sont alors situés aux points z = m a; z' = n a où m, n sont des entiers. En utilisant la méthode des différences finies pour approximer l'opérateur dérivée de l'équation (III-3-2) on peut écrire :

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} G_{lD}^R(z, z'; E) \right]_{z=ma, z'=na} \Rightarrow \frac{1}{a^2} \left\{ G_{lD}^R(m+1, n; E) - 2G_{lD}^R(m, n; E) + G_{lD}^R(m-1, n; E) \right\}$$
(III-3-19)

d'où (III-3-18) devient :

$$\begin{bmatrix} E + i \frac{\hbar}{2\tau_{\varphi}(m;E)} - |e| V(m) \end{bmatrix} G_{1D}^{R}(m,n;E) + \frac{\hbar^{2}}{2m^{*}a^{2}} \Big\{ G_{1D}^{R}(m+1,n;E) - 2G_{1D}^{R}(m,n;E) + G_{1D}^{R}(m-1,n;E) \Big\} = \frac{1}{a} \delta_{m n}$$

soit :

(III-3-20)

$$\beta G_{1D}^{R}(m-1,n;E) + \alpha_{m} G_{1D}^{R}(m,n;E) + \beta G_{1D}^{R}(m+1,n;E) = \frac{1}{a} \delta_{m} n \qquad (\text{III-3-21})$$

où :

$$\beta = \frac{\hbar^2}{2m^* a^2}$$
(III-3-22)

$$\alpha_{m} = E - |e| V(m) - 2\beta + i \frac{\hbar}{2\tau_{\varphi}(m;E)}$$
avec :
$$V(m) = Vapp(m) + \Delta E_{c}(m)$$
(III-3-23)

Ou encore d'une façon générale :

$$\left[E I - \hat{H}\right] G_{1D}^{R}(m, n; E) = \sum_{m, n} \left[E I - \hat{H}\right](m, n) G_{1D}^{R}(m, n; E)$$
(III-3-24)

avec :

$$[E - \hat{H}](m,n) = \alpha_m \qquad si \qquad m = n$$

= $\beta \qquad si m et n sont les plus proches voisins= 0 \qquad autrement$

d'où la matrice correspondante :



fig. III.3.2. - Représentation matricielle d'une chaîne infinie d'atomes en 1-D

Les éléments diagonaux α_m de cette matrice contiennent l'énergie propre de chaque site tandis que les éléments non diagonaux β traduisent l'énergie de couplage d'un site à ses plus proches voisins. Il est intéressant de noter la grande similitude ou équivalence formelle qui existe entre l'Hamiltonien discrétisée (par différences finies) et l'Hamiltonien en liaisons fortes :[E.N. Economou, 1983]

$$\begin{split} H_{\text{liaisons fortes}} &= \sum \left\{ U_{jk} \mid j \rangle \left\langle k \right| + \epsilon_{j} \mid j \rangle \left\langle j \right| \right\} \\ \text{où}: \\ U_{jk} &= \begin{cases} -\beta & \text{si j et k sont les plus proches voisins} \\ 0 & \text{autrement} \end{cases} \end{split}$$
(III-3-25)
et:
$$\epsilon_{j} &= 2\beta + |e|V_{j} \end{split}$$

Dans le modèle des liaisons fortes la fonction d'onde est exprimée en termes d'orbitales atomiques localisées, une sur chaque site. Les orbitales des sites voisins sont connectées par ce qu'on appelle une *intégrale de recouvrement*. Le potentiel local α_m dans notre modèle joue le rôle de l'orbital localisée sur le site m tandis que β joue le rôle de l'intégrale de recouvrement entre orbitales sur les sites du voisinage.

La correspondance entre ces différentes approches nous intéresse pour deux raisons. Premièrement l'approche des différences finies permet par un calcul simple d'obtenir les énergies (ε_j) des sites ainsi que les éléments de la matrice de couplage U_{jk} . Deuxièmement l'approche des liaisons fortes suggère que lorsque le pas de discrétisation diminue, l'électron se trouve alors dans un réseau comme celui des liaisons fortes et il va donc être soumis aux effets semblables à un réseau des liaisons fortes. Donc au lieu de simuler les *électrons libres* avec une relation de dispersion parabolique, nous allons simuler les *électrons fortement liés* avec une énergie de dispersion :

$$E(k) = 2\beta [1 - \cos(ka)]$$
 (III-3-26)

La différence n'est pas sensible si l'on se limite au bas de la parabole E(k) ce qui est le cas tant que le système n'est pas en situation de désequilibre fort.

3-2-1- Calcul de l'équation matricielle de Dyson

L'inversion de la matrice tridiagonale de la fig. III-3-2 pour calculer G_{1D}^R est assez classique tant qu'elle reste de dimensions finies.

$$G_{1D}^{R} = [EI - \hat{H}]^{-1}$$
 (III-3-27)

Mais ce n'est pas le cas, le composant étant traité comme un système ouvert connecté aux contacts qui s'étendent jusqu'à l'infini. Si l'on tronquait simplement la matrice en un point quelconque on aurait en fait décrit un système fermé avec des contacts complètement réfléchissants et non un système ouvert avec des contacts non réfléchissants ou plutôt absorbants semblables aux corps noirs comme on souhaite le décrire.



Schématisons notre composant de la manière suivante :



Les lignes pointillées sur la fig.III-3-3 montrent la possibilité d'une subdivision de la matrice infinie en plusieurs blocs. On peut facilement constater une correspondance directe entre chacune des régions du composant étudié (à savoir les contacts isolés plus le système isolé), et les blocs de la matrice.

La résolution du système matriciel correspondant à cette matrice infinie va nous permettre d'obtenir le propagateur G_{1D}^R correspondant à *tous les sites du réseau discrétisé depuis - \infty jusqu'à + \infty*. Ce qui signifie qu'on calcule à la fois les G_{1D}^R relatifs à chacun des sites des *contacts semi-infinis* et ceux du *système fini* étudié. Mais les seuls propagateurs G_{1D}^R qui nous intéressent sont relatifs aux sites situés à l'intérieur du système ainsi que les deux plus proches sites d'interfaces dans les contacts semiinfinis c'est à dire la zone de dimension M x M partitionnée sur la fig. III-3-4. Il sera donc possible dans ces conditions de se restreindre à cette zone dans la matrice correspondante et rendre faisable le calcul numérique envisagé. La technique consiste à décomposer le *réseau infini de sites couplés* en trois régions isolées constituées de deux *demi-chaînes semi-infinies* (appelés contacts) entourant une *chaîne finie* centrale (appelé système) de telle manière que les propagateurs G_{0-1D}^R correspondant à chacune de ces régions puissent être calculés de façon exacte. Ceci simplifie considérablement les calculs puisque de ce fait l'Hamiltonien total H peut être séparé en deux contributions. Pour la mise en oeuvre de cette technique nous profitons de la similitude citée ci-dessus avec le *modèle de l'Hamiltonien en liaisons fortes*. En faisant un *usage formel* des techniques employées pour celui-ci concernant la séparation de l'Hamiltonien total on peut écrire :

$$H = H_0 + U$$
 (III-3-28)

où H_0 décrit les régions isolées tandis que U correspond au couplage entre les sites du système ainsi qu'au couplage entre les régions isolées.

On peut alors décomposer la matrice [EI - Ĥ] en écrivant :

$$[EI - H] = [EI - H_0] - [U]$$
(III-3-29)

où [EI - \hat{H}_0] et [\hat{U}] sont données respectivement fig.III.3.4 et fig.III.3.5 :



fig. III.3.4. - Partition d'une matrice de dimensions infinies.

Les éléments α_0 et α_{N+1} inclus dans la matrice (M x M) correspondent respectivement aux premiers sites des contacts de gauche et de droite

105



fig. III.3.5. - Matrice de couplage. Chacun des éléments β connecte un site donné à ses plus proches voisins

La séparation de l'Hamiltonien total en deux composantes distinctes nous permet d'utiliser la théorie de perturbations [Economou, 1983], pour la fonction de Green. Il s'agit de calculer à partir de G_{0-1D}^{R} relatif à l'Hamiltonien H₀ la fonction G_{1D}^{R} correspondant à l'Hamiltonien total H du système complet. Ceci nous conduit naturellement à l'équation de Dyson.

$$\hat{\mathbf{G}}^{R} = \hat{\mathbf{G}}_{0}^{R} + \hat{\mathbf{G}}_{0}^{R} \hat{\mathbf{U}} \hat{\mathbf{G}}^{R}$$
(III-3-30)

où toutes les matrices \hat{G}^R et \hat{G}^R_0 sont définies par :

$$\begin{bmatrix} E I - \hat{H} \end{bmatrix} \hat{G}^{R} = I \tag{III-3-31}$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{E} \mathbf{I} - \hat{\mathbf{H}}_0 \end{bmatrix} \hat{\mathbf{G}}_0^{\mathsf{R}} = \mathbf{I}$$
 (III-3-32)

Or :

$$\hat{\mathbf{G}}_{0}^{\mathrm{R}}\left[\mathrm{E}\,\mathrm{I}\,-\,\hat{\mathrm{H}}_{0}\,\right] = \mathrm{I} \tag{III-3-33}$$

donc :

$$\begin{bmatrix} E I - \hat{H} \end{bmatrix} \hat{G}^{R} = I \qquad \hat{G}^{R}_{0} \begin{bmatrix} E I - \hat{H}_{0} - \hat{U} \end{bmatrix} \hat{G}^{R} = \hat{G}^{R}_{0} \qquad (III-3-34)$$

d'où le système matriciel de la forme Ax = B :

$$\left[I - \hat{G}_0^R \hat{U}\right] \hat{G}^R = \hat{G}_0^R$$
(III-3-35)

Il nous reste alors à voir la technique de calcul de G_{0-1D}^R . Nous avons vu que le calcul de G_{0-1D}^R pour le système total peut être décomposé en trois calculs séparés relatifs au calcul des fonctions de Green retardée du *contact 1*, du *système* et du *contact 2* considérés comme *découplés*. Pour cela on va procéder de la manière suivante.

Dans le cas du système isolé (matrice de dimension N x N), les G_{0-1D}^R correspondent au cas où les sites ne sont pas couplés et l'on peut faire le calcul par simple inversion des élements diagonaux α_m :

$$\left[E I - \hat{H}_0 \right] \hat{G}_0^R = \frac{\delta_{mn}}{a}$$
(III-3-36)

soit en écriture discrète :

$$\hat{G}_{0}^{R}(m,n;E) = \frac{\delta_{mn}}{\left[E - 2\beta - |e| V(m) + i \frac{\hbar}{2\tau_{\varphi}(m;E)}\right]}$$
(III-3-37)

où les indices m et n varient entre 1 et N, dimension maximum du système isolé.(voir fig.III.3.3). Le couplage entre ces sites sera établi par l'intérmediaire de l'équation de Dyson.

Dans le cas des contacts isolés les sites sont tous connectés entre eux et dans ce cas il faut calculer la fonction de Green d'une chaîne semi-infinie. Ce calcul est effectué dans le paragraphe suivant.

3-2-2- Fonction de Green pour un milieu homogène 1-D semi-infini

- Pour calculer les propagateurs G_{0-1D}^R correspondant à l'inverse des blocs diagonaux relatifs aux deux contacts on utilise les résultats de (A.Akjouj, B.Sylla & L. Dobrzynski; Ann. phys. Fr.18(1993) p363) concernant la *théorie des systèmes composites*. En utilisant l'équation générale de la théorie des réponses d'intérface ces auteurs montrent que dans le cadre de l'approximation en liaisons fortes la fonction de Green (= fonction de reponse) d'un *milieu semi-infini* s'obtient à l'aide de l'une des deux relations suivantes :

a) Si
$$l_3$$
, $l'_3 \le 0$

$$g_{si}(k_{//}; l_3, l'_3; E) = \frac{1}{\beta_i} \frac{t_i^{|l_3 - l'_3| + 1} - t_i^{|l_3 - l'_3 + 1}}{t_i^2 - 1}$$
(III-3-38)
b) Si l_3 , $l'_3 \ge 1$

$$g_{si}(k_{//};l_{3},l_{3}';E) = \frac{1}{\beta_{i}} \frac{t_{i}^{|l_{3}-l_{3}'|+1} - t_{i}^{3-l_{3}-l_{3}'}}{t_{i}^{2} - 1}$$
(III-3-39)

où g_{si} est la fonction de réponse de surface " s " du matériau " i ". Les électrons font des sauts de site en site par l'intermédiaire de l'intégrale de recouvrement β_i entre sites premiers voisins, pour le matériau " i ". Les sites sont séparés par un pas régulier " a " (= paramètre du réseau) et leurs positions sont représentées par les entiers l_3 , l'_3 . Sur la figure suivante concernant le modèle de surface on comprend mieux la signification des différents paramètres employés :



Fig. III.3.6. - Modèle de surface (d'après A.Akjouj, B.Sylla & L. Dobrzynski)

Pour un matériau homogène nous pouvons omettre les indices " i ".

Les entités "t" représentent la nature de l'onde. Elles sont données par la relation suivante:

$$t = \chi \pm \sqrt{\chi^2 - 1}$$
 (III-3-40)

où le signe + ou - est choisi de telle manière que |t| < 1 et la quantité χ est donnée par :

$$\chi = \frac{E - |\mathbf{e}| \nabla - 2\beta + i \frac{\hbar}{2\tau_{\varphi}}}{-2\beta}$$
(III-3-41)

Où V indique la valeur du potentiel auquel est soumis le contact et τ_{ϕ} correspond au temps de perte de cohérence de phase dans le contact. L'entité β est calculée par la relation (III-3-22).

La relation (III-3-38) va nous permettre de calculer la fonction G_{0-1D}^R pour le contact semi-infini de gauche en prenant $l_3 = l'_3 = 0$, tandis que la relation (III-3-39) nous donne le resultat corespondant au contact semi-infini de droite pour $l_3 = l'_3 = 1$. Donc :

-Pour le contact semi-infini de gauche :

- pour le premier site du contact 1 indicé m = n =0, on a :

$$G_{0-1D}^{R}(0,0;E) = -\frac{1}{\beta} \frac{t-t^{3}}{t^{2}-1} = -\frac{t}{\beta}$$
(III-3-42)

-Pour le contact semi-infini de droite :

- pour le premier site du contact 2 indicé m = n = N+1 on a :

$$G_{0-1D}^{R}(N+1, N+1; E) = -\frac{1}{\beta} \frac{t^{3} - t}{t^{2} - 1} = -\frac{t}{\beta}$$
 (III-3-43)

Il faut souligner que sauf à l'équilibre la valeur de "t " dans le contact de gauche $(t = t_1)$ est différente de celle du contact de droite $(t = t_2)$ puisque l'application d'un potentiel exterieur on crée un décalage de potentiel entre ces deux régions. On peut alors écrire :

$$G_{0-1D}^{R}(0,0;E) = \alpha_{0}^{-1} = -\frac{t_{1}}{\beta}$$
 (III-3-44)

$$G_{0-1D}^{R}(N+1, N+1; E) = \alpha_{N+1}^{-1} = -\frac{t_2}{\beta}$$
 (III-3-45)

Dans ces conditions pour la zone de dimension M x M repérée sur la fig. III-3-4 on obtient les matrices de G_0^R et de U écrites fig.(III.3.7) et (III.3.8):



Fig. III.3.7. - Matrice G_0^R du système complet non couplé. Le premier et le dernier éléments correspondent respectivement aux G_0^R calculés pour des contacts semi-infinis isolés gauche et droite tandis que les éléments du milieu correspondent aux G_0^R du système isolé.

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{U}}(\mathbf{M},\mathbf{M}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -\beta & & & & \\ -\beta & 0 & -\beta & & & \\ & -\beta & & -\beta & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & & -\beta & & \\ & & & & & -\beta & & \\ & & & & & & -\beta & \\ & & & & & & -\beta & \\ & & & & & & -\beta & \\ & & & & & & -\beta & 0 \end{bmatrix}$$

fig.III.3.8. - Matrice de couplage contenant les éléments de couplage des sites du système isolé ainsi que les trois régions séparées. Un élément β connecte un site donné à ses plus proches voisins

On obtient alors les propagateurs G^{R}_{1-D} à partir de la résolution de l'équation matricielle suivante en écriture discrète:

$$I(M,M) - \hat{G}_{0}^{R}(M,M) \hat{U}(M,M)] \hat{G}^{R}(M,M) = \hat{G}_{0}^{R}(M,M)$$
(III-3-46)

où toutes les matrices sont de dimensions finies $M \ge M \ge M \ge [0, N+1]$.

Nous remarquons que la résolution de ce système matriciel correspond à une écriture discrète des formules correspondant à :(voir annexe III-G)

$$\beta G_{1D}^{R}(m-1,n; E) + \alpha_{m} G_{1D}^{R}(m,n; E) + \beta G_{1D}^{R}(m+1,n; E) = \delta_{m n}$$
(III-3-47)

avec α et β en unité Joule et G_{1D}^R en (Joule)⁻¹. Or si l'on divise chaque membre de cette équation par le pas de discrétisation " a " on obtient l'équation (III-3-18). Ceci donne alors comme unité de G_{1D}^R (Joule-mètre)⁻¹ et l'on est en conformité avec le développement initial en continu pour cette fonction.

3-2-3- Extension de la fonction de Green

- Jusqu'ici nous avons décrit comment calculer la fonction de Green $G_{1D}^{R}(z,z';E)$, entre deux sites z et z' à l'intérieur de la zone de simulation de taille MxM. Autrement dit les sites d'injection et de détection se trouvent dans cette zone car chaque site d'injection correspond à une colonne particulière et chaque site de détection à une rangée, dans la matrice $\hat{G}^{R}(m,n;E)$. Cependant nous avons vu que le calcul des grandeurs physiques (voir relation (III-2-55) par exemple) exige la connaissance de la fonction de Green dans les contacts. Il est donc nécessaire de pouvoir évaluer la fonction de Green retardée $G_{1D}^{R}(z,z';E)$ pour les *sites intérieurs d'un contact semi-infini*. Le détail des développements correspondants se trouvent dans l'annexe (III-G-i), où on montre que la solution obtenue pour la fonction de Green retardée le long des interfaces peut être étendue au calcul de G_{1D}^{R} des sites intérieurs aux contacts.



fig. III.3.9. - Calcul de $G_{1D}^{R}(z,z';E)$ pour les sites intérieurs des contacts

On obtient pour le contact 1 (voir fig. III-3-9) :

$$G_{1D}^{R}(z, z'; E) = t_{1}^{z'}(E) G_{1D}^{R}(z, 0; E)$$
 (III-3-48)

De même pour le contact 2 on a :

$$G_{1D}^{R}(z, z'; E) = G_{1D}^{R}(z, N+1; E) t_{2}^{z'}(E)$$
 (III-3-49)

Enfin pour des couples de points situés l'un dans le contact 1, l'autre dans le contact 2 on obtient :

$$G_{1D}^{R}(z, z'; E) = t_{1}^{Z}(E) G_{1D}^{R}(0, N+1; E) t_{2}^{Z'}(E)$$
 (III-3-50)

Dans ces relations z et z' varient de 1 à ∞ . Les entités t_1 et t_2 sont toujours données par la relation (III-3-40) et elles ne différent que s'il y a une différence de potentiel extérieur entre les deux contacts.

III-3-3- Expressions discrétisées des grandeurs physiques

- Ci-dessus nous avons discuté de la discrétisation et de la méthode de résolution de l'équation de transport qui nous permet d'obtenir la fonction de Green retardée $G_{1D}^{R}(z,z;E)$ dans le cas 1-D strict. Nous devons maintenant expliciter les relations donnant le courant, la densité d'états et la densité de charges relatifs au composant étudié. Pour cela il nous faut discrétiser les équations du paragraphe (III-3-1).

La discrétisation en énergie " E " se fait entre deux limites que nous appellerons E_{min} pour la borne inférieure et E_{max} pour la borne supérieure.

$$E_{\min} \le E \le E_{\max}$$
 (III-3-51)

Le pas de discrétisation en énergie est pris égal à ΔE .

Ainsi la version discrétisée de nos équations se présente de la manière suivante :

1) La fonction de distribution :

- On calcule cette fonction de façon "self-consistent" à partir de la relation (III-3-6) pour les sites situés à l'intérieur du système c'est à dire pour $z \in \{1, 2, 3, ..., N\}$. Pour les sites d'interface des contacts (z = 0 et z = N+1), les valeurs correspondantes sont fixées par les conditions aux limites suivantes :

$$f(0; E) = \frac{1}{\binom{E - e\mu(0)}{K_B T}}$$
(III-3-52a)
e + 1

$$f(N + 1; E) = \frac{1}{(\frac{E - e\mu(N+1)}{K_B^T})}$$
(III-3-52b)
e

où $\mu(0)$ et $\mu(N+1)$ sont les potentiels chimiques des contacts (1) et (2) respectivement et T la température.

Or d'après la relation (III-3-6) on constate que z' varie de $-\infty$ à $+\infty$ et l'on peut écrire :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz' = \int_{-\infty}^{+\infty} dz' + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' + \int_{-\infty}^{0} dz' + \int_{-\infty}^{N} dz' + \int_{-\infty}^{+\infty} dz'$$
(III-3-53)

Compte tenu des relations (III-3-48) et (III-3-49) on peut écrire respectivement:

$$\begin{split} \sum_{z'=-\infty}^{0} \Delta z' \frac{\hbar^2 |G_{1D}^{R}(z,z';E')|^2}{\tau_{\phi}(z;E')\tau_{\phi}(z';E')} &= \sum_{z'=-\infty}^{0} \Delta z' |t_1(E')|^{z'} \frac{\hbar^2 |G_{1D}^{R}(z,0;E')|^2}{\tau_{\phi}(z;E')\tau_{\phi}(0;E')} \\ &= \frac{\Delta z'}{1-|t_1(E')|^2} \frac{\hbar^2 |G_{1D}^{R}(z,0;E')|^2}{\tau_{\phi}(z;E')\tau_{\phi}(0;E')} \\ \\ \sum_{z'=N+1}^{+\infty} \Delta z' \frac{\hbar^2 |G_{1D}^{R}(z,z';E')|^2}{\tau_{\phi}(z;E')\tau_{\phi}(z';E')} &= \sum_{z'=N+1}^{+\infty} \Delta z' |t_2(E')|^{z'} \frac{\hbar^2 |G_{1D}^{R}(z,N+1;E')|^2}{\tau_{\phi}(z;E')\tau_{\phi}(N+1;E')} \\ &= \frac{\Delta z'}{1-|t_2(E')|^2} \frac{\hbar^2 |G_{1D}^{R}(z,N+1;E')|^2}{\tau_{\phi}(z;E')\tau_{\phi}(N+1;E')} \end{split}$$
(III-3-55)

d'où :

$$f(z;E) = \frac{\sum_{-\infty}^{+\infty} \Delta z' T(z,z';E) f(z';E)}{\sum_{-\infty}^{+\infty} \Delta z' T(z,z';E)} = \frac{Tc_1 f(0;E) + T_{sn} + Tc_2 f(N+1;E)}{Tc_1 + T_{sd} + Tc_2}$$

(III-3-56)

avec :

$$Tc_{1} = \frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \sum_{E'=E_{min}}^{E} \Delta E' \frac{\Delta z'}{1 - |t_{1}(E')|^{2}} \frac{\hbar^{2} |G_{1D}^{R}(z,0;E')|^{2}}{\tau_{\varphi}(z;E')\tau_{\varphi}(0;E')}$$

$$Tc_{2} = \frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \sum_{E'=E_{min}}^{E} \Delta E' \frac{\Delta z'}{1 - |t_{2}(E')|^{2}} \frac{\hbar^{2} |G_{1D}^{R}(z,N+1;E')|^{2}}{\tau_{\varphi}(z;E')\tau_{\varphi}(N+1;E')}$$

$$T_{sn} = \frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \sum_{z'=1}^{N} \Delta z' f(z';E) \left\{ \sum_{E'=E_{min}}^{E} \Delta E' \frac{\hbar^{2} |G_{1D}^{R}(z,z';E')|^{2}}{\tau_{\varphi}(z;E')\tau_{\varphi}(z';E')} \right\}$$

$$T_{sd} = \frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \sum_{z'=1}^{N} \Delta z' \left\{ \sum_{E'=E_{min}}^{E} \Delta E' \frac{\hbar^{2} |G_{1D}^{R}(z,z';E')|^{2}}{\tau_{\varphi}(z;E')\tau_{\varphi}(z';E')} \right\}$$
(III-3-57)

où la borne supérieure en énergie est fixée par la valeur de l'énergie " E " considérée.

2) Composantes du courant en régime non linéaire

- La composante incohérente du courant (relation III-3-7) se discrétise de la manière suivante.

$$I_{\text{incoh}} = \frac{e}{h} \frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \sum_{z'=1}^{N} \Delta z' \sum_{z=-\infty}^{0} \Delta z \sum_{E=E_{\text{min}}}^{E_{\text{max}}} \Delta E \left[f_{0}(E - e\mu_{c1}) - f(z'; E) \right] \sum_{E'=E_{\text{min}}}^{E} \Delta E' \frac{\hbar^{2} \left| G_{1D}^{R}(z, z'; E') \right|^{2}}{\tau_{\varphi}(1; E') \tau_{\varphi}(z'; E')}$$
(III-3-58)

compte tenu de la relation (III-3-48) :

$$I_{incoh} = \frac{e}{h} \frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \sum_{z'=1}^{N} \Delta z' \sum_{E=E_{m}}^{E} \Delta E \left[f_{0}(E - e\mu_{c1}) - f(z'; E) \right] \sum_{E'=E_{m}}^{E} \Delta E' \left\{ \sum_{z=-\infty}^{0} \Delta z \left| t_{1}(E') \right|^{z} \frac{\hbar^{2} \left| G_{1D}^{R}(0, z'; E') \right|^{2}}{\tau_{\phi}(0; E') \tau_{\phi}(z'; E')} \right\}$$

(III-3-59)

mais puisque :

$$\sum_{z=-\infty}^{0} \Delta z \left| t_{1}(E') \right|^{z} \frac{\left| G_{1D}^{R}(0,z';E') \right|^{2}}{\tau_{\phi}(0;E')\tau_{\phi}(z';E')} = \frac{\Delta z}{1-\left| t_{1}(E') \right|^{2}} \frac{\left| G_{1D}^{R}(0,z';E') \right|^{2}}{\tau_{\phi}(0;E')\tau_{\phi}(z';E')}$$
(III-3-60)

donc :

$$I_{incoh} = \frac{e}{h} \frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \sum_{z'=1}^{N} \Delta z' \sum_{E=E_{min}}^{E_{max}} \Delta E \left[f_{0}(E - e\mu_{c1}) - f(z'; E) \right]$$

$$\sum_{E'=E_{min}}^{E} \Delta E' \left\{ \frac{\Delta z}{1 - |t_{1}(E')|^{2}} \frac{\hbar^{2} |G_{1D}^{R}(0, z'; E')|^{2}}{\tau_{\phi}(0; E') \tau_{\phi}(z'; E')} \right\}$$
(III-3-61)

Pour la composante cohérente du courant (relation III-3-7), les variables de position z et z' se trouvent à la fois dans les contacts de gauche et de droite respectivement. Nous utilisons donc les relations correspondant à l'extension des fonctions $G^{R}_{1D}(z,z';E)$ des sites d'interface vers l'intérieur des contacts. La relation (III-3-50) donne :

$$\begin{split} \sum_{z=-\infty}^{0} \Delta z \sum_{z'=N+1}^{+\infty} \Delta z' \frac{\left| G_{\text{ID}}^{\text{R}}(z,z';E') \right|^{2}}{\tau_{\phi}(z;E')\tau_{\phi}(z';E')} &= \sum_{z=-\infty}^{0} \Delta z \sum_{z'=N+1}^{+\infty} \Delta z' \left| t_{1}(E') \right|^{2} \frac{\left| G_{\text{ID}}^{\text{R}}(0,N+1;E') \right|^{2}}{\tau_{\phi}(z;E')\tau_{\phi}(z';E')} \left| t_{2}(E') \right|^{z'} \\ &= \frac{\Delta z}{1 - \left| t_{1}(E') \right|^{2}} \frac{\left| G_{\text{ID}}^{\text{R}}(0,N+1;E') \right|^{2}}{\tau_{\phi}(z;E')\tau_{\phi}(z';E')} \frac{\Delta z'}{1 - \left| t_{2}(E') \right|^{2}} \end{split}$$

(III-3-62)

d'où :

$$I_{coh} = \frac{e}{h} \frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \sum_{E = E_{min}}^{E_{max}} \Delta E \left[f_{0}(E - e\mu_{c1}) - f_{0}(E - e\mu_{c2}) \right] \\ \left\{ \sum_{E' = E_{min}}^{E} \Delta E' \frac{\Delta z}{1 - |t_{1}(E')|^{2}} \frac{\hbar^{2} |G_{1D}^{R}(0, N + 1; E')|^{2}}{\tau_{\phi}(0; E') \tau_{\phi}(N + 1; E')} \frac{\Delta z'}{1 - |t_{2}(E')|^{2}} \right\}$$
(III-3-63)

avec bien sûr :

 $I_{total} = I_{incoh} + I_{coh}$

Régime linéaire

- La discrétisation se fait de la même manière qu'en régime non linéaire.

3) Potentiel chimique local

- Pour discrétiser la relation (III-3-10) on peut utiliser les résultats de discrétisation de la fonction d'occupation f(z;E), en effectuant les sommations sur les énergies E et E'.

En utilisant la relation (III-3-53) on peut écrire :

$$\mu(z) = \frac{\sum_{-\infty}^{+\infty} \Delta z' T(z, z') \mu(z')}{\sum_{-\infty}^{+\infty} \Delta z' T(z, z')} = \frac{T_1 \mu(0) + T_{sn} + T_2 \mu(N+1)}{T_1 + T_{sd} + T_2}$$
(III-3-65)

$$T_{1} = \frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \sum_{E=E_{min}}^{E_{max}} \Delta E f_{0}(E) \frac{\Delta z'}{1 - |t_{1}(E)|^{2}} \frac{\hbar^{2} |G_{1D}^{R}(z,0;E)|^{2}}{\tau_{\varphi}(z;E)\tau_{\varphi}(0;E)}$$

$$T_{2} = \frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \sum_{E}^{E} \sum_{=E_{min}}^{E} \Delta E f_{0}(E) \frac{\hbar^{2} |G_{1D}^{R}(z, N+1; E)|^{2}}{\tau_{\varphi}(z; E)\tau_{\varphi}(N+1; E)} \frac{\Delta z'}{1 - |t_{2}(E)|^{2}}$$

$$T_{sn} = \frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \sum_{E=E_{min}}^{E_{max}} \Delta E f_{0}(E) \sum_{z'=1}^{N} \Delta z' \left\{ \frac{\hbar^{2} |G_{ID}^{R}(z,z';E)|^{2}}{\tau_{\phi}(z;E)\tau_{\phi}(z';E)} \right\} \mu(z')$$

$$T_{sd} = \frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \sum_{E=E_{min}}^{E_{max}} \Delta E f_{0}(E) \sum_{z'=1}^{N} \Delta z' \left\{ \frac{\hbar^{2} |G_{1D}^{R}(z,z';E)|^{2}}{\tau_{\phi}(z;E)\tau_{\phi}(z';E)} \right\}$$
(III-3-66)

4) Composantes du courant en régime linéaire

En partant des relations (III-3-11), de la même manière que dans le cas non linéaire en utilisant successivement les relations (III-3-53), (III-3-48), et (III-3-60) on obtient pour la composante incohérente :

$$I_{incoh} = \frac{e^2}{h} \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \sum_{z'=1}^{N} \Delta z' \left[\mu_{c1} - \mu(z') \right] \sum_{E=E_{min}}^{E_{max}} \Delta E f_0(E) \left\{ \frac{\Delta z}{1 - |t_1(E)|^2} \frac{\hbar^2 |G_{1D}^R(0, z'; E)|^2}{\tau_{\phi}(0; E) \tau_{\phi}(z'; E)} \right\}$$
(III-3-67)

et pour la composante cohérente en utilisant les relations (III-3-50) et (III-3-62) on a :

$$I_{coh} = \frac{e^2}{h} \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \sum_{E=E_{min}}^{E_{max}} \Delta E \left[\mu_{c1} - \mu_{c2} \right] f_0(E) \left\{ \frac{\Delta z}{1 - \left| t_1(E) \right|^2} \frac{\hbar^2 \left| G_{1D}^R(0, N+1; E) \right|^2}{\tau_{\phi}(0; E) \tau_{\phi}(N+1; E)} \frac{\Delta z'}{1 - \left| t_2(E) \right|^2} \right\}$$
(III-3-68)

5) Potentiel chimique local à T=0

- Dans ce cas il suffit d'utiliser les mêmes relations que pour l'obtention de $\mu(z)$ ci-dessus. Le résultat final est le même excepté qu'il n'y a pas de sommation sur E et que la sommation sur E' se fait jusqu'à l'énergie du niveau de Fermi. On obtient finalement :

$$\mu(z) = \frac{\sum_{-\infty}^{+\infty} \Delta z' \ T^{0}(z, z') \mu(z')}{\sum_{-\infty}^{+\infty} \Delta z' \ T^{0}(z, z')} = \frac{T_{1}^{0} \mu(0) + T_{sn}^{0} + T_{2}^{0} \mu(N+1)}{T_{1}^{0} + T_{sd}^{0} + T_{2}^{0}}$$
(III-3-69)

$$\begin{split} T_{1}^{0} &= \frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \sum_{E'=E_{min}}^{E_{r}} \Delta E' \frac{\Delta z'}{1 - |t_{1}(E')|^{2}} \frac{\hbar^{2} |G_{1D}^{R}(z,0;E')|^{2}}{\tau_{\varphi}(z;E')\tau_{\varphi}(0;E')} \\ T_{2}^{0} &= \frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \sum_{E'=E_{min}}^{E_{r}} \Delta E' \frac{\hbar^{2} |G_{1D}^{R}(z,N+1;E')|^{2}}{\tau_{\varphi}(z;E')\tau_{\varphi}(N+1;E')} \frac{\Delta z'}{1 - |t_{2}(E')|^{2}} \\ T_{sn}^{0} &= \frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \sum_{z'=1}^{N} \Delta z' \Biggl\{ \sum_{E'=E_{min}}^{E_{r}} \Delta E' \frac{\hbar^{2} |G_{1D}^{R}(z,z';E')|^{2}}{\tau_{\varphi}(z;E')\tau_{\varphi}(z';E')\tau_{\varphi}(z';E')} \Biggr\} \mu(z') \end{split}$$

$$T_{sd}^{0} = \frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \sum_{z'=1}^{N} \Delta z' \left\{ \sum_{E'=E_{min}}^{E_{r}} \Delta E' \frac{\hbar^{2} |G_{1D}^{R}(z,z';E')|^{2}}{\tau_{\phi}(z;E')\tau_{\phi}(z';E')} \right\}$$
(III-3-70)

les expressions des composantes de courant sont les mêmes que ci-dessus.

6) <u>Densité locale d'états</u>

on a :

$$N_{0}(z;E) = \frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \sum_{E'=E_{min}}^{E} \Delta E' N_{0}^{1D}(z;E')$$
(III-3-71)

avec :

$$N_0^{1D}(z; E') = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_{1D}^R(z, z; E')$$

où la borne supérieure en énergie est fixée par la valeur de l'énergie " E "considérée.

7) Densité locale de charges en régime non linéaire

- Elle s'ecrit :

$$n(z) = \sum_{E=E_{min}}^{E_{max}} \Delta E N_0(z;E) f(z;E)$$
(III-3-72)

118

8) Densités locales de charges en régime linéaire

On a :

$$n(z) = \frac{m * K_{B}T}{2\pi\hbar^{2}} \sum_{E_{min}}^{E_{max}} \Delta E \ Ln \left\{ 1 + e^{-(E - e\mu(z))/k_{B}T} \right\} N_{0}^{1D}(z; E)$$
(III-3-73)

III-3-4- Organigrammes du calcul numérique

- Afin de résumer les discussions ci-dessus nous allons décrire la procédure du calcul numérique étape par étape en suivant les organigrammes correspondants.

D'une manière générale la procédure exacte du calcul numérique nécessite un calcul "selfconsistent" du temps de perte de cohérence de phase $\tau_{\phi}(z;E)$ par : (voir relations (III-2-13) et (III-2-14))

$$\frac{1}{\tau_{\varphi}(z;E)} = \frac{2\pi}{\hbar} \int d(\hbar\omega) F(z;\hbar\omega) [n(z;E - \hbar\omega) + p(z;E + \hbar\omega)]$$

$$n(z;E) = f(z;E)N_{0}(z;E)$$

$$p(z;E) = [1 - f(z;E)]N_{0}(z;E)$$
(III-3-74)

Or f(z;E) et $\tau_{\phi}(z;E)$ sont liés par les relations (III-2-48) et (III-3-74), ce qui implique de faire une itération entre ces deux relations jusqu'à obtenir une solution "self-consistent". Dans le cas où la fonction spectrale F(z;E) présente un maximum prononcé au voisinage de $\hbar\omega = 0$, le terme entre crochets dans (III-3-74) est approximativement $n + p = N_0$, $\tau_{\phi}(z;E)$ est alors indépendant de f(z;E). En pratique dans les cas plus généraux la dépendance de $\tau_{\phi}(z;E)$ vis à vis de f(z;E) est suffisamment faible pour qu'on puisse éviter cette itération [Mc Lennan & al, 1991]. On écrit alors

$$\tau_{\varphi}(z;E) = \tau_{\varphi}(z) \tag{III-3-75}$$

Ce paramètre dépend de la position et l'on peut ainsi lui affecter des valeurs différentes selon sa position dans les contacts, dans la zone active ou encore dans les zones d'accès situées de part et d'autres des barrières.

Dans ces conditions la procédure de calcul est la suivante :

T)- Entrer les paramètre de calcul caractérisant la structure:

Ltotal = longueur totale du système en (Å) LB = largeur de la barrière (LB1, LB2, s'il y en a deux) en (Å) LP = largeur du puits de potentiel (s'il y en a) (en Å) m* = masse effective en (Kg) EF = l'énergie du niveau de Fermi en (eV) ΔE_c = hauteur de la barrière (ou des barrières) de potentiel en (eV) ΔE = pas de discrétisation en énergie en (eV) $\tau_{\phi}(z)$ = temps de perte de cohérence de phase Δz = pas de discrétisation spatiale en (Å) $f(z;E) = f_0[E - e(\mu_0 + V_{app}(z))]$ fonction Fermi-Dirac

 \mathcal{F} 2) - Calculer les éléments de la matrice complexe \hat{G}_0^R correspondant aux fonctions de Green non perturbées :

- pour les sites internes du système

$$\hat{G}_0^R(m,n;E) = \frac{\delta_{mn}}{\left[E - 2\beta - |e| V(m) + i \frac{\hbar}{2\tau_{\varphi}(m)}\right]}$$

- pour les sites des deux contacts.

$$G_{0-1D}^{R}(0,0;E) = -\frac{1}{\beta} \left[\chi_{1} \pm \sqrt{\chi_{1}^{2} - 1} \right]$$

$$G_{0-1D}^{R}(N+1,N+1;E) = -\frac{1}{\beta} \left[\chi_{2} \pm \sqrt{\chi_{2}^{2} - 1} \right]$$

avec :

$$\beta = \frac{\hbar^2}{2m^* a^2}$$

$$\chi_{j} = \frac{E - |\mathbf{e}| \mathbf{V}_{j} - 2\beta + i \frac{\hbar}{2\tau_{\varphi}}}{-2\beta}$$

où j est l'indice du contact concerné et V_j son potentiel. Le signe est choisi selon que $\left|\chi_{j} \pm \sqrt{\chi_{j}^{2} - 1}\right| < 1$

 \mathcal{F} 3) - Calculer les éléments de la matrice complexe [I - $\hat{G}_0^R \hat{U}$] correspondant au premier membre de l'équation de Dyson.

(F, 4) - Calculer la fonction de Green retardée G^{R}_{1D} par la résolution du système matriciel complexe correspondant à l'équation de Dyson (III-3-35) :

$$\left[I - \hat{G}_0^R \hat{U}\right] \hat{G}^R = \hat{G}_0^R \qquad \Leftrightarrow \qquad \left[E - H_0(z) + \frac{i\hbar}{2\tau_{\varphi}(z)}\right] G_{ID}^R(z, z'; E) = \delta(z - z')$$

* 5) - Calculer la densité d'états :

$$N_{0}(z; E) = \frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \sum_{E'=E_{min}}^{E} \Delta E' N_{0}^{1D}(z; E')$$
$$N_{0}^{1D}(z; E') = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Jm} G_{1D}^{R}(z, z; E')$$

(F, E) - Calculer la fonction de distribution f(z;E) pour les sites internes du système en utilisant les valeurs initiales pour la première itération : $f(z;E) = f_0[E - e(\mu_0 + V_{app}(z))]$:

$$f(z; E) = \frac{\sum_{z'=1}^{N} \Delta z' \sum_{E_{min}}^{E} \Delta E}{\sum_{z'=1}^{N} \Delta z' \sum_{E_{min}}^{E} \Delta E} \frac{\hbar^2 |G_{1D}^R(z, z'; E')|^2}{\tau_{\phi}(z) \tau_{\phi}(z')} f(z'; E)}$$

$$\sum_{z'=1}^{N} \Delta z' \sum_{E_{min}}^{E} \Delta E \frac{\hbar^2 |G_{1D}^R(z, z'; E')|^2}{\tau_{\phi}(z) \tau_{\phi}(z')}$$

A l'intérieur des contacts cette fonction est donnée par des conditions aux limites selon lesquelles dans les contacts f(z;E) est de la forme Fermi-Dirac $f_0(z)$ avec un potentiel chimique constant. On

tiendra compte de la variation de ce potentiel dans les conditions de l'application d'une polarisation extérieure.

- ☞ 7) Vérifier la convergence pour le calcul "self-consistent" de f(z;E)
- * 8) Calculer la densité de porteurs :

$$n(z) = \sum_{E=E_{min}}^{E_{max}} \Delta E N_0(z;E) f(z;E)$$

* 9) - Calculer le courant total et ses composantes :

$$I_{total} = I_{incoh} + I_{coh}$$

$$I_{incoh} = \frac{e}{h} \frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \sum_{z'=1}^{N} \Delta z' \sum_{E=E_{min}}^{E_{max}} \Delta E \left[f_{0}(E - e\mu_{c1}) - f(z'; E) \right]$$
$$\sum_{E'=E_{min}}^{E} \Delta E' \left\{ \frac{\Delta z}{1 - |t_{1}(E')|^{2}} \frac{\hbar^{2} |G_{1D}^{R}(0, z'; E')|^{2}}{\tau_{\phi}(0) \tau_{\phi}(z')} \right\}$$

$$I_{coh} = \frac{e}{h} \frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \sum_{E=E_{min}}^{E_{max}} \Delta E \left[f_{0}(E - e\mu_{c1}) - f_{0}(E - e\mu_{c2}) \right] \\ \left\{ \sum_{E'=E_{min}}^{E} \Delta E' \frac{\Delta z}{1 - |t_{1}(E')|^{2}} \frac{\hbar^{2} |G_{1D}^{R}(0, N + 1; E')|^{2}}{\tau_{\phi}(0) \tau_{\phi}(N + 1)} \frac{\Delta z'}{1 - |t_{2}(E')|^{2}} \right\}$$

cette procédure correspond au cas général d'un *régime non linéaire* et elle se répète pour toutes les valeurs de E.

L'organigramme général correspondant est donné sur la figure (III-3-10).

 \Box - Dans le cas de l'équilibre local le calcul "self-consistent" du potentiel chimique $\mu(z)$ se substitue au calcul "self-consistent" de la fonction d'occupation f(z;E) pour les sites internes du système (relations (III-3-65) et (III-3-66)). Les valeurs initiales nécéssaires à la première itération

sont fixées en tenant compte du potentiel appliqué avec comme conditions aux limites pour le contact i, $\mu(z) = \mu_i$.

En ce qui concerne le calcul de densité de charges ou du courant on utilise les relations correspondantes à ce régime à savoir respectivement relations (III-3-73), (III-3-67) et (III-3-68).

De la même manière que précédemment la procédure de calcul se répète pour toutes les valeurs de l'énergie E.

L'organigramme général correspondant à cette procédure est donné sur la figure (III-3-11).

 \Box - En régime linéaire le calcul du potentiel chimique $\mu(z)$ s'effectue da la même manière que dans le cas précédent et le calcul des grandeurs physiques est effectué à partir de relations faisant intervenir le développement au premeir ordre de la fonction de distribution f(z;E), (voir fig.III-3-12)

□ - Dans le cas particulier des très basses températures (T → 0) du régime linéaire le calcul est seulement effectué à l'énergie du niveau de Fermi $E = E_F$ et la procédure ci-dessus est exécutée une seule fois à cette énergie.

Le calcul "self-consistent" du potentiel chimique est donc effectué à partir des relations (III-3-69) et (III-3-70).



fig.III.3.10. - Schéma de procédure de résolution de l'équation 1-D de transport en régime non linéaire



fig.III.3.11. - Schéma de procédure de résolution de l'équation 1-D de transport en régime d'equilibre local





III - 4 - <u>Résultats Numériques</u>

III-4-1- <u>Régime linéaire (Modèle strict 1-D)</u>

- Dans les calculs qui vont suivre le temps de perte de cohérence τ_{φ} est considéré comme un paramètre d'entrée auquel on peut affecter des valeurs différentes selon sa position

4-1-1- Diode à simple Barrière de potentiel

- La structure 1-D simulée consiste en une simple barrière en Ga_{1-x} Al_x As non intentionnellement dopée (NID) de largeur LB variable, prise en sandwich entre deux couches en GaAs très dopées(fig. III.4.11).

Sauf mention contraire les paramètres de calcul sont les suivants :

$$-m^* = m^*_{AsGa} = 0.067 m_0$$

$$-E_F = 50 \text{ meV}$$

$$-\Delta E_c = 220 \text{ meV}$$

- $L_{accès}$ = 300 Å (longueur fixe de chacune des couches d'accès)

$$-\Delta z = 5 \text{ Å}$$



Fig. III.4.1. Structure schématisée d'une diode à effet tunnel

a) <u>Etude de l'influence de</u> τ_{φ} <u>dans la barrière: Cas particulier des basses</u> <u>températures</u> : T \rightarrow 0

- Dans cette partie du travail, nous cherchons essentiellement à mettre en place le logiciel en traitant un modèle de la littérature pour lequel la diffusion s'opère seulement dans la barrière.

Le fait de traiter les très basses températures entraîne que dans la procédure de calcul numérique seul le niveau $E = E_F$ est à considérer.

Sur la fig. (III-4-2), toutes les courbes sont représentées en échelles Log-Log. Elles représentent les variations en fonction de τ_{ϕ} de la densité d'états au centre de la barrière (fig.b) d'une part, de la conductance totale (fig.a) et de ses composantes cohérente (fig.c) et incohérente (fig.d) d'autre part. Comme la tension appliquée Vapp est constante, les variations de conductance reflètent les variations du courant et de ses composantes cohérente et incohérente. Par ailleurs les conductances étant exprimées en unité (e²/h) la valeur 1 correspond au cas limite d'une barrière parfaitement transparente.

La fig. III-4-3 présente les variations des mêmes grandeurs en fonction de la largeur LB de la barrière.

Ces résultats correspondent à ceux déjà publiés dans la littérature (Néofotistos & al, 1991). Ils permettent en particulier de retrouver pour la composante I_{coh} (fig.III.4.2c) des résultats classiques de l'effet tunnel obtenus avec un vecteur d'onde k calculé à partir d'une énergie : $[\Delta E_c - EF - i\hbar/\tau_{\phi}]$ (Landau, 1967) indiquant en particulier une décroissance exponentielle en fonction de LB. Les résultats concernant la composante I_{incoh} sont interprétés par les auteurs cités ci-dessus en distinguant un régime de faible transparence $I_{incoh} >> I_{coh}$ puis en forte transparence. D'autres résultats expérimentaux sur des jonctions "tunnel" en GaAs/AlAs/GaAs (Bending, 1985); et en α -Si/SiO_x (Naito, 1987; Collins, 1984) aux très basses températures et en régime linéaire ont aussi révélé des comportements qualitativement semblables à ceux présentés ci-dessus.

Ces résultats que nous avons obtenus nous permettent de penser que l'outil numérique est opérationnel et qu'il est possible de l'utiliser pour des simulations aux températures $T \neq 0$.



Fig.III.4.2.- Influence de τ_{ϕ} dans la barrière sur les variations des courants et de la densité d'états au centre de la barrière pour des barrières de différentes largeurs LB.

129



Fig. III.4.3. - Variation du courant total et de la densité d'états au centre de la barrière en fonction de LB pour différentes valeurs de τ_{ϕ}




Fig.III.4.4. - Densité de charges en fonction de la position pour τ_{ϕ} =100 ps partout. Fig.a représente l'influence du domaine d'intégration en énergie. et Fig.b. indique l'influence de la largeur de la barrière (T=300K, EF=85 meV, Vapp=0)

b) <u>Cas où</u> T≠0

- Dans ces conditions les différentes quantités sont calculées en tenant compte du domaine énergétique accessible aux électrons.

b-1) <u>Recherche du domaine d'énergie</u>

- Afin de tenir compte au mieux de l'effet de température d'une part et de l'effet de polarisation du composant d'autre part, sur l'énergie des électrons, nous avons étudié la limite du domaine énergétique à prendre en compte lors du calcul de $G_{1D}^R(z,z';E)$.

L'étude est faite sur une structure à simple barrière de largeur LB=50 Å et d'une longueur totale de 400 Å. Le paramètre τ_{ϕ} est fixé partout égal à 100ps et la hauteur de barrière est égal à 220meV.

Pour un niveau de Fermi de 85 meV, l'étude à 300K de la densité de charges n(z) obtenue avec différentes valeurs de la borne supérieure du domaine d'intégration en energie, montre que les fortes oscillations parasites observées sur n(z) disparaissent pour une borne ≥ 200 meV (fig.III.4.4a).

Cette valeur correspond à peu près à $E_F + 5k_BT$. ($K_BT \approx 25$ meV). Nous en déduisons qu'à une température T il faut étendre le domaine d'intégration en énergie jusqu'à une valeur :

$$E_{max} \ge E_F + 5k_BT$$
.

D'une manière semblable puisque l'application d'une polarisation extérieure - |Vapp|, ne fait que déplacer le bas de la bande de conduction, le domaine des énergies à une température T peut être fixé par les bornes E_{min} et E_{max} avec :

 $E_{min} = -|Vapp|$ et $E_{max} \ge E_F + 5kT$

b-2) Etude de la densité d'états et de la densité de charges

- En considérant les remarques ci-dessus concernant le domaine d'énergie des électrons nous avons calculé pour le cas d'équilibre à T=300K, l'évolution de la densité de charges n(z) et de la densité d'états $N_0(z;E)$ en fonction de la largeur LB et de la hauteur ΔEc de la barrière.

Sur les figures (III.4.4.b) et (III.4.5.c&d) nous avons présenté les évolutions de la densité de charges n(z). On peut constater que l'allure qualitative de n(z) est indépendante de la largeur et de la hauteur de la barrière tandis que quantitativement on peut observer de légères variations dans la barrière en fonction de ces deux paramètres.



Fig.III.4.5. - Influence de ΔE_c à l'équilibre sur la densité d'états au centre de la barrière et la densité de charges pour LB = 50 Å et LB = 100 Å à T=300K. (EF=85 meV, τ_{ϕ} = 100 ps ; Ltotal= 650 Å)



Fig.III.4.6. - Densité d'états aux différents points (fig.a & b) et le nombre d'états en tous points (fig.c & d) de la structure à l'équilibre pour LB = 50 Å et LB = 100 Å à T=300K. (EF=85 meV, $\tau_{\phi} = 100$ ps ; $\Delta E_c = 220$ meV, Ltotal= 650 Å)



(b)

Fig.III.4.7. - Influence de la polarisation sur la variation de la densité d'états aux différents points de la structure pour LB = 50 Å, fig.a. correspond au cas de l'equilibre et fig.b. au potenteil Vapp =50 meV.

(T=300K, EF=85 meV, $\tau_{o} = 100 \text{ ps}$; $\Delta E_{c} = 220 \text{ meV}$, Ltotal= 650 Å)



Fig.III.4.9. -Influence de τ_{φ} sur le profil du potentiel chimique $\mu(z)$ pour $\tau_{\varphi} = 0.1$ ps et $\tau_{\varphi} = 100$ ps. (Vapp = 50 meV, T=300K, EF=85 meV, $\Delta E_c = 220$ meV, Ltotal= 650 Å)





Fig.III.4.8. - Influence de τ_{φ} sur la caractéristique de conduction pour un milieu balistique avec $\tau_{\varphi} = 100$ ps (fig.a) et pour un milieu diffusif avec $\tau_{\varphi} = 0.1$ ps (fig.b). La figure (c) compare les I_{total}.dans les deux cas.

 $(T=300K, EF=85 \text{ meV}, \Delta E_c = 220 \text{ meV}, \text{Ltotal} = 650 \text{ Å})$

137

Par ailleurs l'évolution de la densité d'états au centre de la barrière en fonction de la hauteur de celleci pour deux largeur LB = 50 Å et LB = 100 Å (figures III.4.5.a&b) appelle certaines remarques :

T'une part on peut constater que comme dans le cas des courbes de coefficient de transmission en fonction de l'énergie, la largeur des pics de densité d'états dépend de l'épaisseur de la barrière. Cette largeur diminue lorsque l'épaisseur LB de la barrière augmente.

To'autre part on peut remarquer que les pics de densité d'états évoluent en fonction de la hauteur de la barrière ΔE_c . L'amplitude augmente et le pic se déplace vers des énergies plus élevées lorsque la hauteur de la barrière augmente. Par ailleurs on peut noter que ces pics sont situés à des énergies supérieures ou égales à ΔE_c , ce qui exclue à priori l'existence de densité d'états à l'intérieur d'une barrière de potentiel constituant une région interdite pour les électrons.

Les évolutions de la densité d'états en différents points de la structure de la simple barrière à savoir dans les contacts, au milieu des accès et au centre de la barrière sont regroupées sur la figure (III.4.6a&b) pour deux valeurs de LB = 50 Å et LB = 100 Å. Comme on peut s'y attendre à l'équilibre, la structure est parfaitement symétrique et le maximum d'amplitude pour la densité d'états se trouve dans les contacts.

Par ailleurs la courbe du nombre d'états en fonction de la position indique (fig.III.4.6.c) met bien en évidence l'existence de la barrière.

En créant un déséquilibre entre les deux contacts par l'application d'un potentiel extérieur (figure III.4.7), le pic de densité d'états correspondant au contact soumis à ce potentiel se déplace vers les énergies négatives jusqu'à la valeur - |Vapp|.

b-3) Caractéristiques de conduction I=f(Vapp) et potentiel chimique local

- Les caractéristiques de conduction de la simple barrière de largeur LB=50 Å à T=300K pour deux régimes balistique c'est à dire non diffusif ($\tau \phi = 100$ ps) et diffusif ($\tau \phi = 0.1$ ps) sont reportés sur la figure III.4.8.

Dans le cas d'un régime balistique le courant total se confond avec sa composante cohérente (fig.III.4.8a), ce qui cesse d'être vrai lorsqu'on passe en régime diffusif.

Dans le cas considéré ($\tau \varphi = 0.1$ ps) cependant la contribution incohérente reste faible (fig.III.4.8b), et l'on n'enregistre pas de différence sensible d'un régime à l'autre au niveau du courant total (fig.III.4.8c).

En effet le courant est fonction du potentiel chimique local $\mu(z)$. Or comme on peut le constater sur la figure III.4.9, celui-ci ne présente pas de variations sensibles en fonction de τ_{ϕ} et le courant total reste pratiquement constant.

4-1-2- Diode à double Barrière de potentiel

- Il s'agit d'une structure symétrique composée d'une double barrière de largeur LB1=LB2=28 Å et d'un puits de potentiel de largeur LP=45 Å. La longueur totale est de 451 Å et les couches d'accès sont d'une longueur de 175 Å. Le schéma correspondant se trouve sur la figure III.4.10.

Le niveau de Fermi est de 85 meV, ce qui correspond à un dopage des couches d'accès de 2.10^{18} cm⁻³. La hauteur des barrières est fixée à 270 meV.Et $\Delta z = 5.65$ Å., $X_{Al} = 30$ %.



Fig.III.4.10. - Schéma d'une diode à effet tunnel résonant . NID indique les régions Non Intentionnellement Dopées

a) Densité de charges en fonction du niveau de Fermi

- Les résultats de calcul du profil de charges à l'équilibre, en fonction de l'énergie du niveau de Fermi E_F ont été reportés sur la figure III.4.11.

On constate qu'à une énergie E_F donnée le profil de charges reste pratiquement insensible aux variation de τ_{ϕ} dans le système. Mais par contre la quantité de charges piégées dans le puits diminue en fonction du niveau de Fermi. Ce qui peut être indicatif du fait que pour une hauteur de barrière ΔE_c donnée, une faible énergie de niveau de Fermi traduit une faible énergie moyenne pour les électrons et par conséquent un passage plus difficile dans le puits de potentiel. D'où la décroissance du pic de charges dans le puits en fonction de E_F .

b) <u>Densité d'états</u>

- L'étude qui suit est faite en régime balistique c'est à dire avec $\tau \phi = 100$ ps dans l'ensemble des différentes zones y compris les contacts.

Les variations de densité d'états $N_0(z) = f(z)$ en différents points de la structure à savoir dans les contacts, les accès, les barrières et le puits de potentiel sont représentées sur les figures III.4.12 à III.4.15.

On peut à partir de ces courbes directement constater l'influence d'une polarisation extérieure sur l'évolution de la densité d'états :

☞ Dans les contacts : [fig. III.4.12 a&b]

- Le contact 1 étant toujours à l'équilibre, la densité d'états reste donc insensible aux variations du potentiel extérieur. Mais par contre le pic de densité d'états correspondant au deuxième contact soumis au Vapp, se déplace à gauche vers les énergies négatives et se situe pratiquement à la valeur correspondante au - |Vapp|.

The second secon

- Les densités d'états aux points situés au centre des accès ont un comportement semblable à celui des deux contacts cités ci-dessus. En effet la différence de potentiel s'applique en faite à la zone des barrières. Ainsi pour le premier accès il n'y a pas de variation en fonction de Vapp mais par contre le pic du deuxième accès tout en conservant son amplitude et sa largeur initiale se déplace vers les énergies négatives en fonction de - |Vapp|.



Distance (Angstroms)

Fig.III.4.11. - Evolution de la densité de charges en fonction de la position pour différentes valeurs de E_F et τ_{ϕ} (structure 28/45/28 Å, $\Delta Ec = 270$ meV, EF=85 meV, T=300K)

41

CHAPITRE III

NO(z;E) dans le Contact 1



Fig.III.4.12. - Variation de la densité d'états dans les contacts sous l'influence de la polarisation (structure 28/45/28 Å, $\Delta Ec = 270$ meV, EF=85 meV, T=300K)

NO(z;E) dans acces 1



Fig.III.4.13. - Variation de la densité d'états dans les accès sous l'influence de la polarisation (structure 28/45/28 Å, $\Delta Ec = 270$ meV, EF=85 meV, T=300K)









Fig.III.4.14.- Variation de la densité d'états dans les barrières sous l'influence de la polarisation (structure 28/45/28 Å, $\Delta Ec = 270$ meV, EF=85 meV, T=300K)

NO(z;E) dans le Puits de Potentiel





The provide the second second

- Les deux barrières étant soumises à la polarisation extérieure on constate alors une évolution importante de la densité d'états calculée en leurs centres respectifs, en fonction de Vapp. La symétrie du système est rompue sous l'effet de polarisation. On remarque que dans chacune des barrières la courbe de densité d'états en fonction de l'énergie présente deux pics. Le premier pic est situé aux énergies plus hautes et son existence correspond à celle d'une densité d'états pour des énergies supérieures à la hauteur de la barrière. Le déplacement de ce pic est fonction de la valeur locale du potentiel et son évolution est similaire à celle qu'on peut obtenir pour une simple barrière polarisée.

Le second pic situé aux énergies plus basses est lié à l'existence de phénomène d'interférence [Kim & Arnold, 1988] en relation avec la présence d'une second barrière de potentiel dans le voisinage de celle considérée.

The part of the potentiel of the second seco

- La région du puits étant soumise au potentiel appliqué on constate alors une variation de densité d'états au centre de celui-ci en fonction de Vapp. Le pic de densité d'états diminue en amplitude et se déplace vers les énergies négatives en s'élargissant.

L'évolution de la densité d'états au centre de la barrière est essentiellement porteuse de deux informations très intéressantes :

1- l'énergie à laquelle se situe le pic est indicatrice du niveau d'énergie résonant dans le puits

2- La largeur énergétique de ce pic à mi-hauteur indicatrice du temps de résidence moyen des "électrons" dans l'état d'énergie considéré. [Bruno & Bahder, 1989]

Ces études préliminaires en régime d'équilibre local, faites sur un modèle strict 1-D, nous permettent envisager l'étude d'un modèle quasi 1-D.



Fig.III.4.16. - Comparaison avec Wigner. Caractéristiques J(V) d'une structure 50/50/50Å à 300K (fig.a) et à 77K (fig.b)et d'une structure 28/45/28 Å à 300K (fig.c) (EF=85 meV, $\Delta E_c = 270$ meV, Ltotal = 450 Å, $\tau_{\phi} = 100$ ps partout)

0.20

Vapp (eV)

0.10

0.40

0.30

0.0 K. 0.00

III-4-2- <u>Régime d'équilibre local (Modèle quasi 1-D)</u>

Etude d'une diode à double Barrière de potentiel

- Nous reprenons la structure double barrière détaillée ci-dessus afin de la traiter à partir d'un modèle quasi 1D plus physique.

Nous commençons par une étude comparative avec les résultats obtenus par les approches cohérentes de Wigner et de Schrödinger (chapitre II). Puis après avoir étudié une structure 100/50/100 Å, nous faisons une étude en fonction de la température et du paramètre τ_{ϕ} pour une structure 50/50/50 Å.

4-2-1- Comparaison avec l'approche de Wigner

Nous avons reporté sur la fig.III.4.16 les caractéristiques de conduction de deux types de structures en régime balistique ou cohérent obtenues à 77K et 300K. La comparaison des résultats de simulation obtenus par le présent modèle avec ceux du formalisme de Wigner exposés au chapitre II montre un écart net entre ceux-ci. Les valeurs typiques relevées sont portées dans les tableaux I et II.

| structure | Modèle | Température | Jp/Jv |
|------------|---|-------------|-------|
| 28/45/28 Å | Wigner | 300K | 2 |
| 11 | Schrödinger | 87 | 3.89 |
| " | "Self-energy" locales ($\tau_{\phi} = 100 \text{ps}$) | U | 4.24 |
| | | | |
| 11 | Wigner | 77K | 2.84 |
| 11 | Schrödinger | It | 6.9 |
| " | "Self-energy" locales ($\tau \varphi = 100 \text{ps}$) | 11 | 6.8 |

Tabeau.I. Comparaison des résultats de différentes simulations pour une structure 28/45/28 Å



Fig.III.4.17. - Caractéristique J = f(V) d'une structure 100/50/100 Å à 300K (fig.a) et 77K (fig.b) pour τ_{ϕ} = 100 ps (EF=85 meV, ΔE_c =270 meV, Ltotal = 450 Å)

| structure | Modèle | Température | Jp/Jv |
|------------|---|-------------|-----------|
| 50/50/50 Å | Wigner | 300K | 1.14 |
| 11 | Schrödinger | ** | 3.32 |
| 11 | "Self-energy" locales $(\tau_{\varphi}=100 \text{ ps})$ | н | 3.7 |
| " | Expérience* | " | 1.5 - 1.8 |
| | | | |
| | | | |
| 11 | Wigner | 77K | 1.44 |
| ** | Schrödinger | 11 | 29.7 |
| tt. | "Self-energy" locales | " | 38 |
| | $(\tau_{\varphi}=100 \text{ps})$ | | |
| 11 | Expérience* | 11 | 6 - 8 |

Tabeau.II. Comparaison des résultats de différentes simulations pour une structure 50/50/50 Å

Comme on peut le constater la simulation avec le présent modèle des fonctions "self-energy" locales dans des conditions balistiques ($\tau_{\phi} = 100 \text{ ps}$) semblables à celles des modèles de Wigner et de Schrödinger, nous donne des résultats plutôt satisfaisants. En effet contrairement aux résultats du modèle de Wigner qui sous estime systématiquement à basse température le rapport Jpic/Jvallée, le modèle des fonctions "self-energy" locales conduit à une surestimation de ce rapport comme dans le modèle de Schrödinger. Nous pouvons donc espérer réduire cette surestimation en jouant sur τ_{ϕ} .

4-2-2- <u>Structure 100/50/100 Å</u>

- La caractéristique de conduction simulée à 300K d'une structure 100/50/100 Å (fig.III.4.17) n'indique pas l'existence d'une résistance différentielle négative (dénotée RDN), tandis qu'à 77K on relève un rapport Jp/Jv égal à 67.7. Ces résultats sont en accord qualitatif avec les relevés expérimentaux sur ce type de structure (Vanbesien & al, 1991). En effet aux températures élevées à cause d'une augmentation très rapide du courant vallée, le rapport Jp/Jv diminue considérablement et il est difficile d'observer l'effet d'une RDN dans ces conditions. A 77K nous obtenons là encore une valeur surestimée de Jpic/Jvallée que celle du relevé expérimental au voisinage de 20. Cet écart demande à être réduit là encore en agissant sur τ_{ϕ} . La démonstration de ce point est faite avec une structure 50/50/50 Å.



Fig.III.4.18. - Effet de la température sur l'évolution de Jpic, Jvallée et leur rapport Jp/Jv pour une structure 50/50/50 Å. Cas 1 : milieu complètement balistique avec $\tau_{\phi} = 100$ ps partout (fig.a&b). Cas 2 : zones active balistique avec $\tau_{\phi} = 100$ ps, ailleurs $\tau_{\phi} = 0.02$ ps. (EF=85 meV, $\Delta E_c = 270$ meV, Ltotal = 450 Å)

4-2-3-<u>Structure 50/50/50 Å</u>

a) <u>Etude en fonction de la température T</u>

- Nous avons étudié l'influence de la température sur une structure 50/50/50 Å pour deux cas différents. Cas 1 : le milieu est balistique en prenant $\tau \phi = 100$ ps partout d'un contact à l'autre, Cas 2 : en prenant $\tau \phi = 0.2$ ps dans les contacts ainsi que dans les zones d'accès, et $\tau \phi = 100$ ps dans la zone active de la double barrière considérée comme balistique c'est à dire non dissipatif. Les évolutions des densités de courant pic et vallée et celle de leur rapport sont représentées sur la fig.III.4.18. On peut noter que tandis que la densité de courant vallée présente une croissance importante en fonction de la température, la densité de courant pic a plutôt un comportement presque stationnaire au départ (diminue très légèrement) puis se met à augmenter à partir de 250meV (fig.III.4.18. a&c). Le potentiel correspondant au courant pic reste pratiquement insensible aux variations de la température et égal à 110meV. Le rapport Jp/Jv correspondant par conséquent présente une décroissance au fur et à mesure que la température augmente (fig.III.4.18.b&d). En effet dans les deux cas étudiés à partir d'une température critique T= 450K (contre la valeur expérimentale de 410K, Vanbésien & al 1991a&b) l'effet de la résistance différentielle négative disparaît car l'augmentation de Jpic n'est plus assez suffisante pour garder le rapport Jp/Jv constant.(fig.III.4.18.e&f).

Ces résultats correspondent, qualitativement aux résultats expérimentaux ainsi qu'à ceux obtenus par simulation à partir de l'équation de Schrödinger sur ce type de Structure. (Saint-Pol & al,1990; Vanbésien & al, 1991a&b, Chevoir,1992; Ohnishi,1988; Pritchard,1989; Bar-Joseph,1991).

b) Etude en fonction de τ_{0}

Les caractéristiques de conduction J =f (Vapp) à 77K et 300K pour le Cas 2 ci-dessus ont été reportées sur la fig.(III.4.19a&b). On constate qu'avec les valeurs de τ_{ϕ} choisies, le courant total est essentiellement du à sa composante cohérente.

A 300K nous obtenons un rapport (Jp/Jv) = 2.27 tandis qu'à 77K ce rapport est égal à 11.76. En comparant ces résultats avec des relevés expérimentaux on constate qu'il y a une concordance et que l'amélioration est nette par rapport aux résultats obtenus avec le formalisme de Wigner et pour lequel le rapport Jp/Jv est pratiquement sous estimé.

Ces résultats qui conduisent à approcher les valeurs expérimentales de Jp/Jv à 300K et à 77K sont obtenus en supposant que la zone de la double barrière est balistique.



Fig.III.4.19. Influence de diffusion dans la zone active d'une structure 50/50/50 Å à 300K et à 77K. Cas 2 : zone active balistique avec $\tau_{\phi} = 100$ ps, ailleurs $\tau_{\phi} = 0.02$ ps (fig. a&b). Cas 3 : zone active diffusive avec $\tau_{\phi} = 1$ ps (fig. c&d). Les figures (e & f) comparent les courant I_total. (,EF=85 meV, $\Delta E_c = 270$ meV, Ltotal = 450 Å)





Fig.III.4.20. - Influence de τ_{ϕ} sur la caractéristique J(V) d'une structure 50/50/50 Å. Cas 1 : milieu complètement balistique avec $\tau_{\phi} = 100$ ps partout. Cas 2 : zone active balistique avec $\tau_{\phi} = 100$ ps, ailleurs $\tau_{\phi} = 0.02$ ps (fig. a&b). Cas 3 : zone active diffusive avec $\tau_{\phi} = 1$ ps (fig. c&d). Les figures (e & f) comparent les courant I_total.(EF=85 meV, $\Delta E_c = 270$ meV, Ltotal = 450 Å)

154

Afin d'étudier l'influence de la diffusion dans cette zone nous y avons fait varier τ_{ϕ} en gardant ailleurs la valeur précédente $\tau_{\phi} = 0.2$ ps. (Cas 3)

Nous avons reporté sur fig.(III.4.19c&d) les résultats obtenus à 300K et à 77K avec $\tau \varphi = 1$ ps dans la zone des barrières. On constate qu'avec les valeurs de $\tau \varphi$ choisies, le courant total est essentiellement du à sa composante incohérente. Par ailleurs on observe que pour $\tau \varphi = 1$ ps on a Jp/Jv =1.86 à 300K et Jp/Jv = 7.95 à 77K ce qui correspond sensiblement aux valeurs expérimentales.

Les caractéristiques de conduction J=f(Vapp) correspondant aux trois cas énumérés ci-dessus sont reportées sur la figure III.4.20 et les résultats obtenus sont rassemblés dans les tableaux III & IV.

| τφ (ps) (contact / accès / Zone Active) | Température (K) | (Jp/Jv) _{Exp} | (Jp/Jv) obtenu |
|--|-----------------|------------------------|----------------|
| 100 / 100 / 100 ps | 300 K | 1.5 - 1.8 | 3.7 |
| 0.2 / 0.2 / 100 ps | н | 1.5 - 1.8 | 2.27 |
| 0.2 / 0.2/ 1 ps | 11 | 1.5 - 1.8 | 1.86 |

Tableau. III. Infulence de diffusion sur le rapport des courants à T=300K

| τφ (ps) | Température (K) | (Jp/Jv) _{Exp} | (Jp/Jv) obtenu |
|---------------------------------|-----------------|------------------------|----------------|
| (contact / accès / Zone Active) | | | |
| 100 / 100 / 100 ps | 77 K | 6 - 8 | 38 |
| 0.2 / 0.2 / 100 ps | H H | 6 - 8 | 11.76 |
| 0.2 / 0.2/ 1 ps | H | 6 - 8 | 7.95 |

Tableau. IV. Infulence de diffusion sur le rapport des courants à T=77K

On peut alors conclure qu'en choisissant correctement la valeur de τ_{ϕ} il est possible de faire des prédictions plus satisfaisantes sur le comportement du composant.

III-5 - <u>Conclusion</u>

- Dans ce chapitre, nous avons exprimé les grandeurs physiques : courant, densité d'états, densité de charges, pour un modèle de structure semiconductrice à hétérojonctions en relation avec des contacts de polarisation. Ce système quantique hors d'équilibre a été traité à partir du formalisme de Keldysh qui permet de ramener le problème à la résolution couplée de deux équations intégrodifférentielles où les fonctions "self-energy" permettent de tenir compte des interactions subies par les électrons.

Nous traitons alors de manière exacte l'influence du potentiel appliqué et de manière perturbative au 1er ordre la diffusion des électrons à partir d'un Hamiltonien d'interaction locale proposé par S-Datta.

L'influence du potentiel cristallin est traitée dans 'l'approximation de la masse effective. Les discontinuités et courbures de bandes dues à la charge d'espace interviennent sous la forme d'un potentiel de Hartree qui peut être rendu "self consistent" si l'on inclue l'équation de Poisson, ce que nous n'avons pas fait dans ce travail.

Nous avons montré que ce formalisme des fonctions "self-energy" locales permet d'obtenir la fonction d'intérêt physique G[<] à partir de la résolution d'une équation cinétique pour G^R qui introduit naturellement un temps de perte de cohérence de phase $\tau_{\phi}(r;E)$ lié aux interactions diffusives considérées.

Nous avons traité le cas du régime statique et montré que le calcul des grandeurs physiques fait intervenir une fonction de distribution énergétique locale f(r;E) pour les électrons du système. La détermination "self-consistent" de f(r;E) est couplée à celle de $\tau_{\phi}(r;E)$. Dans le cas de l'équilibre local f(r;E) prend une forme de type Fermi-Dirac qui fait intervenir un potentiel chimique local $\mu(r)$. Par ailleurs dans cette situation, nous avons vu qu'il s'opère un découplage des énergies au niveau du calcul et qu'il devient assez justifié de considérer τ_{ϕ} comme un paramètre. Partant de ces simplifications, nous avons pu alors revenir à la résolution de l'équation pour G^R où τ_{ϕ} est introduit " ab initio", indépendamment du calcul de f(r;E).

Nous avons alors discrétisé l'équation pour G^R pour l'écrire ensuite sous une forme matricielle tout à fait semblable à celle que l'on pourrait obtenir dans un problème d'Hamiltonien en liaisons fortes. Cette coïncidence formelle nous permet alors d'utiliser des techniques de la littérature.

Nous déterminons G^R en utilisant l'équation de Dyson et plus précisément sa restriction à une portion limitée de l'espace physique qui comprend la zone des barrières et les zones d'accès. Les contacts considérés comme des réservoirs infinis, sont pris en compte intégralement dans une étape de calcul préalable qui est totalement analytique.

L'extension de G^R nécessaire au calcul du courant est également analytique. On réalise ainsi une économie appréciable au niveau des calculs numériques. Une économie supplémentaire est faite en ramenant le calcul de la fonction G^R d'un problème quasi 1D à celle d'un problème 1D strict.

Finalement nous donnons les expressions numériques des différentes grandeurs physiques et le mode d'emploi des logiciels sous forme d'organigrammes pour régime général, le régime d'équilibre local et le cas particulier du régime linéaire. Partout, l'influence de la température est prise en compte.

Nous achevons la mise en place du logiciel en particulier par l'ajustement des frontières du spectre énergétique optimal à considérer en fonction de la température et de la polarisation appliquée, en traitant le cas d'une simple barrière tunnel. Nous indiquons alors que nous retrouvons des résultats déjà publiés pour cette structure à propos du courant et des densités d'états.

Nous appliquons enfin le logiciel à deux structures de diode à effet tunnel résonant pour établir leur caractéristique J(V) et faire une première étude sur l'influence de la diffusion. Nous montrons que la diffusion en particulier dans les zones d'accès réduit sensiblement le rapport Jpic/Jvallée.

Ainsi les contacts jouent un rôle important pour les performances du composant dans la mesure où des contacts diffusifs détériorent la résistance différentielle négative.

Nous indiquons enfin dans quelles conditions on peut approcher les valeurs Jpic/Jvallée à 300K et à 77K pour une structure 50/50/50 Å.

Conclusion Générale

Conclusion Générale - Discussion

Le but de ce travail a consisté à mettre en place les éléments de base d'un logiciel capable de simuler le comportement de composants quantiques en régime statique. Nous faisons état des premiers résultats obtenus. Ils sont relatifs au transport perpendiculaire dans des hétérostructures à semiconducteurs du type : diode à effet tunnel résonant. L'étude est réalisée à partir de deux formalismes permettant de traiter des systèmes de caractère quantique hors d'équilibre: le formalisme de la fonction de Wigner et le formalisme de Keldysh pour les fonction de Green. Nous montrons au passage, le lien qui existe entre ces deux approches.

De façon générale, les modèles de composants utilisés dans ce travail sont élémentaires et de type quasi 1D. Ils traitent le composant comme un système ouvert comportant une zone à caractère quantique (zone des barrières) pincée entre deux zones d'accès qui ont un rôle d'interfaçage avec les contacts de polarisation.

Les contacts sont modélisés comme des réservoirs à l'équilibre, caractérisés par leur température et leur potentiel chimique.

L'effet du potentiel extérieur est toujours traité de manière non perturbative. L'effet du potentiel cristallin est traité dans l'approximation de la masse effective. Les discontinuités de la bande de conduction sont prises en compte par un terme de potentiel. Pour simplifier, la masse effective est supposée constante dans toute la structure et la carte de potentiel figurant le bas de la bande de conduction est fixée à priori et n'est pas corrigée ensuite de manière "self-consistent". Rien n'empêche avec les formalismes choisis de lever ces restrictions au prix, bien sûr, de calculs supplémentaires. Mais au stade du développement où nous sommes, l'accent est mis sur le problème des contacts, nécessairement traités comme partie intégrante du composant.

Dans le cadre du formalisme de Wigner, le problème des contacts est traité sans pouvoir introduire de mécanisme de perte de cohérence de phase. De ce point de vue donc, les zones d'accès n'ont pas de rôle actif et leur présence ne sert qu'à éloigner la frontière avec les contacts assimilés à des réservoirs à l'équilibre. Ceux-ci se comportent comme des corps noirs dans leur échange électronique avec les zones d'accès. par ailleurs, la température apparaît uniquement au niveau de la distribution énergétique des électrons des réservoirs. D'un point de vue critique, on retient à propos des simulations effectuées, deux difficultés sans doute liées :

The première concerne l'impossibilité de rendre compte des variations expérimentales du rapport Ipic/Ivallée en fonction de la température. Avec le modèle utilisé l'influence de la température reste faible.

Ia seconde est relative à la taille rapidement excessive des matrices à traiter numériquement. Nous avons rencontré ce problème en particulier à propos des structures à barrières plus épaisses où il importe d'échantillonner correctement le pic de transmission pour obtenir des résultats significatifs.

Nous avons montré que la solution ne réside pas en priorité dans l'accroissement de la taille mémoire nécessaire au traitement d'un échantillonnage en " k " plus serré, mais qu'elle consiste plutôt à utiliser un pas variable pour cet échantillonnage qui est alors optimisé.

Nous avons indiqué que le calcul de la transformée de Fourier discrète du potentiel $V_R(r)$ doit s'effectuer de manière séparée et que rien n'empêche ensuite de sélectionner parmi les valeurs de " k " mise en jeu, un sous ensemble restreint pour le calcul de la fonction de Wigner proprement dit. La taille de ce sous ensemble est alors conditionnée par les capacités du calculateur.

Malgré cette économie de moyens, il semble bien que certains obstacles au développement du formalisme de Wigner persistent. D'une part, le problème de la taille mémoire ressurgit pour la simulation des systèmes 2D ou 3D dont le traitement constitue le prolongement de ce travail. D'autre part, l'introduction d'un temps de perte de cohérence de phase ne peut se faire que de façon phénoménologique et donc fort peu satisfaisante.

Pour ces raisons nous avons repris (chapitre III) l'étude du système contacts-composant à partir du formalisme de Keldysh en introduisant des diffusions supposées locales selon un modèle proposé par S-Datta. Ce modèle permet alors d'introduire en relation directe avec l'hamiltonien d'interaction, un temps de perte de cohérence de phase local τ_{ϕ} comme un paramètre et non comme une grandeur calculée de façon "self-consistent" en relation avec f(r;E) la fonction de distribution énergétique des électrons dans le composant et ses accès. Il y a lieu, bien entendu, dans la suite de ce travail de justifier cette démarche simplificatrice et d'en cerner les limites de validité à partir d'un calcul numérique plus complet.

Dans les simulations effectuées τ_{ϕ} permet donc de contrôler le rôle diffusif des zones d'accès mais aussi celui des contacts et au besoin celui du composant.

Dans le modèle, la température T intervient de façon explicite au niveau de la fonction de distribution énergétique des électrons dans les réservoirs mais aussi dans le composant et ses accès, du moins en régime d'équilibre local.

Les développements théoriques indiquent par ailleurs que τ_{ϕ} dépend de T dans la mesure où il dépend de la distribution énergétique N(E) de type Bose-Einstein pour les diffuseurs supposés à l'équilibre. Mais le fait de traiter ici, τ_{ϕ} comme un paramètre, le rend du même coup simplement ajustable en fonction de T. Ces points importants demandent des études numériques complémentaires pour être améliorés.

Quoiqu'il en soit, les simulations effectuées sur des structures tests montrent que l'effet de τ_{ϕ} est très significatif sur la caractéristique I(V) des systèmes composant-contacts. Il est possible d'encadrer les valeurs expérimentales de la littérature pour le rapport Ipic/Ivallée à 300K et à 77K. A ce stade de l'étude, il paraît quelque peu illusoire de poursuivre plus avant la comparaison simulation expérience.

Les premiers résultats encourageants demandent à être confortés par d'autres études sur des modèles plus proches de structures réalisées en pratique. Ainsi par exemple des structures à accès non intentionnellement dopés pour lesquels le calcul "self-consistent" du potentiel de Hartree paraît important, ou encore des structure 2D. Le traitement de telles structures ne passe pas par une révision profonde des éléments essentiels mis en place. Soulignons en effet pour terminer que les calculs numériques avec le formalisme choisi, restent raisonnables car une partie importante du traitement des équations discétisées peut être effectué de façon analytique à partir de techniques propres au domaines de l'approximation des liaisons fortes. En particulier, nous avons montré comment traiter le couplage aux réservoirs de taille infinie tout en limitant le calcul numérique à la région comprise entre ceux-ci sans faire de troncature pour autant.

La technique est applicable aux systèmes 2D mais nous avons limité l'exposé au cas des systèmes quasi 1D.

Il semble donc qu'un champ expérimental intéressant puisse être exploré à partir du logiciel proposé dans ce travail.



<u>ANNEXE I</u>

NOTES SUR LA SECONDE QUANTIFICATION

La méthode de seconde quantification s'impose en théorie relativiste où l'on a affaire à des systèmes de particules dont le nombre lui-même est variable .(Landau; 1958) En effet dans cette méthode le concept du champ est utilisé pour décrire un système de particules, et les particules du système sont considérées être des " quantas " d'un certain champ et l'interaction entre elles est réalisée à travers d'autres particules . Les champs de particules sont fonction de trois coordonnées spatiales et le temps . Ces coordonnées sont des ' points ' dans l'espace et pas les coordonnées des particules . Puisque les particules sont considérées d'être des quantas du champ , la méthode de 2nd quantification est particulièrement adaptée pour étudier des systèmes dans lesquels les particules se transforment en d'autres particules . Ainsi cette méthode facilite considérablement l'étude des systèmes comportant un très grand nombre de particules identiques .(Davydov M.Q)

Dans l'étude des systèmes constitués d'un très grand nombre de particules identiques afin d'éviter une description excessivement détaillée des états de mouvement des N particules du système, on utilise souvent une nouvelle représentation des fonctions d'onde et des opérateurs dites "*représentation en nombre d'occupation*"...

Prenons par exemple un ensemble de N particules , contenues dans un volume Ω , muni des conditions aux limites périodiques . Pour décrire l'état de tel système , on utilise habituellement la fonction d'onde $\Psi(r_1, r_2, ..., r_N)$, dépendant des 4N coordonnées (3 coordonnées d'espace et une de spin) des particules dans l'*espace de configuration*.

Une telle représentation permet de généraliser naturellement les méthodes mises au point pour une particule .

Mais si l'on considère un ensemble complet d'états à une particule, par exemple des ondes planes de vecteur d'onde ' k ' (en ignorant le spin), on peut repérer l'état du système en indiquant le nombre n_k de particules se trouvant dans la " case " k. Nous sommes ainsi amené à choisir comme vecteurs de base de " l'espace des états du système total ", les vecteurs :

$$|n_1, \dots, n_k, \dots \rangle$$
 (A1-1)

où chacun des n_k peut prendre des valeurs positives entières quelconques (remarquons que le nombre total de particules n'est pas précisé). Un tel état est simplement un produit (éventuellement symetrisé ou antisymetrisé) d'ondes planes, une pour chaque particule. D'où l'intérêt de cette représentation. (Nozieres, 1963)

Afin de décrire des processus physiques d'absorption ou de production de particules dans un état donné on définit des opérateurs *abstraits* qui ont la propriété d'augmenter ou de diminuer le nombre de particules dans cet état. Un *opérateur de création* est une transformation qui change tout état à N particules en un état à (N+1) particules :

$$C_k^* \mid \dots, n_k, \dots \ge \sqrt{n_k + 1} \mid \dots, n_k + 1, \dots \ge$$
 (A1-2)

tandis que un *opérateur d'annihilation* (ou de destruction) est une transformation qui change tout état à N particules en un état à (N-1) particules (Mills p5) :

$$C_k | \dots, n_k, \dots > = \sqrt{n_k} | \dots, n_k - 1, \dots >$$
 (A1-3)

L'objectif est d'exprimer toutes les propriétés du système au moyen de ces opérateurs de destruction et de création (Nozières, 1963) Par le postulat de la statistique quantique on sait que toute particule en physique microscopique est soit un "Boson", soit un "Fermion".

Les fermions correspondant à la statistique de Fermi ,obéissent au principe d'exclusion de Pauli postulant que deux particules ne peuvent pas occuper le même état quantique. Or ceci est caractéristique des particules pour lesquelles uniquement les états antisymétriques interviennent. Autrement dit le vecteur d'état de l'ensemble des N particules change quand on permute les particules.

Les bosons étant des particules qui correspondent à la statistique de Bose n'obéissent pas au principe de Pauli et par conséquent il peut y avoir une ou plusieurs particules dans le même état quantique. Ceci est caractéristique des états symétriques. C'est à dire qu'il n'y a pas de distinction entre particules et le vecteur d'état ne change pas quand on permute les particules.

Le type particulaire, Boson ou Fermion, dépend de la grandeur de son spin en unité de h (nombre de spin). On sait que les particules ayant un nombre entier de spin sont des bosons tandis que celles ayant un nombre demi-entier de spins sont des fermions .(Fujita, 1966). Un ensemble de particules de type Boson ou Fermion est décrit par un opérateur de champ $\Psi(r)$ ou $\Psi_{\sigma}(r)$ si les particules possèdent des spins, et son conjugué hermétique $\Psi^{\dagger}(r)$ ou $\Psi^{\dagger}_{\sigma}(r)$. (G.Rickayzen, 1991)

Les bosons vérifient les relations de commutation suivantes :

 $[\Psi(r) , \Psi(r')] = \Psi(r) \Psi(r') - \Psi(r') \Psi(r) = 0$

$$\begin{bmatrix} \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}) , \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}') \end{bmatrix} = \Psi^{\dagger}(\mathbf{r})\Psi^{\dagger}(\mathbf{r}') - \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}')\Psi^{\dagger}(\mathbf{r}) = 0$$

$$\begin{bmatrix} \Psi(\mathbf{r}) , \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}') \end{bmatrix} = \Psi(\mathbf{r})\Psi^{\dagger}(\mathbf{r}') - \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$
(A1-4)

ou dans le cas des spins non nuls :

$$\begin{bmatrix} \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) &, \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}') \end{bmatrix} = 0$$

$$\begin{bmatrix} \Psi^{\dagger}_{\sigma}(\mathbf{r}) &, \Psi^{\dagger}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \end{bmatrix} = 0$$

$$\begin{bmatrix} \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) &, \Psi^{\dagger}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \end{bmatrix} = \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \Psi^{\dagger}_{\sigma'}(\mathbf{r}') - \Psi^{\dagger}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) = \delta_{\sigma \sigma'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$
(A1-5)

avec :
$$\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r'}) = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x'})\delta(\mathbf{y}-\mathbf{y'})\delta(\mathbf{z}-\mathbf{z'})$$

Les fermions vérifient les relations d'anticommutation suivantes :

$$\begin{bmatrix} \Psi(\mathbf{r}) &, \Psi(\mathbf{r}') \end{bmatrix} = \Psi(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}') + \Psi(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}) = 0$$

$$\begin{bmatrix} \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}) &, \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}') \end{bmatrix} = \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}') + \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}') \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}) = 0$$

$$\begin{bmatrix} \Psi(\mathbf{r}) &, \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}') \end{bmatrix} = \Psi(\mathbf{r}) \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}') + \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

(A1-6)

ou dans le cas des spins non nuls :

$$\begin{bmatrix} \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) &, \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}') \end{bmatrix} = 0$$

$$\begin{bmatrix} \Psi^{\dagger}_{\sigma}(\mathbf{r}) &, \Psi^{\dagger}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \end{bmatrix} = 0$$

$$\begin{bmatrix} \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) &, \Psi^{\dagger}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \end{bmatrix} = \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \Psi^{\dagger}_{\sigma'}(\mathbf{r}') + \Psi^{\dagger}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) = \delta_{\sigma \sigma} \cdot \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$
(A1-7)

Dans le cas des particules à spin demi entier, tels les électrons, on peut écrire les composantes matricielles de ces deux champs :

$$\Psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \\ \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad ; \quad \Psi^{+}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \Psi_{\uparrow}^{+} \\ \Psi_{\downarrow}^{+} \end{pmatrix}$$

Ces opérateurs de champ peuvent être développés en termes d'un ensemble complet de fonctions d'onde classiques monoparticulaires $\varphi_{\alpha(r)}$. Donc :

$$Ψ(\mathbf{r}) = Σ_{\alpha} C_{\alpha} φ_{\alpha}(\mathbf{r})$$
; $Ψ^{\dagger}(\mathbf{r}) = Σ_{\alpha} C^{\dagger}{}_{\alpha} φ^{\dagger}{}_{\alpha}(\mathbf{r})$ (A1-8)

où dans le cas des spins, $\varphi_{\alpha(r)}$ est une matrice classique à deux composantes .Des opérateurs C^+_{α} sont des opérateurs de création pour les particules dans l'état monoparticulaire $\varphi_{\alpha(r)}$ tandis que C_{α} sont des opérateurs d'annihilation pour les mêmes particules .

Les relations de commutation pour ces opérateurs s'établissent à partir des relations (A1-1) et (A1 6) :

$$[C_{\alpha}, C^{\dagger}_{\alpha'}] = C_{\alpha} C^{\dagger}_{\alpha'} + \varepsilon C^{\dagger}_{\alpha'} C_{\alpha} = \delta_{\alpha\alpha'} \qquad (\alpha \# \alpha') \qquad (A1-9)$$

$$[C_{\alpha}, C_{\alpha'}] = [C^{\dagger}_{\alpha}, C^{\dagger}_{\alpha'}] = 0$$
(A1-10)

avec : ε = signe (-) pour les Bosons et signe (+) pour les Fermions

Dans ce cas pour les bosons on peut écrire :

$$\begin{bmatrix} \Psi(\mathbf{r}) &, \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}') \end{bmatrix} = \Sigma_{\alpha\alpha'} \begin{bmatrix} C_{\alpha} &, C^{\dagger}_{\alpha'} \end{bmatrix} \varphi_{\alpha(\mathbf{r})} \varphi^{\dagger}_{\alpha'(\mathbf{r}')}$$
$$= \Sigma_{\alpha} \varphi_{\alpha(\mathbf{r})} \varphi^{\dagger}_{\alpha'(\mathbf{r}')} = \delta(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}')$$
(A1-11)

Pour un système complet d'états de base orthonormée à N-corps on définit l'état vide normalisé par : | 0> et on a :

$$C_{\alpha} \mid 0 > = 0 \qquad \forall \alpha$$

Pour les fermions, un état ne peut que contenir zéro ou une particule que nous désignons par : $| 0 >_{\alpha}$ et $| 1 >_{\alpha}$ respectivement, donc :

$$C_{\alpha} | 1 \rangle_{\alpha} = | 0 \rangle_{\alpha} ; \quad C^{\dagger}_{\alpha} | 1 \rangle_{\alpha} = 0$$

$$C_{\alpha} | 0 \rangle_{\alpha} = 0 ; \quad C^{\dagger}_{\alpha} | 0 \rangle_{\alpha} = | 1 \rangle_{\alpha}$$
(A1-12)

donc $C_{\alpha} C_{\alpha}$ agissent soit sur $|1\rangle_{\alpha}$, soit sur $|0\rangle_{\alpha}$ donnent zéro et de façon similaire nous avons la combinaison $C^{\dagger}_{\alpha} C^{\dagger}_{\alpha} = 0$, car deux particules ne peuvent pas être crées dans le même état. On peut définir les quantités physiques suivantes :

$$\rho(r) = \Psi^{\dagger}(r) \Psi(r) = \Sigma_{\alpha \alpha'} [C^{\dagger}_{\alpha} C_{\alpha'}] \phi^{\dagger}_{\alpha'(r)} \phi_{\alpha}(r) \text{ (densité de particules)}$$
(A1-13)

$$N = \int d^{3}r \rho(r) = \Sigma_{\alpha} [C^{\dagger}_{\alpha} C_{\alpha}] \text{ (Nombre total de particules)}$$
(A1-14)

On peut établir une correspondance biunivoque entre les opérateurs dans la *représentation en coordonnées* et les opérateurs dans la présente représentation.
Par exemple en mécanique ondulatoire ou en représentation en coordonnées les opérateurs monoélectroniques sont toujours donnés par :

 $\Sigma_i f(r_i, \nabla_i)$

où f peut dépendre de la position et du moment de ième particule .L'opérateur correspondant dans la nouvelle représentation est :

$$\int d^3r \Psi^{\dagger}(r) f(r, \nabla) \Psi(r)$$

On peut trouver une liste résumée de ces correspondances entre les deux représentations dans l'ouvrage de G.Rickayzen (1991).

En résumé dans ce formalisme dit *méthode de la 2nd quantification*, les états symétriques (ou antisymetriques) ainsi que les quantités observables pour un ensemble de particules identiques peuvent être exprimés en terme d'opérateurs de création et d'annihilation. Ce nouveau formalisme présente des avantages notables sur le formalisme habituel de Schrödinger. Le premier avantage est que les quantités observables sont définies uniquement en se référant à l'état d'une seule particule. On peut maintenant décrire des systèmes à N-corps (excepté pour les degrés internes de liberté) dans un espace à trois dimensions contrairement au cas du formalisme de Schrödinger dans lequel l'espace multi-particulaire de dimension 3N (N étant nombre de particules) doit être considéré .

Le deuxième et peut-être le plus grand avantage est qu'il tient compte des propriétés de symétrie des particules d'une manière très simple sous forme des règles de commutation (ou d'anticommutation) .Le 3ème avantage est que les quantités observables dans la 2nd quantification sont définies indépendamment du nombre de particules de telle manière que le formalisme peut s'appliquer aux systèmes dans lesquels le nombre de particules n'est pas conservé (Fujita, 1966).

ANNEXE II

Discrétisation de l'équation de transport à masse effective variable

- Il s'agit de discrétiser l'équation de transport suivante dans le cas d'un traitement *unidimensionnel* du problème en *régime statique* :

$$\begin{split} &\hbar \int \frac{d\mathbf{k}'}{8\pi} \,\mathbf{M}_1(\mathbf{R}, \mathbf{k} - \mathbf{k}') \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \mathbf{f}(\mathbf{R}, \mathbf{k}') \\ &- \hbar \int \frac{d\mathbf{k}'}{4\pi} \,\mathbf{k}' \,\mathbf{M}_2(\mathbf{R}, \mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathbf{f}(\mathbf{R}, \mathbf{k}') \\ &+ \hbar \int \frac{d\mathbf{k}'}{16\pi} \,\mathbf{M}_3(\mathbf{R}, \mathbf{k} - \mathbf{k}') \left[\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}^2} - 4(\mathbf{k}')^2 \right] \mathbf{f}(\mathbf{R}, \mathbf{k}') \\ &- \hbar \int \frac{d\mathbf{k}'}{4\pi} \,\mathbf{k}' \,\mathbf{M}_4(\mathbf{R}, \mathbf{k} - \mathbf{k}') \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \mathbf{f}(\mathbf{R}, \mathbf{k}') \\ &- \frac{1}{\hbar} \int \frac{d\mathbf{k}'}{2\pi} \,\mathbf{V}(\mathbf{R}, \mathbf{k} - \mathbf{k}') \,\mathbf{f}(\mathbf{R}, \mathbf{k}') = 0 \end{split}$$

(AII-1)

En tenant compte des conditions aux limites explicitée dans le paragraphe. (II-3-3) et les remarques concernant la transformée de Fourier discrétisée du paragraphe. (II-3-4), dans le cas d'un *problème à masse effective variable* on obtient donc l'équation discrétisée suivante :

$$\frac{\hbar \sum_{k'} \frac{M_{1}(\mathbf{R}, \mathbf{k} - \mathbf{k}')}{\Delta \mathbf{R}} \times \begin{cases} f(\mathbf{R} + \Delta \mathbf{R}, \mathbf{k}') - f(\mathbf{R}, \mathbf{k}'); & \mathbf{k}' < 0 \\ f(\mathbf{R}, \mathbf{k}') - f(\mathbf{R} - \Delta \mathbf{R}, \mathbf{k}'); & \mathbf{k}' > 0 \end{cases} \\
-\hbar \sum_{k'} \mathbf{k}' M_{2}(\mathbf{R}, \mathbf{k} - \mathbf{k}') f(\mathbf{R}, \mathbf{k}') \\
+\hbar \sum_{k'} \frac{M_{3}(\mathbf{R}, \mathbf{k} - \mathbf{k}')}{(\Delta \mathbf{R})^{2}} \Big[f(\mathbf{R} + \Delta \mathbf{R}, \mathbf{k}') - 2(1 + 2\Delta \mathbf{R}^{2} \cdot \mathbf{k}'^{2}) f(\mathbf{R}, \mathbf{k}') + f(\mathbf{R} - \Delta \mathbf{R}, \mathbf{k}') \Big] \\
-\hbar \sum_{k'} \mathbf{k}' \frac{M_{4}(\mathbf{R}, \mathbf{k} - \mathbf{k}')}{\Delta \mathbf{R}} \times \begin{cases} f(\mathbf{R} + \Delta \mathbf{R}, \mathbf{k}') - 2(1 + 2\Delta \mathbf{R}^{2} \cdot \mathbf{k}'^{2}) f(\mathbf{R}, \mathbf{k}') + f(\mathbf{R} - \Delta \mathbf{R}, \mathbf{k}') \Big] \\
-\hbar \sum_{k'} \mathbf{k}' \frac{M_{4}(\mathbf{R}, \mathbf{k} - \mathbf{k}')}{\Delta \mathbf{R}} \times \begin{cases} f(\mathbf{R} + \Delta \mathbf{R}, \mathbf{k}') - f(\mathbf{R}, \mathbf{k}'); & \mathbf{k}' < 0 \\ f(\mathbf{R}, \mathbf{k}') - f(\mathbf{R} - \Delta \mathbf{R}, \mathbf{k}'); & \mathbf{k}' > 0 \end{cases} \\
-\frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} \mathbf{V}(\mathbf{R}, \mathbf{k} - \mathbf{k}') f(\mathbf{R}, \mathbf{k}') = 0 \end{cases}$$
(AII-2)

avec :

$$M_{1}(R, k-k') = \frac{1}{2N_{k}\Delta R} \sum_{r} \sin[(k-k')r] \begin{cases} \frac{1}{m^{-}(R,r)} - \frac{1}{m^{-}(R-\Delta R,r)}; & k' < 0 \\ \frac{1}{m^{-}(R+\Delta R,r)} - \frac{1}{m^{-}(R,r)}; & k' > 0 \end{cases}$$

$$M_{2}(R, k-k') = \frac{1}{N_{k}\Delta R} \sum_{r} \cos[(k-k')r] \left\{ \frac{1}{m^{+}(R,r)} - \frac{1}{m^{+}(R-\Delta R,r)}; \quad k' < 0 \\ \frac{1}{m^{+}(R+\Delta R,r)} - \frac{1}{m^{+}(R,r)}; \quad k' > 0 \right\}$$

(AII-4)

$$M_{3}(R, k-k') = \frac{1}{4N_{k}} \sum_{r} \frac{\sin[(k-k')r]}{m^{-}(R, r)}$$
(AII-5)

$$M_{4}(R, k-k') = \frac{1}{N_{k}} \sum_{r} \frac{\cos[(k-k')r]}{m^{+}(R, r)}$$
(AII-6)

$$V(\mathbf{R}, \mathbf{k} - \mathbf{k}') = \frac{2}{N_{k}} \sum_{r} \sin\left[\left(\mathbf{k} - \mathbf{k}'\right)r\right] \left\{ e \left[\upsilon\left(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}\right) - \upsilon\left(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2}\right)\right] \right\}$$
(AII-7)

Les quantités physiques correspondantes sont alors obtenus à partir des relations suivante :

a) La densité de particules

$$n(R) = \int \frac{dk}{2\pi} f(R,k)$$
 (AII-8)

b) La densité de courant

$$J(R) = \int \frac{dk}{2\pi} \frac{\hbar k}{m(R)} f(R,k)$$
(AII-9)

<u>ANNEXE III</u>

III-A- Calcul des fonctions "self-energy"

- Le calcul des fonctions "self-energy" est faite au 1er ordre. Dans ces conditions le diagramme correspondant est indiqué sur la *figure AIII-1* :



figure AIII-1 : Diagramme au 1er ordre pour la fonction "self-energy"

Ainsi pour ce type de processus les fonctions "self-energy" s'écrivent sous forme (G.D. Mahan, 1987; Langreth, 1972 & 1976) :

$$\Sigma^{>}(x_{1}, x_{2}) = G^{>}(x_{1}, x_{2}) D^{>}(x_{1}, x_{2})$$

$$\Sigma^{<}(x_{1}, x_{2}) = G^{<}(x_{1}, x_{2}) D^{<}(x_{1}, x_{2})$$
(AIII-1)

où x = (r,t) et les fonctions $D^{<}$ et $D^{>}$ sont données par :

$$D^{\diamond}(\mathbf{x}_{1}, \mathbf{x}_{2}) = \langle H_{int}(\mathbf{r}_{1}, \mathbf{t}_{1}) H_{int}(\mathbf{r}_{2}, \mathbf{t}_{2}) \rangle$$

$$D^{\diamond}(\mathbf{x}_{1}, \mathbf{x}_{2}) = \langle H_{int}(\mathbf{r}_{2}, \mathbf{t}_{2}) H_{int}(\mathbf{r}_{1}, \mathbf{t}_{1}) \rangle$$
(AIII-2)

En utilisant la relation (III-2-4) pour Hint on obtient :

$$D^{>}(x_{1}, x_{2}) = U^{2} \sum_{m,n} \delta^{3}(r_{1} - r_{m}) \,\delta^{3}(r_{2} - r_{n}) \left\langle \left(a_{m}^{+}(t_{1}) + a_{m}(t_{1})\right) \left(a_{n}^{+}(t_{2}) + a_{n}(t_{2})\right) \right\rangle$$
(AIII-3)

Nous avons supposé que le bain de diffuseurs est en équilibre thermodynamique donc :

$$\left\langle \begin{array}{l} \left(a_{m}^{+}(t_{1}) \ a_{n}(t_{2})\right) \right\rangle = \delta^{3}_{mn} N(\hbar \omega_{m}) e^{i\omega_{m}(t_{1}-t_{2})} \\ \left\langle \left(a_{m}(t_{1}) \ a_{n}^{+}(t_{2})\right) \right\rangle = \delta^{3}_{mn} \left(N(\hbar \omega_{m}) + 1\right) e^{-i\omega_{m}(t_{1}-t_{2})} \\ \left\langle \left(a_{m}(t_{1}) \ a_{n}(t_{2})\right) \right\rangle = 0 \\ \left\langle \left(a_{m}^{+}(t_{1}) \ a_{n}^{+}(t_{2})\right) \right\rangle = 0 \end{array} \right.$$
(AIII-4)

où N($\hbar\omega_m$) est la fonction de distribution énergétique du diffuseur. Elle est donnée par la relation Bose-Einstein donnée:

$$N(\hbar\omega) = \frac{1}{e^{\hbar\omega/K_{B}T} - 1}$$
(AIII-5)

En utilisant les relations (AIII-4) l'équation (AIII-3) s'écrit encore :

$$D^{>}(x_{1}, x_{2}) = U^{2} \delta^{3}(r_{1} - r_{2}) \sum_{m} \delta^{3}(r_{1} - r_{m}) \left[N(\hbar\omega_{m}) e^{i\omega_{m}(t_{1} - t_{2})} + (N(\hbar\omega_{m}) + 1) e^{-i\omega_{m}(t_{1} - t_{2})} \right]$$
(AIII-6)

En remplaçant les sommes sur *m* par une intégrale (relation III-2-5) et en prenant la transformée de Fourier par rapport à $(t_1 - t_2) \rightarrow \varepsilon$ nous avons :

$$D^{>}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}; \varepsilon) = 2\pi\hbar U^{2} J_{0}(\mathbf{r}_{1}; |\varepsilon|) \delta^{3}(\mathbf{r}_{1}-\mathbf{r}_{2}) \begin{cases} N(|\varepsilon|) & , \varepsilon < 0 \\ N(\varepsilon) + 1 & , \varepsilon > 0 \end{cases}$$
(AIII-7)

de façon similaire on peut montrer que :

$$D^{<}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}; \varepsilon) = 2\pi\hbar U^{2} J_{0}(\mathbf{r}_{1}; |\varepsilon|) \delta^{3}(\mathbf{r}_{1}-\mathbf{r}_{2}) \begin{cases} N(|\varepsilon|) & , \varepsilon > 0\\ N(\varepsilon) + 1 & , \varepsilon < 0 \end{cases}$$
(AIII-8)

Pour calculer les fonctions "self-energy" on prend la transformée de Fourier des équations (AIII-1) :

$$\Sigma^{>}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}; \mathbf{E}) = \int \frac{d\mathbf{E}'}{2\pi\hbar} \mathbf{G}^{>}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}; \mathbf{E}') \mathbf{D}^{>}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}; \mathbf{E}-\mathbf{E}')$$
(AIII-9)

$$\Sigma^{<}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}; \mathbf{E}) = \int \frac{d\mathbf{E}'}{2\pi\hbar} \mathbf{G}^{<}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}; \mathbf{E}') \mathbf{D}^{<}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}; \mathbf{E}-\mathbf{E}')$$
(AIII-10)

Nous rappellons que la transforméé de Fourier d'un produit est égale au produit de convolution des transformées mais étant en régime stationnaire les grandeurs dans la relation (AIII-1) ne dependent que de la différence $t=t_1 - t_2$. Donc la transformée de Fourier en t de cette relation s'obtient directement comme ci-dessus car chaque terme du produit de convolution est une transformée de Fourier coefficientée par $(1/2\pi\hbar)^{1/2}$.

L'utilisation des équations (AIII-8) et (AIII-9) nous permet d'écrire :

$$\Sigma^{>}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}; \mathbf{E}) = \frac{-i\hbar}{\tau_{n}(\mathbf{r}_{1}; \mathbf{E})} \,\delta^{3}(\mathbf{r}_{1}-\mathbf{r}_{2}) \tag{AIII-11}$$

$$\Sigma^{<}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}; \mathbf{E}) = \frac{i\hbar}{\tau_{p}(\mathbf{r}_{1}; \mathbf{E})} \,\delta^{3}(\mathbf{r}_{1} - \mathbf{r}_{2}) \tag{AIII-12}$$

où :

$$\frac{1}{\tau_n(r;E)} = \frac{2\pi}{\hbar} \int dE' F(r; E'-E) p(r;E') \qquad (AIII-13)$$

$$\frac{1}{\tau_{p}(r;E)} = \frac{2\pi}{\hbar} \int dE' F(r; E-E') n(r;E') \qquad (AIII-14)$$

avec F(r; ɛ) décrivant le spectre d'oscillateurs engendrant des diffusions à perte de phase :

$$F(r;\varepsilon) = U^{2} J_{0}(r; |\varepsilon|) \begin{cases} N(\varepsilon) &, \varepsilon > 0\\ N(|\varepsilon|) + 1 &, \varepsilon < 0 \end{cases}$$
(AIII-15)

où $J_0(r;\epsilon)$ est la densité d'oscillateurs par unité de volume et par unité d'énergie.

n(r;E) et p(r;E) sont successivement les densité d'électrons et de trous dans la bande de conduction et τ_n et τ_p les durées de vie respectives.

En utilisant les relations (I-4-46) et (I-4-47) on peut calculer les fonctions "self-energy" retardée et avancée. La transformée de Fourier respective de ces équations par rapport à (t_1-t_2) donne :

$$\Sigma^{R}(r_{1}, r_{2}; E) = i \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE'}{2\pi} \frac{\Sigma^{>}(r_{1}, r_{2}; E) - \Sigma^{<}(r_{1}, r_{2}; E)}{E - E' + i\epsilon}$$
(AIII-16)

$$\Sigma^{A}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}; \mathbf{E}) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\mathbf{E}'}{2\pi} \frac{\Sigma^{<}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}; \mathbf{E}) - \Sigma^{>}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}; \mathbf{E})}{\mathbf{E} - \mathbf{E}' - i\varepsilon}$$
(AIII-17)

La substitution de $\Sigma^{<}$ par l'équation (AIII-11) et $\Sigma^{>}$ (AIII-12) nous donne finalement :

$$\Sigma^{R}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}; \mathbf{E}) = \frac{\hbar}{2\pi} \,\delta^{3}(\mathbf{r}_{1}-\mathbf{r}_{2}) \,\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\mathbf{E}'}{\mathbf{E}-\mathbf{E}'+i\varepsilon} \,\frac{1}{\tau_{\varphi}(\mathbf{r}_{1};\mathbf{E})}$$
(AIII-18)

soit :

$$Im\{\Sigma^{R}(r_{1}, r_{2}; E)\} = \frac{-\hbar}{2\tau_{\varphi}(r_{1}; E)} \delta^{3}(r_{1} - r_{2})$$
(AIII-19)

$$\operatorname{Re}\left\{\Sigma^{R}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}; E)\right\} = \sigma^{R}(\mathbf{r}_{1}; E) \,\delta^{3}(\mathbf{r}_{1} - \mathbf{r}_{2}) \tag{AIII-20}$$

$$\sigma^{R}(r;E) = \frac{\hbar}{2\pi} P \int \frac{dE'}{(E-E')\tau_{\varphi}(r;E')}$$
(AIII-21)

où P représente la partie principale de l'intégrale et :

$$\frac{1}{\tau_{\varphi}(\mathbf{r};\mathbf{E})} = \frac{1}{\tau_{\mathbf{n}}(\mathbf{r};\mathbf{E})} + \frac{1}{\tau_{\mathbf{p}}(\mathbf{r};\mathbf{E})}$$
(AIII-22)

Physiquement la quantité $\tau_{0}(r;E)$ correspond au temps de perte de cohérence de phase.

III-B- Transformée de Fourier

- Nous allons montrer ici l'établissement de la relation (III-2-19) à partir de la transformée de Fourier de la relation (III-2-18) :

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - H_0(r_1)\right] G^R(x_1, x_2) - \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x_3 \left[\Sigma^R(x_1, x_3)G^R(x_3, x_2)\right] = \delta^4(x_1 - x_2)$$
(AIII-23)

En régime stationnaire les grandeurs ne dependent que des différences comme τ =t-t'. Si l'on considère les termes temporels sous l'intégrale alors la transformée de Fourier du produit par rapport à (t₁-t₂) nous donne :

$$TF\left[\int_{-\infty}^{+\infty} dt_{3} \Sigma^{R}(t_{1}-t_{3})G^{R}(t_{3}-t_{2})\right] = \int d(t_{1}-t_{2}) e^{-\frac{i}{\hbar}E(t_{1}-t_{2})} \int dt_{3} \Sigma^{R} \left[(t_{1}-t_{2}) - (t_{3}-t_{2})\right]G^{R}(t_{3}-t_{2})$$
(AIII-24)

or la quantité sous la deuxième intégrale représente un produit de convolution : $(\Sigma^R \otimes G^R)(t_1-t_2)$ et puisque t_1 et t_2 y sont fixés alors $dt_3 = d(t_3-t_2)$. cette transformée de Fourier correspond donc au produit direct des transformées de Fourier :

$$TF\left[\int dt_{3} \Sigma^{R}(t_{1}-t_{3})G^{R}(t_{3}-t_{2})\right] = \Sigma^{R}(r_{1},r_{3}; E) G^{R}(r_{3},r_{2}; E) \quad (AIII-25)$$

et :

$$TF\left[\int d^{3}X_{3} \dots \right] = TF\left[\int d^{3}r_{3} dt_{3} \dots \right] = \int d^{3}r_{3} TF\left[\int dt_{3} \dots \right]$$

=
$$\int d^{3}r_{3} \Sigma^{R}(r_{1}, r_{3}; E) G^{R}(r_{3}, r_{2}; E)$$
(AIII-26)

d'où le résultat de la transformée donné par la relation (III-2-19) :

$$\begin{bmatrix} E - H_0(r_1) \end{bmatrix} G^R(r_1, r_2; E) - \int_{-\infty}^{+\infty} d^3r_3 \begin{bmatrix} \Sigma^R(r_1, r_3; E) G^R(r_3, r_2; E) \end{bmatrix} = \delta^3(r_1 - r_2)$$
(AIII-27)

III-C- <u>L'équation intégrale pour G</u><

- Pour obtenir l'équation (III-2-21) nous procèdons de la manière suivante : L'équation (III-2-19) ci-dessus peut encore s'écrire sous la forme :

$$\int d^{3}r_{3} \left[E - H_{0}(r_{1}) \right] G^{R}(r_{3}, r_{2}; E) \delta^{3}(r_{1} - r_{3}) - \int d^{3}r_{3} \left[\Sigma^{R}(r_{1}, r_{3}; E) G^{R}(r_{3}, r_{2}; E) \right]$$

= $\int d^{3}r_{3} \left\{ \left[E - H_{0}(r_{1}) \right] \delta^{3}(r_{1} - r_{3}) - \Sigma^{R}(r_{1}, r_{3}; E) \right\} G^{R}(r_{3}, r_{2}; E) = \delta^{3}(r_{1} - r_{2})$

(AIII-28)

posons :

$$\alpha(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{3};\mathbf{E}) = \left\{ \left[\mathbf{E} - \mathbf{H}_{0}(\mathbf{r}_{1}) \right] \delta^{3}(\mathbf{r}_{1} - \mathbf{r}_{3}) - \Sigma^{\mathbf{R}}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{3};\mathbf{E}) \right\}$$
(AIII-29)

alors

$$\int d^{3}r_{3} \alpha(r_{1}, r_{3}; E) G^{R}(r_{3}, r_{2}; E) = \delta^{3}(r_{1} - r_{2})$$
(AIII-30)

Définissons α^{-1} telle que :

$$\int d^{3}r' \ \alpha^{-1}(r_{1}, r'; E) \ \alpha(r', r_{2}; E) = \delta^{3}(r_{1} - r_{2})$$
(AIII-31)

Si l'on fait agir la quantité : $\int d^3r_1 \alpha^{-1}(r_4, r_1; E)$ de part et d'autre de l'équation (AIII-30) nous avons :

$$\int d^{3}r_{1} \ \alpha^{-1}(r_{4}, r_{1}; E) \int d^{3}r_{3} \ \alpha(r_{1}, r_{3}; E) \ G^{R}(r_{3}, r_{2}; E) = \int d^{3}r_{1} \ \alpha^{-1}(r_{4}, r_{1}; E) \ \delta^{3}(r_{1} - r_{2})$$
(AIII-32)

Compte tenu de la définition précèdente (AIII-30) nous donne :

$$\int d^{3}r_{3} \, \delta^{3}(r_{4} - r_{3}) \, G^{R}(r_{3}, r_{2}; E) = \int d^{3}r_{1} \, \alpha^{-1}(r_{4}, r_{1}; E) \, \delta^{3}(r_{1} - r_{2})$$
(AIII-33)

ce qui conduit à écrire :

$$G^{R}(r_{4}, r_{2}; E) = \int d^{3}r_{1} \alpha^{-1}(r_{4}, r_{1}; E) \delta^{3}(r_{1} - r_{2})$$
(AIII-34)

par ailleurs nous avons (relation III-2-16) :

$$\begin{bmatrix} E - H_0(r_1) \end{bmatrix} G^{<}(r_1, r_2; E) - \int d^3 r_3 \Sigma^{R}(r_1, r_3; E) G^{<}(r_3, r_2; E) = = \int d^3 r_3 \Sigma^{<}(r_1, r_3; E) G^{R*}(r_2, r_3; E)$$
(AIII-35)

qui peut se mettre sous forme suivante :

$$\int d^{3}r_{3} \alpha(r_{1}, r_{3}; E) G^{<}(r_{3}, r_{2}; E) = \int d^{3}r_{3} \Sigma^{<}(r_{1}, r_{3}; E) G^{A}(r_{3}, r_{2}; E)$$
(AIII-36)

De la même manière que pour l'équation (AIII-33) nous obtenons pour (AIII-37) :

$$\int d^{3}r_{1} \alpha^{-1}(r_{4}, r_{1}; E) \int d^{3}r_{3} \alpha(r_{1}, r_{3}; E) G^{<}(r_{3}, r_{2}; E) =$$

$$= \int d^{3}r_{1} \alpha^{-1}(r_{4}, r_{1}; E) \int d^{3}r_{3} \Sigma^{<}(r_{1}, r_{3}; E) G^{A}(r_{3}, r_{2}; E)$$
(AIII-37)

Compte tenu de la défintion (AIII-32) nous obtenons :

$$G^{<}(r_{4}, r_{2}; E) = \int d^{3}r_{1} \alpha^{-1}(r_{4}, r_{1}; E) \int d^{3}r_{3} \int d^{3}r' \delta^{3}(r_{1} - r') \Sigma^{<}(r', r_{3}; E) G^{A}(r_{3}, r_{2}; E)$$

ou encore :

$$G^{<}(r_{4}, r_{2}; E) = \int d^{3}r_{3} \int d^{3}r' \int d^{3}r_{1} \alpha^{-1}(r_{4}, r_{1}; E) \delta^{3}(r_{1} - r') \Sigma^{<}(r', r_{3}; E) G^{R}(r_{3}, r_{2}; E)$$

(AIII-39)

(AIII-38)

soit par substitution à l'aide de (AIII-34) :

$$G^{<}(r_{4}, r_{2}; E) = \int d^{3}r_{3} \int d^{3}r' \ G^{R}(r_{4}, r'; E) \ \Sigma^{<}(r', r_{3}; E) \ G^{A}(r_{3}, r_{2}; E)$$
(AIII-40)

En faisant le changement de variable $r_4=r_1$ nous avons alors :

$$G^{<}(r_{1}, r_{2}; E) = \int d^{3}r_{3} \int d^{3}r' \ G^{R}(r_{1}, r'; E) \Sigma^{<}(r', r_{3}; E) \ G^{A}(r_{3}, r_{2}; E)$$
(AIII-41)

Finalement après la substitution de Σ^{R} à partir de (AIII-18) et en remplaçant G^A par son complexe conjugé G^{R*} on obtient l'équation (III-2-21) recherchée :

$$G^{<}(r_{1}, r_{2}; E) = i\hbar \int d^{3}r_{3} \frac{G^{R}(r_{1}, r_{3}; E) G^{R*}(r_{2}, r_{3}; E)}{\tau_{p}(r_{3}; E)}$$
(AIII-42)

III-D- Calculs de la densité de porteurs et de la densité d'états

- Nous savons que la *densité d'électrons* peut être calculée à partir des éléments diagonaux de la fonction de corrélation $G^{<}$:

$$n(r; E) = -\frac{i}{2\pi} G^{<}(r, r; E)$$
 (AIII-43)

si l'on substitue la fonction $G^{<}$ par son expression (AIII-42) on peut écrire :

$$n(r;E) = \frac{\hbar}{2\pi} \int d^{3}r' \frac{|G^{R}(r,r';E)|^{2}}{\tau_{p}(r';E)}$$
(AIII-44)

de la même manière on peut calculer la *densité de trous* (états vides de la bande de conduction) si l'on considère la composante $G^>$ de la matrice **G** (voir chapitre I) au lieu de $G^<$:

$$p(r;E) = \frac{i}{2\pi} G^{>}(r,r;E)$$
 (AIII-45)

d'où :

$$p(r;E) = \frac{\hbar}{2\pi} \int d^{3}r' \frac{|G^{R}(r,r';E)|^{2}}{\tau_{n}(r';E)}$$
(AIII-46)

Or la *densité d'états* dans la bande de conduction est égale à la somme des densités de trous et d'électrons dans cette bande :

$$N_0(r;E) = n(r;E) + p(r;E)$$
(AIII-47)

d'où en tenant compte de la relation (AIII-22) par substitution on obtient :

$$N_{0}(r;E) = \frac{\hbar}{2\pi} \int d^{3}r' \frac{\left|G^{R}(r,r';E)\right|^{2}}{\tau_{0}(r';E)}$$
(AIII-48)

Si l'on prend la transformée de Fourier par rapport à (t_1-t_2) de la relation suivante :

$$G^{R}(t_{1},t_{2}) = -\theta (t_{1},t_{2}) \{ G^{<}(t_{1},t_{2}) - G^{>}(t_{1},t_{2}) \}$$
(AIII-49)

en utilisant les relations (AIII-43) et (AIII-46) on peut montrer que la densité d'états peut aussi être directement calculée à partir des éléments diagonaux de G^R :

$$N_0(r; E) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Jm} G^R(r, r; E)$$
 (AIII-50)

où pour prendre en compte le spin des élctrons il faudrait multiplier par un facteur 2.

III-E- Calcul de la densité de courant

a) Densité de courant

- Pour une charge " a " en $X_a = (r_a, t_a)$ de valeur e et de masse m^{*}, on définit au point X=(r, t) la densité de courant par : (Messiah, 1965; Abrikosov, 1964)

$$\hat{J}_{v}^{a}(X) = \frac{e}{2m^{*}} \left[\hat{p}_{v}^{a} \,\hat{\delta}^{4} \big(X^{a} - X \big) + \hat{\delta}^{4} \big(X^{a} - X \big) \,\hat{p}_{v}^{a} \right]$$

avec :

$$\hat{p}_{v}^{a} = (-i\hbar \nabla_{v}^{a})$$
 opérateur vectoriel
 $\hat{\delta}^{4}(X^{a} - X)$ opérateur densité de particules en 1 point
où $v = (1, 2, 3)$

Pour un ensemble de particules identiques : (Landau MQ (64.2)/p266)

$$\hat{J}_{\nu}(X) = \sum_{a} \hat{J}_{\nu}^{a}(X)$$
(AIII-52)

qui est une la somme d'opérateurs monoélectroniques.

Or en utilisant le fait que dans la représentation en 2nd quantification l'opérateur :

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_{a} \hat{\delta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{a})$$
(AIII-53)

est défini par :

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \ \hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r}') \ \hat{\delta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \ \hat{\psi}(\mathbf{r}')$$
(AIII-54)

on peut alors écrire l'expression ci-dessus dans le formalisme de 2nd quantification par :

$$\hat{J}_{\nu}(X) = -\frac{ie\hbar}{2m^{*}} \int d^{4}X' \,\hat{\psi}^{+}(X') \left[\nabla_{\nu}' \,\hat{\delta}^{4}(X'-X) + \hat{\delta}^{4}(X'-X) \,\nabla_{\nu}'\right] \hat{\psi}(X') \quad (AIII-55)$$

En intégrant par rapport à t'on obtient :

$$\hat{J}_{v}(r;t) = -\frac{ie\hbar}{2m^{*}} \int d^{3}r' \,\hat{\psi}^{+}(r';t) \left[\nabla_{v}' \,\hat{\delta}^{3}(r'-r) + \hat{\delta}^{3}(r'-r) \,\nabla_{v}'\right] \hat{\psi}(r';t) \quad (AIII-56)$$

L'intégration par parties nous permet d'écrire :

$$\int d^{3}r' \,\hat{\psi}^{+}(r';t) \,\nabla_{v}' \,\hat{\delta}^{3}(r'-r) \,\hat{\psi}(r';t) = \int d^{3}r' \,\hat{\psi}^{+}(r';t) \,\nabla_{v}' \left[\hat{\delta}^{3}(r'-r) \,\hat{\psi}(r';t)\right] \\ = \left[\hat{\psi}^{+}(r';t) \,\hat{\delta}^{3}(r'-r) \,\hat{\psi}(r';t)\right] - \int d^{3}r' \,\left(\nabla_{v}' \,\hat{\psi}^{+}(r';t)\right) \hat{\delta}^{3}(r'-r) \hat{\psi}(r';t) \\ \downarrow$$

Terme nul car pour chacune des deux bornes $\hat{\delta}^3(r'-r) = 0$

$$= - \left(\nabla_{v} \hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r}; t) \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}; t)$$
(AIII-57)

De plus :

$$\int d^{3}r' \,\hat{\psi}^{+}(r';t) \,\hat{\delta}^{3}(r-r') \left[\nabla'_{\nu} \,\hat{\psi}(r';t)\right] = \,\hat{\psi}^{+}(r;t) \left[\nabla_{\nu} \,\hat{\psi}(r;t)\right] \tag{AIII-58}$$

Ainsi :

$$\hat{J}_{v}(r;t) = \frac{ie\hbar}{2m^{*}} \left[(\nabla_{v} \hat{\psi}^{+}(r;t)) \hat{\psi}(r;t) - \hat{\psi}^{+}(r;t) (\nabla_{v} \hat{\psi}(r;t)) \right]$$
(AIII-59)

Sachant que pour t < t':

$$G^{<}(X,X') = \frac{i}{\hbar} \langle \psi^{+}(X') \psi(X) \rangle$$
 (AIII-60)

et puisque : $\langle \hat{J}_{\nu}(r;t) \rangle = J_{\nu}(r,t)$

$$J_{\nu}(r;t) = -\frac{e\hbar^{2}}{2m^{*}} \left(\nabla_{\nu} - \nabla_{\nu}' \right) G^{<}(r,t;r',t')_{\downarrow_{r=r'}}, _{t'=t+0}$$
(AIII-61)

Lorsque le système est dans un état stationnaire les grandeurs sont indépendantes du temps

$$T = \left(\frac{t+t'}{2}\right) \text{ et } G^{<}(r,t ; r',t') \text{ ne dépend que de } \tau = (t'-t^{+}) \text{ . Ainsi :}$$
$$G^{<}(r,t ; r',t') \downarrow_{t'} = t + 0 = G^{<}(r,r' ; \tau) \downarrow_{r} = r' ; \tau = 0^{+}$$
(AIII-62)

et dans ces conditions $J_{v}(r)$ est indépendant de t qui se confond avec T lorsque $\tau = 0$. D'où dans le cas d'un *régime stationnaire* :

$$J_{\nu}(\mathbf{r}) = -\frac{e\hbar^{2}}{2m^{*}} \left(\nabla_{\nu} - \nabla_{\nu}^{'} \right) G^{<}(\mathbf{r},\mathbf{r}^{'};\tau)_{\downarrow_{\mathbf{r}=\mathbf{r}^{'}}}, \tau=0$$
(AIII-63)
$$f(\mathbf{u}) = \int d\mathbf{x} f(\mathbf{x}) e^{-i\alpha u \mathbf{x}}$$
$$f(\mathbf{x}) = \frac{\alpha}{2\pi} \int d\mathbf{u} f(\mathbf{u}) e^{i\alpha u \mathbf{x}}$$
(AIII-64)

ce qui implique :

$$\int du f(u) = \int dx f(x) \left[\int du e^{-i\alpha ux} \right] = \frac{2\pi}{\alpha} \int dx f(x) \delta(x) = f(0) \frac{2\pi}{\alpha}$$
(AIII-65)

.

donc pour $G^{<}(r,r';E)$:

$$G^{<}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\mathbf{E}) = \int d\tau G^{<}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\tau) e^{-\frac{1}{\hbar}E\tau}$$
(AIII-66)
$$2\pi\hbar G^{<}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\tau)_{\downarrow\tau=0^{+}} = \int d\mathbf{E} G^{<}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\mathbf{E})$$

on peut écrire par substitution :

$$J_{\nu}(r) = -\frac{e\hbar}{4\pi m^*} \left(\nabla_{\nu} - \nabla'_{\nu} \right) \int dE G^{<}(r, r'; E)_{\downarrow r=r'}$$
(AIII-67)

ou encore en écrivant :

$$J_{\nu}(r) = \int dE J_{\nu}(r; E)$$
 (AIII-68)

On peut finalement écrire $J_v(r;E)$ ou plus souplement J(r;E) sous la forme :

$$J(r;E) = -\frac{e\hbar}{4\pi m^*} \lim_{r \to r'} (\nabla - \nabla')G^{<}(r,r';E)$$
(AIII-69)

Ce qui signifie que la densité de courant s'obtient à partir des éléments non diagonaux de $G^{<}(r,r';E)$.

Nous allons trouver une expression différente pour J(r;E) faisant intervenir $G^{<}$ en nous servant de la relation suivante (voir AIII-42):

$$G^{<}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\mathbf{E}) = \int d^{3}r_{1} \int d^{3}r_{2} \ G^{R}(\mathbf{r},\mathbf{r}_{1};\mathbf{E}) \ \Sigma^{<}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2};\mathbf{E}) \ G^{R^{*}}(\mathbf{r}_{2},\mathbf{r}';\mathbf{E})$$
(AIII-70)

soit après la substitution de $\Sigma^{<}$ par la relation (AIII-12) dans G $^{<}$ et son report dans l'expression de J(r;E) on peut écrire :

$$J(r;E) = -\frac{ie\hbar^{2}}{4\pi m^{*}} \lim_{r \to r'} \int \frac{d^{3}r_{1}}{\tau_{p}(r_{1};E)} x$$

x {[\nabla G^{\mathbf{R}}(r',r_{1};E)] G^{\mathbf{R}^{*}}(r',r_{1};E) - G^{\mathbf{R}}(r',r_{1};E)[\nabla ' G^{\mathbf{R}^{*}}(r',r_{1};E)]}

en prenant la limite r'=r ==> ∇ ' = ∇ on peut écrire :

$$J(r;E) = -\frac{ie\hbar^{2}}{4\pi m^{*}} \int \frac{d^{3}r_{1}}{\tau_{p}(r_{1};E)} x$$

$$x \left\{ \left[\nabla G^{R}(r,r_{1};E) \right] G^{R^{*}}(r,r_{1};E) - G^{R}(r,r_{1};E) \left[\nabla G^{R^{*}}(r,r_{1};E) \right] \right\}$$
(AIII-72)

en faisant un changement de variable $r_1 = r'$ on a alors :

$$J(r;E) = -\frac{ie\hbar^{2}}{4\pi m^{*}} \int \frac{d^{3}r'}{\tau_{p}(r';E)} x \\ x \left\{ \left[\nabla G^{R}(r,r';E) \right] G^{R^{*}}(r,r';E) - G^{R}(r,r';E) \left[\nabla G^{R^{*}}(r,r';E) \right] \right\}$$

C'est la densité de courant de probabilité .

b) Cacul de la divergence de la densité de courant

La dérivée par rapport à r de J(r;E) nous donne :

$$\nabla J(r; E) = -\frac{ie\hbar^2}{4\pi m^*} \int \frac{d^3r'}{\tau_p(r'; E)} x$$

$$x \left\{ \left[\nabla^2 G^R(r, r'; E) \right] G^{R^*}(r, r'; E) - G^R(r, r'; E) \left[\nabla^2 G^{R^*}(r, r'; E) \right] \right\}$$
(AIII-74)

ou encore :

(AIII-71)

(AIII-73)

$$\nabla J(\mathbf{r}; \mathbf{E}) = \frac{ie}{2\pi} \int \frac{d^{3}r'}{\tau_{p}(\mathbf{r}'; \mathbf{E})} x$$

$$x \left\{ \left[\left(-\frac{\hbar^{2}\nabla^{2}}{2m^{*}} \right) \mathbf{G}^{R}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mathbf{E}) \right] \mathbf{G}^{R^{*}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mathbf{E}) - \mathbf{G}^{R}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mathbf{E}) \left[\left(-\frac{\hbar^{2}\nabla^{2}}{2m^{*}} \right) \mathbf{G}^{R^{*}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mathbf{E}) \right] \right\}$$
(AIII-75)

Par ailleurs $G^{R}(r,r';E)$ et $G^{R*}(r,r';E)$ obéissent respectivement aux relations suivantes :

$$\begin{bmatrix} E - H_t + \frac{i\hbar}{2\tau_{\varphi}(r;E)} \end{bmatrix} G^{R}(r,r';E) = \delta^{3}(r-r')$$

$$\begin{bmatrix} E - H_t^* - \frac{i\hbar}{2\tau_{\varphi}(r;E)} \end{bmatrix} G^{R*}(r,r';E) = \delta^{3}(r-r')$$
(AIII-76)

avec :

$$H_t = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} + H_1(r)$$
 et $H_t = H_t^*$ (AIII-77)

avec : $H_1(r) = e V(r)$

Compte tenu de ces relations on peut écrire :

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*}\right) G^{\mathbb{R}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\mathbf{E}) = \left[\mathbf{E} - \mathbf{H}_1(\mathbf{r}) + \frac{i\hbar}{2\tau_{\varphi}(\mathbf{r};\mathbf{E})}\right] G^{\mathbb{R}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\mathbf{E}) - \delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \qquad (\text{AIII-78})$$

$$(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*}) G^{R^*}(r,r';E) = \left[E - H_1(r) - \frac{i\hbar}{2\tau_{\varphi}(r;E)} \right] G^{R^*}(r,r';E) - \delta^3(r-r') \quad (AIII-79)$$

En explicitant les termes du 2nd membre de $\nabla J(r;E)$ ci-dessus on peut écrire :

$$G^{R^{*}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';E) \left(-\frac{\hbar^{2}\nabla^{2}}{2m^{*}}\right)G^{R}(\mathbf{r},\mathbf{r}';E) = G^{R^{*}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';E) \left[E - H_{1}(\mathbf{r}) + \frac{i\hbar}{2\tau_{\varphi}(\mathbf{r};E)}\right]G^{R}(\mathbf{r},\mathbf{r}';E)$$
$$-\delta^{3}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')G^{R^{*}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';E)$$
$$G^{R}(\mathbf{r},\mathbf{r}';E) \left(-\frac{\hbar^{2}\nabla^{2}}{2m^{*}}\right)G^{R^{*}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';E) = G^{R}(\mathbf{r},\mathbf{r}';E) \left[E - H_{1}(\mathbf{r}) - \frac{i\hbar}{2\tau_{\varphi}(\mathbf{r};E)}\right]G^{R^{*}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';E)$$
$$-\delta^{3}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')G^{R}(\mathbf{r},\mathbf{r}';E)$$

Par différence on obtient :

$$G^{R^{*}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';E)(-\frac{\hbar^{2}\nabla^{2}}{2m^{*}})G^{R}(\mathbf{r},\mathbf{r}';E) - G^{R}(\mathbf{r},\mathbf{r}';E)(-\frac{\hbar^{2}\nabla^{2}}{2m^{*}})G^{R^{*}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';E) = = \left[\frac{i\hbar}{\tau_{\varphi}(\mathbf{r};E)}\right]G^{R^{*}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';E)G^{R}(\mathbf{r},\mathbf{r}';E) + \delta^{3}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\left[G^{R}(\mathbf{r},\mathbf{r}';E) - G^{R^{*}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';E)\right]$$
(AIII-80)

d'où compte tenu de :

$$G^{R}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\mathbf{E}) = |G^{R}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\mathbf{E})| \quad e^{-i\theta(\mathbf{r},\mathbf{r}';\mathbf{E})}$$
AIII-81)

$$G^{R*}(r,r';E) = |G^{R}(r,r';E)| e^{-i\theta(r,r';E)}$$
 (AIII-82)

on peut écrire :

$$\nabla J(r;E) = \frac{ie}{2\pi} \int \frac{d^3r'}{\tau_p(r';E)} \left[\left(\frac{i\hbar}{\tau_p(r;E)} \right) \left| G^R(r,r';E) \right|^2 + \delta^3(r-r') \left\{ G^R(r,r';E) - G^{R*}(r,r';E) \right\} \right]$$

mais puisque :

$$G^{\mathbf{R}}(\mathbf{r},\mathbf{r};\mathbf{E}) - G^{\mathbf{R}^*}(\mathbf{r},\mathbf{r};\mathbf{E}) = 2i \, \mathbf{Jm} \, G^{\mathbf{R}}(\mathbf{r},\mathbf{r};\mathbf{E}) \tag{AIII-84}$$

par ailleurs la densité d'état est donnée par :

$$N_0(r;E) = -(1/\pi) \, Jm \, G^R(r,r;E)$$
(AIII-85)

. .

En substituant on obtient :

$$\nabla J(r; E) = \frac{ie}{2\pi} \int \frac{d^3r'}{\tau_p(r'; E)} \left[\left(\frac{i\hbar}{\tau_p(r; E)} \right) \left| G^R(r, r'; E) \right|^2 - i2\pi N_0(r; E) \delta^3(r - r') \right]$$
(AIII-86)

soit :

$$\nabla J(r;E) = \frac{e\hbar}{2\pi} \int \frac{d^3r'}{\tau_p(r';E)} \left[\frac{2\pi}{\hbar} N_0(r;E) \delta^3(r-r') - \left(\frac{\left| G^R(r,r';E) \right|^2}{\tau_\phi(r;E)} \right) \right]$$

(AIII-87)

(AIII-83)

III-F) Le développement de Sommerfeld

- Il s'agit de calculer l'intégrale suivante :

$$I = - \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \ J(\varepsilon) \ \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}$$
(AIII-88)

où f est la fonction de Fermi-Dirac et $J(\varepsilon)$ est une fonction continue, dérivable à tous les ordres.





Le développement de Sommerfeld est une présentation du résultat sous forme d'une série des puissances de T, dans laquelle ε_F intervient comme un paramètre. La fonction $(\partial f / \partial \varepsilon)$ n'a de valeur importante que dans un étroit domaine d'énergie de largeur $\approx K_B T$ autour de $\varepsilon = \varepsilon_F$. Ceci suggère de remplacer dans l'intégrale, J(ε) par son développement en série de Taylor au voisinage de ε_F , à savoir :

$$J(\varepsilon) = J(\varepsilon_F) + (\varepsilon - \varepsilon_F) J'(\varepsilon_F) + [(\varepsilon - \varepsilon_F)/2!] J''(\varepsilon_F) + \dots$$
(AIII-90)

soit avec un changement de variable $u = [(\varepsilon - \varepsilon_F)/K_BT]$:

$$I = J(\varepsilon_{F}) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{u} du}{(1 + e^{u})^{2}} + (K_{B}T) J'(\varepsilon_{F}) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{ue^{u} du}{(1 + e^{u})^{2}} + (K_{B}T)^{2} \frac{J''(\varepsilon_{F})}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{u^{2}e^{u} du}{(1 + e^{u})^{2}} + \dots$$

(AIII-91)

La première intégrale vaut -1. La seconde est nulle car son facteur intégrant est fonction impaire de u. La troisième se calcule par la "méthode des résidus" et vaut $\pi^2/3$. On obtient donc :

$$I = J(\varepsilon_{\rm F}) + (\pi^2/6) (K_{\rm B}T)^2 J''(\varepsilon_{\rm F}) + ...$$
(AIII-92)

on constate alors qu'en se limitant au terme du premier ordre il est possible d'écrire :

$$I = - \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \ J(\varepsilon) \ \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \approx J(\varepsilon_{F})$$
(AIII-93)

et c'est ce que nous avons utilisé pour établir la relation (III-2-58).

III-G) <u>Détails des calculs numériques</u>

a) Fonction de Green GR quasi 1-D

- La simulation d'un composant sous conditions d'une *invariance* translationnelle dans le plan transverse permet de calculer les quantités physiques à une dimension (dénotées 1-D). On peut effectuer cette tâche en moyennant chacune des équations envisagées sur le plan transverse ou encore sur une section transverse du composant.

Nous allons montrer que pour un système physique 3-D les différentes quantités physiques qui nous intéressent peuvent être évaluées à partir des résultats obtenus par un modèle strict 1D pour lequel il suffit de calculer $G_{1D}^{R}(z,z;E)$. Ainsi ces quantités auront les mêmes dimensions que dans le modèle 3-D initial et nous permettront d'avoir une bonne estimation des résultats 3-D.

Nous allons alors ici accomplir ce travail pour les différentes équations qui nous intéressent en détaillant la marche à suivre.

En considérant un système quelconque décrit par l'Hamiltonien H, nous commençons d'abord par l'établissement d'une équation de base exprimant la fonction de Green retardée en fonction des valeurs propres E_k et des fonctions propres orthonormées $\Psi_k(r)$ de H₀.

On suppose que cet Hamiltonien peut être séparé en deux parties :

$$H(r;E) = H_0(r) - \frac{i\hbar}{\tau_{\phi}(r;E)}$$
(AIII-94)

on peut alors écrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$H_{0} \Psi_{k}(r) = E_{k} \Psi_{k}(r)$$
(AIII-95)

où E_k est l'énergie propre correspondant à l'état propre $|k\rangle$ de l'Hamiltonien H_0 .

Lorsque les fonctions propres $\Psi_k(r)$ forment un système orthonormé on a :

$$\int dr \ \Psi_k(r) \Psi_{k'}^*(r) = \delta_{kk'}$$
(AIII-96)

où $\delta_{kk'}$ est le symbole de kronecker.

Dans ce cas-là la fonction de Green peut s'écrire sous la forme suivante :

$$G^{R}(r,r';E) = \sum_{k} C_{k}(r') \Psi_{k}(r)$$
 (AIII-97)

où $C_k(r')$ est un coefficient qu'il faut déterminer de façon appropriée. Par ailleurs on a :

$$\left[E - H_0(r) + \frac{i\hbar}{2\tau_{\varphi}(r; E)}\right] G^R(r, r'; E) = \delta(r - r')$$
(AIII-98)

En substituant l'expression (AIII-97) de la fonction de Green dans de l'équation (AIII-98), compte tenu de la relation (AIII-95) on peut écrire :

$$\sum_{k} \left[E - E_{k} + \frac{i\hbar}{2\tau_{\varphi}(r;E)} \right] C_{k}(r') \Psi_{k}(r) = \delta(r-r')$$
(AIII-99)

En multipliant par $\Psi_k^*(r)$, puis intégrant par rapport à r à l'aide de la relation d'orthogonalité (AIII-96) on obtient :

$$C_{k}(r') = \frac{\Psi_{k}^{*}(r')}{E - E_{k} + \frac{i\hbar}{2\tau_{\varphi}(r;E)}}$$
(AIII-100)

en substituant cette relation dans (AIII-97) on a obtient finalement l'équation recherchée pour un régime stationnaire :

$$G^{R}(r,r'; E) = \sum_{k} \frac{\Psi_{k}(r) \Psi_{k}^{*}(r)}{E - E_{k} + \frac{i\hbar}{2\tau_{\varphi}(r;E)}}$$
(AIII-101)

On peut en déduire que quelle que soit la structure étudiée , pour calculer la fonction de Green G^{R} il suffit de connaître les fonctions propres $\Psi_{k}(r)$ de l'Hamiltonien et de sommer sur les états k.

Mais puisque le système est invariant par translation avec des conditions aux limites périodiques les *fonctions propres transverses* de l'Hamiltonien H sont de *type d'ondes planes* (appelées aussi fonctions d'ondes non perturbées). Par conséquent :

$$\Psi_{k_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} e^{i k_x x}$$

$$\Psi_{k_y}(y) = \frac{1}{\sqrt{L_y}} e^{i k_y y}$$
(AIII-102)

et comme on a supposé que l'Hamiltonien total du système était séparable donc la fonction d'ondes en " r " peut s'écrire sous forme de produits de fonctions d'ondes pour chaque coordonnée et l'énergie propre E_k sera la somme des énergies propres :

$$\Psi_{k}(r) = \Psi_{k_{x}}(x) \Psi_{k_{y}}(y) \Psi_{k_{y}}(z)$$
(AIII-103)

$$E_k = E_{k_x} + E_{k_y} + E_{k_z}$$
 (AIII-104)

ou encore :

$$E_{K} = \frac{\hbar^{2} k_{x}^{2}}{2m^{*}} + \frac{\hbar^{2} k_{y}^{2}}{2m^{*}} + E_{k}$$

l'invariance translationnelle dans le plan transverse nous permet de supposer que τ_{ϕ} est indépendant des coordonnées transverses. Pour alléger les écriture on écrira : $\tau_{\phi}(r; E) = \tau_{\phi}(z; E) = \tau$. Ainsi la relation (AIII-101) peut s'écrire sous la forme suivante :

$$G^{R}(x,y,z; x',y',z'; E) = \sum_{k_{x}k_{y}k_{z}} \frac{\left[\frac{e^{i(k_{x}x + k_{y}y)}}{\sqrt{L_{x}}\sqrt{Ly}}\right] \left[\frac{e^{-i(k_{x}x' + k_{y}y')}}{\sqrt{L_{x}}\sqrt{Ly}}\right] \Psi_{k_{z}}(z) \Psi_{k_{z}}^{*}(z)}{E - E_{k_{x}} - E_{k_{y}} - E_{k_{z}} + \frac{i\hbar}{2\tau}}$$

(AIII-105)

en posant : E' = E - E_{k_x} - E_{k_y} , on peut définir la *fonction de Green à une dimension* :

$$G_{1D}^{R}(z,z'; E') = \sum_{k_{z}} \frac{\Psi_{k_{z}}(z) \Psi_{k_{z}}^{*}(z)}{E' - E_{k_{z}} + \frac{i\hbar}{2\tau}}$$
(AIII-106)

ou encore puisque pour un système homogène dans les conditions de l'invariance translationnelle les variables ne dépendent que de la différence des coordonnées spatiales en posant : X = x - x' et Y = y - y' on peut écrire alors :

$$G^{R}(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, z, z'; E) = \frac{1}{L_{x} L_{y}} \sum_{k_{x}} \sum_{k_{y}} e^{i \left[k_{x} \mathbf{X} + k_{y} \mathbf{Y}\right]} G^{R}_{1D}(z, z'; E - E_{k_{x}} - E_{k_{y}})$$
(AIII-107)

avec :

$$G_{1D}^{R}(z, z'; E - E_{k_{x}} - E_{k_{y}}) = \sum_{k_{z}} \frac{\Psi_{k_{z}}(z) \Psi_{k_{z}}^{*}(z)}{E - E_{k_{x}} - E_{k_{y}} - E_{k_{z}} + \frac{i\hbar}{2\tau}}$$
(AIII-108)

Dans la limite où les dimensions transverses L_x et L_y tend vers l'infini on peut remplacer alors les sommations par des intégrales et écrire :

$$G^{R}(x-x',y-y',z,z'; E) = \frac{1}{L_{x}L_{y}}\int dk_{x} dk_{y} e^{i\left[k_{x}(x-x')+k_{y}(y-y')\right]} \frac{\Psi_{k_{z}}(z)\Psi_{k_{z}}^{*}(z)}{E-E_{k_{x}}-E_{k_{y}}-E_{k_{z}}+\frac{i\hbar}{2\tau}}$$

$$G^{R}(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{z}, \mathbf{z}'; \mathbf{E}) = \frac{1}{L_{x} L_{y}} \int d\mathbf{k}_{x} d\mathbf{k}_{y} e^{i \left[\mathbf{k}_{x} \mathbf{X} + \mathbf{k}_{y} \mathbf{Y} \right]} G^{R}_{1D}(\mathbf{z}, \mathbf{z}'; \mathbf{E} - \mathbf{E}_{\mathbf{k}_{x}} - \mathbf{E}_{\mathbf{k}_{y}})$$
(AIII-110)

avec G_{1D}^{R} définie toujours par la relation (AIII-108).

b) Expression du courant quasi 1-D

- L'expression de la densité de courant par unité de volume est donnée par :

$$I_{i}(r) = \frac{e}{h} \int d^{3}r' \int dE \ T(r,r'; E) \ [f(r; E) - f(r'; E)]$$
avec :
$$T(r,r'; E) = \frac{\hbar^{2} |G^{R}(r,r'; E)|^{2}}{\tau_{\phi}(r; E)\tau_{\phi}(r'; E)}$$
(AIII-111)

en moyennant sur la section transverse on peut écrire :

$$I_i(z) = \frac{1}{L_x L_y} \int dx \, dy \, I_i(r)$$
 (AIII-112)

Le système étant invariant par translation dans le plan transverse alors on peut supposer que temps $\tau_{\varphi}(r; E)$ et le facteur d'occupation f(r; E) sont indépendants des coordonnées transverses x et y et écrire :

$$\tau_{\varphi}(\mathbf{r};\mathbf{E}) = \tau_{\varphi}(\mathbf{z};\mathbf{E}) \tag{AIII-113}$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{r}; \mathbf{E}) = \mathbf{f}(\mathbf{z}; \mathbf{E}) \tag{AIII-114}$$

donc il s'en suit :

$$\begin{split} I_{i}(z) &= \frac{e}{h} \frac{1}{L_{x} L_{y}} \int dz' \int dx \, dy \int dx' \, dy' \int dE \ T(x, y, z; x, y', z'; E) \ \left[f(z; E) - f(z'; E) \right] \\ &= \frac{e}{h} \frac{1}{L_{x} L_{y}} \int dz' \int dE \ \left[f(z; E) - f(z'; E) \right] \int dx \, dy \int dx' \, dy' \ T(x, y, z; x, y', z'; E) \\ &= \frac{e}{h} \int dz' \int dE \left[f(z; E) - f(z'; E) \right] \frac{1}{L_{x} L_{y}} \int dx \, dy \int dx' \, dy' \ \frac{\hbar^{2} \left| G^{R}(x, y, z; x', y', z'; E) \right|^{2}}{\tau_{\phi}(z; E) \tau_{\phi}(z'; E)} \end{split}$$

ou encore :

$$I_{i}(z) = \frac{e}{h} \int dz' \int dE [f(z; E) - f(z'; E)] T(z; z'; E)$$
(AIII-116)

(AIII-115)

Il s'agit de la version 1-D de l'expression (AIII-111) avec :

$$T(z;z'; E) = \frac{1}{L_{x}L_{y}} \int dx \, dy \int dx' \, dy' \, \frac{\left|G^{R}(x,y,z;x',y',z'; E)\right|^{2}}{\tau_{\phi}(z;E)\tau_{\phi}(z';E)}$$
(AIII-117)

Afin de faciliter les écritures posons $\tau_{\phi}(r;E) = \tau$ dans la relation (AIII-101). Ainsi on a :

$$\left|G^{R}(r,r';E)\right|^{2} = (G^{R}.G^{R^{*}}) = \sum_{k}\sum_{k'} \frac{\Psi_{k}(r)\Psi_{k'}^{*}(r)\Psi_{k}^{*}(r')\Psi_{k'}(r')}{(E-E_{k}+i\hbar/2\tau)(E-E_{k'}-i\hbar/2\tau)}$$
(AIII-118)

Mais puisque pour les variable primées on a :

$$\int dx' \int dy' \Psi_{k_{x,y,z}}^{*}(x',y',z') \Psi_{k_{x,y,z}}(x',y',z') =$$

$$= \Psi_{k_{z}}^{*}(z')\Psi_{k_{z}'}(z') \int dx' \Psi_{k_{x}}^{*}(x') \Psi_{k_{x}'}(x') \int dy' \Psi_{k_{y}}^{*}(y') \Psi_{k_{y}'}(y')$$
(AIII-119)
$$= \Psi_{k_{z}}^{*}(z')\Psi_{k_{z}'}(z') \delta_{k_{x}k_{x}'} \delta_{k_{y}k_{y}'}$$

par conséquent si l'on intègre l'équation (AIII-118) sur x' et y', nous pouvons effectuer les sommations sur k'_x et k'_y . On obtient alors :

$$\sum_{k_{x},k_{y},k_{z}} \sum_{k_{z}'} \frac{\Psi_{k_{z}}(z)\Psi_{k_{z}}^{*}(z)\Psi_{k_{z}}(z')\Psi_{k_{z}}(z')\left|\Psi_{k_{x}}(x)\right|^{2}\left|\Psi_{k_{y}}(y)\right|^{2}}{(E - E_{k_{x}} - E_{k_{y}} - E_{k_{z}} + i\hbar/2\tau)(E - E_{k_{x}} - E_{k_{y}} - E_{k_{z}}' - i\hbar/2\tau)}$$
(AIII-120)

de la même manière puisque les fonctions d'ondes sont normalisées, l'intégration sur x et y nous donne :

$$\sum_{k_{x},k_{y},k_{z}} \sum_{k_{z}'} \frac{\Psi_{k_{z}}(z)\Psi_{k_{z}}^{*}(z)\Psi_{k_{z}}^{*}(z')\Psi_{k_{z}}(z')}{(E - E_{k_{x}} - E_{k_{y}} - E_{k_{z}} + i\hbar/2\tau)(E - E_{k_{x}} - E_{k_{y}} - E_{k_{z}'} - i\hbar/2\tau)}$$
(AIII-121)

En posant : E' = E - $E_{k_x} - E_{k_y}$, nous définissons :

$$\left|G_{1D}^{R}(z,z';E'\right|^{2} = \sum_{k_{z}} \sum_{k_{z}'} \frac{\Psi_{k_{z}}(z)\Psi_{k_{z}}^{*}(z)\Psi_{k_{z}}^{*}(z')\Psi_{k_{z}'}(z')}{(E'-E_{k_{z}}+i\hbar/2\tau)(E'-E_{k_{z}'}-i\hbar/2\tau)}$$
(AIII-122)

d'où le module au carré de la fonction de Green :

$$\left|G^{R}(r,r';E)\right|^{2} = \sum_{k_{x}} \sum_{k_{y}} \left|G^{R}_{1D}(z,z';E-E_{k_{x}}-E_{k_{y}})\right|^{2}$$
(AIII-123)

Ainsi en multipliant les deux membre par les coefficients : $(\frac{\hbar^2}{\tau_{\varphi}(z;E) \tau_{\varphi}(z';E)})$ on obtient

finalement:

$$T(z, z'; E) = \frac{1}{L_x L_y} \sum_{k_x} \sum_{k_y} T^{1D}(z, z'; E - E_{k_x} - E_{k_y})$$
(AIII-124)

avec :

$$T^{1D}(z,z';E') = \frac{\hbar^2 \left| G_{1D}^{R}(z,z';E') \right|^2}{\tau_{\varphi}(z;E') \tau_{\varphi}(z';E')}$$
(AIII-125)

Or lorsque les dimensions transverses augmentent il devient impraticable d'effectuer les sommation de l'équation (AIII-124). Pour éviter ce problème, on considère la limite où ces dimensions deviennent infinies. Dans cette limite, les sommations peuvent être converties en intégrales et l'on obtient :

$$T(z,z';E) = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \int_{-\infty}^{E} dE' T^{1D}(z,z';E')$$
(AIII-126)

d'où par substitution dans la relation (AIII-116) l'expression du courant terminal 1-D s'écrit :

$$I_{i} = \frac{2\pi m^{*}e}{h^{3}} \int_{\Omega_{i}} dz \int dz' \int dE \int_{-\infty}^{E} dE' \frac{\hbar^{2} |G_{1D}^{R}(z,z';E')|^{2}}{\tau_{\varphi}(z;E') \tau_{\varphi}(z';E')} [f(z;E) - f(z';E)]$$
(AIII-127)

c) Densité locale d'états quasi 1-D

- Dans le cas d'un modèle 3-D la densité locale d'états par unité de volume est donnée par la relation suivante :

$$N_0(r; E) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Jm} G^R(r, r; E)$$
 (AIII-128)

en utilisant la relation (AIII-101) pour G^R , puisque ici r = r' on peut écrire :

$$N_{0}(r;E) = \frac{1}{\pi} \sum_{k} |\Psi_{k}(r)|^{2} \frac{\hbar/2\tau_{\phi}(r;E)}{(E-E_{k})^{2} + \hbar^{2}/4\tau_{\phi}^{2}(r;E)}$$
(AIII-129)

La moyenne sur la section transverse (L_xL_y) de $N_0(r;E)$ nous donne :

$$N_{0}(z; E) = \frac{1}{L_{x} L_{y}} \int dx \int dy N_{0}(x, y, z; E)$$
 (AIII-130)

en supposant $\tau_{\phi}(r;E) = \tau_{\phi}(z;E)$, la substitution de N₀(r;E) par la relation (AIII-129) permet d'écrire :

$$N_{0}(z;E) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{L_{x} L_{y}} \sum_{k} \frac{\hbar/2\tau_{\varphi}(z;E)}{(E-E_{k})^{2} + \hbar^{2}/4\tau_{\varphi}^{2}(z;E)} \int dx \int dy |\Psi_{k}(r)|^{2}$$
(AIII-131)

ou encore :

$$N_{0}(z;E) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{L_{x} L_{y}} \sum_{k_{x}} \sum_{k_{y}} \sum_{k_{z}} \left| \Psi_{k_{z}}(z) \right|^{2} \frac{\hbar/2\tau_{\varphi}(z;E)}{(E - E_{k_{x}} - E_{k_{y}} - E_{k_{z}})^{2} + \hbar^{2}/4\tau_{\varphi}^{2}(z;E)} \int dx \left| \Psi_{k_{x}}(x) \right|^{2} \int dy \left| \Psi_{k_{y}}(y) \right|^{2}$$
(AIII-132)

en utilisant la condition de normalisation des fonctions d'onde (AIII-96) le calcul des intégrales est trivial. On peut alors définir la *densité locale d'états strict 1-D* par la relation suivante :

$$N_{0}^{1D}(z;E') = \frac{1}{\pi} \sum_{k_{z}} |\Psi_{k_{z}}(z)|^{2} \frac{\hbar/2\tau_{\varphi}(z;E)}{(E'-E_{k_{z}})^{2} + \hbar^{2}/4\tau_{\varphi}^{2}(z;E)}$$
(AIII-133)

 $o\dot{u}: E' = E - E_{k_x} - E_{k_y}$

Il s'agit de la version unidimensionnelle de l'équation (AIII-129). En utilisant cette définition l'équation (AIII-132) se réduit à l'équation suivante :

$$N_{0}(z; E) = \frac{1}{L_{x}L_{y}} \sum_{k_{x}} \sum_{k_{y}} N_{0}^{1D}(z; E - E_{k_{x}} - E_{k_{y}})$$
(AIII-134)

avec :

$$N_0^{1D}(z; E') = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Jm} G_{1D}^R(z, z; E')$$
(AIII-135)

dans la limite où les dimensions transverses L_x et L_y tendent vers l'infini les sommations peuvent être converties en intégrales et l'on obtient :

$$N_{0}(z;E) = \frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \int_{-\infty}^{E} dE' N_{0}^{1D}(z;E')$$
(AIII-136)

On remarque donc que la densité locale d'états pour un système physique 3D peut être évaluée à partir d'un *modèle 1D strict* pour lequel on calcule $G_{1D}^{R}(z,z;E)$. Dans ce cas cette densité a la même dimension que en 3-D c'est à dire (m⁻³).

d) Fonction de distribution quasi 1-D

- Le calcul "self-consistent" de f(r;E) se fait à partir de la relation suivante :

$$f(r;E) = \int d^{3}r' \frac{\hbar^{2} \left| G^{R}(r,r';E) \right|^{2}}{2\pi N_{0}(r;E) \tau_{\phi}(r';E)} f(r';E)$$
(AIII-137)

ou encore en remplaçant la densité d'états par son expression intégrale :

$$f(r;E) = \frac{\int dr' \frac{\left|G^{R}(r,r';E')\right|^{2}}{\tau_{\varphi}(r;E')\tau_{\varphi}(r';E')} f(r';E)}{\int dr' \frac{\left|G^{R}(r,r';E')\right|^{2}}{\tau_{\varphi}(r;E')\tau_{\varphi}(r';E')}} = \frac{\int dr' T(r,r';E) f(r';E)}{\int dr' T(r,r';E)}$$
(AIII-138)

Dans le cas d'une invariance translationnelle transverse on peut supposer f(r;E) = f(z;E). En utilisant les relations (AIII-117,125,126,), pour le noyau T(r,r';E) on obtient :

$$f(z;E) = \frac{\int dz' f(z';E) \int_{-\infty}^{E} dE' \frac{|G_{1D}^{R}(z,z';E')|^{2}}{\tau_{\varphi}(z;E') \tau_{\varphi}(z';E')}}{\int dz' \int_{-\infty}^{E} dE' \frac{|G_{1D}^{R}(z,z';E')|^{2}}{\tau_{\varphi}(z;E') \tau_{\varphi}(z';E')}}$$
(AIII-139)

e) <u>Potentiel chimique local quasi 1-D</u>

- Pour un régime de fonctionnement linéaire nous avons besoin de connaître le potentiel chimique local $\mu(r)$. Les relations (III-2-55) nous donnent :

$$\mu(\mathbf{r}) = \frac{\int d^{3}\mathbf{r}' \ \mathbf{T}(\mathbf{r},\mathbf{r}') \ \mu(\mathbf{r}')}{\int d^{3}\mathbf{r}' \ \mathbf{T}(\mathbf{r},\mathbf{r}')}$$
avec :
$$\mathbf{T}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \int d\mathbf{E} \ \frac{\hbar^{2} \left| \mathbf{G}^{R}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\mathbf{E}) \right|^{2}}{\tau_{\varphi}(\mathbf{r};\mathbf{E})\tau_{\varphi}(\mathbf{r}';\mathbf{E})} \left(-\frac{\partial \mathbf{f}_{0}}{\partial \mathbf{E}}\right)$$
(AIII-140)

posons :

$$T(r, r', E) = \frac{\hbar^2 |G^R(r, r'; E)|^2}{\tau_{\phi}(r; E)\tau_{\phi}(r'; E)}$$
(AIII-141)

donc :

$$T(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \int dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) T(\mathbf{r},\mathbf{r}';E)$$
(AIII-142)

En moyennant sur la section transverse on obtient la quantité unidimensionnelle suivante:

$$T(z, z') = \frac{1}{L_x L_y} \int dx \int dy \int dx' \int dy' T(x, y, z; x', y', z'; E)$$
 (AIII-143)

$$T(z, z'; E) = \frac{1}{L_x L_y} \sum_{k_x} \sum_{k_y} T^{1D}(z, z'; E - E_{k_x} - E_{k_y})$$
(AIII-144)

mais T(z,z';E) a déjà été calculée par les relations (AIII-125) et (AIII-126). D'où la version-1-D de la relation (AIII-142) :

$$T(z,z') = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) T(z,z';E)$$
 (AIII-145)

ou encore :

$$T(z,z') = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) \int_{-\infty}^{E} dE' \frac{\hbar^2 \left|G_{1D}^R(z,z';E')\right|^2}{\tau_{\varphi}(z;E')\tau_{\varphi}(z';E')}$$
(AIII-146)

enfin :

$$\mu(z) = \frac{\int dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) \int dz' \frac{\mu(z')}{\tau_{\phi}(z) \tau_{\phi}(z')} \int_{-\infty}^{E} dE' \left|G_{1D}^{R}(z, z'; E')\right|^{2}}{\int dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) \int dz' \frac{1}{\tau_{\phi}(z) \tau_{\phi}(z')} \int_{-\infty}^{E} dE' \left|G_{1D}^{R}(z, z'; E')\right|^{2}}$$

On constate qu'il y alors deux intégrales à effectuer pour obtenir T(z,z') et ceci ne peut qu'augmenter le temps de calcul numérique que nous cherchons au contraire à diminuer. Il existe pourtant une solution qui consiste à faire analytiquement une intégration par parties et à trouver ainsi une équation plus simple. En intégrant par parties on obtient :

$$T(z, z') = \left[-f_0(E) T(z, z'; E)\right]_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_0(E) \frac{\partial}{\partial E} T(z, z'; E)$$
(AIII-148)

Le premier terme est nul puisque $f_0(+\infty) \rightarrow 0$ et que pour $E \rightarrow -\infty$ l'intégrale sur E' est nulle. On a donc le résultat suivant :

$$T(z,z') = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_0(E) T^{1D}(z,z';E)$$
 (AIII-149)

Le potentiel chimique 1-D s'écrit alors finalement :

$$\mu(z) = \frac{\int dz' \ \mu(z') \ \int_{-\infty}^{+\infty} dE \ f_{0}(E) \ \frac{\left|G_{\rm ID}^{\rm R}(z,z';E)\right|^{2}}{\tau_{\varphi}(z;E) \ \tau_{\varphi}(z';E)}}{\int dz' \ \int_{-\infty}^{+\infty} dE \ f_{0}(E) \ \frac{\left|G_{\rm ID}^{\rm R}(z,z';E)\right|^{2}}{\tau_{\varphi}(z;E) \ \tau_{\varphi}(z';E)}} = \frac{\int dz' \ T(z,z')\mu(z')}{\int dz' \ T(z,z')}$$

(AIII-150)

(AIII-147)

Cas particulier où T = 0

- Dans ce cas la bande des énergies se réduit à l'énergie du niveau de Fermi $E=E_F$, et l'on a :

$$\tau_{\varphi}(r;\mu_0) \rightarrow \tau_{\varphi}(z)$$
 et $\mu(r) \rightarrow \mu(z)$

Faisant usage du développement de Sommerfeld pour le calcul de la première intégrale sur E dans la relation (AIII-147), on obtient :

$$\mu(z) = \frac{\int_{-\infty}^{\mu_0} dE' \int dz' \frac{\left| G_{1D}^{R}(z,z';E') \right|^2}{\tau_{\varphi}(z;E') \tau_{\varphi}(z';E')} \mu(z')} \qquad (AIII-151)$$
$$\int_{-\infty}^{\mu_0} dE' \int dz' \frac{\left| G_{1D}^{R}(z,z';E') \right|^2}{\tau_{\varphi}(z;E') \tau_{\varphi}(z';E')}$$

f) Densité locale de charges quasi 1-D

- La densité locale d'états 1-D étant calculée on peut en déduire la densité locale de charges 1-D. On suppose qu'à cause de l'invariance translationnelle dans le plan transverse la fonction d'occupation f(r;E) est indépendante des coordonnées transverses et on peut écrire :

$$\mathbf{n}(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{E} \, \mathbf{N}_0(z; \mathbf{E}) \mathbf{f}(z; \mathbf{E})$$
(AIII-152)

où la densité d'états est donnée par la relation (AIII-136), et la fonction de distribution sera calculée de façon "self-consistent" par la relation (AIII-138) ci-dessus. n(z) a les dimensions d'un modèle 3-D c'est à dire (m⁻³).

<u>Régime linéaire</u>

- Dans le cadre d'une théorie linéaire du transport la fonction de distribution f(z;E)peut être développée en série de Taylor autour de $\mu(z) = \mu_0$. Avec l'hypothèse de l'équilibre local cette fonction est de la forme Fermi-Dirac et on a :

$$f(z; E) = \frac{1}{e^{(E-e\mu(z))/k_BT} + 1}$$
 (AIII-153)

où $\mu(z)$, le potentiel chimique local 1-D doit être calculé de façon "self-consistent" par une relation que nous allons établir plus loin.

Cette forme particulière de f(z;E) nous permet de trouver une expression plus simple pour la densité de charges qui est très avantageuse pour le calcul numérique. En effet compte tenu de la relation (AIII-136) pour N₀ on constate qu'il y a deux intégrales à calculer sur le domaine d'énergie E et ceci est prejudiciable pour le temps de calcul n(z). Mais à l'aide d'une intégration par partie on peut alléger le calcul numérique de la manière suivante.

posons dans l'expression (AIII-152):

$$\lambda = N_0(z,E)$$
 donc $\rightarrow d\lambda = (dN_0/dE) dE$

$$dv = f(z;E) \qquad donc \quad v = Ln \left[1 + exp(-(\frac{E - \mu(z)}{K_BT}) \right] (-K_BT)$$

Par ailleurs d'après l'expression de $N_0(z;E)$ déjà obtenue :

$$\frac{\partial N_0(z;E)}{\partial E} = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} N_0^{1D}(z;E')$$

d'où :

$$n(z) = \left| N_{0}(z;E) \left[(-K_{B}T) Ln \left\{ 1 + e^{-(E-e\mu(z))/k_{B}T} \right\} \right] \right|_{-\infty}^{+\infty} + K_{B}T \int_{-\infty}^{+\infty} dE Ln \left\{ 1 + e^{-(E-e\mu(z))/k_{B}T} \right\} \left(\frac{m^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \right) N_{0}^{1D}(z;E)$$
(AIII-154)

le premier terme apporte une contribution nulle . En effet pour $+\infty \exp(-(E/K_BT)) \rightarrow 0$ et Ln(1) = 0 ; pour - $\infty N_0(z;-\infty) = 0$ d'après (AIII-136).

d'où la relation suivante :

$$n(z) = \frac{m^* K_B T}{2\pi\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dE Ln \{1 + e^{-(E-e\mu(z))/k_B T}\} N_0^{1D}(z; E)$$
(AIII-155)

où la densité d'états strict 1-D est calculée par la relation (AIII-135).

Il s'agit donc d'une densité locale de charges 1-D qui a les dimensions d'un modèle à 3-D c'est à dire (m⁻³).

g) <u>Passage de l'écriture continue à l'écriture discrète pour une</u> <u>fonction de Dirac</u>

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d^3\mathbf{k}$$
 (AIII-156)

Par ailleurs on a: (Kittel, 1983; Economou, 1983) :

$$\sum_{k} \rightarrow \frac{\Omega}{(2\pi)^{d}} \int d^{d}k$$
 (AIII-157)

où Ω (= L_x L_y L_z), est le volume et d est la dimension étudiée.

$$\sum_{k} e^{ik(r-r')} \rightarrow \frac{\Omega}{(2\pi)^{d}} \int d^{3}k \ e^{ik(r-r')} = \Omega \delta(r-r')$$
(AIII-158)

en se limitant à la première zone de Brillouin, en supposant $L_x = L_y = L_z = (N a)$, où N est le nombre de sites et " a " le pas entre sites, on peut écrire :

$$\sum_{k} e^{ik(r-r')} \rightarrow (Na)^{3} \delta(r-r')$$
(AIII-159)

par ailleurs :

$$\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \rightarrow \frac{1}{(\mathrm{N}\,\mathbf{a})^{\mathrm{d}}} \underbrace{\sum_{\mathrm{k}} e^{\mathrm{i}\mathbf{k} (\mathrm{m}-\mathrm{n})\mathbf{a}}}_{\mathrm{N}^{\mathrm{d}}\,\delta_{\mathrm{mn}}} = \frac{1}{(\mathbf{a})^{\mathrm{d}}} \,\delta_{\mathrm{mn}}$$
(AIII-160)

où δ_{mn} est le symbole de kronecker.

Finalement dans le cas 1-D qui nous intéresse cette expression se réduit à :

$$\delta(z-z') \rightarrow \frac{1}{Na} \sum_{\substack{k_z \\ N\delta_{mn}}} e^{ik_z(m-n)a} = \frac{1}{a} \delta_{mn}$$
(AIII-161)

h) Equation matricielle de Dyson

- Définissons la matrice de dimensions infinies suivante pour inclure les contacts considérés comme infinis :

$$\hat{G}^{R}(\mathbf{D},\mathbf{D})$$
 où $\mathbf{D}\in[-\infty,+\infty]$ (AIII-162)

et la matrice de dimensions finies suivante correspondant à la zone de simulation :

$$\hat{G}^{R}(M,M)$$
 où $M \in [0, N+1]$ (AIII-163)

On écrit donc de façon générale l'équation matricielle de Dyson sous la forme :

$$\left[I(D,D) - \hat{G}_{0}^{R}(D,D) \hat{U}(D,D)\right] \hat{G}^{R}(D,D) = \hat{G}_{0}^{R}(D,D)$$
(AIII-164)

posons :

$$\hat{G}_{0}^{R}(D,D) \hat{U}(D,D) = \hat{A}(D,D)$$
(AIII-165)

La matrice de couplage $\hat{U}(D,D)$ compte tenu de sa structure se réduit à son bloc matriciel central $\hat{U}(M,M)$, car en dehors du domaine MxM les éléments sont nuls. Donc on peut écrire:

$$\hat{G}_{0}^{R}(D,D) \hat{U}(M,M) = \hat{A}(D,M)$$
(AIII-166)

où la matrice $\hat{A}(D,M)$ est telle que ses éléments sont nuls sauf sur une bande colonne de dimension M, autour du centre. Par ailleurs puisque le calcul des propagateurs G^R est restreint à la zone de

simulation (voir fig III-3-5) alors la matrice $\hat{G}^{R}(D,D)$ se réduit à $\hat{G}^{R}(M,D)$ et l'équation de Dyson (AIII-164) peut donc s'écrire encore :

$$\hat{G}^{R}(D,D) - \hat{A}(D,M)\hat{G}^{R}(M,D) = \hat{G}^{R}_{0}(D,D)$$
 (AIII-167)

mais on sait calculer la matrice $\hat{G}_0^R(D,D)$ en la répartissant sur les trois régions isolées : contact1, système et contact2. Alors pour la zone de simulation il nous faut la matrice $\hat{G}_0^R(M,M)$ donc l'équation (AIII-164) peut encore s'écrire :

$$\hat{G}^{R}(M,M) - \hat{A}(M,M)\hat{G}^{R}(M,M) = \hat{G}^{R}_{0}(M,M)$$
 (AIII-168)

soit en définitif :

$$\left[I(M,M) - \hat{G}_{0}^{R}(M,M) \ \hat{U}(M,M)\right] \hat{G}^{R}(M,M) = \hat{G}_{0}^{R}(M,M)$$
(AIII-169)

ce qui représente la restriction de l'équation (AIII-164) à l'espace (MxM)

AIII-G- i - Extension de la fonction de Green GR

- Nous allons démontrer dans ce paragraphe les relations (III-3-48), (III-3-49) et (III-3-50).

- L'équation générale de la théorie des réponses d'interface s'écrit : [Akjouj & al, 1993]

$$\hat{G}^{R}(D,D) = \hat{G}^{R}_{0}(D,D) + \hat{G}^{R}_{0}(D,M) \hat{T}(M,M) \hat{G}^{R}_{0}(M,D)$$
 (AIII-170)

où les matrices (D,D) sont de tailles infinies. Ceci donne en particulier :

$$\hat{G}^{R}(M,M) = \hat{G}_{0}^{R}(M,M) + \hat{G}_{0}^{R}(M,M) \hat{T}(M,M) \hat{G}_{0}^{R}(M,M)$$
 (AIII-171)

En multipliant à gauche et à droite par $\hat{G}_0^{-1}(M, M)$ on obtient pour $\hat{T}(M, M)$:

$$\hat{T}(M,M) = \left[\hat{G}_0^R(M,M)\right]^{-1} \hat{G}^R(M,M) \left[\hat{G}_0^R(M,M)\right]^{-1} - \left[\hat{G}_0^R(M,M)\right]^{-1}$$
(AIII-172)

D'où en remplaçant $\hat{T}(M, M)$ par son expression, dans la relation (AIII-170) :

$$\hat{G}^{R}(D,D) = \hat{G}^{R}_{0}(D,D) + \hat{G}^{R}_{0}(D,M) \left[\hat{G}^{R}_{0}(M,M)\right]^{1} \hat{G}^{R}(M,M) \left[\hat{G}^{R}_{0}(M,M)\right]^{1} \hat{G}^{R}_{0}(M,D)$$

- $\hat{G}^{R}_{0}(D,M) \left[\hat{G}^{R}_{0}(M,M)\right]^{1} \hat{G}^{R}_{0}(M,D)$

(AIII-173)

Cette relation permet de calculer tous les éléments de $\hat{G}^{R}(D, D)$ à partir de $\hat{G}^{R}(M, M)$ et \hat{G}_{0}^{R} .



fig. AIII.3

a) <u>Détermination de</u> $\hat{G}^{R}(C_{1}, M)$:

Pour calculer $\hat{G}^{R}(C_{1}, M)$ on utilise la relation générale (AIII-170). On peut alors écrire :

$$\hat{G}^{R}(C_{1}, M) = \hat{G}_{0}^{R}(C_{1}, M) + \hat{G}_{0}^{R}(C_{1}, M) \hat{T}(M, M) \hat{G}_{0}^{R}(M, M)$$
 (AIII-174)

soit encore :

$$\hat{G}^{R}(C_{1},M) = \hat{G}^{R}_{0}(C_{1},M) + \hat{G}^{R}_{0}(C_{1},M) \left[\hat{G}^{R}_{0}(M,M)\right]^{-1} \hat{G}^{R}(M,M) \left[\hat{G}^{R}_{0}(M,M)\right]^{-1} \hat{G}^{R}_{0}(M,M)$$
$$- \hat{G}^{R}_{0}(C_{1},M) \left[\hat{G}^{R}_{0}(M,M)\right]^{-1} \hat{G}^{R}_{0}(M,M)$$

(AIII-175)

ce qui donne :
$$\hat{G}^{R}(C_{1},M) = \hat{G}^{R}_{0}(C_{1},M) \left[\hat{G}^{R}_{0}(M,M)\right]^{-1} \hat{G}^{R}(M,M)$$
(AIII-176)

Or ces matrices sont de la forme suivante :



fig. AIII.4



fig. AIII.5



fig. AIII.6

et compte tenu des relation (III-3-38) et (III-3-39) :



fig. AIII.7



fig.AIII.8.

Donc compte tenu des produits matriciels dans l'équation (AIII-176) on a tous les éléments de $\hat{G}^{R}(C_{1}, M)$. On peut alors en déduire :

$$G^{R}(z, z'; E) = t_{1}^{z'}(E) G^{R}(z, 0; E)$$
 (AIII-177)

où z' ∈ c1. Ceci correspond à l'équation (III-3-48). On peut procèder de la même manière pour obtenir la relation (III-3-49).

b) <u>Détermination de</u> $\hat{G}^{R}(C_1, C_2)$

- Pour calculer $\hat{G}^{R}(C_1, C_2)$ on utilise aussi la relation générale (AIII-171). On peut alors écrire :

$$\hat{G}^{R}(C_{1},C_{2}) = \hat{G}^{R}_{0}(C_{1},C_{2}) + \hat{G}^{R}_{0}(C_{1},M) \hat{T}(M,M) \hat{G}^{R}_{0}(M,C_{2})$$
(AIII-178)
encore :

$$\hat{G}^{R}(C_{1},C_{2}) = \hat{G}^{R}_{0}(C_{1},C_{2}) + \hat{G}^{R}_{0}(C_{1},M) \left[\hat{G}^{R}_{0}(M,M)\right]^{-1} \hat{G}^{R}(M,M) \left[\hat{G}^{R}_{0}(M,M)\right]^{-1} \hat{G}^{R}_{0}(M,C_{2})$$

$$- \hat{G}^{R}_{0}(C_{1},M) \left[\hat{G}^{R}_{0}(M,M)\right]^{-1} \hat{G}^{R}_{0}(M,C_{2})$$
(AIII-179)

Or :

$$\hat{G}_{0}^{R}(C_{1},C_{2}) = 0$$
 et $\hat{G}_{0}^{R}(M,C_{2}) \neq 0$ (AIII-180)

Donc l'expression (AIII-179) après les multiplications matricielles se réduit à :

$$\hat{G}^{R}(C_{1},C_{2}) = \hat{G}^{R}_{0}(C_{1},M) \left[\hat{G}^{R}_{0}(M,M)\right]^{-1} \hat{G}^{R}(M,M) \left[\hat{G}^{R}_{0}(M,M)\right]^{-1} \hat{G}^{R}_{0}(M,C_{2})$$
(AIII-181)

posons :

$$B(C_{1},M) = \hat{G}_{0}^{R}(C_{1},M) \left[\hat{G}_{0}^{R}(M,M)\right]^{-1}$$

$$C(M,C_{2}) = \left[\hat{G}_{0}^{R}(M,M)\right]^{-1} \hat{G}_{0}^{R}(M,C_{2})$$
(AIII-182)

l'équation (AIII-181) s'ecrit alors :

$$\hat{G}^{R}(C_{1},C_{2}) = B(C_{1},M) \hat{G}^{R}(M,M) C(M,C_{2})$$
 (AIII-183)

Compte tenu des relations (III-3-38) et (III-3-39) la matrice $\hat{G}_{0}^{R}(M, C_{2})$ est de la forme :



fig. AIII.9

d'où en utilisant les figures AIII.5 et AIII.7 on obtient pour les matrices $B(C_1, M)$ et $C(M, C_2)$ les formes suivantes :





fig. AIII.11

d'où le produit matriciel final donnat la matrice $\hat{G}^{R}(C_{1}, C_{2})$:

| 0 | 0 | $\begin{array}{l} (t_{1}^{3}g_{0,N+1}t_{2}^{3}) & (t_{1}^{3}g_{0,N+1}t_{2}^{3}) \\ (t_{1}^{2}g_{0,N+1}t_{2}^{2}) & (t_{1}^{2}g_{0,N+1}t_{2}^{2}) \\ (t_{1}g_{0,N+1}t_{2}) & (t_{1}g_{0,N+1}t_{2}) \end{array}$ | | |
|---|---|--|------|------|
| 0 | 0 | 0 | 0 | |
| 0 | 0 | 0 | 0 | |



On peut alors à partir de ce calcul écrire :

$$G^{R}(z,z';E) = t_{1}^{z'}(E) G^{R}(0,N+1;E) t_{2}^{z'}(E)$$
(AIII-184)

Où $z \in C1$ et $z' \in C2$. Ceci correspond à l'équation (III-3-50).

Références Bibliographiques

<u>Réferences Bibilographiques</u>

- Abrikosov, A. A., Gorkov. L. P., Dzyaloshinski. I. E., 1963, Method of Quantum Field Theory In Statistical Physics, (Prectice-Hall, Inc)
- Adachi. S., J. Appl. Phys. 58(3),(1985),R1-R29
- Akjouj. A., Sylla. B., Dobrzynski. L., Ann. Phys. Fr. 18 (1983), p363
- Altshuler, B. L., Aronov. A. G., 1978a, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. 27, 700, [JETP Lett. 27, 662(1978)].
- Altshuler, B. L., Aronov. A. G., 1978b, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 75, 1610, [Sov. Phys. - JETP 48, 812(1978)].
- Altshuler, B. L., Aronov. A. G., 1979a, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. 30, 514, [JETP Lett. 30, 482(1979)].
- Altshuler, B. L., Aronov. A. G., 1979b, Solid State Commun. 30, 115.
- Anda. E.V., Flores. F., J. Phys. Condens. Mat. 3, (1991), p9087
- Aronov, A. G., Gal'perin. Yu.M., Gurevich. V. L., Kozub. V. I., 1981, Adv. Phys. 30, 359
- Aronov, A. G., Gurevich. V. L., 1974, Fiz. Tverd. Tela (Leningrad) 16, 2656, [Sov. Phys. - Solid State 16, 1722 (1974)]
- Artemenko, S. N., Volkov. A. F., 1981a, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 80, 2018, [Sov. Phys. - JETP 53, 1050 (1981)].
- Artemenko, S. N., Volkov. A. F., 1981b, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 81, 1872, [Sov. Phys. JETP 54, 992 (1981)].
- Balescu. R., Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mecanics, Wisley, New york (1975)
- Bar-Joseph. I., & al; Phys Rev B44, (1991), p8361
- Barker, J. R., J. Phys. C 6, 2663 (1973)
- Barker, J. R., Ferry. D. K., Solid State Electron. 23, 531 (1980)
- Barker, J. R., in *The Physics of Non-Linear Transport in Semiconductors*, NATO
 Advanced Study Institute Serie B: Physics edited by D. K. Ferry, J. R.. Barker,
 & C. Jacoboni (Plenum, New York, 1980), p. 126 (ou 589)

Bending. S.J., Beasley. M.R., Phys. Rev. Lett. 55, (1985), p324

- Bertoncini, R., Kriman. A. M., Ferry. D. K., (1990), Phys. Rev. B 41, 1390.
- Blandin, A., Nourtier. A., Hone. D. W., 1976, J. Phys. (Paris) 37, 369
- Bohm. D., Quantum Theory, Prentice Hall Engelwood Cliffs NJ (1951)
- Broekaert. T., & al, Appl. Phys. Lett 53, 1988, p314
- Bruno. J.D., Bahder. T.B., Phys. Rev. B39, (1989), p3659
- Capasso, F., Pearsall. T. P., Thornber. K. K., IEEE Eletron. Device Lett. EDL-2, 295 (1981)
- Caroli, C., Combescot. R., Nozières. P., Saint-James. D., 1971a, J. Phys. C 4, p916.
- Caroli, C., Combescot. R., Nozières. P., Saint-James. D., 1971b, J. Phys. C 4, p2598
- Caroli, C., Combescot. R., Nozières. P., Saint-James. D., 1972, J. Phys. C 5, p21
- Chang. L.L., Esaki. L., Tsu. R., appl. Phys. Lett., 12, 1974, p593
- Chevir. F., Thèse de Doctorat de l'Université, Paris XI Orsay, 1992
- Chou, Kuang-chao, Zhao-bin Su, Bai-lin Hao, Lu Yu, 1985, Phys. Rep. 118, 1.
- Collins. R.T., & al; Appl. Phys. Lett. 44, 532 (1984)
- Craig. R. A., I. Math. Phys. 9, (1968), p605
- Combescot; R., J. Phys. C 4, (1971) 2611
- Danielewicz, P., 1984, Ann. Phys. (N. Y.) 152, 239, 305.
- Datta. S., J. Phys. Cond. Matter 2. (1990),p8023
- Davydov, A., Quantum Mecanics

Economou. E.N., Green's Functions in Quantum Physics (Springer-Verlag, Berlin, 1983) Enders, P., Phys. Stat. Sol. (b) 139, K113, (1987)

- Ferry. D.K., Kluksdahl. N.C., Kriman. A.M., Phys. Rev. B39,(1989 1),p7720
- Fetter. A., Walecka. J.D., Quantum Theory of Many Particle Systèmes, (McGraw Hill Co, London, 1978)
- Fischetti, M. V., DiMaria. D. J., Phys. Rev. Lett. 42, 2475 (1979).
- Fleurov, V. N., Kozlov. A. N., 1978, J. Phys. F8, 1899.
- Frensley, W. R., Phys. Rev. B36, (1987), p1570
- Frensley. W. R., Solid State Elect, 31, No 3/4, (1988), p739
- Frensley, W. R., Rew. Mod. Phys., Vol. 62, n° 3, (1990), p. 745
- Fujitta, S., 1966, Introduction to Non-equilibrium Quantum Statistical Mecanics, (W. B. Sunders Company, Philadephia & London)

Gell-Mann, Low. M., F., Phys. Rev. 84, 350(1951)

- Hajdu, J., Keiter.H., J. Phys. 201, 507 (1967)
- Haug, A., Theoretical Solid State Physics, 1978, vol. 1, p. 96, Pergamon Press, New York
- Huang. C.I. & al, Appl. Phys. Lett. 51, 1987, p121
- Iafrate, G. J., in : Gallium Arsenide Technology (D. K. Ferry, ed.), Ch.12, H. W. Sams, Indianapolis (1985).
- Iafrate, G. J., in : The Physics of Submicron Semiconductor Devices (H. L. Grubin, D. K. Ferry, & C. Jacoboni, eds.), Plenum, New York (1988).
- Jauho, A. P., in : Granular Nanoelectronics, (D. K. Ferry, ed.), Plenum Press, New York, 133, (1991)
- Jauho. A.P., Wilkins. J.W., Phys. Rev. B29,(1984),p1919
- Jensen, K.L.& Buot, F.A., J. Appl. Phys. 65 (12), (1989 a), p. 5248
- Jensen, K.L.& Buot, F.A., Appl. Phys. Lett. 55 (7), (1989 b), p. 669
- Jensen, K.L.& Buot, F.A., J. Appl. Phys. 67 (4), (1990 a), p. 2153
- Jensen, K.L.& Buot, F.A., J. Appl. Phys. 67 (12), (1990 b), p. 7602
- Jones, W., March. N., Theoretical Solid State Physics, 1973, Vol. 2, Ch.6, Wiley, New York
- Jonson. M., Grincwajg. A., Appl. Phys. Lett. 51, 1987, p 1729
- Kadanoff, L.P., Baym. G., Quantum Statistical Mechanics, (Benjamin, New York, 1962)
- Keldysh, L. V., 1964. Zh. Eksp. Teor. Fiz. 47, 1515 [Sov. Phys.- JETP 20, 1018 (1965)]

Kim. G., Arnold. G., Phys. Rev. B38,(1988),p3252

- Kittel, C., 1967, Theorie Quantique du Solide (Dunod, Paris)
- Kittel. C., Physique de l'état solide, ed. Dunod Université,(1983)
- Kluksdahl. N.C., & al.; IEEE. Elec. Dev. Lett. 9,(1988), p457
- Kluksdahl. N.C., & al.; Phys. Rev. B39, (1989),p7720
- Kriman. A.M., & al; Phys. Rev. B36,(1987), p5953
- Kriman. A.M., & al, Quantum Transport in Semiconductors, Ed. by D.K. Ferry & C. Jacoboni, (Plenum, press, New york, 1991)
- Landau, L. D., Lifshitz. M., 1967, Mecanique Quantique, (Mir, Moscou)
- Landau, L. D., Lifshitz. E. M., Quantum Mecanics, pergmon press (Londre 1958),
- Landau, L. D., Lifshitz. E. M, Physique Théorique, Tome 10, Ed. Globe, (1979)
- Landau. L.D., Lifshitz. E., Mecanique Quantique, Théorie Non Relativiste, Ed Mir Moscou (1974)

Langreth, D. C., Phys. Rev. B6., (1972),p3189

- Langreth, D. C., 1976, in : Linear and NonLinear Electron Transport in Solids, NATO Advanced Study Institute Series B, Vol.17, edited by J. T. Devreese and E. van Doren (Plenum, New York / London), p.3.
- Levinson, I.B., Zh. Eksp. Theor. Fiz. 57, (1969), p660[Sov. Phys. JETP.30, (1970),p362]
- Lifshitz, E. M., Pitaevskii. L. P., 1981, Physical Kinetics (Pergamon, New york).
- Lippens. D., Saint-Pol. L. & al, Rev. Phys. Appl. 24 (1989), p17
- Mahan, G. D., Many Particle Physics (Plenum, New York, 1981)
- Mahan, G. D., Phys. Rep. 110, 321 (1984) et ses réferences
- Mahan, G. D., Phys. Rep. 145, (1987), p251
- Mahan, G. D., in *Quantum Transport in Semiconductors*, (D.K. Ferry & C. Jacoboni, ed), (Plenum, New York, 1992)
- Mains, R.K., & Haddad, G.I., J. Appl. Phys. 64 (10), (1988), p. 504
- Martin, Ph. A., Rothen. F., 1990, *Problèmes à N-corps et Champs Quantiques* (Press Polytech. et Univ. Romandes, Collection de Physique, Lausanne Suisse)
- Mathieu. H., Physique des Semiconducteurs et des Composants Electroniques, (Ed. Masson, 1987)
- Mc. Lennan. M.J., Lee. Y., Datta. S., Phys. Rev. B43, (1991), p13846
- Meijer. P.H.E., Quantum Statistiacal Mechanics; Ed. Gordon & Breach Science Publishers, London
- Messiah. A., Mecanique Quantique, Tome2, Ed. Dunod Paris (1965)
- Mills, R., 1969, *Propagators for many-particle systems* (Gordon & Breach Science Pub. Inc. New-york)
- Monemar. B., & al; J. Appl. Phys. 47, (1976), p2604 1976
- Moyel, J.E., Proc. Cambridge. Phil. Soc. 45, 99 (1949)
- Naito. M., Beasley. M.R., Phys. Rev. B35, (1987),p2548
- Neofotistos. G., & al; Phys. Rev. B43, (1991), p2442
- Nicolson. A.M., Electron. Lett. 9, 1973, p317
- Nozière, P., 1963, Le Problème à N-Corps, (Dunod, Paris)
- Oran Brigham. E., The Fast Fourier Transform, prentice-Hall Inc (1974), Egalewood Cliffs, New Jersey
- Ohnishi, H. & al; Elctron. Comm. Japon, 71, 50, (1988)

Pritchard. R., & al, Semicond. Sci. Technol.; 4; 754 (1989)

- Rammer, J., Smith. H., 1986, Rev. Mod. Phys. 58, 323.
- Ravaioli. U. & al; Physica 134B (1985), p36
- Reggiani, L., Lugli. P., Jauho. A. P., J. Appl. Phys. 64, 3072 (1988)
- Reed. A.M., Lee. J.W., Tsai. H.L., Appl. Phys. Lett. 49 (3), (1986), p158
- Reich, R. K., Grondin. R. O., Ferry. D. K., Phys. Rev. B27, 3483 (1983)
- Ricco. B., Azbel. M. YA., Phys. Rev. B29, (1984), p1970
- Rickayzen, G., 1991, Green's Functions and Condensed Matter, (Academic Press, New-york)
- Sakaki. H., Chang. L.L., Appl. Phys. Lett. 31 (1985),p211
- Saint-Pol. L., Thèse de Doctorat de l'université Lille, (1990)
- Saint-Pol. L. & al, Electronic Letters, Vol. 26, n° 5 (1990), p. 342
- Schmid, A., 1981, in Nonequlibrium Superconductivity, Phonons, and Kapitza Boundaries, NATO Advanced Study Institute Series B, Vol. 65, edited by K. E. Gray (Plenum, New York/London), p. 423.
- Schibatomi. A., Yokoyama. N., Solide State Technology, Nov.87, p101
- Schrödinger, E., Ann. Phys. (Leipzig) 79, 489 (1926)
- Shah, J., Iafrate. G. J., in : *Hot Carriers in Semiconductors*, Special Issue: Solid State Electronics 31, No. 3-4 (1988)
- Shewchuk & al, Appl. Phys. Lett. 46, (1985), p508
- Shichijo, H., Hess. K., Phys. Rev. B 23, 4197 (1981)
- Sollner. T.C.L.G.& al, Appl. Phys. Lett. 49, 1983 p588
- Sollner. T.C.L.G., & al; Physics of Quantum ELec. Dev., Ed. F. Capasso, Spriger Verlag, (1991)
- Sugiyama. Y., & al, Appl. Phys. Lett, 52, 1988, p314
- Thomas. D., Thèse de Doctorat de l'université paris 6, (1989)
- Thornber, K. K., Phys. Rev. B 3, 1929 (1971)
- Thornber, K. K., Solid State Electron. 21, 259 (1978)
- Tsu. R., Esaki. L., Appl. Phys. Lett., 11, 1973, p562
- Tsuchiya. H., Matsuto. O., IEEE. Trans. Elect. Dev. 38, (1991),p1246
- Vanbésien. O. & al, in Resonant Tunneling in Semiconducteurs, Ed. L.L. Chang & al, plenum press New York, (1991a)
- Vanbésien. O., Thèse de Doctorat de l'université de Lille, (1991b)

Wigner. E., Phys. Rev. 40, (1932),p749 Wilkins, J. W., Phys. Rev. B 6, 3189 (1972) Wu, G.Y., Solid State Communications, Vol. 90, No. 6, (1994), p. 397

Zwanzig, R. W., in *Lecture in Theoretical Physics*, edited by W. E. Brittin, B. W. Downs, & J. Downs (Interscience, New York, 1961), p.106.

