



Etude du régime transitoire d'un modèle mathématique de jonction P-N

Huy Xuong Nguyen

► To cite this version:

Huy Xuong Nguyen. Etude du régime transitoire d'un modèle mathématique de jonction P-N. Modélisation et simulation. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 1969. Français. NNT: . tel-00281653

HAL Id: tel-00281653

<https://theses.hal.science/tel-00281653>

Submitted on 23 May 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THESE
présentée à
LA FACULTE DES SCIENCES DE L'UNIVERSITE DE GRENOBLE
pour obtenir
LE GRADE DE DOCTEUR DE TROISIEME CYCLE
" Mathématiques Appliquées "

par
NGUYEN HUY XUONG

////////

**Etude du régime transitoire
d'un modèle mathématique
de jonction P-N**

////////

Thèse soutenue le 27 juin 1969, devant la Commission d'examen :

Monsieur	J. KUNTZMANN	Président
Messieurs	M. BUYLE-BODIN	
	N. GASTINEL	Examineurs
	J. GREMILLET	
	J.C. PFISTER	

PROFESSEURS TITULAIRES (suite)

MM.	KLEIN J.	Mathématiques
	VAILLANT F.	Zoologie et Hydrobiologie
	ARNAUD Paul	Chaire de Chimie
	SENGEL P.	Chaire de Zoologie
	BARNOUR F.	Chaire de Biozyntèse de la Cellulose
	BRISSONNEAU P.	Physique
	GAGNAIRE	Chaire de Chimie Physique
Mme	KÖFLER L.	Botanique
	DEGRANGE Charles	Zoologie
	PEBAY-PEROULA J.C.	Physique
	RASSAT A.	Chaire de Chimie Systématique
	DUCROS P.	Vhaire de Cristallographie Physique
	DODU Jacques	Chaire de Mécanique Appliquée I.U.T.
	ANGLES D'AURIAC P.	Mécanique des Fluides
	LACAZE A.	Thermodynamique

PROFESSEURS SANS CHAIRE

MM.	GIDON P.	Géologie et Mnéralogie
	GIRAUD P.	Géologie
	PERRET R.	Servomécanisme
Mme	BARBIER M.J.	Electrochimie
Mme	SOUTIF J.	Physique
	COHEN J.	Electrotechnique
	DEPASSEL R.	Mécanique des Fluides
	GASTINEL N.	Mathématiques Appliquées
	GLENAT R.	Chimie
	BARRA J.R.	Mathématiques Appliquées
	COLUMES A.	Electronique
	PERRIAUX J.	Géologie et Minéralogie
	ROBERT A.	Chimie Papetière
	BIAREZ J.P.	Mécanique Physique
	BONNET G.	Electronique
	CAUQUIS G.	Chimie Générale
	BONNETAIN L.	Chimie Minérale
	DEPOMMIER P.	Etude Nucléaire et Génie Atomique
	HACQUES Gérard	Calcul Numérique
	POLOUJADOFF M.	Electrotechnique

PROFESSEURS ASSOCIES

MM.	NAPP-ZINN	Botanique
	RODRIGUES Alexandre	Mathématiques Pures
	STANDING Kenneth	Physique Nucléaire

MAITRES DE CONFERENCES

MM.	LANCIA Roland	Physique Atomique
Mme	KAHANE J.	Physique
	DEPORTES C.	Chimie
Mme	BOUCHE L.	Mathématiques
	SARRÔT-REYNAUD	Géologie Propédeutique

MAITRES DE CONFERENCES (suite)

Mme	BONNIER M.J.	Chimie
MM.	KAHANE A.	Physique Générale
	DOLIQUE J.M.	Electronique
	BRIERE G.	Physique M.P.C.
	DESRE G.	Chimie S.P.C.N.
	LAJZROWICZ J.	Physique M.P.C.
	VALENTIN P.	Physique M.P.C.
	BERTRANDIAS J.P.	Mathématiques Appliquées T.M.P.
	LAURENT P.J.	Mathématiques Appliquées T.M.P.
	CAUBET J.P.	Mathématiques Pures
	PAYAN J.J.	Mathématiques
Mme	BERTRANDIAS F.	Mathématiques Pures M.P.C.
	LONGEGUEUE J.P.	Physique
	NIVAT M.	Mathématiques Appliquées
	SOHM J.C.	Electrochimie
	ZADWORYNY F.	Electronique
	DURAND F.	Chimie Physique
	CARLER G.	Biologie Végétale
	AUBERT G.	Physique M.P.C.
	DELPUECH J.J.	Chimie Organique
	PFISTER J.C.	Physique C.P.E.M.
	CHIBON P.	Biologie Animale
	IDELMAN S.	Physiologie Animale
	BOUVARD Maurice	Hydrologie
	RICHARD Lucien	Botanique
	PELMONT Jean	Physiologie Animale
	BLOCH D.	Electrotechnique I.P.
	BOUSSARD J.Claude	Mathématiques Appliquées I.P.
	MOREAU René	Hydraulique I.P.
	BRUGEL L.	Energétique I.U.T.
	SIBILLE R.	Construction Mécanique I.U.T.
	ARMAND Yves	Chimie I.U.T.
	BOLLINET Louis	Informatique I.U.T.
	KUHN Gérard	Energétique I.U.T.
	GERMAIN J.P.	Construction Mécanique I.U.T.
	CONTE René	Thermodynamique
	JOLY Jean René	Mathématiques Pures
Mme	PIERY Yvette	Biologie Animale
	BENZAKEN Claude	Mathématiques Appliquées

MAITRE DE CONFERENCES ASSOCIES

MM.	SAWCZUK A.	Mécanique des Fluides
	CHEEKE J.	Thermodynamique
	YAMADA O.	Physique du Solide
	NATR Lubomir	B.M.P.V.
	NAYLOR Arch	Physique Industrielle
	SILBER Léo	Radioélectricité
	NOZAKI Akihiro	Mathématiques Appliquées
	RUTLEDGE Joseph	Mathématiques Appliquées
	DONOHU Paul	Physique Générale
	EGGER Kurt	B.M.P.V.

Le présent travail a été réalisé dans le cadre d'un contrat passé entre la Délégation Générale à la Recherche Scientifique et Technique et le Service de Mathématiques Appliquées de l'Université de Grenoble.

Je tiens à exprimer ici toute ma reconnaissance à

Monsieur le Professeur J. KUNTZMANN, Directeur du Service de Mathématiques Appliquées de l'Université de GRENOBLE, qui a dirigé ce travail et qui par son aide et ses précieux conseils m'a permis de le mener à bien; je suis particulièrement sensible à l'honneur qu'il m'a fait en acceptant de présider le Jury.

Je suis particulièrement reconnaissant à

Monsieur le Professeur N. GASTINEL, Directeur du Laboratoire de Calcul de l'Université de GRENOBLE, d'avoir eu la bienveillance de s'intéresser à cette étude.

Je remercie vivement

Monsieur le Professeur M. BUYLE-BODIN, Professeur à la Faculté des Sciences de GRENOBLE,

Monsieur J. GREMILLET, Directeur de Recherche du Laboratoire Central de Recherche THOMSON-C.S.F.,

Monsieur J.C. PFISTER, Maître de Conférences à la Faculté des Sciences de GRENOBLE,

pour l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant de faire partie du Jury.

Je voudrais également remercier

Messieurs R. FUNCK et D. VANDORPE ainsi que mes camarades du Laboratoire de Calcul pour leur collaboration amicale.

Je ne saurais enfin oublier dans mes remerciements, les personnels des Services Administratifs et Techniques de l'I.M.A.G. qui ont assuré la réalisation matérielle de cette thèse.

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION

NOTATION

CHAPITRE I : GENERALITES

- 1 - Jonction
- 2 - Barrière de potentiel
- 3 - Système d'équations
- 4 - Normalisation des équations
 - 4.1 - Convention de signe
 - 4.2 - Coefficients de normalisation
 - 4.3 - Le système normalisé
- 5 - Loi de recombinaison

CHAPITRE II : METHODES D'INTEGRATION

- 1 - Rappel : étude du régime permanent
 - 1.1 - Modèle utilisé
 - 1.2 - Méthode numérique
 - 1.3 - Algorithme
 - 1.4 - Remarques
- 2 - Etude du régime transitoire
 - 2.1 - Position du problème
 - 2.2 - Modèle physique et mathématique utilisé
 - 2.2.a. - Conditions initiales et aux limites
 - 2.2.b. - Condition liée au fonctionnement du circuit extérieur
 - 2.3 - Méthodes d'intégration
 - 2.3.a. - Algorithme J
 - 2.3.b. - Algorithme V

CHAPITRE III : METHODES NUMERIQUES

- 1 - Equations paraboliques du second ordre
- 2 - Méthodes de variables discrètes de résolution
 - 2.1. - Equations aux différences
 - 2.2. - Convergence. Stabilité.
- 3 - Application de ces méthodes
 - 3.1. - Choix de θ
 - 3.2. - Notations
 - 3.3. - Calcul de E, n, p suivant l'algorithme J
 - 3.3.a. - Calcul de E
 - 3.3.b. - Calcul de n,p
 - 3.3.c. - Remarques
 - 3.3.d. - Organigramme
 - 3.4. - Calcul de E,n,p suivant l'algorithme V
 - 3.4.a. - Remarque
 - 3.4.b. - Organigramme
- 4 - Précision de la méthode : choix de Δt .

CHAPITRE IV : QUELQUES APPLICATIONS

- 1 - Généralités
- 2 - Exemples

APPENDICE : LES PROGRAMMES

INTRODUCTION

L'usage des dispositifs semi-conducteurs a permis de réaliser, dans des dimensions toujours plus réduites, et de faire fonctionner, avec des consommations d'énergie relativement faibles, les puissants ordinateurs d'aujourd'hui. Les circuits de commutation composés de diodes et de transistors jouent un rôle important dans la réalisation de ces machines. Dès lors, se pose le problème du calcul des performances d'un circuit. Ce travail ne peut pas se faire sans une définition mathématique du schéma équivalent. Or un bon schéma équivalent doit prévoir le plus précisément possibles les performances du dispositif.

En ce qui concerne les dispositifs semi-conducteurs, les modèles mathématiques définis jusqu'à ce jour sont loin d'être satisfaisants, et cela par suite des approximations trop grossières. Il est donc indispensable de pouvoir décrire et calculer exactement les phénomènes de circulation des porteurs de courant dans les dispositifs semi-conducteurs. Il est aussi intéressant de savoir évaluer les retards introduits par le blocage des diodes (influence des charges de diffusion stockées) qui limitent les performances en vitesse, des circuits de commutation. Nous essayons dans ce travail d'étudier le fonctionnement en régime transitoire d'une diode. L'étude que nous présentons nous a permis de définir, à partir des travaux déjà réalisés dans ce domaine par GUMMEL et DEMARI, un modèle mathématique assez simple des diodes en commutation. Les résultats, bien qu'insuffisants pour expliquer tous les phénomènes, ont permis néanmoins de mettre en évidence les phénomènes, de recouvrement inverse, d'influence des charges stockées, de temps de transit,...etc...

Par ailleurs, nous signalons aussi que les méthodes mises en oeuvre dans ce travail peuvent être utilisées dans d'autres études de phénomène transitoire d'un dispositif semi-conducteur.

NOTATIONS

Nous employons les mêmes notations pour les grandeurs normalisées ou non.

SYMBOLE	GRANDEUR REPRESENTEE
n_i	Concentration d'électrons libres dans le semi-conducteur intrinsèque
n	Concentration d'électrons libres
p	Concentration de trous libres
J_n	Densité de courant d'électrons
J_p	Densité de courant de trous
J_o	Coefficient de normalisation de la densité de courant
J	Densité de courant total
V	Potentiel électrostatique
V_J	Potentiel de jonction
ϕ	Barrière de potentiel (ou potentiel de diffusion)
F_n	Pseudo-niveau de Fermi (électron)
F_p	Pseudo-niveau de Fermi (trou)
V_A	Potentiel appliqué
E	Champ électrique
μ_n	Mobilité des électrons
μ_p	Mobilité des trous
D_o	Coefficient de normalisation des constantes de diffusion
D_n	Constante de diffusion des électrons
D_p	Constante de diffusion des trous

ND	Concentration en atomes donneurs
NA	Concentration en atomes accepteurs
DOP	Dopage, $DOP = NA - ND$
R	Génération - recombinaison
x	Variable géométrique
t	Variable temps
TAUP	Durée de vie des trous
TAUN	Durée de vie des électrons
L_D	Coefficient de normalisation de longueur
k	Constante de Boltzmann
T	Température absolue
q	Charge d'un électron
ϵ	Permittivité du matériau
a	L'inverse, en grandeur normalisée, de la constante de diffusion des électrons $a = \frac{D_o}{D_n}$
b	L'inverse, en grandeur normalisée, de la constante de diffusion des trous $b = \frac{D_o}{D_p}$

REMARQUE

Nous continuons d'employer la terminologie, consacrée par l'usage, de constante de diffusion quoique les grandeurs désignées sous ce nom n'ont rien d'une constante.

CHAPITRE - I

GENERALITES

=====

1. Jonction
2. Barrière de potentiel
3. Système d'équations
4. Normalisation du système
5. Loi de recombinaison

GENERALITES

1. - JONCTION (voir [15] et [17])

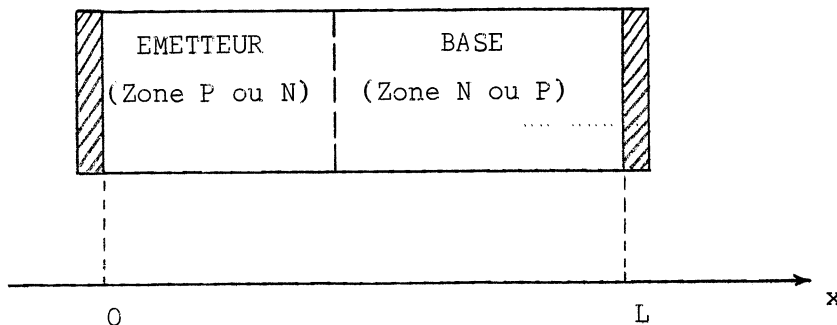
Physiquement, on définit une jonction (PN ou NP) comme la surface limite qui, dans un même monocristal, sépare les zones affirmées P et N. Cette surface est telle que :

$$DOP(x) = N_A - N_D = 0.$$

En fait, le mot jonction désigne souvent, mais d'une façon moins précise, la région du monocristal comprise entre les zones P et N où existe une forte variation de la concentration. Cette seconde définition des jonctions permet d'en distinguer différents types :

- les jonctions abruptes qui sont généralement obtenues par alliage et dont l'épaisseur est d'un ordre de grandeur inférieur au micron
- les jonctions non abruptes qui comprennent :
 - les jonctions diffusées à pentes rapides
 - les jonctions obtenues par alliage à pentes linéaires.

On appelle EMETTEUR la zone la plus dopée et BASE la zone la moins dopée. Géométriquement, nous représentons une jonction de la façon suivante :



Dans toute la suite, nous nous intéressons uniquement à un modèle de jonction unidimensionnelle, c'est-à-dire un modèle tel que toutes les quantités physiques (concentration, densité de courant, champ électrique etc...) ne dépendent que de la variable x (distance).

En outre, on suppose que les contacts métalliques sont situés aux deux extrémités de la jonction.

D'autres hypothèses seront introduites au fur et à mesure de leur nécessité.

2. - BARRIERE DE POTENTIEL

Considérons une jonction à l'équilibre thermique et en l'absence de tension appliquée. En raison du phénomène de diffusion, les porteurs majoritaires, au voisinage de la jonction, tendent à s'étendre dans la zone où ils se trouvent être minoritaires. Le déplacement de ces porteurs laisse, de part et d'autre de la jonction, une zone de transition où la neutralité électrique est en défaut. Ainsi, se crée un dipôle de charge qui produit un champ électrique $\vec{E}$.

Nous définissons la barrière de potentiel de la façon suivante :

$$\phi = - \int_0^L E(x) dx.$$

En prenant l'origine du potentiel en 0, l'expression des porteurs s'écrit, à l'équilibre :

$$p(x) = p(0) \exp \left(- \frac{V(x)}{\frac{kT}{q}} \right)$$

$$n(x) = n(0) \exp \left(\frac{V(x)}{\frac{kT}{q}} \right).$$

D'où, en supposant la neutralité électrique à l'extrémité $x = L$:

$$p(0) \exp\left(-\frac{V(L)}{\frac{kT}{q}}\right) - n(0) \exp\left(\frac{V(x)}{\frac{kT}{q}}\right) + \text{DOP}(L) = 0$$

on en déduit :

$$\phi = -V(L) = \frac{kT}{q} \left[\text{Log}\left(\frac{\text{DOP}(L)}{2}\right) + \sqrt{\frac{\text{DOP}(L)^2}{4} + p(0) n(0)} - \text{Log}(n(0)) \right].$$

Pour calculer la valeur des porteurs en 0 il suffit de remarquer que

$$\begin{cases} p(0) n(0) = n_i^2 \\ p(0) - n(0) + \text{DOP}(0) = 0 \end{cases} \quad (\text{neutralité électrique})$$

On a donc :

$$\phi = \frac{kT}{q} \left[\text{Log}\left(-\frac{\text{DOP}(0)}{2} + \sqrt{\frac{\text{DOP}(0)^2}{4} + n_i^2}\right) + \text{Log}\left(\frac{\text{DOP}(L)}{2} + \sqrt{\frac{\text{DOP}(L)^2}{4} + n_i^2}\right) \right]$$

Dans le cas d'une jonction P-N abrupte fortement dopée, on a donc approximativement :

$$\phi \approx \frac{kT}{q} \text{Log}\left(\frac{N_A \cdot N_D}{n_i^2}\right)$$

car :

$$\text{DOP}(0) = -N_A$$

$$\text{DOP}(L) = N_D.$$

L'application d'une tension extérieure (jonction polarisée) a pour effet d'abaisser (polarisation directe) ou d'augmenter (polarisation inverse) cette barrière de potentiel.

3. - SYSTEME D'EQUATIONS (voir [17])

Dans ce paragraphe, nous écrivons les équations régissant la circulation des porteurs dans un dispositif semi-conducteur. Notons toutes fois que ces équations résultent de l'approximation de la statistique de Fermi par celle de Boltzmann (approximation valable seulement quand les différences $\varphi_p - V$ et $V - \varphi_n$ sont petites par rapport à la largeur de la bande d'énergie). Le système d'équations (S) s'écrit alors :

$$(S) \quad \left\{ \begin{array}{ll} \vec{J}_n = q\mu_n n \vec{E} + qD_n \text{grad } n & (1) \\ \vec{J}_p = q\mu_p p \vec{E} - qD_p \text{grad } p & (2) \\ \frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \text{div } \vec{J}_n - R & (3) \\ \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \text{div } \vec{J}_p - R & (4) \\ \text{div } \vec{E} = \frac{q}{\epsilon} (p - n + \text{DOP}) & (5) \end{array} \right.$$

où :

(1) et (2) représentent la circulation des porteurs sous l'effet du champ et de la diffusion. Nous notons que $\vec{J}_n$ ($\vec{J}_p$) s'obtient comme la différence de deux termes très grands par rapport à lui.
D'où l'une des difficultés.

(3) et (4) sont des équations de continuité classiques. R représente la loi de recombinaison.

(5) C'est l'équation de Poisson.

Dans toute la suite, nous supposons que ce système (S) est valable pour tout modèle de dispositif semi-conducteur que nous considérerons.

4. - NORMALISATION DU SYSTEME (S)

Pour des raisons de simplicité du calcul numérique, il est souhaitable de transformer le système (S) en un système sans dimension. D'autre part, pour avoir des résultats physiques cohérents, cette normalisation doit tenir compte de la géométrie du dispositif (P-N ou N-P). Par conséquent, il est nécessaire de fixer un sens positif du courant correspondant à celui du courant direct.

4.1 - Sens positif du courant

Nous fixons comme sens positif du courant celui de l'axe des abscisses. Pour une jonction P-N on a :

- polarisation directe : $J > 0$
- polarisation inverse : $J < 0$.

Par contre, pour une jonction N-P, les signes sont inversés.

Pour retrouver les mêmes signes, il nous suffit donc de choisir, suivant le cas, un courant de normalisation positif ou négatif.

4.2 - Coefficients de normalisation

Nous donnons dans le tableau ci-dessous la valeur des coefficients de normalisation. Nous traiterons les deux cas les plus usuels : le Silicium (Si) et le Germanium (Ge).

Nous remarquons qu'une certaine liberté est laissée au choix de D_o (coefficient de normalisation des constantes de diffusion) ou de J_o (coefficient de normalisation des densités de courant). La relation entre ces deux coefficients s'écrit, au signe près :

$$J_o = \frac{q D_o n_i}{L_D} .$$

En général, on choisit l'un ou l'autre suivant l'aspect physique du problème à traiter.

En outre, dans toute la suite, nous supposons toujours que la température est constante. On prendra :

$$T = 300.$$

Dans le tableau ci-dessous, nous posons :

$$L_D = \sqrt{\frac{\epsilon k T}{q^2 n_i}}.$$

En général, L_D désigne la longueur de Debye (qui vaut $\sqrt{\frac{\epsilon k T}{2 q^2 n_i}}$), ici, nous conservons la même notation pour une raison évidente.

L_D servira de coefficient de normalisation pour la longueur. Son choix est clairement dicté par la normalisation de l'équation de Poisson.

Enfin, pour fixer les idées, nous prendrons comme coefficient de normalisation de la densité de courant :

$$J_0 = 10^4 \text{ A/m}^2 = 1 \text{ A/cm}^2$$

Désignation	Symbol	Coefficient	Valeur numérique (Si)	Valeur numérique
Abscisse	x	$\sqrt{\frac{\epsilon kT}{2q^2 n_i}}$	$33.29 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$	$9.56 \cdot 10^{-5} \text{ cm}$
Potentiel	V	}	0.0258 volt	0.0258 volt
Niveaux de Fermi	φ_n, φ_p			
Tension appliquée	V_A			
Barrière de potentiel	ϕ	}		
Champ électrique	E	$\frac{kT}{qL_D}$	7.74.Volt/cm	296.87 Volt/cm
Concentration	n, p	n_i	$1.51 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$	$2.5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$
Dopage	NA, ND	n_i	$1.51 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$	$2.5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$
Densité de courant	J, J_n, J_p	J_o	1 A/cm^2	1 A/cm^2
Constante de diffusion	D_n, D_p	D_o	$1.4 \cdot 10^6 \text{ cm}^2/\text{sec}$	$23.52 \text{ cm}^2/\text{sec}$
Temps	t	$\frac{L_D^2}{D_o}$	$7.85 \cdot 10^{-12} \text{ sec}$	$3.87 \cdot 10^{-10} \text{ sec}$
Résistance	R	$\frac{kT}{q L_D^2 J_o}$	$2.27 \cdot 10^3 \text{ Ohm}$	$2.74 \cdot 10^6 \text{ Ohm}$

4.3 - Système (S) normalisé

Posons :

$$a = \frac{D_o}{D_n}$$

$$b = \frac{D_o}{D_p}$$

En général, a et b sont des fonctions connues de x . Dans les applications pratiques, a et b sont des fonctions constantes par morceaux.

Avec ces notations, le système (S) normalisé s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} a\vec{J}_n = \text{grad } n + n\vec{E} \\ b\vec{J}_p = -\text{grad } p + p\vec{E} \\ \frac{\partial n}{\partial t} = \text{div } \vec{J}_n - R \\ \frac{\partial p}{\partial t} = -\text{div } \vec{J}_p - R \\ \text{div } \vec{E} = p - n + \text{DOP}(x). \end{array} \right.$$

Bien entendu, en écrivant le système d'équations sous cette forme, nous avons supposé que le dopage ne varie pas avec le temps et que les atomes accepteurs et donneurs sont tous ionisés.

5. - LOI DE RECOMBINAISON

En principe, dans les méthodes numériques de résolution du système précédent, toutes les lois de recombinaison peuvent être utilisées. Mais, pour fixer les idées, dans les applications pratiques nous utiliserons la loi de SHOCKLEY-READ-HALL qui s'écrit :

$$R = \frac{p_n - n_1^2}{\tau_p(n+n_1) + \tau_n(p+p_1)}$$

(voir A.B. Phillips : Transistor Engineering).

En général, on suppose que le niveau des "pièges" n_1 et p_1 est pris égal à n_i (niveau intrinsèque). D'où, en écriture normalisée, l'expression de R :

$$R = \frac{pn-1}{TAUP(n+1)+TAUN(p+1)} .$$

Dans le cas où TAUP et TAUN sont infinis, $R \equiv 0$, nous dirons que le modèle traité est "sans recombinaison". Dans les autres cas, le modèle est dit "avec recombinaison".

CHAPITRE - II

METHODES D'INTEGRATION

=====

1. Rappel : régime permanent
2. Etude du régime transitoire

METHODES D'INTEGRATION

L'étude mathématique d'un modèle de dispositif semi-conducteur se pose sous deux formes : l'étude du régime permanent (indépendant du temps) et l'étude du régime transitoire (régime résultant de la variation en fonction du temps des paramètres extérieurs). Dans chacun des cas, le problème revient à résoudre le système (S) et cela, sous les conditions physiques appropriées.

Comme dans la plupart des cas des problèmes de la physique mathématique, il est impossible de résoudre le système (S) analytiquement (c'est-à-dire donner les expressions explicites ou implicites des fonctions inconnues). D'ailleurs, si c'était le cas, il ne serait pas certain que ces expressions soient directement exploitables par les calculateurs numériques.

Par conséquent, en admettant l'existence d'une solution (problème certainement très difficile), on doit chercher à résoudre (S) par des méthodes numériques approchées. Ces méthodes doivent être facilement traitées par les calculateurs. Or, à proprement parler, la forme du système (S) liée à la nature physique du problème à étudier n'est pas commode. En effet, le phénomène, donc les équations, n'est pas linéaire. En outre, les quantités physiques présentent des variations très brutales dans le temps et dans l'espace. Ainsi, la quasi totalité des auteurs qui se sont intéressés à ce problème ont cherché à éviter ces difficultés par un biais purement physique (linéariser les équations par l'emploi des hypothèses simplificatrices : neutralité électrique, champ électrique faible etc...).

Nous nous intéressons dans ce chapitre à étudier le régime transitoire d'un modèle de dispositif semi-conducteur, plus précisément d'une jonction P-N. Notre but consiste à chercher des méthodes numériques approchées, d'où des algorithmes de résolution du système (S) dans les conditions les plus générales possibles. Nous ne rentrerons pas dans les détails, techniques (de calcul) et physiques, de l'application de ces méthodes aux problèmes concrets posés par le régime transitoire. Ce sera l'objet du troisième et quatrième chapitre.

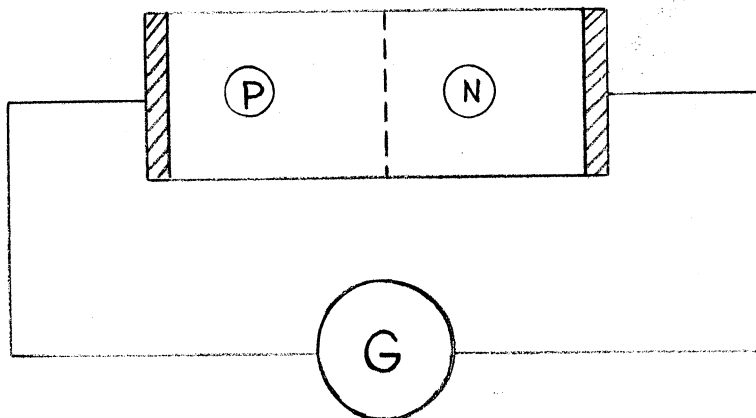
Mais, on ne peut pas étudier un régime transitoire sans connaître le régime permanent "correspondant". Dans les cas qui nous intéressent, ce dernier apparaît soit comme le régime "limite" (dans le temps) d'un régime transitoire, soit comme l'état initial d'un système évolutif. Nous allons donc rappeler brièvement l'étude du régime permanent d'une jonction PN.

1. - RAPPEL : REGIME PERMANENT

Pour plus de détails, on peut voir [3], [8], [18].

1.1 - Modèle utilisé

Nous représentons le dispositif comme suit :



Nous supposons que la condition de neutralité électrique est rigoureusement satisfaite au voisinage des contacts métalliques externes. Autrement dit, les concentrations en électrons et en trous sont indépendantes, en 0 et L, de la polarisation externe appliquée. On a donc, en ces deux points :

$$(1) \quad \begin{cases} np = 1 \\ n-p-DOP = 0 \end{cases}$$

ceci revient à supposer que la vitesse de recombinaison est infinie sur les contacts métalliques. Cette hypothèse n'est pas essentielle, on peut la modifier par la suite. Pour une jonction abrupte, (1) donne :

$$p(0) = \frac{NA}{2} + \sqrt{\frac{NA^2}{4} + 1} \neq NA$$

$$n(0) = \frac{1}{p(0)}$$

$$n(L) = \frac{ND}{2} + \sqrt{\frac{ND^2}{4} + 1} \neq ND$$

$$p(L) = \frac{1}{n(L)} .$$

Nous prendrons l'origine des potentiels au point 0. Dans ce cas :

$$V(L) = \phi - VA \quad (2)$$

VA : tension appliquée, ϕ : barrière de potentiel (voir Ch. I).

Ceci étant, nous écrivons le système (S), pour un modèle unidimensionnel, correspondant au régime permanent de la façon suivante, en omettant la variable x :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dn}{dx} = aJ_n + n \frac{dV}{dx} \\ \frac{dp}{dx} = -(bJ_p + p \frac{dV}{dx}) \\ \frac{dJ_n}{dx} = R \\ \frac{dJ_p}{dx} = -R \\ \frac{d^2V}{dx^2} = n-p-DOP \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (S.1) \\ (S.2) \\ (S.3) \\ (S.4) \\ (S.5) \end{array}$$

on a en outre :

$$E = - \frac{dV}{dx}$$

En posant :

$$J = J_n + J_p$$

(S.3) et (S.4) donne :

$$\frac{dJ}{dx} = 0 \Rightarrow J = \text{constante}$$

ce qui exprime bien la conservation de l'électricité.

1.2 - Méthode d'intégration

Il s'agit de résoudre le système d'équations précédent avec les conditions aux limites (1) et (2). Pour cela, on procède de la façon suivante :

1.2.a. - Modèle "sans recombinaison"

Dans ce cas : $R \equiv 0$

De (S.3) et (S.4) on déduit :

$$J_n(x) = \text{constante (à déterminer)}$$

$$J_p(x) = \text{constante (à déterminer)}.$$

En supposant que le potentiel $V(x)$ soit connu, (S.1) et (S.2) peuvent s'intégrer comme deux équations linéaires du premier ordre. Ce qui donne :

$$n(x) = n(L)e^{V(x)-V(L)} + (n(0)-n(L)e^{-V(L)}) \frac{e^{V(x)} \int_0^L a(u)e^{-V(u)} du}{\int_0^L a(u)e^{-V(u)} du}$$

$$p(x) = p(0)e^{-V(x)} + (p(L)-p(0)e^{-V(L)}) \frac{e^{-V(x)} \int_0^x b(u)e^{V(u)} du}{e^{-V(L)} \int_0^L b(u)e^{V(u)} du}$$

D'où les expressions des densités de courant :

$$J_n = \frac{n(L)e^{-V(L)} - n(0)}{\int_0^L a(x)e^{-V(x)} dx}$$

$$J_p = \frac{p(0)e^{-V(L)} - p(L)}{e^{-V(L)} \int_0^L b(x)e^{V(x)} dx}$$

Remarquons que ces expressions ont été écrites de façon qu'elles soient facilement calculables.

En effet, nous devons calculer les intégrales où figurent les termes $e^{V(x)}$ et $e^{-V(x)}$. Or, il est impossible de calculer, sur les ordinateurs usuels, les exponentiels dont l'exposant est trop grand. Or dans les cas de forte polarisation inverse ou directe, le potentiel peut prendre des valeurs très appréciables.

Par contre, malgré la présence des exponentiels, les expressions écrites plus haut sont toujours calculables en machine. Prenons par exemple le cas d'une très forte polarisation inverse. Dans ce cas, pour une jonction P-N, le potentiel est croissant. On a, par exemple :

$$F(x) = e^{-V(x)} \int_0^x b(u) e^{V(u)} du = \int_0^x b(u) e^{V(u)-V(x)} du$$

$$G(x) = e^{V(x)} \int_x^L a(u) e^{-V(u)} du = \int_x^L a(u) e^{V(x)-V(u)} du.$$

Dans les deux expressions, les exposants sont négatifs. On peut donc toujours les calculer quelle que soit la valeur du potentiel.

Ceci étant, considérons l'équation de Poisson. En supposant que $p(x)$ et $n(x)$ sont connus, il s'agit de résoudre l'équation différentielle linéaire avec conditions aux limites :

$$\frac{d^2V}{dx^2} = n(x) - p(x) - \text{DOP}(x).$$

Le second membre représente la charge électrique totale. Cette charge varie très brutalement dans l'espace. Par suite, malgré sa simplicité, l'intégration de (S.5) par les méthodes classiques s'est avérée numériquement impossible, en ce sens que les valeurs du potentiel dans deux boucles d'itération successives se différencient notablement. Par conséquent, nous cherchons à "stabiliser" cette équation en utilisant les pseudo-niveaux de Fermi. En effet, on pose, par définition :

$$p(x) = e^{F_P(x)-V(x)}$$

$$n(x) = e^{V(x)-F_N(x)}.$$

Physiquement, tout comme le potentiel $V(x)$, les pseudo-niveaux $F_p(x)$ et $F_n(x)$ sont assez "réguliers". Leur introduction dans l'équation de Poisson rend cette dernière non-linéaire :

$$\frac{d^2V}{dx^2} = e^{V(x)-F_n(x)} - e^{F_p(x)-V(x)} - DOP(x).$$

La non-linéarité nous oblige à employer une méthode d'approximation successive. Pour cela, on pose, à la $i^{\text{ème}}$ itération :

$$V_i(x) = V_{i-1}(x) + \delta_i(x)$$

où δ_i représente la "correction" à apporter à V_{i-1} .

En négligeant les termes non linéaires dans le second membre de l'équation différentielle, on obtient l'équation linéaire :

$$\begin{aligned} \frac{d^2\delta_i(x)}{dx^2} - \delta_i(x) [e^{V_{i-1}(x)-F_n(x)} + e^{F_p(x)-V_{i-1}(x)}] \\ = e^{V_{i-1}(x)-F_n(x)} - e^{F_p(x)-V_{i-1}(x)} - DOP(x) - \frac{d^2V_{i-1}(x)}{dx^2}. \end{aligned}$$

Nous avons omis de mettre le rang de l'itération ($i-1$) dans les expressions des pseudo-niveaux de Fermi.

Nous appellerons cette dernière équation : équation de Poisson linéarisée. Les calculs montrent effectivement que l'emploi des pseudo-niveaux de Fermi permet une "stabilisation" de l'intégration de l'équation de Poisson. La réussite de la méthode tient à cette remarque.

1.2.b. - Modèle "avec recombinaison"

Dans ce cas, les densités de courant ne sont plus constantes. L'intégration de (S.1) et (S.2) donne :

$$n(x) = e^{V(x)} \left(- \int_x^L a(u) J_n(u) e^{-V(u)} du + n(L) e^{-V(L)} \right)$$

$$p(x) = e^{-V(x)} \left(p(0) - \int_0^x b(u) J_p(u) e^{V(u)} du \right).$$

Enfin, l'intégration de (S.3) et (S.4) est immédiate, en tenant compte des conditions aux limites sur les porteurs :

$$J_n(x) = \int_0^x R(u) du + \frac{n(L) e^{-V(L)} - n(0)}{\int_0^L a(x) e^{-V(x)} dx} - \frac{\int_0^L a(x) e^{-V(x)} \left(\int_0^x R(u) du \right) dx}{\int_0^L a(x) e^{-V(x)} dx}$$

$$J_p(x) = - \int_0^x R(u) du + \frac{p(0) e^{-V(L)} - p(L)}{e^{-V(L)} \int_0^L b(x) e^{V(x)} dx} + \frac{\int_0^L b(x) e^{V(x)} \left(\int_0^x R(u) du \right) dx}{\int_0^L b(x) e^{V(x)} dx}.$$

La méthode exposée en 1.2.a. pour un modèle "sans recombinaison" s'appliquerait si on connaissait le terme de recombinaison $R(x)$. Mais, en fait, $R(x)$ s'écrit exactement $R(n(x), p(x))$. Par conséquent, la connaissance de $V(x)$ n'est plus suffisante pour déterminer les inconnues n , p , J_n , J_p .

Mais, en supposant le modèle "sans recombinaison" résolu, on a donc une expression approchée de $R(n(x), p(x))$. Dans ce cas, le modèle "avec recombinaison" se traiterait comme celui "sans recombinaison" avec une boucle d'itération en plus.

1.3. - Algorithme

Il découle de la méthode exposée précédemment la remarque suivante : la connaissance du potentiel $V(x)$, solution de (S), permet de calculer les autres inconnues (J_n , J_p , n , p) exactement (1.2.a.) ou "approximativement" (1.2.b.) Comme $V(x)$ est solution d'une équation non-linéaire, nous employons une méthode d'itération. Il est donc nécessaire, pour pouvoir démarrer l'itération, de connaître une première approximation $V_0(x)$ de $V(x)$. En général, la théorie simplifiée de Shockley constitue une première approximation utilisable (voir [18]).

En résumé, on peut schématiser la méthode utilisée par l'algorithme suivant :

ALGORITHME

1. Détermination d'une fonction potentielle $V_0(x)$ approchée.
2. $R(x) \equiv 0$.
3. Calcul de $n(x)$ et $p(x)$ correspondant à $V(x)$. On en déduit $F_n(x)$, $F_p(x)$, $R(x)$.
4. Amélioration de $V(x)$ par la solution de l'équation de Poisson linéarisée.
5. Si la précision sur la "correction" δ dépasse une valeur fixée à l'avance, on revient en 3. Sinon on revient en 2. tant que la convergence ne soit pas encore atteinte.

1.4. - Remarque sur l'intégration de l'équation de Poisson

L'étape fondamentale de l'algorithme précédent est l'intégration numérique de l'équation de Poisson. On emploie une méthode itérative, par conséquent, la réussite de cette étape dépend de la convergence de l'itération.

Nous essayons de regarder de plus près cette convergence en établissant une similitude entre la méthode employée et la méthode très classique de Newton pour la résolution des systèmes non linéaires. Car, c'est seulement dans cette dernière méthode que l'on a un outil solide en la matière du théorème Kantorovitch sur la convergence (voir [9]). Il ressortira aussi à la fin de la remarque le rôle important que joue la tension appliquée (donc de la forte ou faible injection). Considérons donc l'équation de Poisson :

$$\frac{d^2V}{dx^2} = n(x) - p(x) - DOP(x)$$

où n et p sont écrits comme fonction du potentiel $V(x)$.

L'une des méthodes numériques de résolution de cette équation aux conditions aux limites consiste à discrétiser la variable x puis, ensuite, approcher la dérivée seconde au point $x = x_i$ par l'expression :

$$\frac{V(x_{i+1}) - 2V(x_i) + V(x_{i-1}))}{h^2}$$

où l'on suppose que le pas h est constant. Ainsi, si l'intervalle $(0, L)$ est divisé en $N+1$ sous-intervalles, on obtient un système de N équations en N inconnues $V_i = V(x_i)$. Ce système, non linéaire comme nous avons vu peut s'écrire matriciellement :

$$\phi(V) = 0$$

On emploie souvent la méthode de Newton pour résoudre un tel système. (voir [9]). En désignant par j le rang de l'itération et par A la matrice jacobienne de ϕ , cette méthode itérative peut s'exprimer par la relation :

$$V^{j+1} = V^j - [A(V^j)]^{-1} \phi(V^j).$$

D'où, en posant :

$$\delta^{j+1} = V^{j+1} - V^j$$

on a :

$$A(V^j) \cdot \delta^{j+1} = \phi(V^j).$$

Autrement dit, la correction δ est solution d'un système linéaire.

La méthode est facilement applicable si la résolution de ce système linéaire, de dimension appréciable, s'effectue rapidement et sans trop d'erreurs. Ce n'est pas le cas pour notre problème.

Considérons maintenant la discrétisation du second membre. Pour la simplicité de l'écriture, nous prenons un modèle "sans recombinaison" avec a et b constantes par morceaux. Nous supposons que les intégrales sont calculées par la méthode de trapèzes. Dans ce cas, en omettant le rang de l'itération, la $i^{\text{ème}}$ équation s'écrit :

$$\begin{aligned} \phi_i(V_1, V_2, \dots, V_N) = & V_{i+1} - 2V_i + V_{i-1} - h^2 \text{DOP}_i e^{V_i} \left[1 + (e^{-VA} - 1) \frac{\sum_{j=0}^{i-1} e^{-V_j}}{N-1} \right] \\ & + \frac{h^2}{\text{DOP}_i} e^{-V_i} \left[1 + (e^{VA} - 1) \frac{\sum_{j=0}^{i-1} e^{V_j}}{N-1} \right] + h^2 \text{DOP}_i \end{aligned}$$

Posons :

$$\begin{aligned} \alpha_i = & \text{DOP}_i e^{V_i} \left[1 + (e^{-VA} - 1) \frac{\sum_{j=0}^{i-1} e^{-V_j}}{N-1} \right] \\ \beta_i = & \frac{e^{-V_i}}{\text{DOP}_i} \left[1 + (e^{VA} - 1) \frac{\sum_{j=0}^{i-1} e^{V_j}}{N-1} \right] \end{aligned}$$

Les éléments de la matrice A s'écrivent :

$$a_{ii} = -2-h^2(\alpha_i + \beta_i) + (e^{VA}-1)f_i$$

$$a_{ii-1} = 1+(e^{-VA}-1)g_i$$

$$a_{ii+1} = 1+(e^{-VA}-1)h_i$$

$$a_{ij} = (e^{-VA}-1)k_{ij} \quad (|i-j| > 1)$$

où f_i, g_i, h_i, k_{ij} sont des quantités bornées.

Or si nous écrivons le système d'équations linéaires correspondant à l'équation de Poisson linéarisée, on s'aperçoit qu'il s'écrit matriciellement :

$$A^*(V^j) \delta^{j+1} = \phi(V^j) \quad (3)$$

où j représente le rang de l'itération, avec :

$$a_{ii}^* = -2-h^2(\alpha_i + \beta_i)$$

$$a_{ii-1}^* = 1$$

$$a_{ii+1}^* = 1$$

$$a_{ij}^* = 0 \quad (|i-j| > 1).$$

Nous voyons ainsi apparaître une similitude entre les deux méthodes. Les deux matrices A et A^* sont d'autant plus proches l'une de l'autre que le terme $(e^{|VA|} - 1)$ est petit. D'autre part, nous savons que l'ordre de convergence de la méthode de Newton est 2 (convergence quadratique où le nombre de chiffre correct est doublé à chaque itération). La méthode que nous employons peut être assimilée à la méthode de Newton modifiée, par conséquent, la convergence est moins rapide.

Nous retrouvons ainsi, d'après ce qui précède, un résultat du calcul : à faible injection, la convergence est assez rapide (remarquons d'ailleurs que la théorie simplifiée constitue déjà une très bonne approximation).

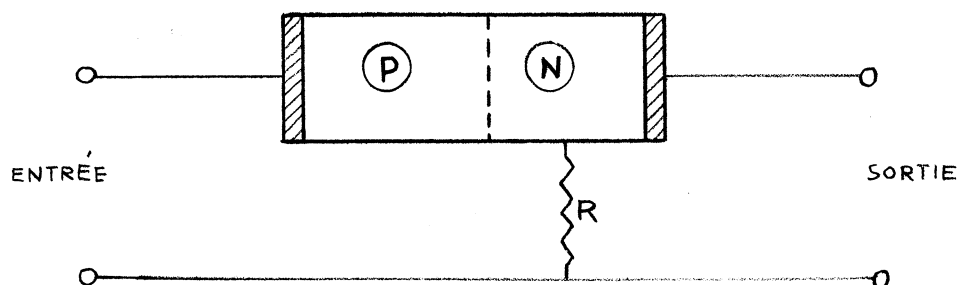
En résumé, en employant la méthode de linéarisation pour résoudre le système d'équations non linéaires associé à l'équation de Poisson, la convergence est moins rapide mais, en compensation, nous mettons moins de temps pour résoudre le système (3), car la matrice A^* est tridiagonale donc très simple.

2 - ETUDE DU REGIME TRANSITOIRE

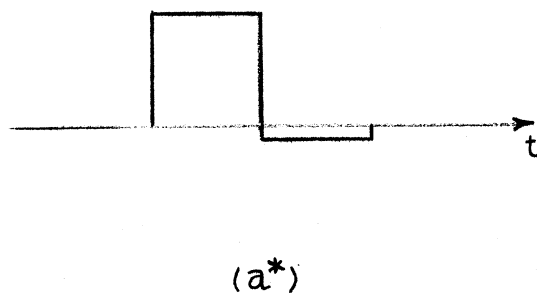
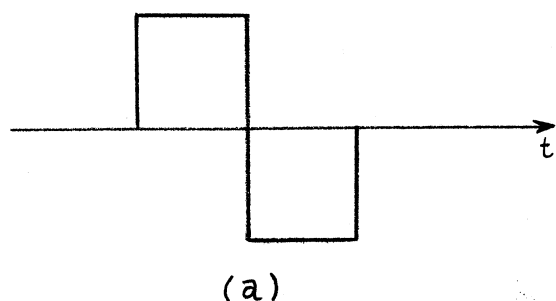
2.1. - Position du problème

Il s'agit, grosso-modo, d'étudier la réponse donnée par une jonction P-N lorsqu'on lui soumet à un signal d'entrée. La rapidité avec laquelle le dispositif répond à un signal donné est un facteur important à plusieurs points de vue (voir [15]).

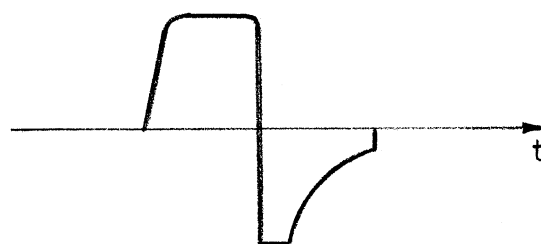
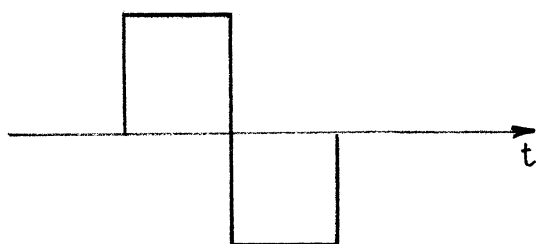
Considérons, par exemple, le dispositif physique suivant :



Si le dispositif était purement résistif, quand on met à l'entrée un signal (en tension) de la forme (a) on obtiendrait une réponse idéale de la forme (a*)



mais, en fait, il existe en quelque sorte une capacité de transition due à l'accumulation des charges minoritaires de part et d'autre de la jonction. L'évacuation de ces charges n'est pas instantanée. Par conséquent, nous avons la correspondance suivante :



Une étude quantitative correcte de tel phénomène ne peut se faire que par l'intégration du système (S) (Chapitre I) relatif au régime dépendant du temps. C'est l'objet de ce paragraphe.

2.2 - Modèle physique et mathématique du dispositif utilisé

C'est le même modèle physique que nous avons utilisé pour le régime permanent, c'est-à-dire :

- non dégénérescence
- température uniforme
- complète ionisation des impuretés
- dopage indépendant du temps
- unidimensionnel.

Le système d'équation s'écrit, en omettant x , sous forme normalisée :

$$(T) \quad \left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial n}{\partial x} = aJ_n - nE & (T.1) \\ \frac{\partial p}{\partial x} = -bJ_p + pE & (T.2) \\ \frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial J_n}{\partial x} - R & (T.3) \\ \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial J_p}{\partial x} - R & (T.4) \\ \frac{\partial E}{\partial x} = p-n+DOP & (T.5) \end{array} \right.$$

Notons, comme une conséquence de (T.3), (T.4), (T.5), la relation

$$\frac{\partial}{\partial x} (J_n + J_p + \frac{\partial E}{\partial t}) = 0$$

ce qui donne, en appelant J la densité du courant total :

$$J = J_n + J_p + \frac{\partial E}{\partial t} \quad (T.6)$$

$$\frac{\partial J}{\partial x} = 0.$$

Ce n'est autre que la relation de Maxwell pour la conservation de l'électricité. Nous désignerons par V_J le potentiel de jonction (potentiel effectivement mesurable en circuit extérieur). On a :

$$V_J = \phi + \int_0^L E \, dx.$$

où :

ϕ : barrière de potentiel

E : champ électrique.

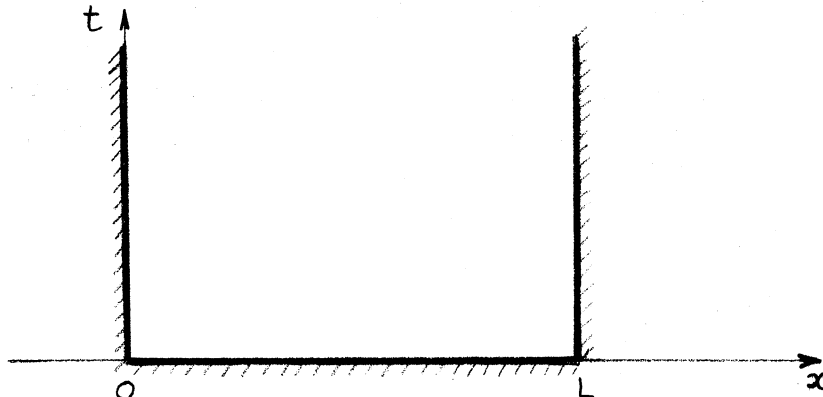
Enfin, on posera :

$$\lambda = R.S$$

où R est la résistance et S la surface de la jonction, toutes deux exprimées en grandeurs normalisées.

2.2.a. - Domaine d'intégration. Conditions initiales. Conditions aux limites

Le domaine d'intégration est une demi-bande représentée de la façon suivante :



Dans toute la suite, nous supposons que le dispositif se trouve, à l'instant $t=0$ (le fond de la bande), dans un état permanent. Cet état est parfaitement connu d'après 1.

Les conditions aux limites s'obtiennent en écrivant la neutralité électrique au deux extrémités 0 et L. Ce qui donne :

$$\begin{cases} n(x,t) \cdot p(x,t) = 1 \\ n(x,t) - p(x,t) - DOP(x) = 0 \end{cases} \quad \forall t \geq 0$$

On en déduit :

$$\begin{cases} n(0,t), n(L,t) \\ p(0,t), p(L,t) \\ \frac{\partial E}{\partial x}(0,t) = \frac{\partial E}{\partial x}(L,t) = 0. \end{cases} \quad \forall t \geq 0$$

Bien entendu, n'importe quel autre ensemble de conditions aux limites peut être donné.

Remarque

L'origine du potentiel est toujours prise au point 0.

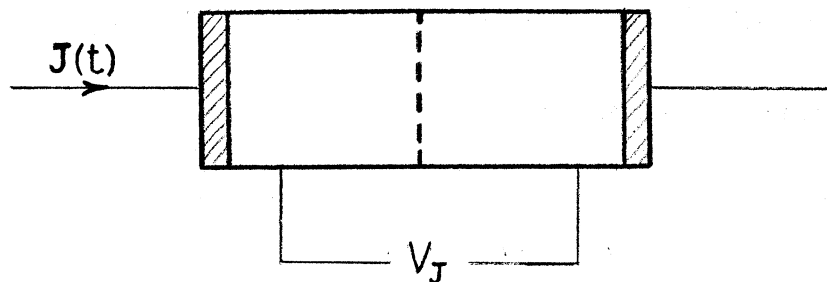
2.2.b. - Condition liée au fonctionnement du circuit extérieur

Le modèle sera complètement déterminé si l'on précise les éléments du circuit extérieur. En général, on considère deux sortes de signal d'entrée :

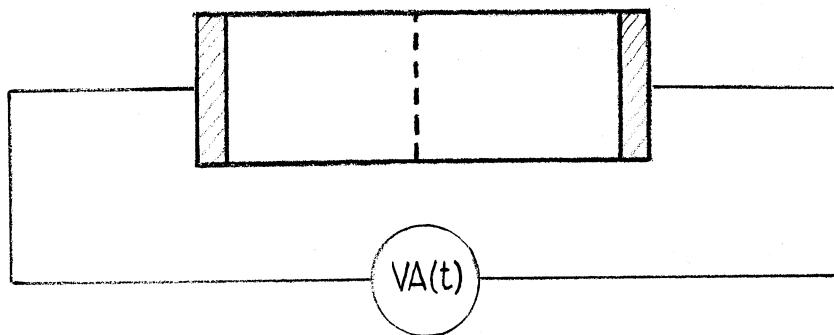
1 - Le courant total. Dans ce cas, on a :

$$J = J(t) \quad (\text{fonction connue}).$$

On représente un tel dispositif par :



2 - La tension appliquée $V_A(t)$. On représente un tel dispositif par :



Dans ce cas, on a ($\forall t > 0$)

$$V_A(t) = V_J + \lambda J(t).$$

2.3. - Méthodes d'intégration approchée du système (T)

Physiquement, le système (T) décrit l'évolution dans le futur d'un ensemble de phénomènes liés au dispositif semi-conducteur considéré plus haut. A ce titre, sa forme n'est pas la meilleure possible, et pour la description physique de l'évolution du système, et pour la résolution mathématique.

Nous essayons donc de trouver un système équivalent qui s'écrira sous la forme :

$$\frac{\partial U}{\partial t} = F(U, t, \dots)$$

où U est un vecteur (inconnu)
 F une application vectorielle.

C'est une forme classique des problèmes d'évolution.
 De (T.6) on tire :

$$\frac{\partial E(x, t)}{\partial t} = J(t) - J_n(x, t) - J_p(x, t).$$

En tenant compte de (T.1) et (T.2) on a :

$$\frac{\partial E(x, t)}{\partial t} = J(t) - \frac{1}{a(x, t)} \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{b(x, t)} \frac{\partial p(x, t)}{\partial x} - \left(\frac{n(x, t)}{a(x, t)} + \frac{p(x, t)}{b(x, t)} \right) E(x, t)$$

(T.3) et (T.4) donnent, après dérivation de (T.1) et (T.2) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = \frac{1}{a(x,t)} \left[\frac{\partial^2 n(x,t)}{\partial x^2} + (E(x,t) - \frac{1}{a(x,t)} \frac{\partial a(x,t)}{\partial x}) \frac{\partial n(x,t)}{\partial x} \right. \\ \left. + (\frac{\partial E(x,t)}{\partial x} - \frac{E(x,t)}{a(x,t)} \frac{\partial a(x,t)}{\partial x}) n(x,t) \right] - R(x,t) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = \frac{1}{b(x,t)} \left[\frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2} - (E(x,t) + \frac{1}{b(x,t)} \frac{\partial b(x,t)}{\partial x}) \frac{\partial p(x,t)}{\partial x} \right. \\ \left. - (\frac{\partial E(x,t)}{\partial x} - \frac{E(x,t)}{b(x,t)} \frac{\partial b(x,t)}{\partial x}) p(x,t) \right] - R(x,t) . \end{aligned}$$

Enfin, remarquons que :

$$\frac{\partial E(x,t)}{\partial x} = p(x,t) - n(x,t) + DOP(x) \quad (\text{d'après (T.5)}).$$

On a le système suivant, on omettant désormais les variables x et t :

(T^*)	$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} &= \frac{1}{a} \left[\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + (E - \frac{1}{a} \frac{\partial a}{\partial x}) \frac{\partial n}{\partial x} + (p - n + DOP - \frac{E}{a} \frac{\partial a}{\partial x}) n \right] - R \end{aligned} \right. \quad (T^{*.1})$
	$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t} &= \frac{1}{b} \left[\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - (E + \frac{1}{b} \frac{\partial b}{\partial x}) \frac{\partial p}{\partial x} - (p - n + DOP - \frac{E}{b} \frac{\partial b}{\partial x}) p \right] - R \end{aligned} \right. \quad (T^{*.2})$
	$\frac{\partial E}{\partial t} = J(t) - \frac{1}{a} \frac{\partial n}{\partial x} + \frac{1}{b} \frac{\partial p}{\partial x} - (\frac{n}{a} + \frac{p}{b}) E \quad (T^{*.3})$

Nous obtenons ainsi le système (T^*) qui est bien de la forme cherchée.

Remarquons que :

- $(T^*.1)$ et $(T^*.2)$ sont deux équations de transport (des porteurs). Elles sont toutes deux paraboliques non-linéaires.
- $(T^*.3)$ est linéaire.

Lorsque $J(t)$ est connu, les conditions initiales et aux limites décrites en 2.2.a. déterminent complètement la solution de (T^*) .

Dans le cas où la tension appliquée $VA(t)$ est donnée, la résolution se complique car on doit ajouter à (T^*) l'équation (voir 2.2.b.)

$$\lambda J(t) + \int_0^L E(x,t) dx - VA(t) + \phi = 0 \quad (C)$$

mais, nous savons qu'il existe une correspondance biunivoque entre J et VA (nous appellerons la courbe $J_t = f(VA_t)$ la caractéristique du dispositif à l'instant t). Par conséquent, nous gardons (T^*) toujours sous cette forme en considérant (C) plutôt comme une condition à satisfaire que comme une équation faisant partie de (T^*) . Les méthodes numériques que nous allons exposer tiennent compte de la donnée soit de $J(t)$ soit de $VA(t)$.

2.3.a. - $J(t)$ connu : méthode numérique et algorithme

Apparemment, la connaissance du champ $E(x,t)$ permet de résoudre (T^*) assez facilement (et dans ce cas, il vaut mieux garder $\frac{\partial E}{\partial x}$ que de le remplacer par le second membre de (T.5) dans les seconds membres de $(T^*.1)$ et $(T^*.2)$).

Mais, nous faisons la remarque suivante, d'origine physique, qui sera fondamentale :

Quand le système physique évolue, parmi les trois quantités (E, n, p), ce sont n et p qui varient le plus régulièrement dans le temps. Car, comme nous avons vu au début du chapitre, l'évacuation des porteurs minoritaires n'est pas instantanée, par conséquent, la répartition (suivant l'axe des x) des porteurs à l'instant $t+\Delta t$ est assez proche de celle à l'instant t .

Considérons alors l'état du dispositif à l'instant t : $E(x,t), n(x,t), p(x,t)$ sont connus. Supposons qu'à l'instant $t+\Delta t$ ($\Delta t > 0$) nous connaissons la répartition des porteurs : $n(x,t+\Delta t), p(x,t+\Delta t)$ (une répartition approchée est donnée précisément par celle à l'instant t). Alors l'équation :

$$\frac{\partial E}{\partial t} = J(t) - \frac{1}{a} \frac{\partial n}{\partial x} + \frac{1}{b} \frac{\partial p}{\partial x} - \left(\frac{n}{a} + \frac{p}{b}\right)E$$

nous donne la valeur du champ à l'instant $t+\Delta t$ (voir chapitre III).

Considérons maintenant les deux équations de transport ($T^*.1$) et ($T^*.2$). Pour simplifier le raisonnement nous supposons que le terme de recombinaison est donné sous la forme $R(x,t)$ (en fait, dans la pratique, elle est donnée sous la forme $R(n(x,t), p(x,t))$, mais, nous verrons plus loin comment on peut tourner la difficulté). Nous supposons que le champ est connu à l'instant $t+\Delta t$. ($T^*.1$) et ($T^*.2$) sont non-linéaires. On peut les résoudre de deux manières :

- linéariser les termes non linéaires du second membre et pour cela on remplace les seconds membres par des expressions approchées : on écrira :

$$(p-n)n \approx \frac{1}{2} [p(x,t)-n(x,t)]n(x,t+\Delta t) + \frac{1}{2} [p(x,t+\Delta t)-n(x,t+\Delta t)]n(x,t)$$

$$(p-n)p \approx \frac{1}{2} [p(x,t)-n(x,t)]p(x,t+\Delta t) + \frac{1}{2} [p(x,t+\Delta t)-n(x,t+\Delta t)]p(x,t)$$

(T^{*}.1) et (T^{*}.2) deviennent ainsi deux équations paraboliques linéaires dont la résolution pratique est classique. L'avantage de cette méthode est qu'elle est directe (i.e pas d'itération), mais les inconvénients sont nombreux : elle nous oblige à chercher p et n simultanément (numériquement, la matrice du système après discrétisation est un système tridiagonal par bloc). D'autre part, ce sera un système linéaire dont les inconnus auront des ordres de grandeur très différents. Dans la pratique, la résolution demande beaucoup de temps et donne peu de précision (vu l'ordre de grandeur de p et n).

- par approximations successives (méthode itérative)

Désignons par i le rang de l'itération et posons :

$$\delta n^{i+1} = n^{i+1} - n^i$$

$$\delta p^{i+1} = p^{i+1} - p^i$$

A la (i+1)^{ème} itération on doit résoudre :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\delta n^{i+1}}{\delta t} = \frac{1}{a} \left[\frac{\delta^2 n^{i+1}}{\delta x^2} + \left(E - \frac{1}{a} \frac{\delta a}{\delta x} \right) \frac{\delta n^{i+1}}{\delta x} + (p^{i+1} - n^{i+1} - \text{DOP} - \frac{E}{a} \frac{\delta a}{\delta x}) n^{i+1} \right] - R \\ \frac{\delta p^{i+1}}{\delta t} = \frac{1}{b} \left[\frac{\delta^2 p^{i+1}}{\delta x^2} - \left(E + \frac{1}{b} \frac{\delta b}{\delta x} \right) \frac{\delta p^{i+1}}{\delta x} - (p^{i+1} - n^{i+1} + \text{DOP} - \frac{E}{b} \frac{\delta b}{\delta x}) p^{i+1} \right] - R \end{array} \right.$$

Remplaçons, dans le second membre, n^{i+1} et p^{i+1} par leur valeur et en utilisant la linéarité de la dérivation :

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial n^{i+1}}{\partial t} &= \frac{1}{a} \left[\frac{\partial^2 n^i}{\partial x^2} + (E - \frac{1}{a} \frac{\partial a}{\partial x}) \frac{\partial n^i}{\partial x} + \frac{\partial^2 \delta n^{i+1}}{\partial x^2} + (E - \frac{1}{a} \frac{\partial a}{\partial x}) \frac{\partial \delta n^{i+1}}{\partial x} \right. \\ &\quad \left. + (p^i - n^i + \text{DOP} - \frac{E}{a} \frac{\partial a}{\partial x})(n^i + \delta n^{i+1}) + (\delta p^{i+1} - \delta n^{i+1})(n^i + \delta n^{i+1}) \right] - R \\ \\ \frac{\partial p^{i+1}}{\partial t} &= \frac{1}{b} \left[\frac{\partial^2 p^i}{\partial x^2} - (E + \frac{1}{b} \frac{\partial b}{\partial x}) \frac{\partial p^i}{\partial x} + \frac{\partial^2 \delta p^{i+1}}{\partial x^2} - (E + \frac{1}{b} \frac{\partial b}{\partial x}) \frac{\partial \delta p^{i+1}}{\partial x} \right. \\ &\quad \left. - (p^i - n^i + \text{DOP} - \frac{E}{b} \frac{\partial b}{\partial x})(p^i + \delta p^{i+1}) - (\delta p^{i+1} - \delta n^{i+1})(p^i + \delta p^{i+1}) \right] - R. \end{aligned} \right.$$

Nous ne nous occupons pas pour le moment de calculer les premiers membres (voir Chapitre III). Nous faisons remarquer simplement qu'ils sont linéaires et par conséquent, quel que soit la méthode d'approximation, ils s'exprimeront linéairement en fonction de n^i , δn^{i+1} et de p^i , δp^{i+1} respectivement.

Par contre, dans les seconds membres, nous avons des termes non linéaires.

Nous les linéarisons en négligeant les termes de degré 2 en δn^{i+1} et δp^{i+1} .

Ce qui nous donne :

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial n^{i+1}}{\partial t} &= \frac{1}{a} \left[\frac{\partial^2 \delta n^{i+1}}{\partial x^2} + (E - \frac{1}{a} \frac{\partial a}{\partial x}) \frac{\partial \delta n^{i+1}}{\partial x} + (p^i - 2n^i + \text{DOP} - \frac{E}{a} \frac{\partial a}{\partial x}) \delta n^{i+1} \right] + \frac{n^i}{a} \delta p^{i+1} + A_n^i \\ \\ \frac{\partial p^{i+1}}{\partial t} &= \frac{1}{b} \left[\frac{\partial^2 \delta p^{i+1}}{\partial x^2} - (E + \frac{1}{b} \frac{\partial b}{\partial x}) \frac{\partial \delta p^{i+1}}{\partial x} - (2p^i - n^i + \text{DOP} - \frac{E}{b} \frac{\partial b}{\partial x}) \delta p^{i+1} \right] + \frac{p^i}{b} \delta n^{i+1} + B_n^i \end{aligned} \right.$$

avec :

$$A_n^i = \frac{1}{a} \left[\frac{\partial^2 n^i}{\partial x^2} + (E - \frac{1}{a} \frac{\partial a}{\partial x}) \frac{\partial n^i}{\partial x} + (p^i - n^i + \text{DOP} - \frac{E}{a} \frac{\partial a}{\partial x}) n^i \right] - R$$

$$A_p^i = \frac{1}{b} \left[\frac{\partial^2 p^i}{\partial x^2} - (E + \frac{1}{b} \frac{\partial b}{\partial x}) \frac{\partial p^i}{\partial x} - (p^i - n^i + \text{DOP} - \frac{E}{b} \frac{\partial b}{\partial x}) p^i \right] - R$$

on obtient ainsi un système linéaire en δn^{i+1} et δp^{i+1} . Nous donnons au Chapitre III une méthode numérique de résolution de tel système (dit parabolique). Il nous reste à préciser les premières approximations pour démarrer le cycle d'itération. Comme nous avons fait remarquer que les porteurs ne bougent pas instantanément, on peut prendre, à l'instant $t+\Delta t$:

$$n^0(x, t+\Delta t) = n(x, t)$$

$$p^0(x, t+\Delta t) = p(x, t).$$

Cette méthode offre l'avantage suivant : nous avons à résoudre un système linéaire dont les inconnues (δn , δp) ont des ordres de grandeur très acceptables, d'ailleurs, il est à prévoir que la variation de ces quantités (suivant x) est assez régulière (comparativement à celle des porteurs n et p). D'autre part, pour t assez grand, l'approximation précédente est très bonne (dont la convergence est rapide). Mais, quel qu'en soit l'avantage, cette méthode n'est applicable que si elle assure la convergence. Nos essais numériques confirment l'efficacité de cette méthode.

Nous résumons la méthode exposée ci-dessus par l'algorithme suivant :

ALGORITHME J (J est donné)

1. Approximation de $n(x, t+\Delta t)$ et $p(x, t+\Delta t)$ par $n(x, t)$ et $p(x, t)$ respectivement.
2. Calcul du champ électrique : résolution de (T*.3)
3. Avec ce champ, on résout (T*.1) et (T*.2) par approximations successives.
4. Retour en 2. avec les nouvelles expressions approchées des porteurs tant que la convergence globale (de E , n , p) n'est pas encore atteinte.

L'algorithme s'arrête quand $t = t_0$ (t_0 donné à l'avance).

Remarque :

Nous avons supposé que le terme de recombinaison s'écrit sous la forme $R(x,t)$. En réalité, il est donné sous la forme $R(n,p)$ (loi linéaire, ou loi de Shockley-Read-Hall). Même dans ce cas, l'algorithme donné est applicable. Pour cela, il suffit dans la première boucle d'itération, d'employer un modèle "sans recombinaison" ($R \equiv 0$). Ensuite, dans la $i^{\text{ème}}$ boucle d'itération, on prendra la recombinaison comme étant égal à $R(n^{i-1}, p^{i-1})$.

2.3.b. - VA(t) donné : méthode numérique et algorithme

Il s'agit de résoudre le système (T^*), assujetti à la condition (C), avec les mêmes conditions initiales et aux limites que dans 2.3.a. Suivant le circuit extérieur nous distinguons deux cas :

1^{er} cas $\lambda \neq 0$ (circuit extérieur comportant une résistance).

Dans ce cas, on peut écrire, d'après (C) :

$$J(t) = \frac{1}{\lambda} \left[VA(t) - \int_0^L E(x,t) dx - \phi \right]. \quad (C^*)$$

Supposons qu'à l'instant $t+\Delta t$, nous connaissons une valeur approchée du courant total J (par exemple, celle prise par J à l'instant t). Alors, l'algorithme J nous donne l'expression du champ électrique et des porteurs à l'instant $t+\Delta t$. Alors, de deux choses l'une : ou bien la condition (C) est vérifiée ou bien elle ne l'est pas. Si (C) est vérifiée la valeur approchée $J(t+\Delta t)$ donnée est une bonne approximation (dans un sens que nous devons préciser, voir Chapitre IV) et l'algorithme est terminé. Dans le cas contraire, on peut "améliorer" $J(t+\Delta t)$ en prenant, d'après (C^*) :

$$J(t+\Delta t) = \frac{1}{\lambda} \left[VA(t+\Delta t) - \int_0^L E(x,t+\Delta t) dx - \phi \right]$$

et on recommence.

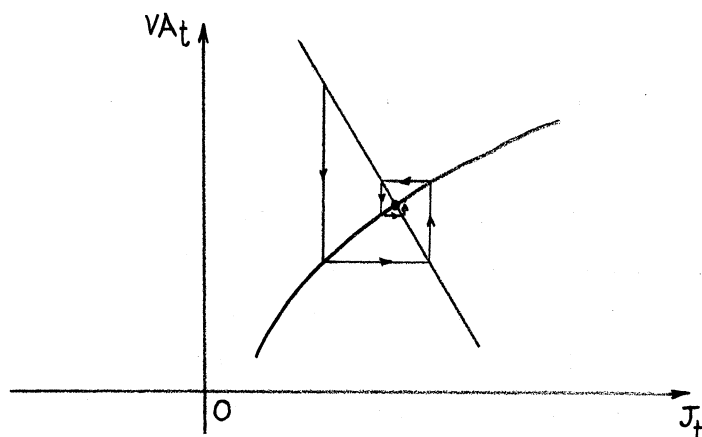
Ainsi, nous avons deux boucles d'itération :

- la grande boucle : itération sur J , en employant (C^*)
- la petite boucle : pour chaque valeur itérée de J , on applique l'algorithme J .

La méthode n'est applicable que s'il y a convergence de la grande boucle d'itération. Or cette itération n'est autre que la recherche de la racine du système d'équation :

$$\begin{cases} J = f(VA) & \text{(la "caractéristique" à l'instant } t) \\ J = \frac{1}{\lambda} \left[VA - \int_0^L E \, dx - \phi \right] \end{cases}$$

et cela, à l'instant t . On peut schématiser cette itération par le graphe suivant :



La convergence de cette itération, très classique, dépend de la forme caractéristique $J = f(VA)$, de la position relative de deux courbes, et de la valeur initiale de J . Dans les applications pratiques, nous observons toujours une convergence assez rapide.

Nous donnons donc l'algorithme suivant :

ALGORITHME V ($V(t)$ est donné)

1. Approximation de $J(t+\Delta t)$
2. Algorithme J
3. Si (C) n'est pas vérifié, on améliore J par (C^*) et on revient en 2.
Dans le cas contraire, on revient en 1. tant que $t \leq t_0$ (t_0 donné à l'avance).

Remarques

1. Apparemment, l'algorithme V semble être très coûteux à cause de deux boucles d'itération. D'ailleurs, théoriquement, on peut supprimer l'itération portant sur J. En effet, portons le second membre de (C^*) dans $(T^{*}.3)$:

$$\frac{\partial E}{\partial t} = -\frac{1}{\lambda} \int_0^L E(x,t) dx - \left(\frac{n}{a} + \frac{p}{b}\right) E - \frac{1}{a} \frac{\partial n}{\partial x} + \frac{1}{b} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\lambda} (VA(t) - \phi)$$

on pourrait alors employer l'algorithme J en calculant le champ électrique par cette équation (au lieu de $(T^{*}.3)$). Or l'équation précédente est une équation intégral-différentielle linéaire dont une méthode classique de résolution numérique est précisément itérative. Or la vitesse de convergence de cette méthode est conditionnée par le facteur $\frac{\Delta t}{\lambda}$ (supposé $< \frac{1}{L}$, voir Chapitre III). Comme λ était fixé, pour avoir une convergence rapide, il suffirait de choisir Δt assez petit. Mais alors, pour connaître l'état physique du dispositif semi-conducteur à un instant t assez grand, on doit "avancer" très lentement. Or nous verrons au chapitre III que précisément l'algorithme V peut être utilisé même pour des pas Δt assez grand. D'ailleurs, des essais numériques ont montré la "lenteur" de l'équation intégral-différentielle précédente. Aussi, préférons-nous conserver l'algorithme V.

2. La même remarque concernant la forme de R (remarque de 2.3.a.) est valable ici :

2ème cas $\lambda = 0$ (circuit extérieur sans résistance).

Dans ce cas (C) s'écrit :

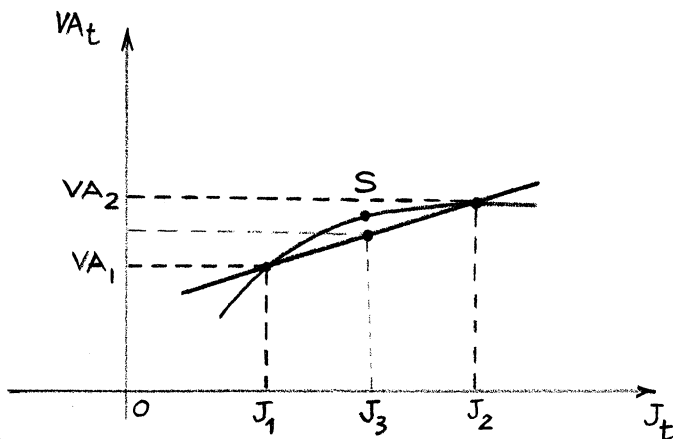
$$\int_0^L E(x,t) dx = VA(t) - \phi \quad (C^{**})$$

Il nous manque donc une relation explicite entre J et VA, donc, en principe, nous ne pouvons plus itérer J suivant (C^*) . Mais, on peut chercher à vérifier (C^{**}) par tâtonnement. On procède de la manière suivante :

$J = J_1 \rightarrow$ algorithme $J \rightarrow VA = VA_1$ (par (C^{**}))

$J = J_2 \rightarrow$ algorithme $J \rightarrow VA = VA_2$

Considérons alors le plan (V, J) où S est le point du "caractéristique" (à l'instant t) tel que (C^{**}) est vérifié.



On peut espérer que J_3 sera meilleur que J_1 et J_2 . Bien sûr, le cas de la figure est idéal, mais des considérations physiques (tels les modèles simplifiés) permettent de localiser assez bien S.

D'ailleurs, quand nous disposons de plus de deux couples (V, J) nous pouvons employer des méthodes d'interpolation plus élaborées. Le cas que nous montrons correspond à une interpolation linéaire du caractèreistique. Ainsi, avec la remarque précédente, nous pouvons employer l'algorithme V avec comme modification : au lieu d'une itération suivant (C^*) , on cherche à satisfaire (C^{**}) par tâtonnement.

L'algorithme V s'applique entièrement dans ce cas aux remarques précédentes près.

Remarques :

1. A priori, il n'y a pas lieu de distinguer les deux cas $\lambda \neq 0$ et $\lambda = 0$ car ce que nous avons dit dans le deuxième cas ($\lambda=0$) s'appliquerait aussi au premier cas ($\lambda \neq 0$). Mais nous tenons à le faire pour plus de clarté. En effet, la condition (C^*) nous permet d'améliorer J à chaque itération et cela sans tâtonnement. Cette condition fait défaut par contre dans le deuxième cas.

2. Dans l'algorithme (V), la première étape consiste à prendre une approximation de J à l'instant $t+\Delta t$. Nous pouvons prendre très simplement :

$$J_0(t+\Delta t) = J(t). \quad (t > 0)$$

Un autre moyen de choisir $J_0(t+\Delta t)$ consiste à utiliser l'interpolation (linéaire ou autres) à partir des valeurs de J aux deux (ou plusieurs) instants précédents (voir la figure du 2ème cas).

CHAPITRE - III

METHODES NUMERIQUES

=====

1. Equations paraboliques du second ordre
2. Méthode de variables discrètes de résolution
3. Application de ces méthodes
4. Précision de la méthode. Choix de Δt .

METHODES NUMERIQUES

Dans le deuxième chapitre, nous avons exposé les méthodes d'intégration du système (T^*) lié au régime dépendant du temps d'une jonction. Nous arrivons ainsi, aussi bien dans l'algorithme J que V, à l'intégration de deux équations paraboliques du second ordre non linéaires (équation de transport des porteurs) et une équation linéaire du 1^{er} ordre pour le champ électrique. Mais, l'essentiel est de savoir résoudre ces équations numériquement. C'est ce que nous allons expliquer dans la suite.

1. - EQUATIONS PARABOLIQUES DU SECOND ORDRE (voir [6], [7])

Généralement, en physique, les équations paraboliques servent à décrire l'évolution d'un phénomène dans le futur. L'équation la plus simple est certainement l'équation de la chaleur :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

On les rencontre souvent dans l'étude des phénomènes irréversibles et ainsi, elles ne permettent pas de décrire le passé du phénomène mais seulement son évolution future.

Leur forme peut être :

- linéaire : par exemple

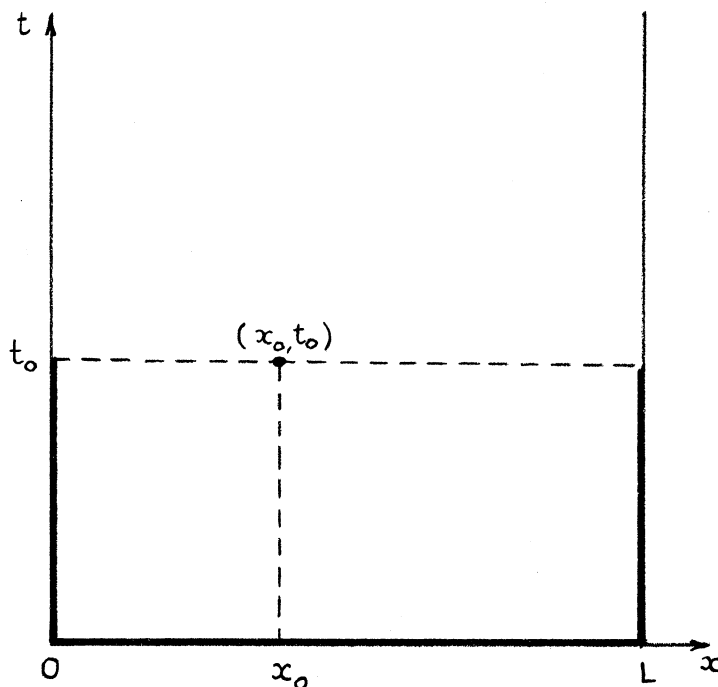
$$\frac{\partial u}{\partial t} = a(x,t) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b(x,t) \frac{\partial u}{\partial x} + c(x,t)u + d(x,t)$$

- non linéaire : par exemple

$$\frac{\partial u}{\partial t} = F(x, t, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial^2 u}{\partial x^2})$$

Une notion très importante attachée aux équations aux dérivées partielles c'est la notion du domaine de dépendance. Pour une équation parabolique, elle s'exprime de la manière suivante :

Considérons un problème mixte (i.e avec condition initiale et aux limites). Le domaine d'intégration est la demi-bande $\{0 \leq x \leq L ; t \geq 0\}$. On démontre que la solution en un point (x_0, t_0) dépend de la condition initiale (sur tout le fond de la bande) et des conditions aux limites correspondant à $t \leq t_0$. La ligne renforcée de la figure s'appelle le "domaine" de dépendance du point (x_0, t_0) (il vaut mieux dire "l'intervalle" de dépendance). Cette particularité se fera sentir dans les méthodes numériques.



2. - METHODES DE VARIABLES DISCRETES DE RESOLUTION D'EQUATIONS PARABOLIQUES

Dans ce paragraphe nous reconsidérons que les équations paraboliques linéaires du second ordre. C'est le cas où des conclusions rigoureuses peuvent être données. Dans la pratique, nous extrapolons ces conclusions aux équations non linéaires car on ne connaît pas grand chose en ce qui concerne ces dernières.

2.1. - Equations aux différences

Soit l'équation :

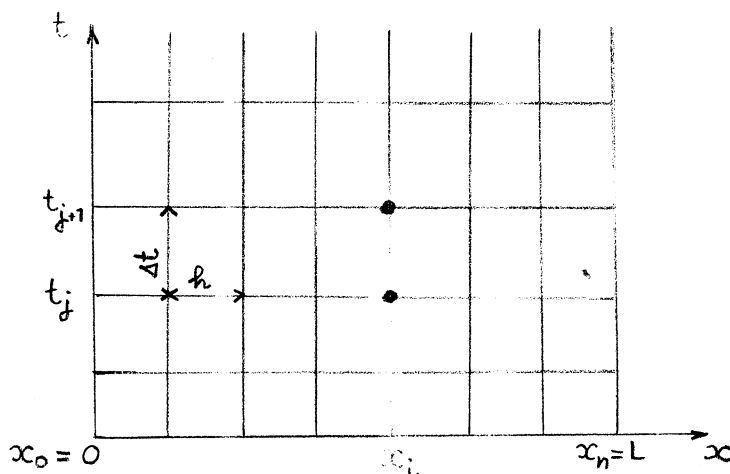
$$(1) \quad L(u) \equiv \frac{\partial u}{\partial t} - a(x,t) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 2b(x,t) \frac{\partial u}{\partial x} - c(x,t)u = d(x,t)$$

(avec $a(x,t) > 0$)

(à comparer avec les deux équations $(T^{*}.1)$ et $(T^{*}.2)$ linéarisées), avec les conditions :

$$(2) \quad \begin{cases} u(x,0) = f(x) & 0 \leq x \leq L \\ u(0,t) = g_0(t) & t > 0 \\ u(L,t) = g_1(t) \end{cases}$$

Pour résoudre (1), on place sur la demi-bande une grille :



Pour simplifier, on suppose que $(0,L)$ est divisé en intervalles réguliers.

On pose :

$$x_{i+1} - x_i = h$$

$$t_{j+1} - t_j = \Delta t.$$

En chaque point (x_i, t_j) du réseau nous cherchons une quantité $v(x_i, t_j)$, valeur approchée de la solution $u(x_i, t_j)$ de (1) et (2). Posons :

$$u(x_i, t_j) = u_{ij}$$

$$v(x_i, t_j) = v_{ij}$$

Considérons le point $(x_i, t_j + \theta \Delta t)$ où $0 \leq \theta \leq 1$. Puisque v_{ij} approche u_{ij} nous pouvons approcher les dérivées de u par les différences de v :

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t_j + \theta k) \approx \frac{1}{2h} (v_{i+1, j+\theta} - v_{i-1, j+\theta})$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_j + \theta k) \approx \frac{1}{h^2} (v_{i+1, j+\theta} - 2v_{i, j+\theta} + v_{i-1, j+\theta})$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_j + \theta k) \approx \frac{1}{\Delta t} (v_{i, j+1} - v_{i, j})$$

où nous avons posé :

$$v_{i, j+\theta} = v(x_i, t_j + \theta \Delta t) = \theta v_{i, j+1} + (1-\theta) v_{i, j}$$

Nous appellerons

$$r = \frac{\Delta t}{h^2}$$

le rapport de maille.

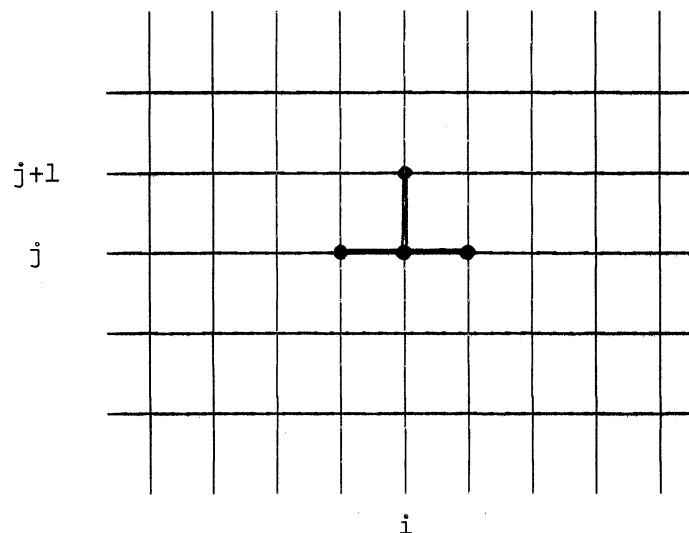
A l'aide des formules précédentes nous transformons (1) en équation aux différences :

$$(2) \quad \Delta t L_{h, \Delta t}(v_{i,j+\theta}) \equiv v_{i,j+1} - v_{i,j} - r a_{i,j+\theta} (v_{i+1,j+\theta} - 2v_{i,j+\theta} + v_{i-1,j+\theta}) \\ - r h b_{i,j+\theta} (v_{i+1,j+\theta} - v_{i-1,j+\theta}) - \Delta t c_{i,j+\theta} v_{i,j+\theta} = \Delta t d_{i,j+\theta}$$

Enfin, nous remplaçons les valeurs initiales et aux limites de v par celles de u .
On distinguera les cas suivants :

1. $\theta = 0$

L'équation (3) est dite explicite car, elle permet de résoudre $v_{i,j+1}$ explicitement en fonction de $v_{i+1,j}$ (à bien remarquer cette dépendance). On peut dire que dans ce cas on a utilisé pour chaque point $(i,j+1)$ la portion suivante de la grille :



2. $\theta \neq 0$

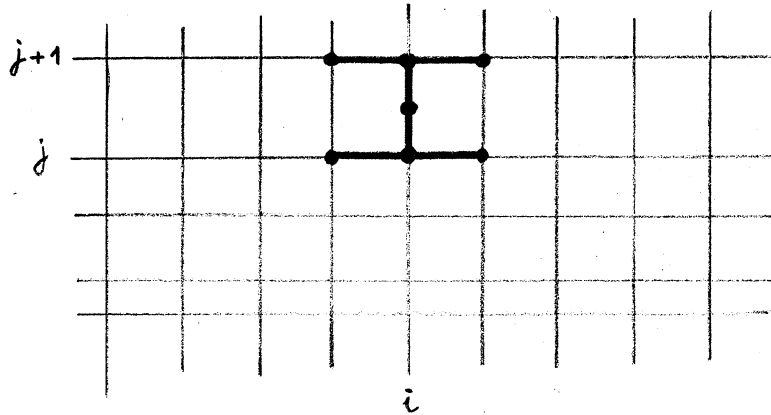
L'équation (3) est dite implicite car on ne peut plus en tirer $v_{i,j+1}$ sans connaître les valeurs voisines $v_{i^*,j+1}$ ($i^* \neq i$, $i^* \in [0, N]$). En effet, (2) s'écrit dans ce cas (après interpolation)

$$\alpha_i v_{i-1,j+1} + \beta_i v_{i,j+1} + \gamma_i v_{i+1,j+1} = \delta_{ij}$$

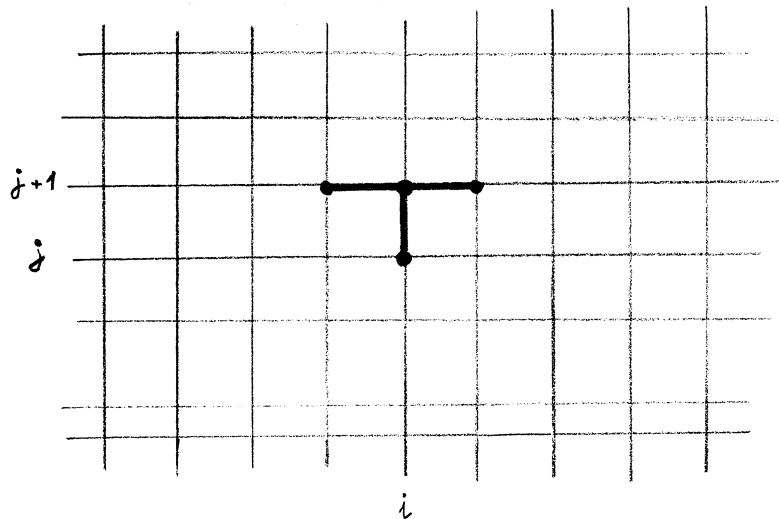
où δ_{ij} dépend de la j^{e} ligne.

Lorsque $\theta = \frac{1}{2}$ on dit aussi que c'est une méthode de Crank-Nicolson.

Pour chaque point, la portion de la grille utilisée est la suivante :



Lorsque $\theta = 1$, la méthode est dite purement implicite. On a la figure suivante :



Nous remarquons que dans ce dernier cas, la valeur de v en un point $(i, j+1)$ dépend de la totalité de celles de la j^{e} ligne (donc de la ligne $t = 0$ et des valeurs limites). Autrement dit u_{ij} et v_{ij} ont le même domaine de dépendance.

2.2. - Convergence - Stabilité

Les équations aux différences sont dites convergentes si leur solution satisfait à :

$$\lim_{h, \Delta t \rightarrow 0} |u_{i,j} - v_{ij}| = 0.$$

La convergence assure que la solution numérique est, pour des dimensions de maille assez petites, suffisamment proche de la solution exacte de l'équation différentielle. On appelle

$$\varepsilon = u - v$$

l'erreur de discrétisation.

La stabilité est une propriété délicate liée aux équations aux différences. Intuitivement, on dit que les équations aux différences sont stables si de petites erreurs introduites au début et au cours du calcul (par exemple, erreur sur l'évaluation des conditions initiales et aux limites, erreur d'arrondi etc...) restent limitées dans la suite.

On démontre (voir [10]) qu'une condition suffisante de convergence et de stabilité des équations aux différences exposées en 2.1 s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} 1+\theta\Delta t \, c(x,t) > 0 \\ a(x,t)-h|b(x,t)| \geq 0 \\ 1-(1-\theta) [2ra(x,t)+\Delta tc(x,t)] \geq 0 \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{(CS.1)} \\ \text{(CS.2)} \\ \text{(CS.3)} \end{array}$$

Et dans ce cas on a :

$$\begin{array}{ll} \theta = 0 & |\varepsilon| \leq O(h^2) \\ \theta = \frac{1}{2} & |\varepsilon| \leq O(h^2)+O((\Delta t)^2) \\ \theta = 1 & |\varepsilon| \leq O(h^2)+O(\Delta t) \end{array}$$

Dans les problèmes pratiques, (CS.1) et (CS.2) sont assez faciles à satisfaire. Par contre (CS.3) nous impose une condition sur le rapport de maille r :

Si $\theta = 1$, (CS.3) est trivialement satisfait, on dit que les équations aux différences sont inconditionnellement stable

Si $\theta \neq 1$, on doit avoir :

$$\Delta t \leq \frac{h^2}{2(1-\theta)a(x,t)+h^2c}$$

Remarques

1. On peut justifier intuitivement (CS.3) en considérant les domaines de dépendance de l'équation différentielle (1) et de l'équation aux différences (2). En effet, comme nous l'avons remarqué pour $\theta = 1$ ces deux domaines sont identiques. Dans les autres cas, ce n'est pas le cas, d'où la condition sur Δt .

2. Il ne faut pas croire que, pour $\theta = 1$, on peut prendre Δt aussi grand que l'on veut.

3. - APPLICATION DES METHODES DE VARIABLES DISCRETES

3.1. - Choix de θ

Pour simplifier l'écriture et le raisonnement, nous considérons un modèle "sans recombinaison" où $a(x,t)$ et $b(x,t)$ (à ne pas confondre avec les mêmes notations de l'équation différentielle (1), il s'agit ici de l'inverse de la diffusion), sont indépendantes de t et constantes par morceaux en x . Les remarques du Chapitre II justifient l'hypothèse du modèle "sans recombinaison" (voir aussi 3.3.c plus loin). Dans ce cas (T^*) s'écrit :

$$(T^*) \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{a} \left[\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + E \frac{\partial n}{\partial x} + (p-n+DOP)n \right] \quad (T^{*.1}) \\ \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{b} \left[\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - E \frac{\partial p}{\partial x} - (p-n+DOP)p \right] \quad (T^{*.2}) \\ \frac{\partial E}{\partial t} = J(t) - \frac{1}{a} \frac{\partial n}{\partial x} + \frac{1}{b} \frac{\partial p}{\partial x} - \left(\frac{n}{a} + \frac{p}{b} \right) E \quad (T^{*.3}) \end{array} \right.$$

Nous avons discuté au Chapitre II comment on peut résoudre théoriquement ($T^{*.1}$) et ($T^{*.2}$) par approximations successives. On arrive ainsi aux deux équations :

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} &= \frac{1}{a} \left[\frac{\partial^2 \delta n}{\partial x^2} + E \frac{\partial \delta n}{\partial x} + (p-2n+DOP)\delta_n \right] + \frac{n}{a} \delta_p + A_n \\ \frac{\partial p}{\partial t} &= \frac{1}{b} \left[\frac{\partial^2 \delta p}{\partial x^2} - E \frac{\partial \delta p}{\partial x} - (2p-n+DOP)\delta_p \right] + \frac{p}{b} \delta_n + A_p \end{aligned}$$

qu'on doit résoudre à chaque itération.

Ces deux dernières équations sont paraboliques linéaires. Alors, on peut appliquer les méthodes de résolution numérique exposées en 2. Mais, qu'elle est la valeur de θ que nous allons prendre ?

Si on prenait $\theta \neq 1$, on devrait avoir, pour tout (x,t)

$$\Delta t \leq \frac{h^2 d}{2(1-\theta) + h^2 \alpha(x,t)}$$

où :

$$d = \min(a,b)$$

$$\alpha = \min(\inf_{x,t} (p-2n+\text{DOP}), \inf_{x,t} (2p-n+\text{DOP})).$$

Ce qui donne, dans le cas du Germanium, pour un pas h de l'ordre de 10^{-3} :

$$\Delta t \leq \frac{10^{-7}}{1-\theta} \neq \frac{10^{-16}}{1-\theta} \text{ sec.}$$

Par conséquent, le pas Δt est très faible et on devrait faire plusieurs pas d'intégration pour connaître l'état du système physique à un instant t donné.

En conclusion, dans toute la suite, nous prenons

$$\theta = 1$$

dans les équations aux différences (méthode implicite pure).

Ceci étant, il ressort des discussions en 2. que, compte tenu des conditions aux limites, la solution au niveau $t+\Delta t$ est parfaitement déterminée dès que celle au niveau t est connue. En quelque sorte, l'intégration se fait pas à pas dans la direction t . Comme nous connaissons l'état initial, nous pouvons déterminer l'état physique du dispositif à n'importe quel instant de la grille.

Par conséquent, dans la suite on suppose que les quantités E , n , p sont connues au niveau $t = t_j$. Il s'agit de les déterminer au niveau $t_{j+1} = t_j + \Delta t$.

3.2. - Notations

Nous désignons par :

i : indice en abscisse (x)

j : indice en ordonnée (t)

k : le rang de l'itération

$$\delta n^{k+1} = n^{k+1} - n^k$$

$$\delta p^{k+1} = p^{k+1} - p^k$$

(Nous changeons ici de notation pour plus de facilité d'écriture). En outre, à la $k^{\text{ème}}$ itération, la valeur des inconnues en un point (x_i, t_j) s'écrit :

$$E^k(x_i, t_j) = E_{i,j}^k$$

$$n^k(x_i, t_j) = n_{i,j}^k$$

$$p^k(x_i, t_j) = p_{i,j}^k$$

Les quantités non k -indicées ($E_{i,j}$, $n_{i,j}$, $p_{i,j}$) représentent les valeurs "exactes" (c'est-à-dire, en principe, pour k assez grand).

3.3. - Calcul de E , n , p suivant l'algorithme J (Chapitre II)

A la $(k+1)^{\text{ème}}$ itération on a :

3.3.a. - Calcul de E

(T*.3) est remplacé par l'équation aux différences (méthode implicite pure) :

$$\begin{aligned} \frac{E_{i,j+1}^{k+1} - E_{i,j}^k}{\Delta t} = & J_{j+1}^k - \frac{1}{a} \frac{n_{i+1,j+1}^k - n_{i-1,j+1}^k}{2h} + \frac{1}{b} \frac{p_{i+1,j+1}^k - p_{i-1,j+1}^k}{2h} \\ & - \left(\frac{n_{i,j+1}^k}{a} + \frac{p_{i,j+1}^k}{b} \right) E_{i,j+1}^{k+1} \end{aligned}$$

on en tire :

$$E_{i,j+1}^{k+1} = \frac{E_{i,j}^k + \frac{\Delta t}{2h} \left[2hJ_{j+1}^k - \frac{1}{a}(n_{i+1,j+1}^k - n_{i-1,j+1}^k) + \frac{1}{b}(p_{i+1,j+1}^k - p_{i-1,j+1}^k) \right]}{1 + \Delta t \left(\frac{n_{i,j+1}^k}{a} + \frac{p_{i,j+1}^k}{b} \right)}$$

Dans la suite, nous représentons cette équation par :

$$E_{.,j+1}^{k+1} = F(E_{.,j}^k, n_{.,j+1}^k, p_{.,j+1}^k)$$

où . parcourt l'ensemble $\{0, 1, \dots, N\}$.

3.3.b. - Calcul de n et p

Il s'agit de résoudre, à la $(k+1)^{\text{ème}}$ itération le système :

$$\begin{cases} \frac{\partial n^{k+1}}{\partial t} = \frac{1}{a} \left[\frac{\partial^2 \delta n^{k+1}}{\partial x^2} + E \frac{\partial \delta n^{k+1}}{\partial x} + (p^k - 2n^k + \text{DOP}) \delta n^{k+1} \right] + \frac{n^k}{a} \delta p^{k+1} + A_n^k \\ \frac{\partial p^{k+1}}{\partial t} = \frac{1}{b} \left[\frac{\partial^2 \delta p^{k+1}}{\partial x^2} - E \frac{\partial \delta p^{k+1}}{\partial x} - (2p^k - n^k + \text{DOP}) \delta p^{k+1} \right] + \frac{p^k}{b} \delta n^{k+1} + A_p^k \end{cases}$$

avec :

$$A_n^k = \frac{1}{a} \left[\frac{\partial^2 n^k}{\partial x^2} + E \frac{\partial n^k}{\partial x} + (p^k - n^k + \text{DOP}) n^k \right]$$

$$A_p^k = \frac{1}{b} \left[\frac{\partial^2 p^k}{\partial x^2} - E \frac{\partial p^k}{\partial x} - (p^k - n^k + \text{DOP}) p^k \right]$$

En employant la méthode implicite pure, on a le système d'équations aux différences :

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{n_{i,j+1}^{k+1} - n_{i,j}^{k+1}}{\Delta t} &= \frac{1}{a} \left[\frac{\delta n_{i+1,j+1}^{k+1} - 2\delta n_{i,j+1}^{k+1} + \delta n_{i-1,j+1}^{k+1}}{h^2} + E_{i,j+1}^{k+1} \frac{\delta n_{i+1,j+1}^{k+1} - \delta n_{i-1,j+1}^{k+1}}{2h} \right. \\ &\quad \left. + (p_{i,j+1}^k - 2n_{i,j+1}^k + \text{DOP}_i) \delta n_{i,j+1}^{k+1} \right] + \frac{n_{i,j+1}^k}{a} \delta p_{i,j+1}^{k+1} + (A_n)_i^k \\ \frac{p_{i,j+1}^{k+1} - p_{i,j}^{k+1}}{\Delta t} &= \frac{1}{b} \left[\frac{\delta p_{i+1,j+1}^{k+1} - 2\delta p_{i,j+1}^{k+1} + \delta p_{i-1,j+1}^{k+1}}{h^2} - E_{i,j+1}^{k+1} \frac{\delta p_{i+1,j+1}^{k+1} - \delta p_{i-1,j+1}^{k+1}}{2h} \right. \\ &\quad \left. - (2p_{i,j+1}^k - n_{i,j+1}^k + \text{DOP}_i) \delta p_{i,j+1}^{k+1} \right] + \frac{p_{i,j+1}^k}{b} \delta n_{i,j+1}^{k+1} + (A_p)_i^k \\ &\quad (i = 1, 2, \dots, N-1) \end{aligned} \right.$$

Les $(A_n)_i^k$ et $(A_p)_i^k$ peuvent se calculer en utilisant des schémas aux différences finies quelconques (par exemple, pour les dérivées secondes, on peut employer des formules à cinq points du type :

$$y_i'' = \frac{1}{12h^2} [-y_{i-2} + 16y_{i-1} - 30y_i + 16y_{i+1} - y_{i+2}] + O(h^4)$$

Nous employons les mêmes schémas exposés en 2.1. (i.e formules symétriques à 3 points et à deux points).

Finalement, en remarquant que :

$$n_{i,j+1}^{k+1} = n_{i,j+1}^k + \delta n_{i,j+1}^{k+1}$$

$$p_{i,j+1}^{k+1} = p_{i,j+1}^k + \delta p_{i,j+1}^{k+1}$$

on a :

$$\left\{ \begin{aligned} & \left(\frac{2}{h} - E_{i,j+1}^{k+1} \right) \delta n_{i-1,j+1}^{k+1} - 2 \left[\frac{2}{h} + a \frac{h}{\Delta t} - h(p_{i,j+1}^k - 2n_{i,j+1}^k + \text{DOP}_i) \right] \delta n_{i,j+1}^{k+1} \\ & + 2hn_{i,j+1}^k \delta p_{i,j+1}^{k+1} + \left(\frac{2}{h} + E_{i,j+1}^{k+1} \right) \delta n_{i+1,j+1}^{k+1} \\ & = -2ah \left[(A_n)_{i,j+1}^k + \frac{1}{\Delta t} (n_{i,j+1}^k - n_{i,j}^k) \right] \end{aligned} \right. \quad (4)$$

$$\left\{ \begin{aligned} & \left(\frac{2}{h} + E_{i,j+1}^{k+1} \right) \delta p_{i-1,j+1}^{k+1} - 2 \left[\frac{2}{h} + b \frac{h}{\Delta t} + h(2p_{i,j+1}^k - n_{i,j+1}^k + \text{DOP}_i) \right] \delta p_{i,j+1}^{k+1} \\ & + 2hp_{i,j+1}^k \delta n_{i,j+1}^{k+1} + \left(\frac{2}{h} - E_{i,j+1}^{k+1} \right) \delta p_{i+1,j+1}^{k+1} \\ & = -2bh \left[(A_p)_{i,j+1}^k + \frac{1}{\Delta t} (p_{i,j+1}^k - p_{i,j}^k) \right] \end{aligned} \right. \quad (5)$$

En faisant abstraction du niveau $j+1$, on pose :

$$\Delta_i^{k+1} = \begin{bmatrix} \delta n_i^{k+1} \\ \delta p_i^{k+1} \end{bmatrix}$$

$$D_i^{k+1} = \begin{bmatrix} -2 \left[\frac{2}{h} + a \frac{h}{\Delta t} - h(p_i^k - 2n_i^k + \text{DOP}_i) \right] & 2hn_i^k \\ 2hp_i^k & -2 \left[\frac{2}{h} + b \frac{h}{\Delta t} + h(2p_i^k - n_i^k + \text{DOP}_i) \right] \end{bmatrix}$$

$$(D1)_i^{k+1} = \begin{bmatrix} \left(\frac{2}{h} - E_i^k \right) & 0 \\ 0 & \frac{2}{h} + E_i^k \end{bmatrix}$$

$$(D2)_{i+1}^{k+1} = \begin{bmatrix} \frac{2}{h} + E_i^k & 0 \\ 0 & \frac{2}{h} - E_i^k \end{bmatrix}$$

$$S_i^{k+1} = \begin{bmatrix} -2ah \left[(A_n)_i^k + \frac{1}{\Delta t} (n_{i,j+1}^k - n_{i,j}^k) \right] \\ -2bh \left[(A_p)_i^k + \frac{1}{\Delta t} (p_{i,j+1}^k - p_{i,j}^k) \right] \end{bmatrix}$$

Alors les équations aux différences s'écrivent matriciellement :

$$(D1)_i^{k+1} \Delta_{i-1}^{k+1} + D_i^{k+1} \Delta_i^{k+1} + (D2)_{i+1}^{k+1} \Delta_{i+1}^{k+1} = S_i^{k+1}$$

$$i = 1, 2, \dots, N-1$$

En remarquant que, quelque soit k , on a, d'après les conditions aux limites :

$$\Delta_0^k = 0 \quad (\text{i.e. } \delta n_0^k = \delta p_0^k = 0)$$

$$\Delta_N^k = 0 \quad (\text{i.e. } \delta n_N^k = \delta p_N^k = 0)$$

On obtient finalement le système tridiagonal par bloc (en omettant le rang de l'itération) :

$$\begin{bmatrix} D_1 & (D2)_2 & & & 0 \\ (D1)_2 & D2 & (D2)_3 & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ (D1)_i & D_i & (D2)_{i+1} & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & (D1)_{N-2} & D_{N-2} & (D2)_{N-1} & \\ 0 & & & (D1)_{N-1} & D_{N-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta_1 \\ \Delta_2 \\ \vdots \\ \Delta_i \\ \vdots \\ \Delta_{N-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \\ \vdots \\ S_i \\ \vdots \\ S_{N-1} \end{bmatrix}$$

En principe, la résolution du système précédent est facile. Mais, l'inconvénient c'est qu'on doit manipuler les matrices au lieu des nombres, par conséquent, nous risquons de perdre du temps (c'est d'ailleurs effectivement le cas dans les essais que nous avons effectués).

L'idée nous vient alors de "couper" la matrice du premier membre en deux (cette matrice est de dimension $4(N-1)^2$). On y parvient facilement en remplaçant dans le second membre de (4) et de (5) :

$$2hn_{i,j+1}^k \quad \delta p_{i,j+1}^{k+1} \quad \text{par} \quad 2hn_{i,j+1}^k \quad \delta p_{i,j+1}^k$$

$$2hp_{i,j+1}^k \quad \delta n_{i,j+1}^{k+1} \quad \text{par} \quad 2hp_{i,j+1}^k \quad \delta p_{i,j+1}^k$$

on obtient alors deux systèmes tridiagonaux qui s'écrivent, en omettant le rang de l'itération :

$$T \cdot \delta n = U \quad (6)$$

$$R \cdot \delta p = W \quad (7)$$

avec :

$$\left\{ \begin{array}{l} T_{i,i} = -2 \left[\frac{2}{h} + a \frac{h}{\Delta t} - (p_i - 2n_i + DOP_i) h \right] \\ T_{i,i-1} = \frac{2}{h} - E_i \\ T_{i,i+1} = \frac{2}{h} + E_i \\ R_{i,i} = -2 \left[\frac{2}{h} + b \frac{h}{\Delta t} + h(2p_i - n_i + DOP_i) \right] \\ R_{i,i-1} = \frac{2}{h} + E_i \\ R_{i,i+1} = \frac{2}{h} - E_i \\ T_{i,j} = R_{ij} = 0 \end{array} \right. \quad \text{pour } |i-j| > 1.$$

Dans la suite, nous représentons les solutions de (6) et (7) par :

$$\delta n = G(n_{.,j+1}^k, p_{.,j+1}^k, E_{.,j+1}^{k+1})$$

$$\delta p = H(n_{.,j+1}^k, p_{.,j+1}^k, E_{.,j+1}^{k+1})$$

3.3.c. - Remarques

1. Il ressort de la discussion précédente qu'en fin de compte, nous arrivons à la résolution d'un système tridiagonal. Il nous semble souhaitable d'en donner une méthode (voir [9]) :

Soit donc le système :

$$\begin{array}{rcl} b_1 x_1 + c_2 x_2 & & = d_1 \\ a_2 x_1 + b_2 x_2 + c_3 x_3 & & = d_2 \\ \dots\dots\dots & & \\ a_i x_{i-1} + b_i x_i + c_{i+1} x_{i+1} & & = d_i \\ \dots\dots\dots & & \\ a_{N-1} x_{N-2} + b_{N-1} x_{N-1} + c_N x_N & & = d_{N-1} \\ & a_N x_{N-1} + b_N x_N & = d_N \end{array}$$

Le principe de la méthode est l'élimination directe (méthode de Gauss) : avec les deux premières équations, on élimine x_1 . En combinant le résultant de l'élimination avec la 3ème équation, on élimine x_2 et ainsi de suite. Finalement, le résultant de l'avant dernière élimination permet, avec la dernière équation, d'éliminer x_{N-1} et on en tire x_N . Il ne reste plus qu'à "remonter" pour trouver les autres inconnues.

Nous résumons cette méthode dans l'algorithme suivant :

On pose :

$$l_1 = b_1$$

Pour $i = 2, 3, \dots, N$ on calcule :

$$l_i = b_i - \frac{a_i c_i}{l_{i-1}}$$

Ensuite, avec :

$$u_1 = \frac{d_1}{l_1}$$

on calcule, pour $i = 2$ jusqu'à N :

$$u_i = \frac{d_i - a_i u_{i-1}}{l_i}$$

et finalement :

$$x_N = u_N$$

$$x_i = u_i - \frac{c_{i+1} x_{i+1}}{l_i} \quad (i \text{ varie de } N-1 \text{ jusqu'à } 1)$$

(voir en APPENDICE la procédure TRIDIA correspondant à cet algorithme).

2. Désignons par M l'indice correspondant à l'abscisse de la jonction. Pour une jonction abrupte, l'équation de Poisson n'a pas de sens en ce point à cause de la discontinuité du dopage. Il en est donc de même pour les équations de transport ($T^*.1$) et ($T^*.2$). Par suite, nous ne pouvons plus écrire l'équation aux différences pour $i = M$ de la même manière que celle correspondant aux autres indices. Mais, nous savons que les concentrations sont dérivables sur $(0, L)$, en particulier en $x = x_M$. Nous pouvons donc écrire pour $x = x_M$

$$n_{i-1,j+1}^{k+1} - 2n_{i,j+1}^{k+1} + n_{i+1,j+1}^{k+1} = 0$$

$$p_{i-1,j+1}^{k+1} - 2p_{i,j+1}^{k+1} + p_{i+1,j+1}^{k+1} = 0$$

D'où les équations de même forme pour $\delta n_{i,j+1}^{k+1}$ et $\delta p_{i,j+1}^{k+1}$.

3. Au chapitre II, nous avons indiqués comment on peut étudier un modèle "avec recombinaison" en passant par un modèle "sans recombinaison". Pour cela, on peut prendre, pour démarrer l'itération (à un instant $t+\Delta t$), la recombinaison comme étant celle de l'instant t .

Une autre méthode consiste à "séparer" les deux modèles, en ce sens qu'on commence par étudier le cas où la recombinaison est nulle et ensuite, prendre les résultats correspondants comme premières approximations pour démarrer l'étude du modèle avec recombinaison (et cela à chaque instant). Cette méthode est quelque peu "contre nature", nous préférons procéder comme l'indique la remarque du Chapitre II (2.3.a.).

3.3.d. - Organigramme

Pour résumer la méthode de calcul, avec l'aide de l'algorithme J, et dans le but d'une meilleure compréhension des programmes écrits, nous donnons l'organigramme ci-dessous où l'on a mis en évidence deux compteurs :

compteur j : instant $t = t_j$

compteur k : nombre d'itérations.

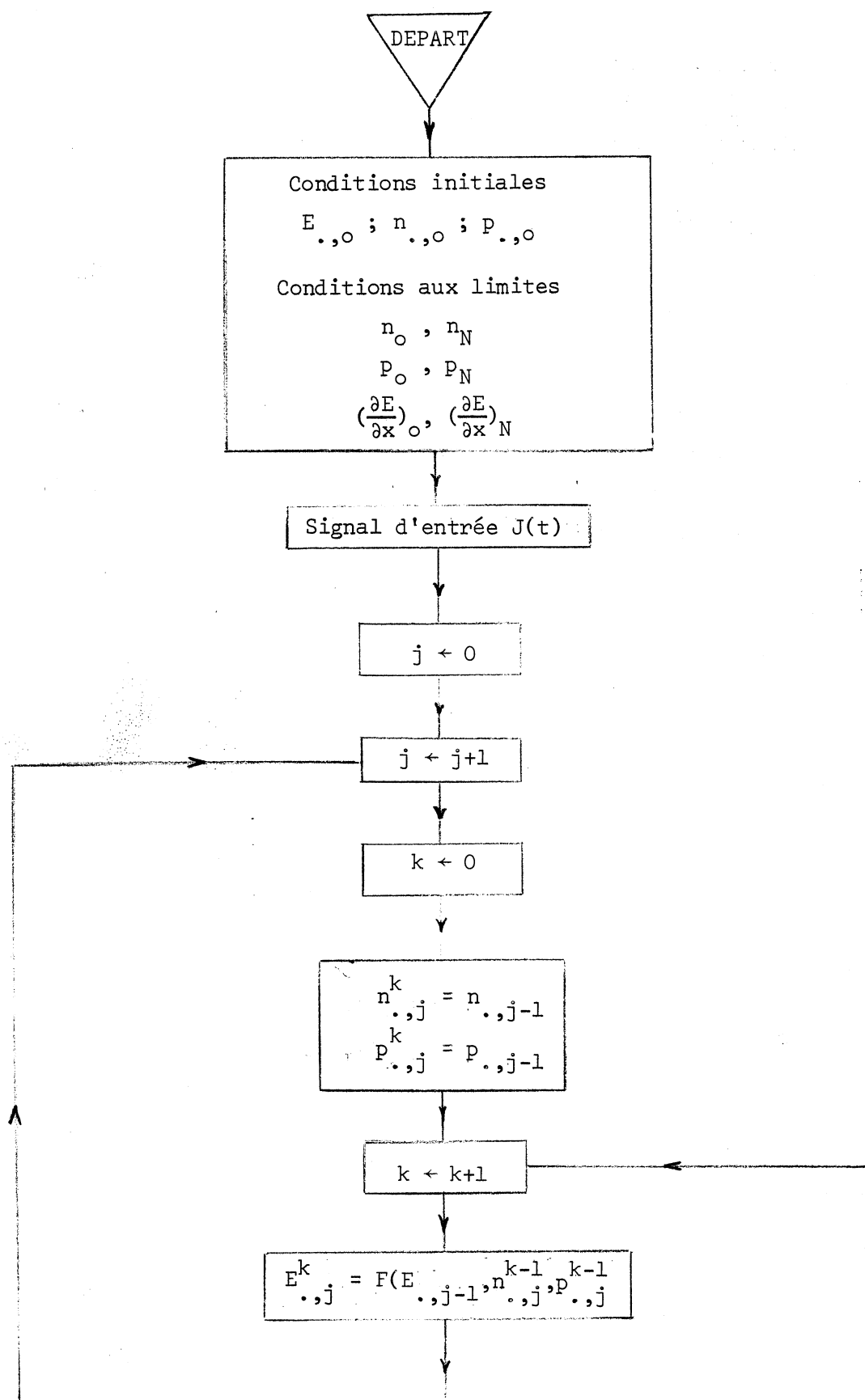
Nous commençons par préciser les conditions aux limites et initiales (ce qui suppose que l'étude du régime permanent a été faite). Le compteur j est donc mis au zéro.

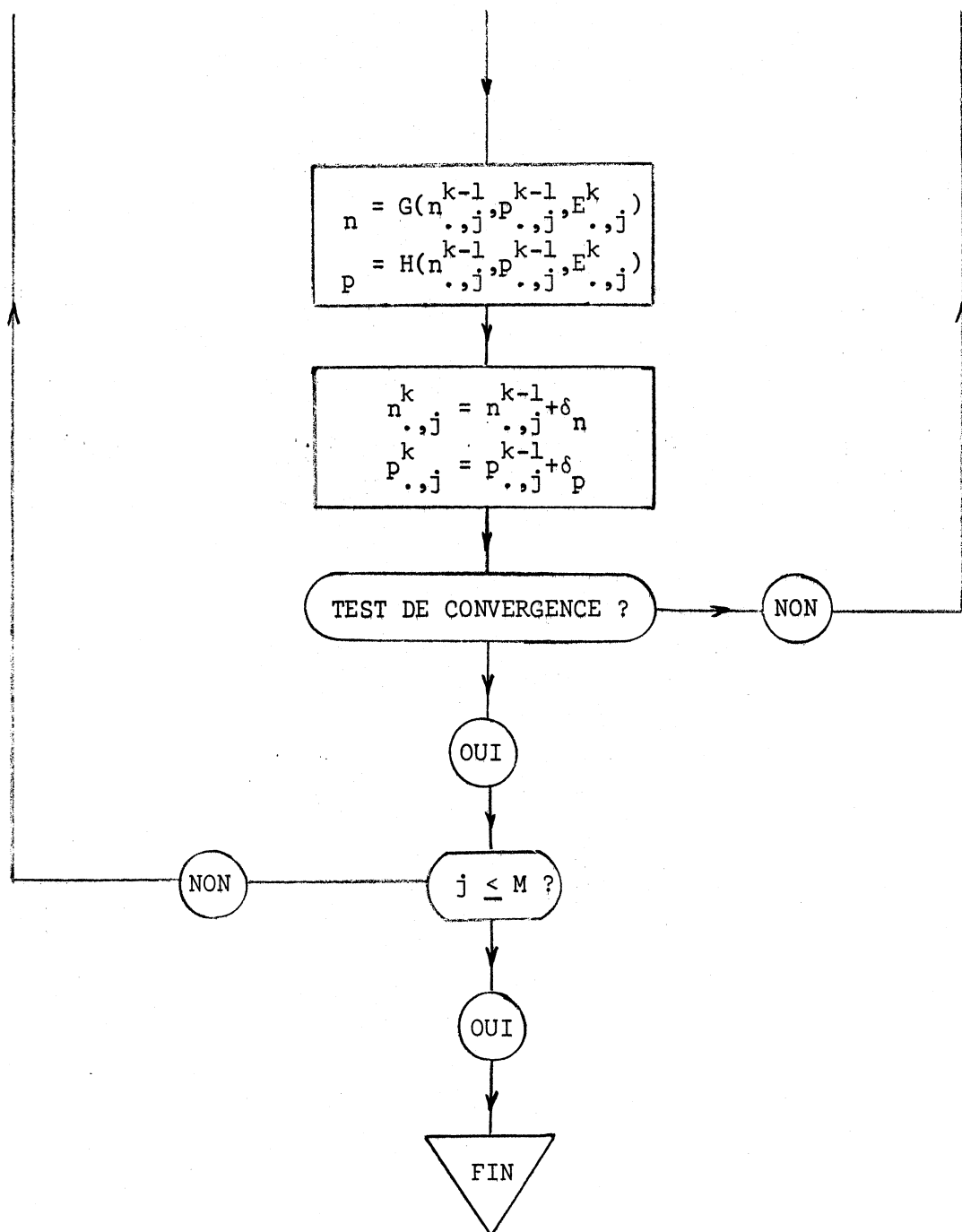
Supposons qu'on voulait connaître l'état du système à l'instant $t = t_M$. Alors le processus se déroule tant que $j \leq M$.

Chaque boucle d'itération sont initialisée de la façon suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{compteur } k \text{ mis au zéro} \\ p_{.,j}^k = p_{.,j-1} \\ n_{.,j}^k = n_{.,j-1}^k \end{array} \right. \quad (\text{première approximation})$$

Pour chaque itération, on effectue un test de convergence (portant sur l'ensemble des trois inconnues). Ce test porte sur le maximum de deux itérés successifs. Tant que ce maximum dépasse un ϵ fixé à l'avance, le compteur k est augmenté d'une unité et l'itération se recommence.





3.4. - Calcul de E, n, p suivant l'algorithme V (Chapitre II)

D'après ce que nous avons dit au chapitre II, l'algorithme V est le même que celui de J à ceci près que le courant total n'est plus donné explicitement. Alors, nous devons, à chaque instant, choisir J pour que la condition (C*) :

$$\lambda J(t) + \int_0^L E(x,t) dx - VA(t) + \phi = 0$$

soit vérifiée.

Pour cela, on ajoute une boucle d'itération en plus. Désignons par ℓ le rang de cette itération. Soit J_{j+1}^ℓ la valeur (approchée) de J à l'instant $j+1$ et à la $\ell^{\text{ème}}$ itération. Pour un ℓ fixé, les équations aux différences s'écrivent de la même manière à ceci près que l'expression en variable discrète de E devient :

$$E_{i,j+1}^{k+1} = \frac{E_{i,j} + \frac{\Delta t}{2h} \left[2h J_{j+1}^\ell - \frac{1}{a} (n_{i+1,j+1}^k - n_{i-1,j+1}^k) + \frac{1}{b} (p_{i+1,j+1}^k - p_{i-1,j+1}^k) \right]}{1 + \Delta t \left(\frac{n_{i,j+1}^k}{a} + \frac{p_{i,j+1}^k}{b} \right)}$$

Désignons par $E^\ell(x,t)$ la valeur "exacte" de E à la $\ell^{\text{ème}}$ itération (i.e pour ℓ fixé et k assez grand), nous prenons :

$$\lambda J_{j+1}^{\ell+1} + \int_0^L E^\ell(x,t) dx - VA_{j+1} + \phi = 0.$$

Cette relation nous oblige à vérifier la convergence (en ℓ) de J. Par conséquent, dans l'organigramme nous aurons deux tests de convergence.

3.4.a. - Remarque

A propos de l'algorithme J, nous avons mis en évidence une équation intégral-différentielle qui pourrait servir à calculer le champ électrique.

Cette équation s'écrit :

$$\frac{\partial E}{\partial t} = -\frac{1}{\lambda} \int_0^L E(x,t) dx - \left(\frac{n}{a} + \frac{p}{b}\right) E - \frac{1}{a} \frac{\partial n}{\partial x} + \frac{1}{b} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\lambda} (VA(t) - \phi)$$

La résolution peut se faire en employant la méthode implicite pure.

L'équation aux différences s'écrit :

$$\frac{E_{i,j+1} - E_{i,j}}{\Delta t} = -\frac{1}{\lambda} \int_0^L E(x, t_{j+1}) dx - \left(\frac{n_{i,j+1}}{a} + \frac{p_{i,j+1}}{b}\right) E_{i,j+1} + S_{i,j+1}$$

où l'on pose :

$$S_{i,j+1} = \left[-\frac{1}{a} \frac{\partial n}{\partial x} + \frac{1}{b} \frac{\partial p}{\partial x} \right]_{i,j+1} + \frac{1}{\lambda} (VA_{j+1} - \phi)$$

(l'intégration et la dérivation se font par des schémas de différences finies classiques).

On en déduit :

$$E_{i,j+1} + \frac{\Delta t}{\lambda \left[1 + \Delta t \left(\frac{n_i}{a} + \frac{p_i}{b} \right) \right]} \int_0^L E(x, t_{j+1}) dx = E_{i,j} + S_{i,j+1}$$

on peut considérer cette équation aux différences comme celle associée à l'équation intégrale :

$$E(x) + \int_0^L K(x,y) E(y) dy = g(x) \quad (I)$$

où le noyau K s'écrit :

$$K(x,y) \equiv \frac{\Delta t}{\lambda \left[1 + \left(\frac{n(x)}{a} + \frac{p(x)}{b} \right) \Delta t \right]}$$

Pour résoudre l'équation (I) on procède par approximations successives. Une condition suffisante de convergence s'écrit :

$$\text{Max}_{x,y} |K(x,y)| = \text{Max}_x \frac{\Delta t}{\lambda \left[1 + \Delta t \left(\frac{n(x)}{a} + \frac{p(x)}{b} \right) \right]} < \frac{1}{L}$$

Compte tenu des ordres de grandeur de la concentration des porteurs on devrait avoir pratiquement :

$$\Delta t \leq \frac{\lambda}{L}$$

Ce qui nous impose, dans la pratique, pour une diode d'épaisseur 1μ de section $10 \mu^2$ en série avec une résistance de 100Ω :

$$\Delta t \leq 10^{-4} \quad (\text{normalisé ou } 10^{-12} \text{ seconde}).$$

Cette restriction justifie l'utilisation de l'algorithme V.

3.4.b. - Organigramme

Nous avons maintenant trois compteurs :

compteur ℓ : rang de l'itération de la grande boucle

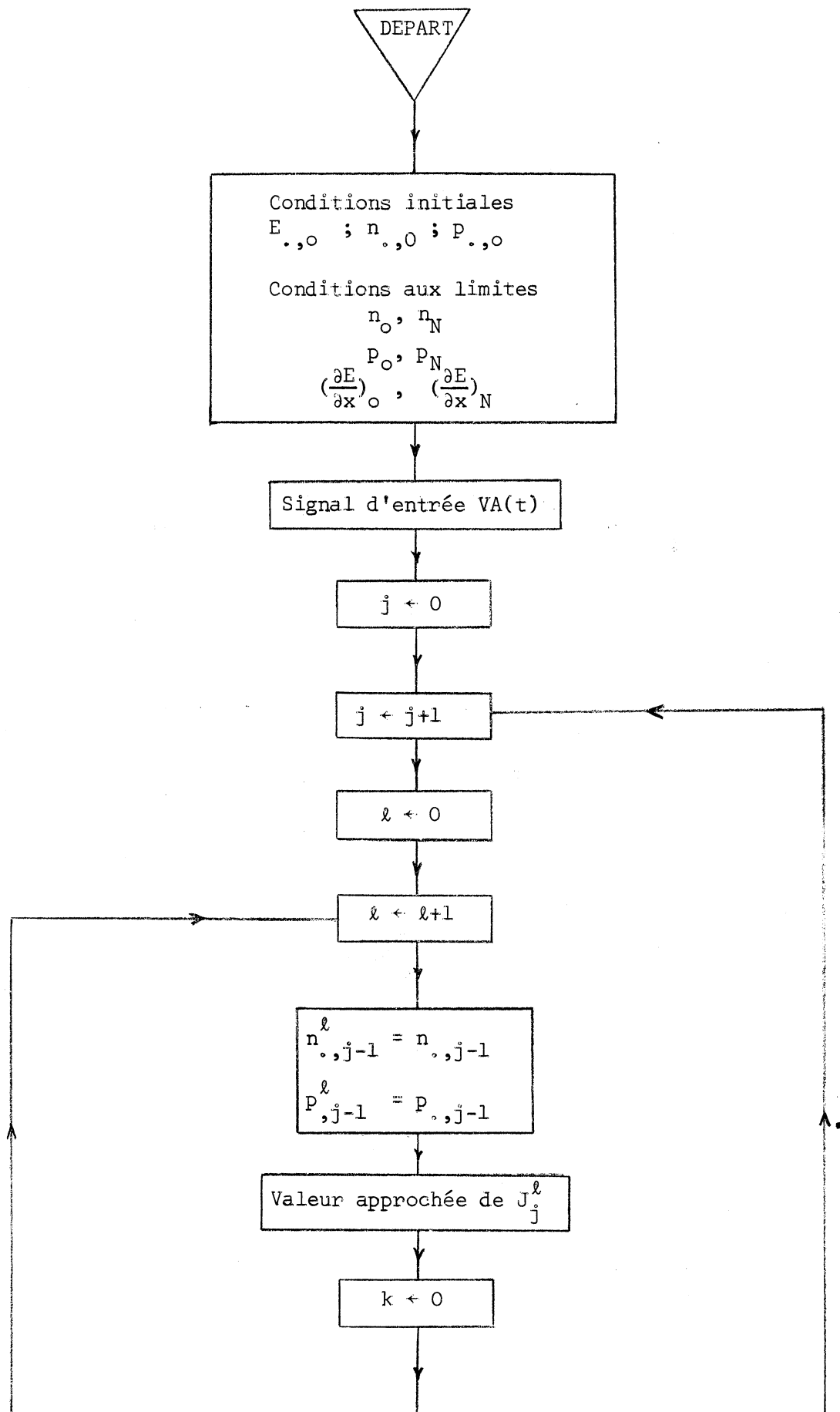
compteur j , compteur k : même signification qu'en 3.3.d.

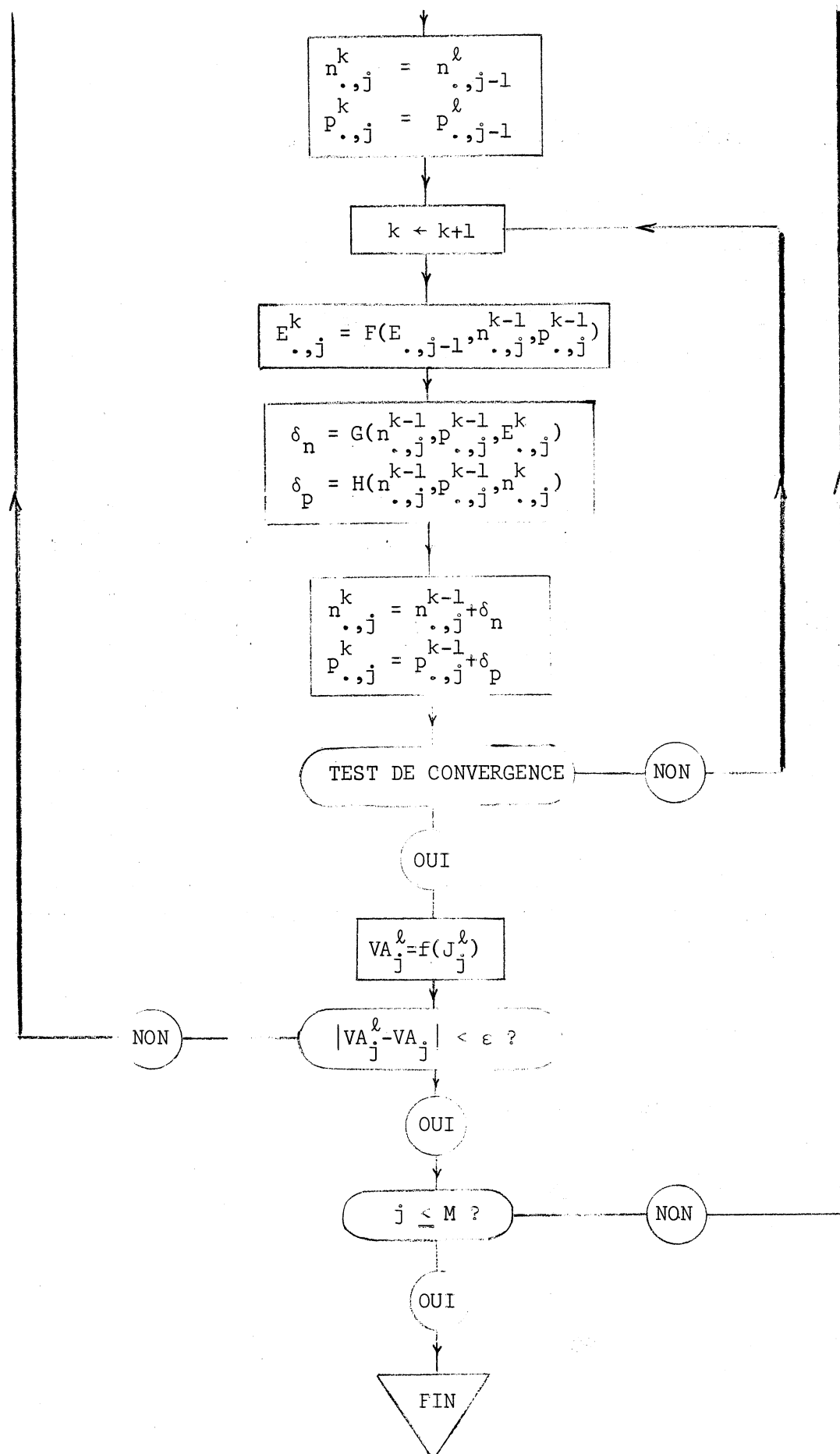
Pour chaque valeur de ℓ , nous appliquons l'algorithme J jusqu'à la convergence. Alors, avec ces résultats, nous cherchons à satisfaire la condition (C*). Pour cela, nous calculons :

$$VA^{\ell}(t) = \phi + \int_0^L E^{\ell}(x,t)dt$$

Et le test de convergence de la grande boucle est porté sur $|VA_t - VA^{\ell}(t)|$. L'initialisation de chaque boucle d'itération se fait de la même façon qu'en 3.3.d.

D'où l'organigramme suivant :





4. - PRECISION DE LA METHODE. CHOIX DE Δt

Nous ne voulons pas aborder ici le problème très difficile de l'analyse des erreurs. Déjà, dans les problèmes linéaires, cette analyse s'est posée avec beaucoup de complexité. Pour les problèmes non linéaires comme celui que nous avons à traiter, il est peut être quasi impossible d'étudier les erreurs de façon précise. Néanmoins, nous pouvons quand même tirer quelques conclusions, à la lumière des études des cas simples, quand à l'origine des erreurs, et leur répercussion dans les calculs pratiques.

Tout d'abord, l'erreur systématique de la méthode. Considérons l'équation (1) :

$$L(u) = d(x,t)$$

Nous avons approché le premier membre par une expression à variable discrète $L_{h,\Delta t}$. Ce faisant, nous avons commis déjà une erreur sur la "forme" de L (cette forme est évidemment indépendante de la solution u ou de n'importe quelle fonction définie sur la grille). L'erreur systématique est celle commise en remplaçant l'opérateur différentiel L par l'opérateur aux différences $L_{h,\Delta t}$. On démontre que cette erreur est de la forme $O(h^2) + O(\Delta t)$. (voir [19]), c'est-à-dire qu'elle tend vers zéro avec les dimensions de la maille.

Il est évident que l'erreur systématique de la méthode a une grande influence sur la précision de la solution approchée. Dans notre méthode de variable discrète, nous avons appelé l'erreur de discrétisation la quantité

$$\varepsilon = u - v$$

où u est la solution de l'équation différentielle et v la solution de l'équation aux différences correspondantes. Cette erreur de discrétisation dépend bien entendu de la méthode de variable discrète choisie : pour l'équation linéaire (1) on a, dans le cas de la méthode implicite pure :

$$|\varepsilon| \leq O(h^2) + O(\Delta t).$$

Ceci étant, revenons au système (T^*) . En employant la méthode implicite, et avec les schémas aux variables discrètes utilisés en 3., nous avons manifestement comme erreur systématique de la méthode une quantité de la forme $O(h^2)+O(\Delta t)$. Mais, il ne faut pas oublier que nous avons employé une méthode itérative, vue la non-linéarité de (T^*) , pour résoudre le système d'équations aux différences. En admettant que l'erreur de discrétisation est $\leq O(h^2)+O(\Delta t)$, nous devons y "ajouter" l'erreur due à l'itération, car nous avons en quelque sorte considéré deux suites $v_{h,\Delta t}$ et $[v_{h,\Delta t}^*]_k$ telles que :

$$\lim_{h,\Delta t} v_{h,\Delta t} = u(h,\Delta t)$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} [v_{h,\Delta t}^*]_k = v_{h,\Delta t}$$

Nous avons passé sous silence les effets des erreurs de calcul : erreur d'arrondi (due au calculateur), erreur de quadrature (calcul des intégrales). En employant des calculs en double précision (16 chiffres significatifs) nous pouvons supposer que les erreurs d'arrondi sont négligeables par rapport aux erreurs de discrétisation. En ce qui concerne l'erreur de quadrature (calcul de $\int_0^L E(x,t)dx$ dans la condition (C)) nous pouvons aussi la négliger devant l'erreur de discrétisation. En effet, dans la pratique, en employant par exemple la méthode de Simpson (l'erreur est de l'ordre de h^5) l'expérience montre que les résultats sont plus que satisfaisants.

Considérons maintenant l'influence de la précision des conditions initiales qui sont, somme toutes, obtenues par des méthodes approchées. En supposant qu'elles sont assez précises (voir [18]), nous pouvons considérer que l'erreur qu'elles comportent restent limitées comme nous assure la stabilité de la méthode implicite pure.

Les remarques précédentes nous font ressortir l'importance de la dimension de la maille $(h, \Delta t)$. En supposant le pas h fixé, comment pouvons nous choisir Δt de façon que le volume de calcul reste acceptable tout en ayant la même précision ? Encore une fois, nous essayons d'extrapoler les conclusions concernant les équations paraboliques linéaires du second ordre. Considérons alors l'équation de la chaleur

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

rattachée à un problème mixte (de condition initiale et de conditions aux limites). Sous certaine condition (concernant le développement en série de Fourier de la condition initiale, on démontre (voir [5]) qu'une majoration de l'erreur de discrétisation peut s'écrire :

$$|\varepsilon| \leq A \sum_{k=0}^{n-1} \Delta t_k \left(\frac{h^2}{6} + \Delta t_k \right) e^{-\pi^2 t_k}$$

où l'on pose :

$$\Delta t_k = t_{k+1} - t_k$$

$$t_n = \sum_{k=0}^{n-1} \Delta t_k$$

Pour avoir $|\varepsilon| = O(h^2)$ on pourrait prendre :

$$\text{soit} \quad \Delta t_k = (\alpha + \beta t_k) h^2 \quad \alpha > 0, \quad \beta \geq 0$$

$$\text{soit} \quad \Delta t_k = e^{\frac{\pi^2}{2} t_k} h^2$$

Les considérations précédentes ne doivent pas nous faire oiblier un autre facteur important : le volume de calcul et par suite le temps de calcul. En admettant que ce temps est proportionnel au nombre de points de la grille, on voit que la précision est inversement proportionnel au temps de calcul. Dans notre problème où le temps de calcul joue un rôle important (par suite des boucles d'itérations) il est important de tenir compte en même temps **les** deux facteurs précédents). Par conséquent, nous appliquerons les lois de variation données plus haut pour le pas Δt . Nous donnerons des conclusions basées sur des changements de pas au chapitre IV, car faute d'étude théorique, nous ne pouvons s'en rendre compte que sur les exemples pratiques.

CHAPITRE IV

QUELQUES APPLICATIONS

- 1 . Généralités
- 2 . Considérations pratiques
- 3 . Remarque sur le changement de pas
- 4 . Résultats.

CHAPITRE IV

QUELQUES APPLICATIONS

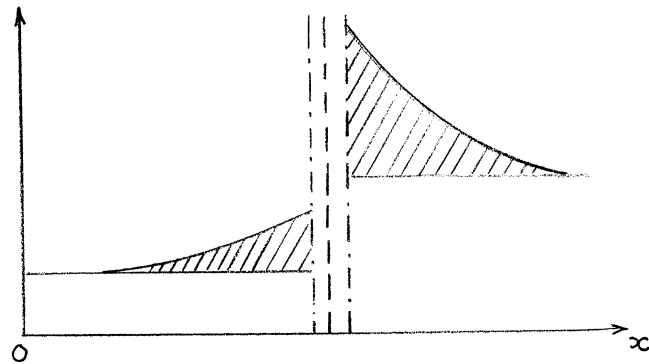
Dans les chapitres précédents, nous avons exposé une méthode de résolution du système d'équations aux dérivées partielles (S) décrivant le fonctionnement en régime transitoire d'un dispositif de semi-conducteur. Nous allons, dans ce chapitre, appliquer cette méthode à l'étude de quelques problèmes concrets, à savoir les diodes en commutation.

Nous commençons par quelques considérations physiques qui sont nécessaires à la compréhension des résultats et, surtout, très utiles dans les méthodes numériques.

I - GENERALITES

I-1 - Charges de diffusion

Considérons une jonction P-N à l'équilibre. En régime permanent, lorsqu'on la polarise en sens direct, les charges minoritaires, par suite du phénomène d'injection des porteurs, augmentent de part et d'autre de la jonction et au voisinage de celle-ci. Autrement dit, par rapport à l'équilibre, il y a un excès des porteurs minoritaires. Les charges excédentaires qui résultent des excès de porteurs s'appellent charges de diffusion. On peut représenter schématiquement ces charges par le diagramme suivant :



En général, les charges de diffusion stockées dans l'émetteur sont négligeables par rapport à celles stockées dans la base.

Il est aussi intuitif de voir que la charge de diffusion est proportionnelle au courant direct I_d correspondant à la tension de polarisation V_A positive :

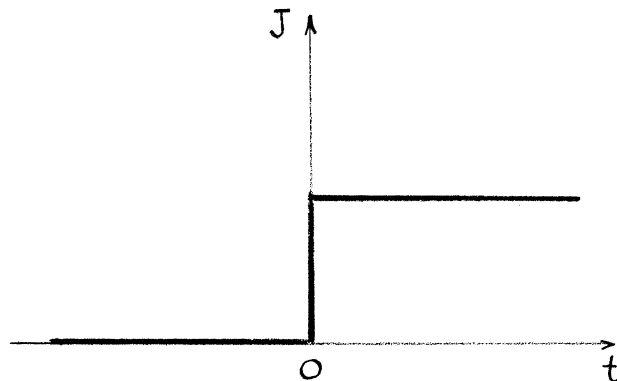
$$Q = \tau I_d$$

On appelle τ la durée de vie effective. Dans le cas d'une jonction infinie, on démontre que τ n'est rien d'autre que la durée de vie des porteurs minoritaires dans la base (d'où son nom).

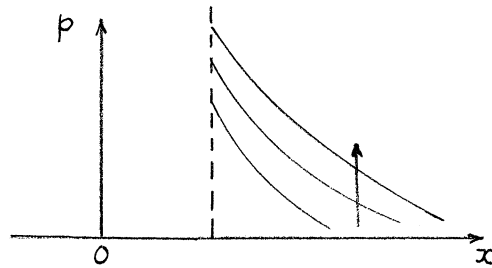
Evidemment, le stockage ou l'évacuation de ces charges de diffusion ne sont pas instantanés. L'étude des phénomènes transitoires doit permettre de rendre compte du temps nécessaire à l'installation ou l'évacuation de ces charges dans la base.

I-2 - Attaque en courant

Considérons une jonction P-N à l'équilibre. Il s'agit d'étudier le phénomène d'injection des charges minoritaires de part et d'autre de la jonction sous l'effet d'un échelon de courant :



Le phénomène principal dans ce cas est bien entendu l'accumulation progressive des charges de diffusion: par exemple, dans la base, on a le diagramme de concentration des porteurs minoritaires suivants :



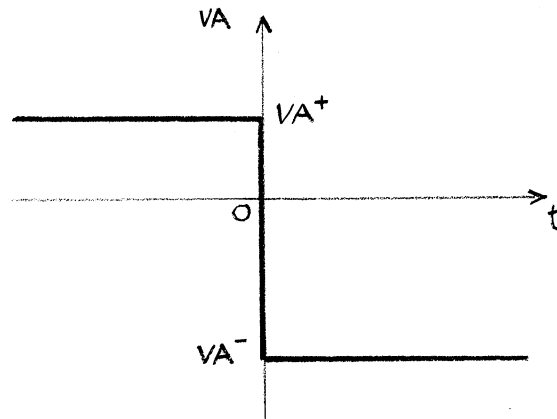
La variation du potentiel de jonction (c'est-à-dire le potentiel aux bornes de la diode) dépend fortement de l'échelon de courant. Nous montrerons dans la série de figure I l'allure de cette variation correspondante aux deux échelons très différents de courant.

I-3 - Attaque en tension : le phénomène de recouvrement inverse.

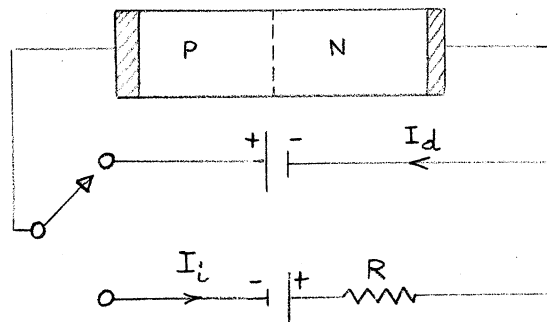
Il s'agit de loin le phénomène le plus intéressant. En effet, en général, un circuit de commutation a deux états de conduction : il conduit ou pas. Pour que la commutation soit idéale, l'état de non conduction doit avoir une très grande résistance, approchant celle d'un circuit ouvert. Par contre, dans l'état de conduction, la diode idéale doit avoir une très faible résistance, approchant celle d'un court circuit. Finalement, en changeant d'état, la diode devrait commuter aussi rapidement que possible, c'est-à-dire, la réponse à un signal devrait être instantannée.

Etant donné le rôle important que jouent les diodes de commutation, il est indispensable de connaître l'influence des paramètres physiques sur le comportement de ces circuits.

Considérons alors une diode polarisée en sens direct par une tension appliquée V_A^+ . Appliquons à cette diode un échelon de tension représenté de la manière suivante :



On peut représenter un tel circuit de commutation de la manière suivante :



Comme nous avons vu plus haut, quand la diode est polarisée en sens direct, les charges de diffusions sont stockées de part et d'autre de la jonction. Sous l'effet de l'échelon de tension, la diode ne pourra jouer son rôle d'interrupteur ouvert que si l'on lui a laissé le temps matériel d'éliminer la totalité des charges de diffusion stockées pendant la phase directe. D'où les différentes phases suivantes du comportement de la diode :

a) Phase de conduction inverse (ou le "plateau")

Au moment où l'on change la polarisation, un courant I_i traverse la diode en sens inverse. Ce courant est en quelque sorte imposé par le circuit extérieur à la diode. Par conséquent, il reste constant pendant une certaine durée t_1 .

(temps de stockage ou durée du "plateau"). En faisant quelques hypothèses sur le champ électrique, A.S. GROVE et C.T. SAH ont démontré que t_1 est donné par :

$$\sum_{k=0}^{k=\infty} \frac{\exp\left\{-\left[1+\left(k+\frac{1}{2}\right)^2 \pi^2 \frac{L_p^2}{W^2}\right] \frac{t_1}{\tau_p}\right\}}{1+\left(k+\frac{1}{2}\right)^2 \pi^2 \frac{L_p^2}{W^2}} = \frac{\frac{W}{L_p} \operatorname{th} \frac{W}{L_p}}{2\left(1+\frac{I_d}{|I_i|}\right)}$$

où :

τ_p : durée de vie des trous en zone N

$L_p = \sqrt{D_p \tau_p}$: longueur de diffusion

W : longueur de la zone de charge d'espace du côté N

I_d : courant direct.

Dans le cas où $W/L_p \ll 1$ on peut écrire :

$$\sum_{k=0}^{k=\infty} \frac{\exp\left[-(2k+1)^2 \frac{\pi^2}{4} \frac{t_1 D_p}{W^2}\right]}{(2k+1)^2} = \frac{\pi^2}{8\left(1+\frac{I_d}{|I_i|}\right)}$$

D'où :

si $|I_i| \ll I_f$:

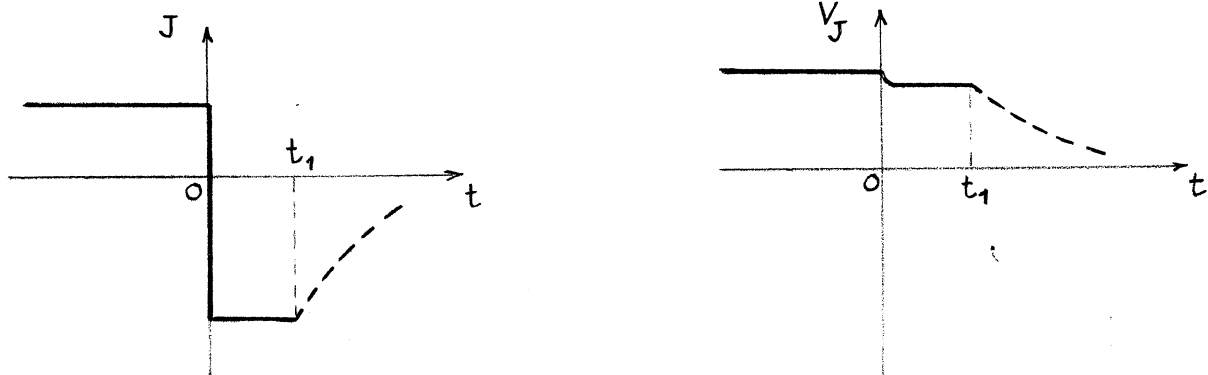
$$t_1 = \frac{4W^2}{\pi^2 D_p} \operatorname{Log} \left[\frac{8\left(1+\frac{I_d}{|I_i|}\right)}{\pi^2} \right]$$

si $|I_i| \gg I_f$

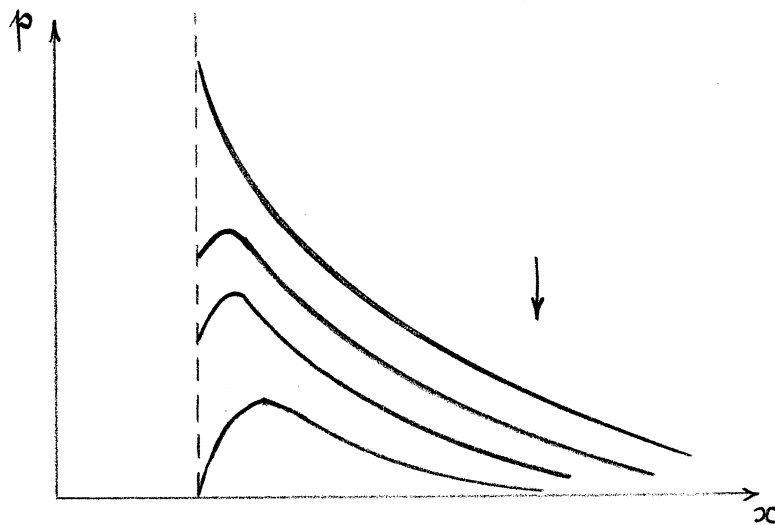
$$t_1 = \frac{\pi W^2}{4D_p} \frac{1}{\left[1+\frac{I_d}{I_i}\right]^2}$$

A cette phase pendant laquelle le courant est constant correspond le "plateau" caractérisé par une tension qui demeure constante aux bornes de la diode.

On peut schématiser cette phase par les deux courbes suivantes représentant la variation du courant et celle du potentiel de jonction :



Cette phase s'achève quand le nombre de porteurs minoritaires s'annule à la jonction. D'où le diagramme de la concentration des trous dans la base.



b) Phase de recouvrement (ou le "trainage")

La charge ayant maintenant notablement diminuée, le courant I_i ne peut plus se maintenir constant. L'écoulement des charges résiduelles correspond à la décroissance abrupte du courant. Cette phase dure pendant un temps t_2 , appelé temps de recouvrement ou durée du "trainage". De la même manière que dans la phase de conduction, on démontre que

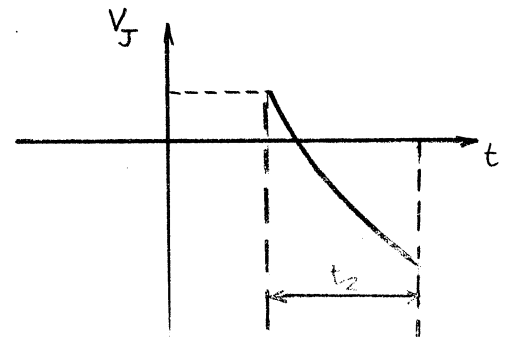
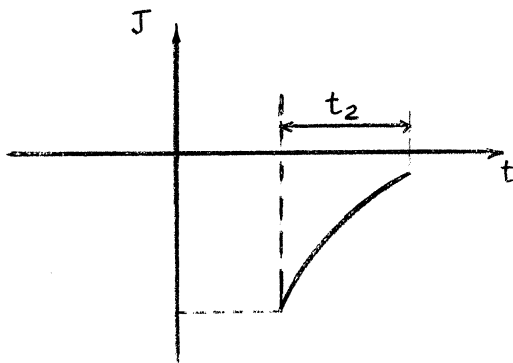
si $|I_i| \ll I_d$:

$$t_2 = \frac{W^2}{D_P} \text{Log} \frac{10}{\pi^2}$$

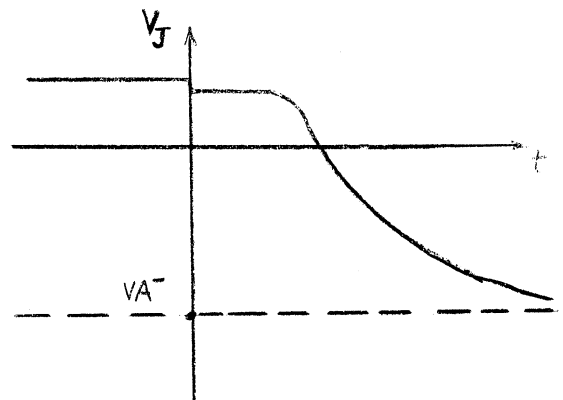
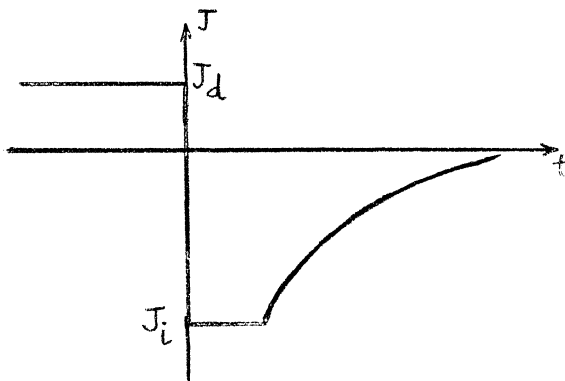
Si $|I_i| \gg I_d$:

$$t_2 = \frac{W^2}{\pi D_P} \left[\frac{1}{\left(1 + 0,2 \frac{|I_i|}{I_d}\right)^2} - \frac{1}{\left(1 + \frac{|I_i|}{I_d}\right)^2} \right]$$

on a les deux courbes suivantes :

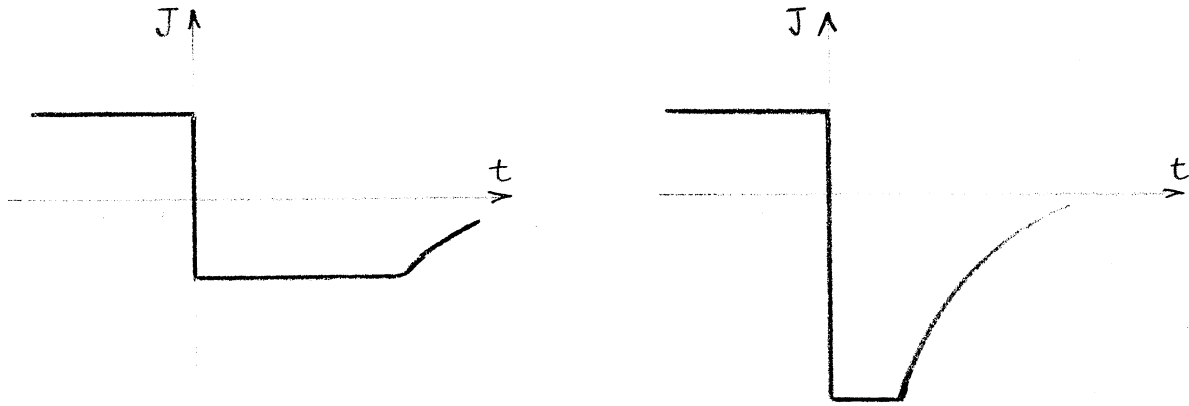


En résumé, on peut représenter l'ensemble du phénomène par les deux courbes suivant



Remarque

Nous avons pu constater dans les formules approchées données plus haut, que la durée de la phase de conduction et celle de la phase de recouvrement dépend du rapport $\frac{|I_i|}{I_f}$. Suivant la valeur du courant inverse, la réponse en courant a l'une des f formes suivantes (voir aussi la série II de figures) :



II - CONSIDERATIONS PRATIQUES

A la lumière des considérations physiques données précédemment, nous pouvons en tirer quelques renseignements en vue de l'application des algorithmes J et V.

II-1 - Détermination du courant inverse, I_i , dans la phase de conduction

Comme nous l'avons fait remarquer, pendant cette phase, le courant est déterminé par le circuit extérieur. Or, on peut considérer que la variation de la tension aux bornes de la diode est négligeable par rapport à celle du courant de sorte qu'on a :

$$I_i = \frac{V_A^- - V_J}{R} = \frac{V_A^- - V_A^+}{R}$$

D'ailleurs, dans l'algorithme V, nous devons nous donner un courant total pour démarrer l'itération. La valeur précédente constitue une excellente approximation que confirme les résultats.

II-2 Sur l'équation (C) (Chapitre II)

Dans l'algorithme V, nous devons déterminer, à chaque instant, $J(t)$ de façon que :

$$VA(t) = V_J(t) + \lambda J(t) \quad t > 0$$

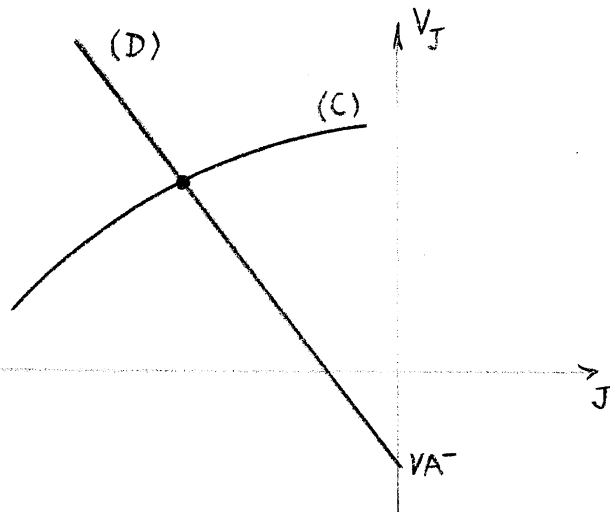
Dans le cas où l'on a un échelon de tension, la relation précédente s'écrit :

$$VA^- = V_J(t) + \lambda J(t) \quad t > 0 \quad (D)$$

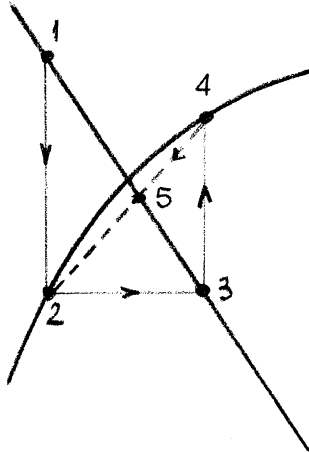
Pour cela, on procède par itération en prenant, à la $(k+1)^{\text{ème}}$ itération :

$$J_{k+1}(t) = \frac{1}{\lambda} \left[VA^- - \int_0^L E_k(x, t) dx - \Phi \right]$$

Autrement dit, le problème revient à chercher, à chaque instant, l'intersection de la droite (D) avec la courbe "caractéristique" $V_J = f(J)$ (à un instant donné). Or, d'après l'expression du champ électrique (Chapitre III), nous pouvons dire que cette fonction est croissante. Par conséquent, nous avons les deux courbes suivantes :



Avec cette particularité, nous pouvons procéder de la manière suivante pour chercher l'intersection des deux courbes :



En partant du point 1 (qui donne donc la première approximation du courant total) on obtient le point 2 situé sur la caractéristique après avoir appliqué l'algorithme J. Le point 3 constitue en général une meilleure approximation que le point 1 et donne à son tour le point 4. Maintenant, au lieu de continuer l'itération de manière classique, nous prenons le point 5 qui, lui, joue le rôle du point 1 et on recommence. Nos applications confirment l'efficacité de l'algorithme précédent dans ce cas particulier de l'étude du recouvrement inverse.

II-3 - Calcul des courants

Comme nous avons fait remarquer lors de l'étude de régime permanent, les courants J_n et J_p s'obtiennent par la différence des termes dont les ordres de grandeurs sont grands par rapport à eux. Dès lors, on ne peut plus les calculer à partir des expressions :

$$aJ_n = \frac{\partial n}{\partial x} - nE$$

$$bJ_p = - \frac{\partial p}{\partial x} + pE$$

Nous procédons comme dans le cas du régime permanent, c'est-à-dire, nous intégrons les deux équations :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial J_n}{\partial x} - R$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = - \frac{\partial J_p}{\partial x} - R$$

D'où :

$$J_n(x,t) = \int_0^x \left[\frac{\partial n}{\partial t}(u,t) + R(u,t) \right] du + K_n(t) = f_n(x,t) + K_n(t)$$

$$J_p(x,t) = - \int_0^x \left[\frac{\partial p}{\partial t}(u,t) + R(u,t) \right] du + K_p(t) = f_p(x,t) + K_p(t).$$

Les deux fonctions inconnues $K_n(t)$ et $K_p(t)$ sont déterminées par les conditions aux limites portant sur n et p . En effet, on a :

$$n(x,t) = e^{V(x,t)} \left[- \int_x^L a J_n e^{-V} du + n(L) e^{-V(L)} \right]$$

$$p(x,t) = e^{-V(x,t)} \left[- \int_0^x b J_p e^V du + p(0) \right]$$

D'où en remplaçant J_n et J_p par leur expression, on trouve, comme dans le cas du régime permanent :

$$J_n(x,t) = f_n(x,t) + \frac{n(L)e^{-V(L)} - n(0) - \int_0^L a f_n e^{-V} dx}{\int_0^L a e^{-V} dx}$$

$$J_p(x,t) = f_p(x,t) + \frac{p(0)e^{-V(L)} - p(L) - e^{-V(L)} \int_0^L b f_p e^V dx}{e^{-V(L)} \int_0^L b e^V dx}$$

III - REMARQUE SUR LE CHANGEMENT DE PAS

III-1 - Pas h

Le choix du pas h (l'axe des abscisses) dépend du rapport de dopage NA/ND. En effet, ce rapport indique en quelque sorte le rapport des épaisseurs des zones de transition du côté P et du côté N. Or, précisément, c'est dans ces zones que la variation des concentrations de porteurs sont les plus abruptes. Bien sûr, on peut choisir un pas très petit mais, dans ce cas, le volume de calcul devient trop important et nous avons un dépassement de la capacité de la machine.

Néanmoins, dans les exemples pratiques (NA/ND de l'ordre de 10^3), quelques centaines de points sur l'axe Ox nous permettent de traiter le problème avec une précision convenable et cela dans les temps très acceptables (quelques minutes).

III-2 - Pas Δt

Dans notre problème du régime transitoire, le choix du pas Δt se pose avec beaucoup plus de difficultés que celui du pas h. D'ailleurs, il est souhaitable, vu la nature du phénomène, de choisir un pas Δt variable. Nous avons au chapitre III, mentionné une loi de variation utilisable de Δt . Cette loi a été effectivement utilisée dans nos essais numériques. Nous pouvons tirer quelques conclusions suivantes :

- dans l'algorithme J, une loi de forme

$$\Delta t = (\alpha + \beta t)h^2$$

est excellente, même avec α et β assez grands. Cela ne doit pas nous surprendre car le phénomène est assez régulier (dans le temps).

- Par contre, dans l'algorithme V, la loi précédente n'est pas toujours applicable. On peut justifier ce fait en regardant la courbe de réponse (en courant, dans un phénomène de recouvrement inverse. En effet, lorsque $\frac{|I_i|}{I_d}$ est très grand, cette courbe présente pratiquement un point anguleux. En ce point là, il est donc nécessaire d'employer un pas Δt très faible. Ce qui n'a pas été prévu dans la formule précédente.

IV - RESULTATS

Matériau : Germanium à 300°K

Longueur de la zone P : 0,2

Longueur de la zone N : 1

Dopage NA : 10^4

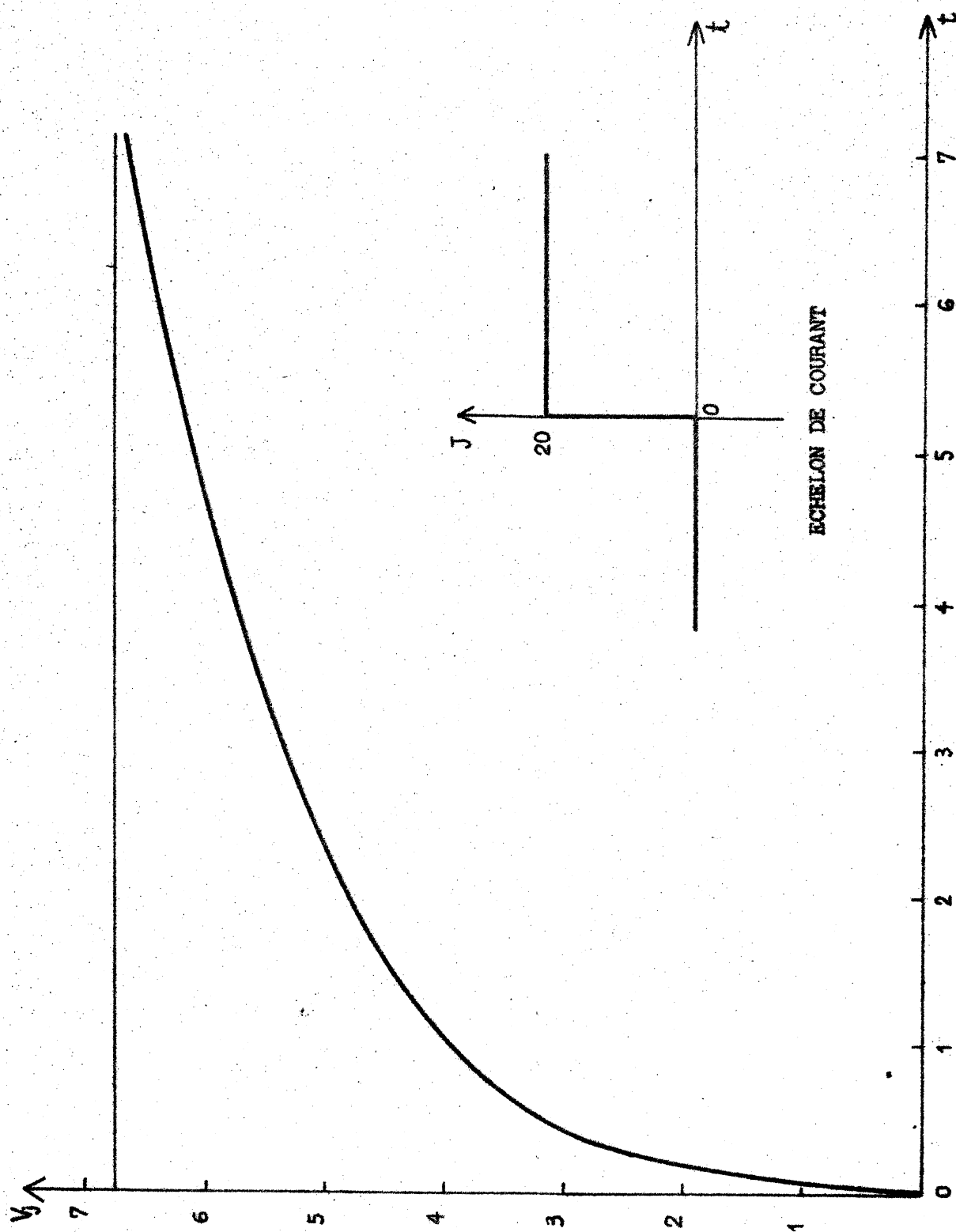
Dopage ND : 10^2

D_p : 44

D_n : 93

Fig. I.1

VARIATION DU POTENTIEL DE JONCTION



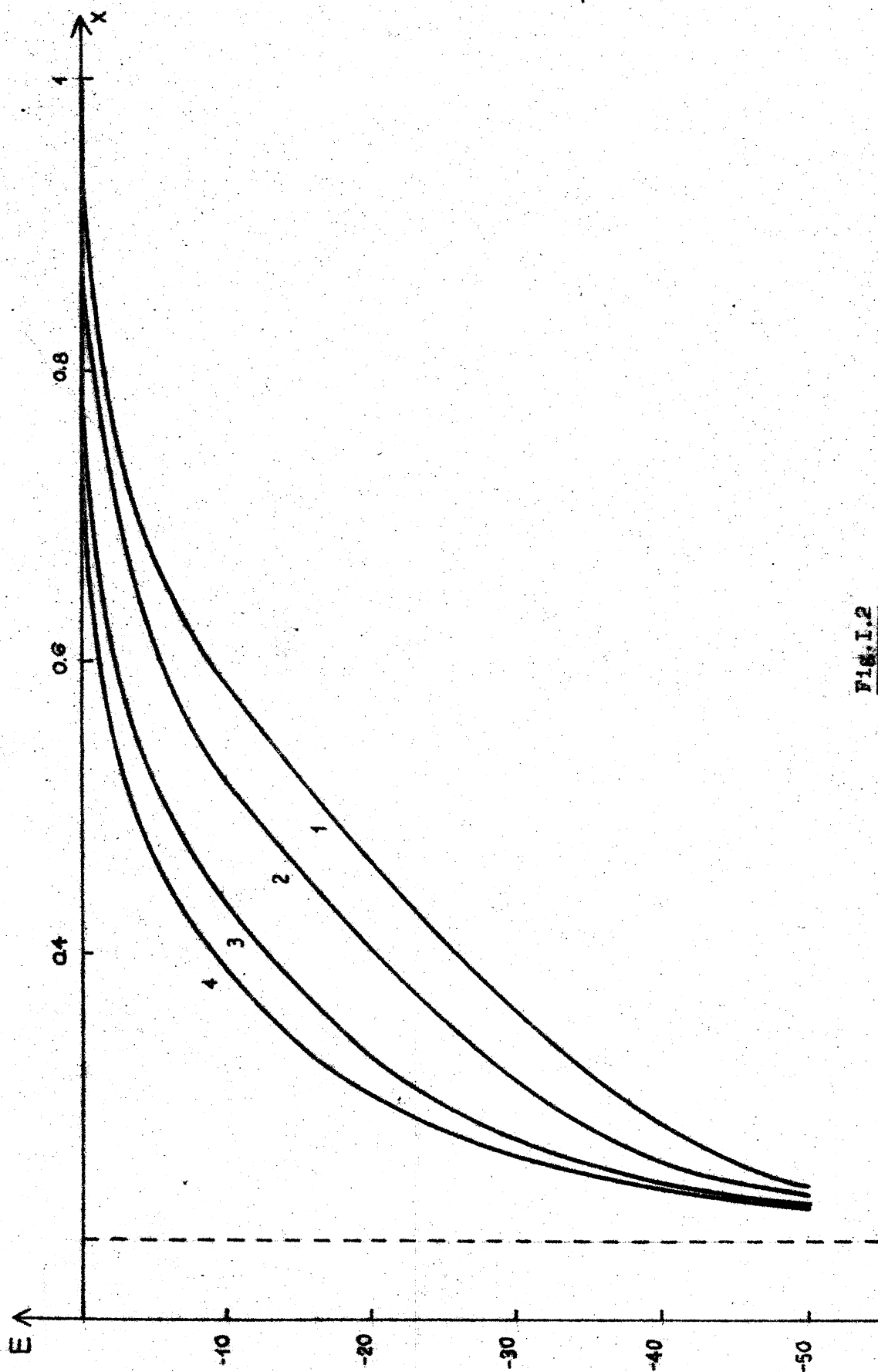


Fig. 1.2

VARIATION DU CHAMP ELECTRIQUE DANS LA BASE

$t_1=0.006$, $t_2=0.37$

$t_3=2.9$, $t_4=6.6$

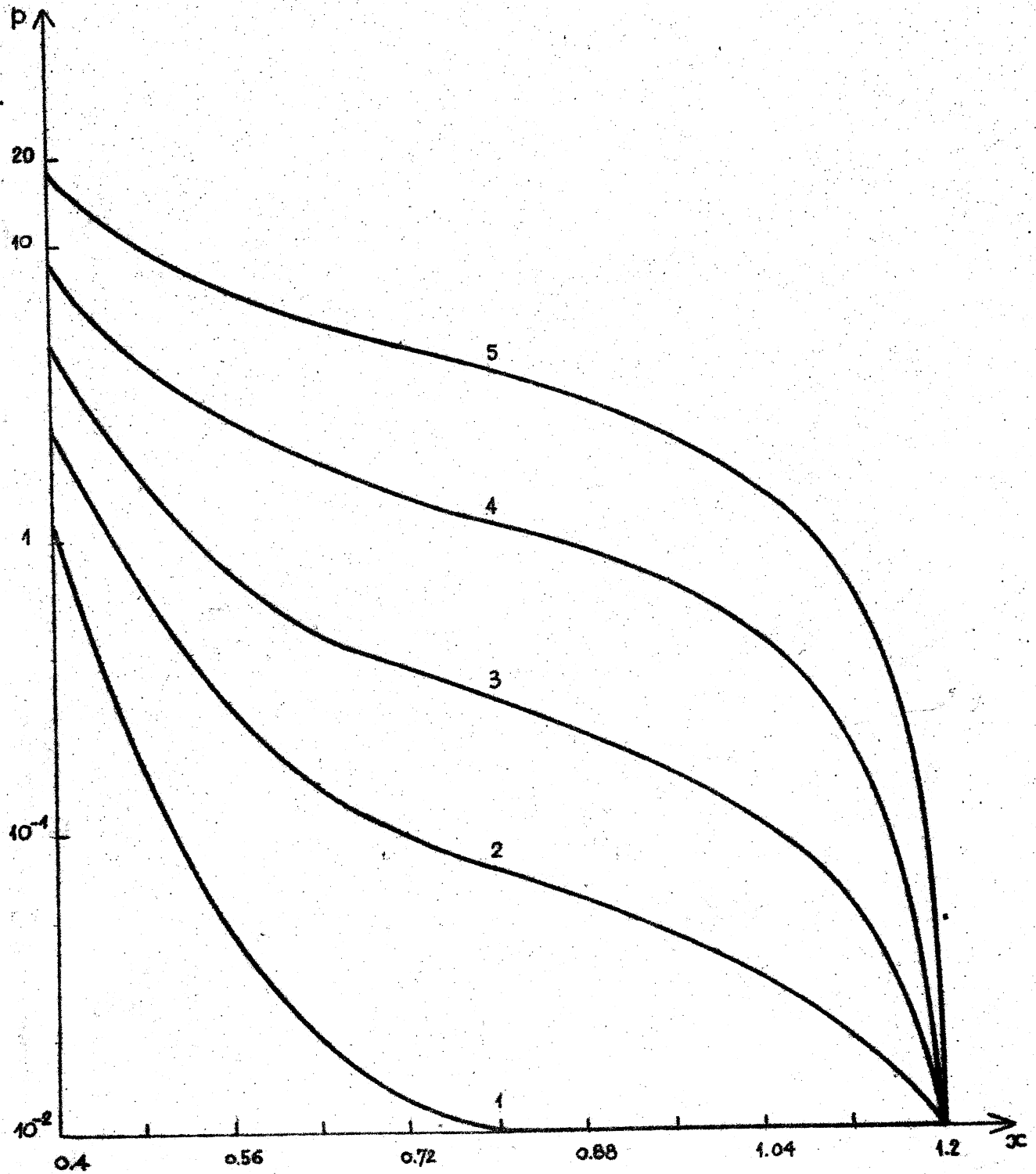
Fig.1.3

VARIATION DES TROUS EN ZONE N

$t_1=0$, $t_2=0.37$

$t_3=0.8$, $t_4=2.9$

$t_5=6.6$



80.0 81.0 82.0 83.0 84.0 85.0

80.0 81.0 82.0 83.0 84.0 85.0

Fig. I.4

VARIATION DES ELECTRONS EN ZONE P

$t_1=0$, $t_2=0.37$

$t_3=1.1$, $t_4=2.9$

$t_5=6.6$

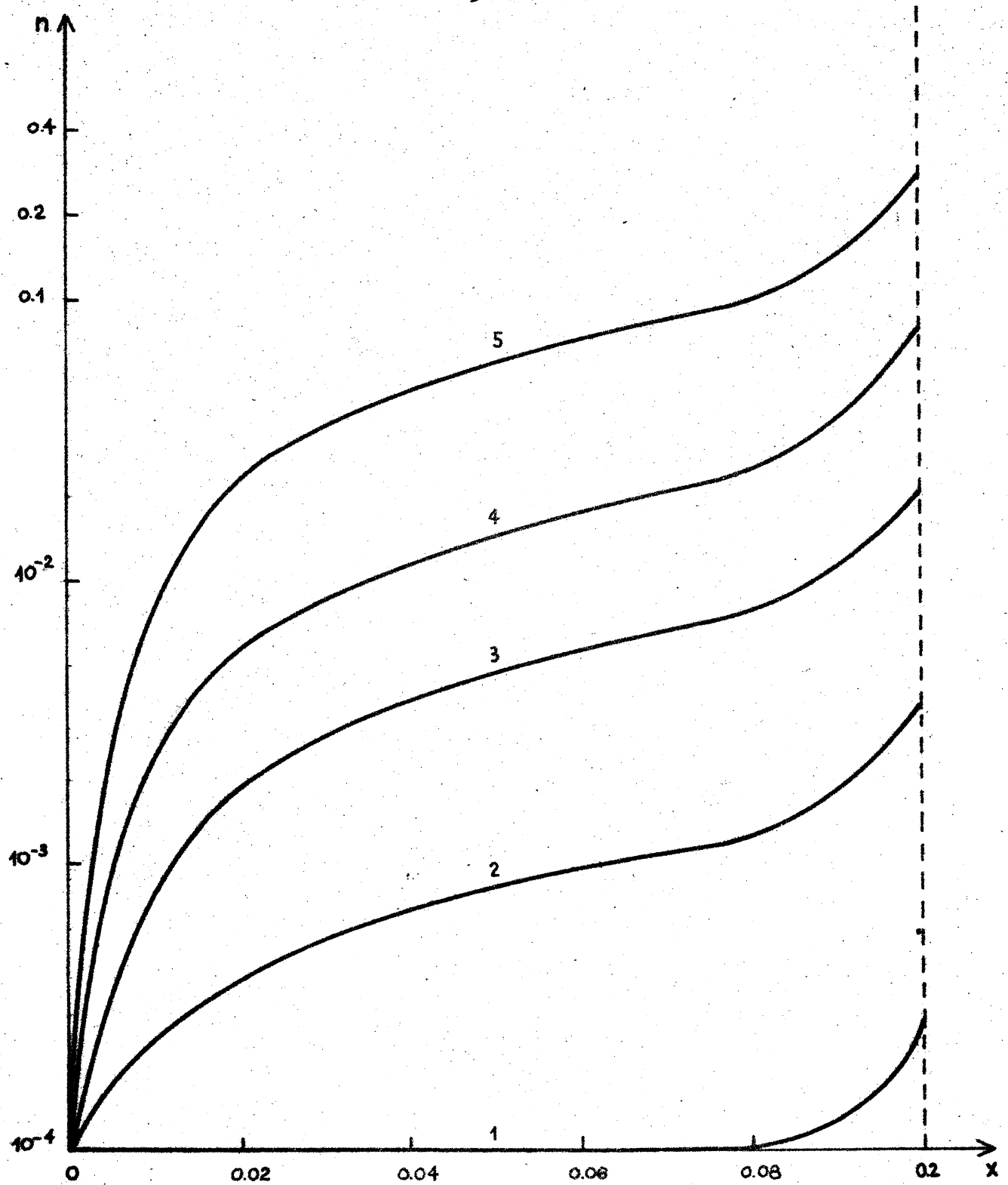
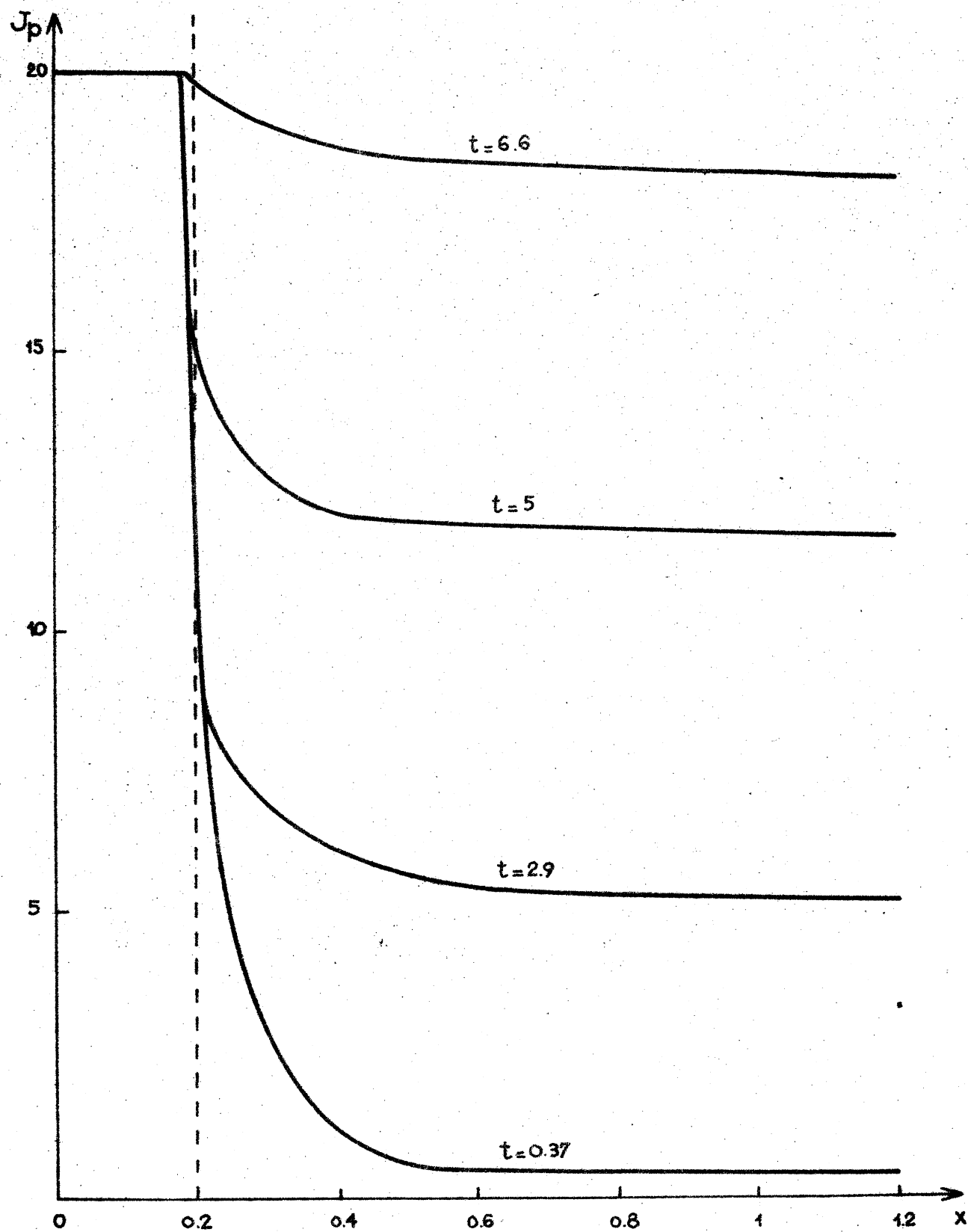


Fig. I.5
VARIATION DU COURANT J_p



Matériau : Silicium à 300°K

Longueur de la zone P : 0,05

Longueur de la zone N : 0,1

Dopage NA : 10^8

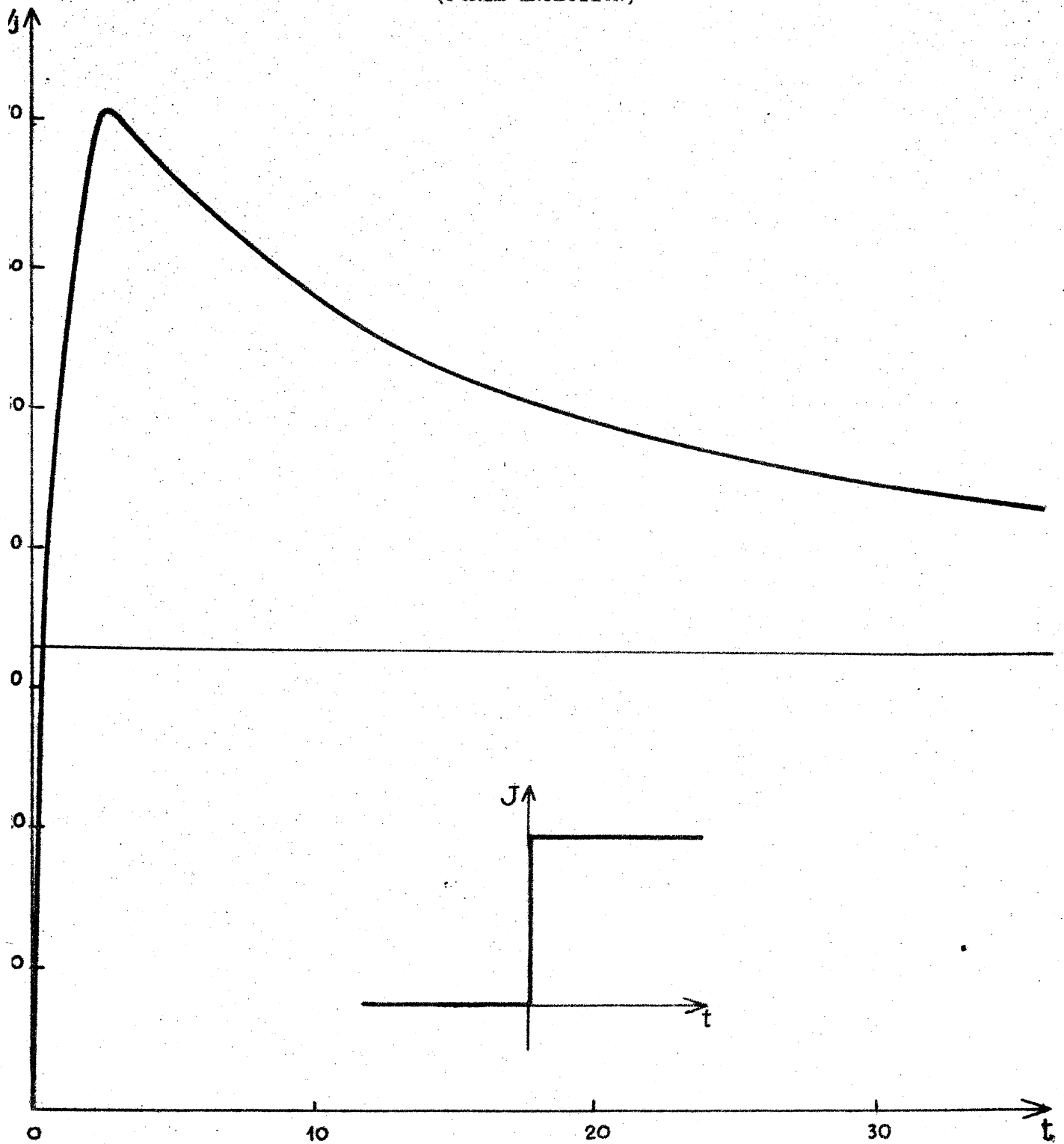
Dopage ND : 10^6

D_p : 11,5

D_n : 29,3

Fig. I.6

VARIATION DU POTENTIEL DE JONCTION
(FORTE INJECTION)



Matériau	:	Silicium à 300°K
Longueur de la zone P	:	0,05
Longueur de la zone N	:	0,1
Dopage NA	:	10^9
Dopage ND	:	10^6
D_p	:	11,5
D_n	:	29,5

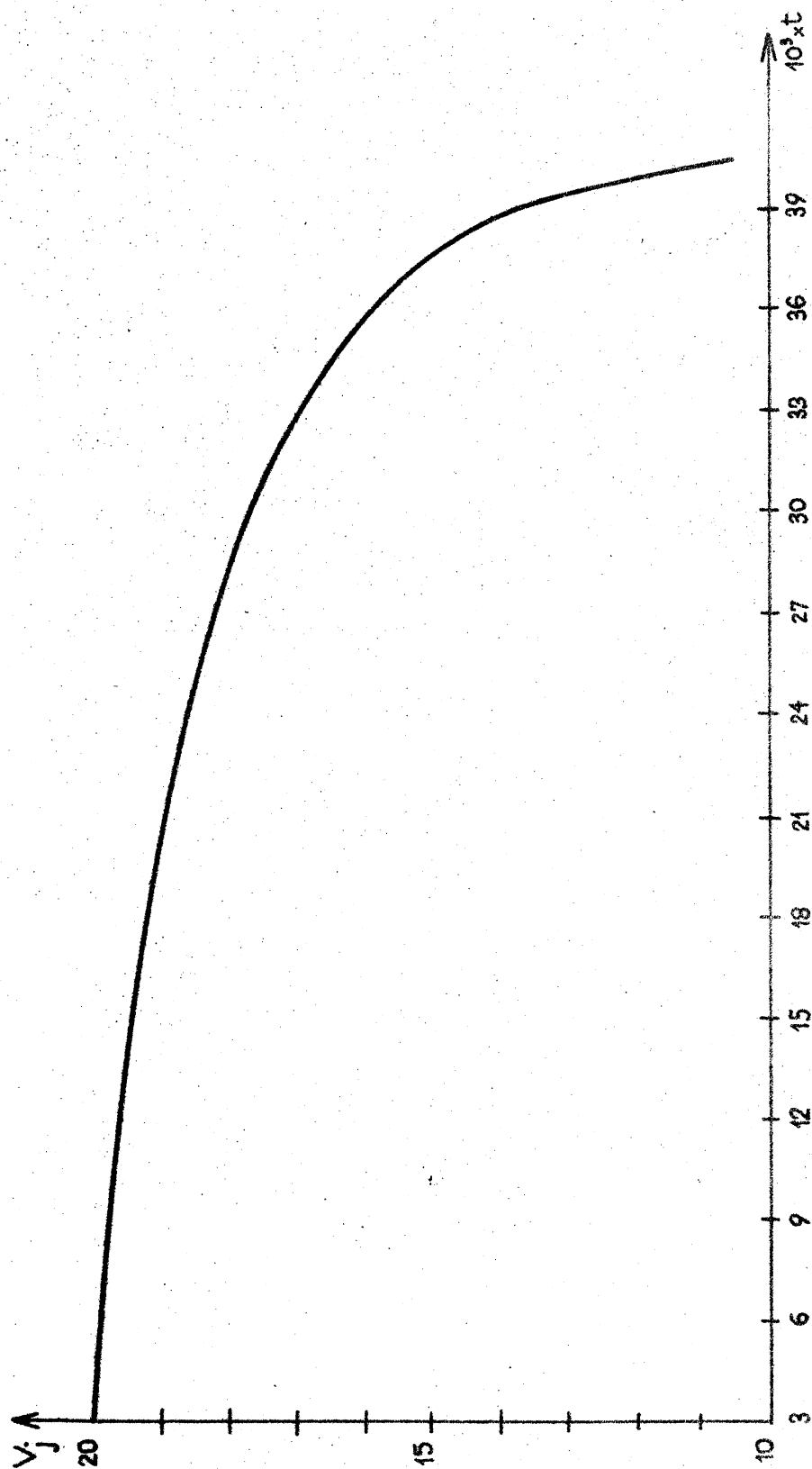
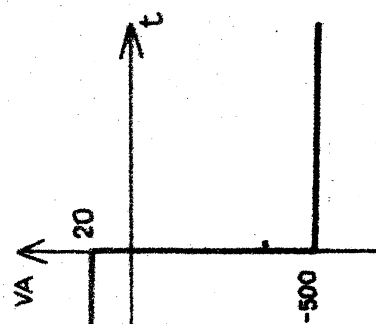


Fig. II.1.1
VARIATION DU POTENTIEL DE JONCTION
(FORTE INJECTION)

$$I_D = 0.42$$

$$I_i = 100$$



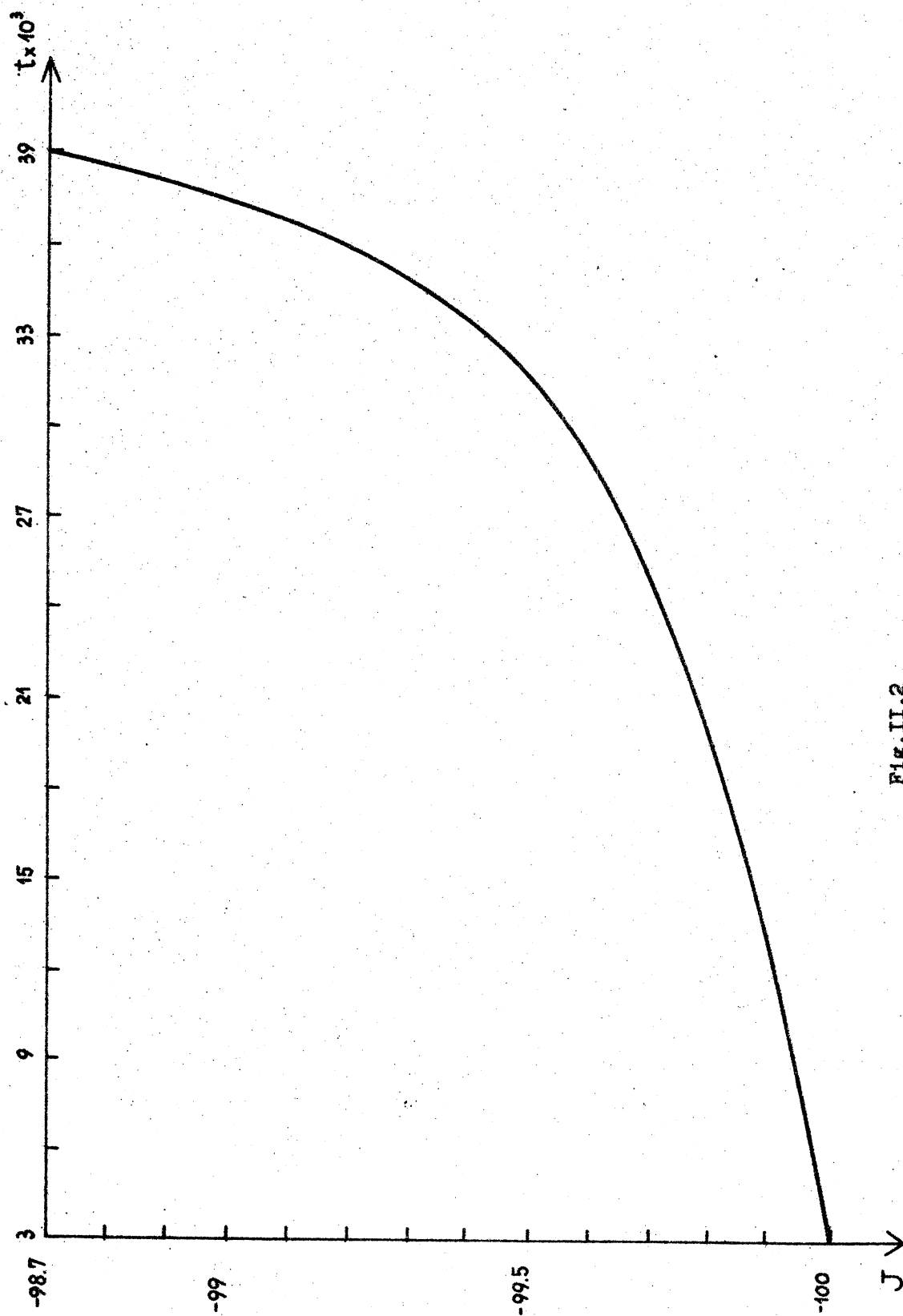
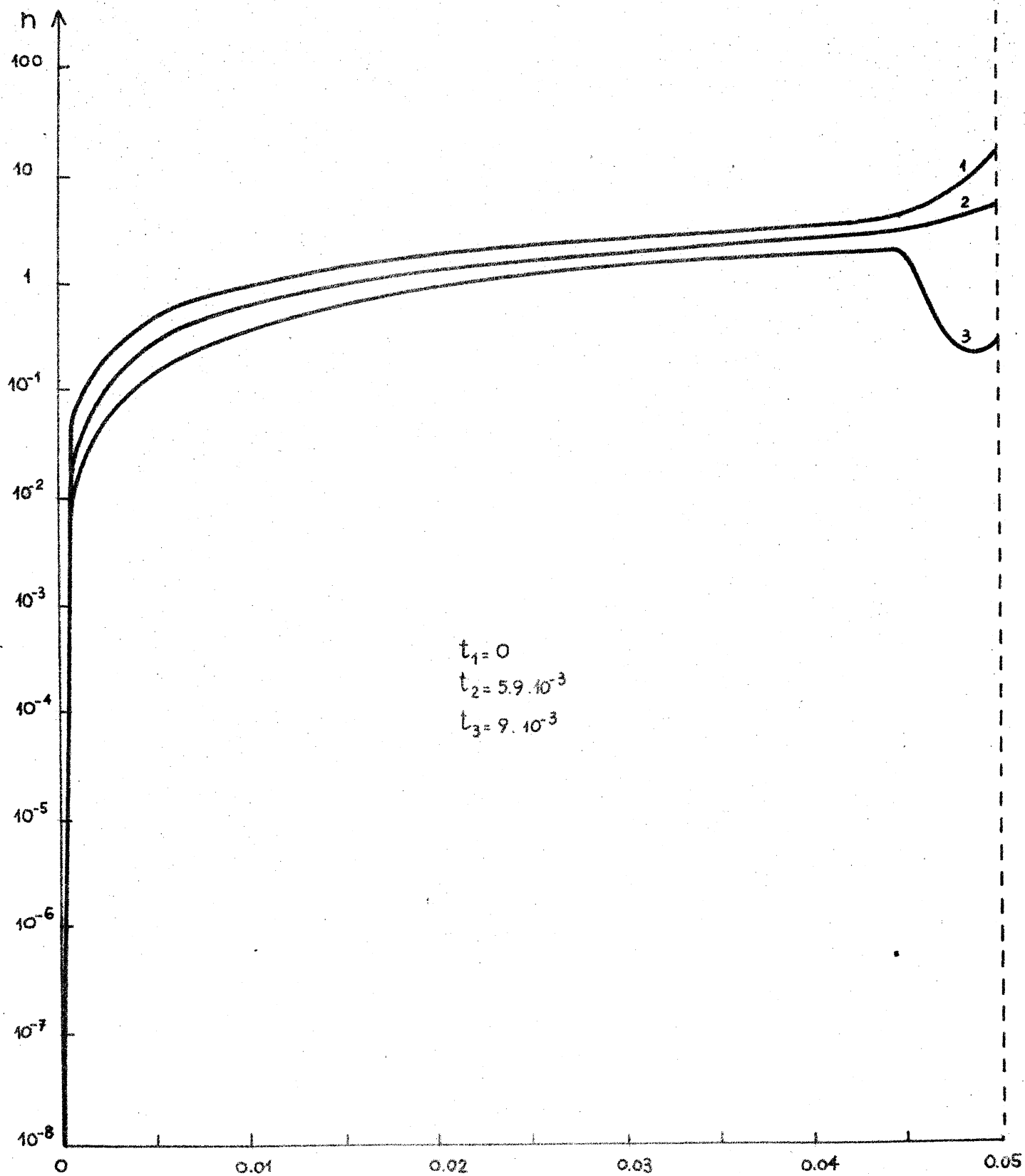


Fig. II.2
VARIATION DU COURANT TOTAL

Fig.II.3

REPARTITION DES ELECTRONS EN ZONE P



Matériau : Silicium à 300°K

Longueur de la zone P : 0,05

Longueur de la zone N : 0,1

Dopage NA : 10^8

Dopage ND : 10^6

D_p : 11,5

D_n : 29,3

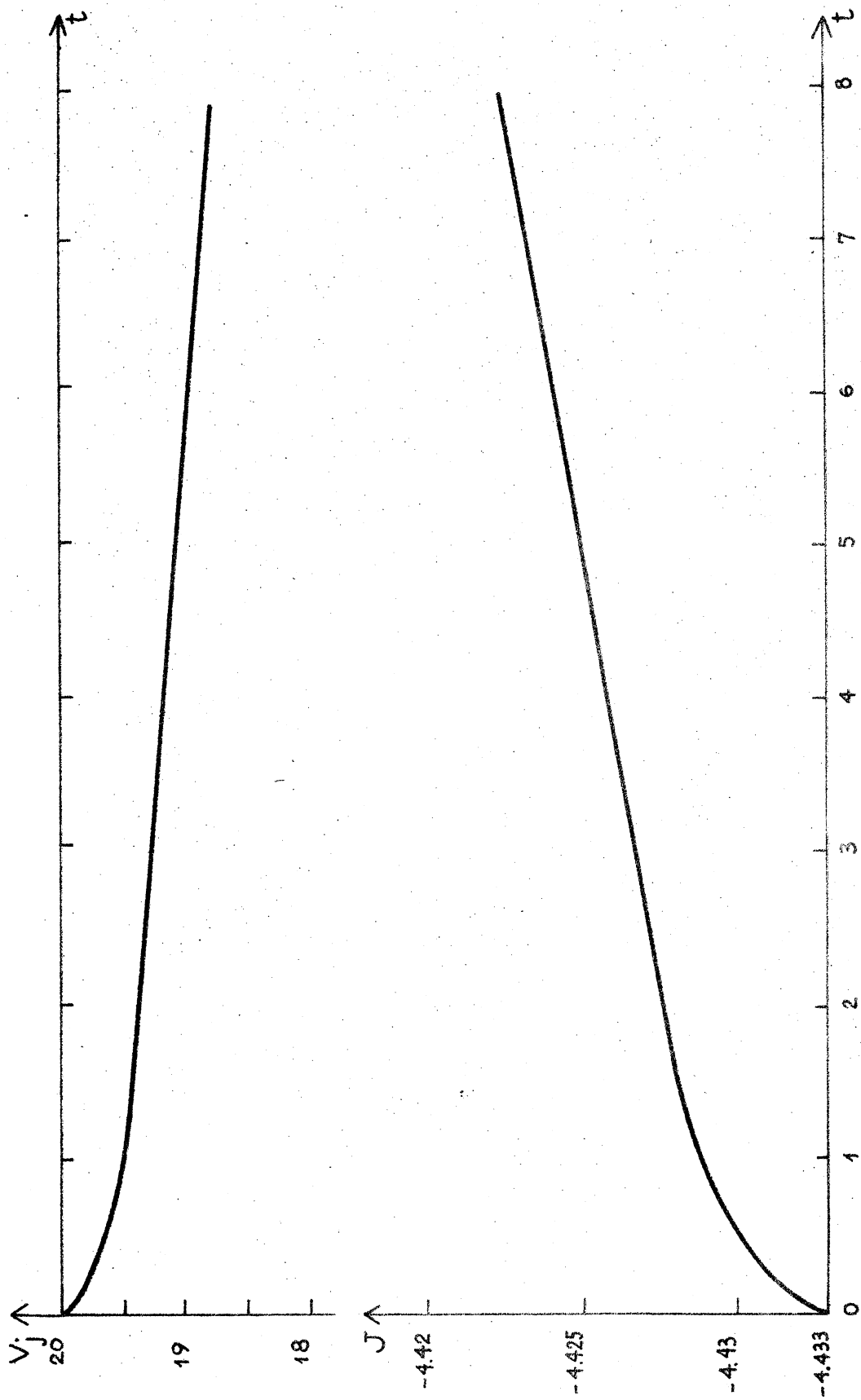
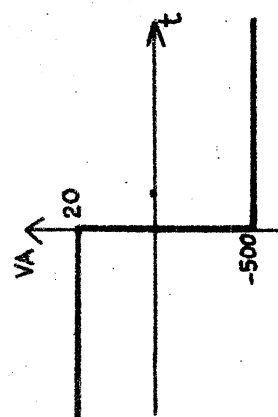


Fig. II.4

VARIATION DU POTENTIEL DE JONCTION ET DU COURANT TOTAL

(FAIBLE INJECTION)

$I_d = 0.42$, $I_i = 4.43$



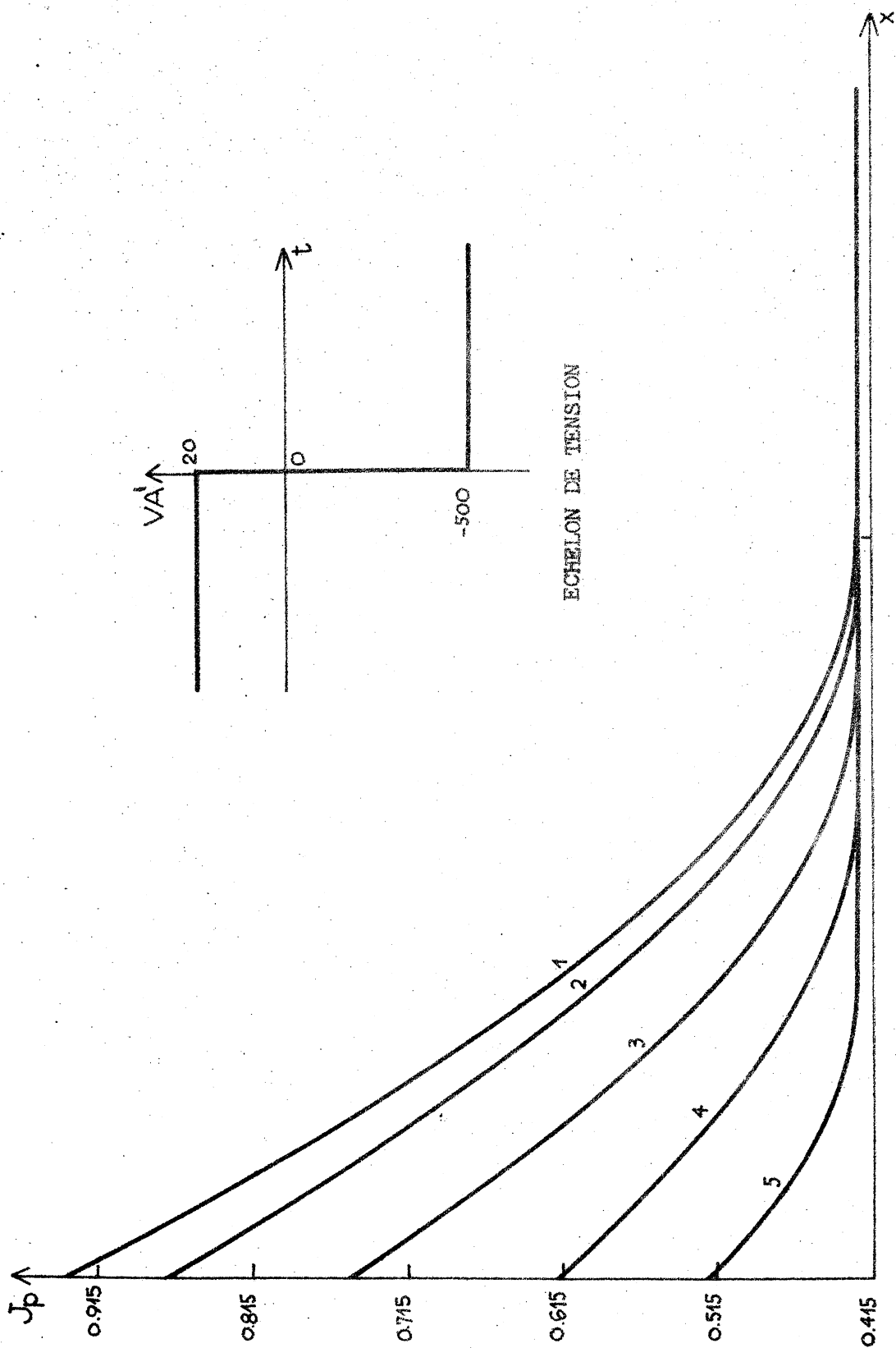


Fig. II.5

VARIATION DE J_p PRES DE LA JONCTION, EN ZONE N

$t_1=0.0026$, $t_2=0.041$

$t_3=0.09$, $t_4=0.12$

$t_5=0.15$

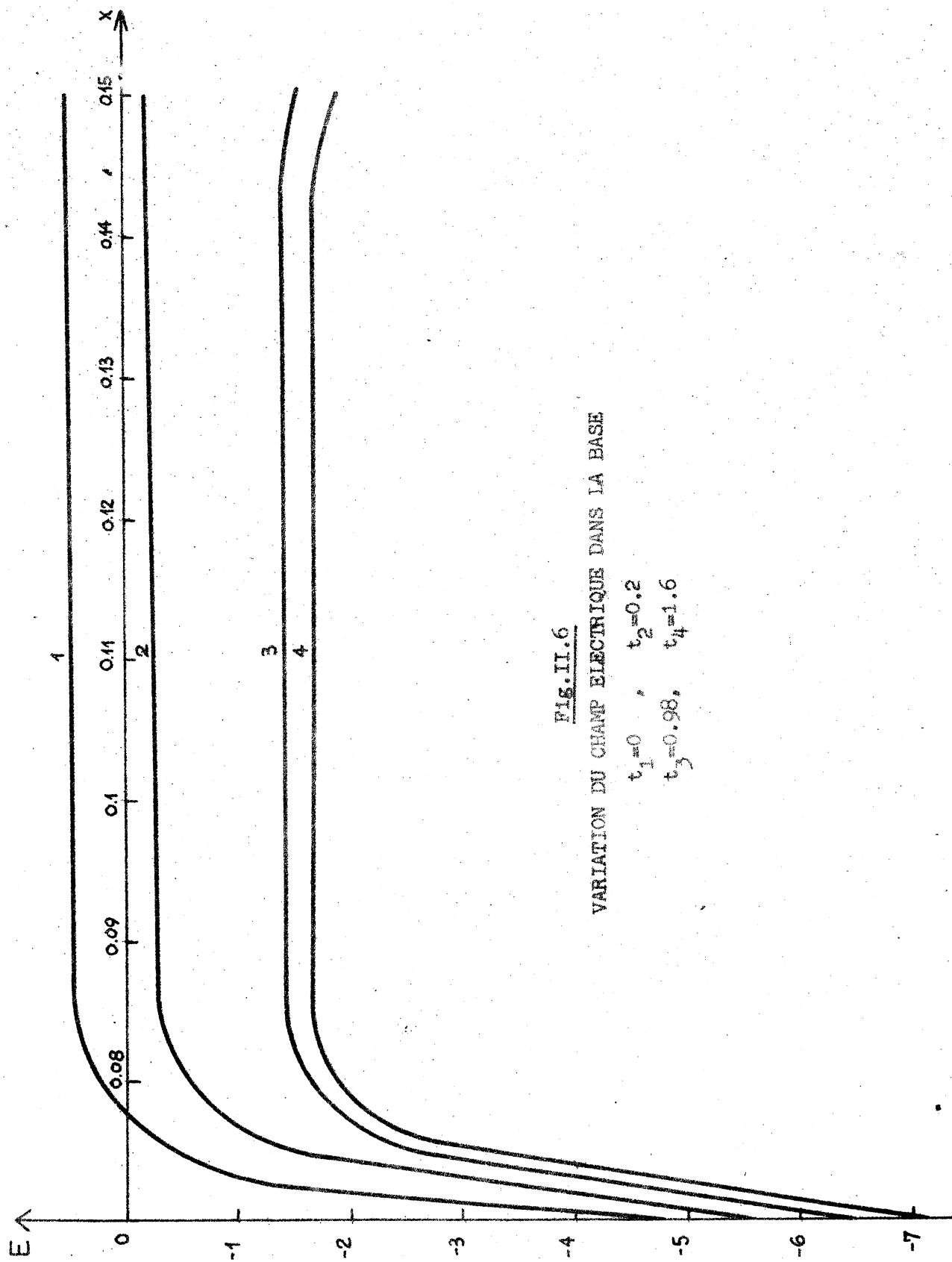


FIG. II.6

VARIATION DU CHAMP ELECTRIQUE DANS LA BASE

$$t_1=0, \quad t_2=0.2$$

$$t_3=0.98, \quad t_4=1.6$$

BIBLIOGRAPHIE

- [1] J. CRANK
P. NICOLSON A practical method for numerical evaluations of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. Proc. Cambridge Phil. Soc., pp 50-67, 1947
- [2] A. DE MARI An accurate numerical steady-state one-dimensional solution of the P-N junction. Solid State electronics, Vol. 11, pp. 33-58, 1968
- [3] A. DE MARI An accurate numerical one-dimensional solution of the P-N junction under arbitrary transient conditions Solid-State electronics, Vol. 11, pp. 1021-1053, septembre 1968
- [4] J. DOUGLAS, Jr - A survey of numerical methods for parabolic differential equations Advances in computer, Vol 2, pp. 1-52 Academic Press, 1961
- [5] J. DOUGLAS, Jr - Variable time steps in the solution of the heat equation by a difference equation T.M. GALLIE Proc. AMS, pp. 787-793, 1955
- [6] J. FAVARD Cours d'Analyse de l'Ecole Polytechnique Tome III : Théorie des Equations Gauthier-Villars, 1963
- [7] G.E. FORSYTHE Finite-difference methods for partial differential equations W.R. WASOW John-Wiley, 1960
- [8] H.K. GUMMEL A self-consistent Iterative scheme for one-dimensional steady-state transistor calculations. IEEE Transaction on electron. device, pp. 455-465, 1964
- [9] P. HENRICI Discrete variable methods for ordinary differential equations. John Wiley, 1961
- [10] H.B. KELLER Résolution d'équations paraboliques aux dérivées partielles. Chapitre 12 de Méthodes Mathématiques pour calculateurs arithmétiques de A. Ralston et H.S. Wilf. Dunod, 1965.
- [11] D.P. KENNEDY Reverse transient characteristics of a P-N junction diode due to minority carrier storage. IEEE Transaction on electron device, pp. 174-182, mars 1962

- [12] W.H. KO The reverse transient behaviour of semiconductor junction diodes.
IRE Transaction on electron devices, Vol. ED-8, mars 1961.
- [13] R.W. LADE On the dynamic behaviour of high-low junction devices.
A.G. JORDAN Journal of electronics and control, Vol. 13, Dec. 1962.
- [14] B. LAX - Transient response of a P-N junction
S.F. NEUSTADLER Journal of Applied Physic, Vol. 25, Septembre 1954.
- [15] R. LYON-CAEN - Diodes et transistors utilisés en commutation.
Masson, 1965
- [16] M.E. ROSE On the integration of non linear parabolic equations by implicit
difference methods.
Quart. Appl. Math. pp. 237-248, 1956.
- [17] W. SHOCKLEY Electrons and holes in semiconductors.
D. Van Nostrand Company, 1950.
- [18] D. VANDORPE - Etude d'un modèle mathématique de certains dispositifs semi-
conducteurs.
Thèse, Février 1969, Grenoble.
- [19] S.K. GODUNOV The theory of difference scheme
V.S. RYABENKI - An introduction
North-Holland, 1964.

VU

Grenoble, le

Le Président de la Thèse

VU

Grenoble, le

Le Doyen de la Faculté des Sciences

Vu, et permis d'imprimer,

Le Recteur de l'Académie de GRÈNOBLE

