



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

Université 20 août 1955-Skikda

Faculté des Sciences

Département de Physique

N° :

Mémoire de Master

Filière : Physique

Spécialité : physique des rayonnements.

Thème

Développement d'un modèle numérique pour la simulation du phénomène de la résistance négative d'une diode tunnel

Présenté par :

AHMED SAID Soumia

Soutenu le : 30/06/2025.

devant le jury composé de :

Kounfais Kamel	Pof	Université de Skikda	Président
Labioud Samir	MCA	Université de Skikda	Rapporteur
	MRA		Co- Rapporteur
Khelili Farid	MCB	Université de Skikda	Examineur

Année Universitaire : 2024/2025

Dédicace

Au nom d'Allah, le Tout Miséricordieux, le Très Miséricordieux.

Louange à Dieu qui m'a guidée, facilitée le chemin du savoir, et donné la force de persévérer malgré les difficultés.

À mes chers parents, Mohamed et Hadda, pour leur amour, leurs prières et leur soutien inconditionnel.

À mes frères et sœurs :

Khadija, Sara, Manel et Brahim, pour leur présence constante et leur affection.

À nos petits anges : Ilyes, Ishak, Yaacoub et Jawed, dont la joie et l'innocence ont illuminé mes journées.

Je garde dans mon cœur une pensée spéciale pour une personne discrète, mais importante, qui m'a soutenue et motivée sans le savoir.

À ma précieuse amie Mayssa, pour sa fidélité et son soutien sincère.

À celles qui ont marqué mon parcours par leur gentillesse et leur amitié : Sara, Nihal, Romissa et Mofida.

À mes enseignants et à tous mes collègues du département de physique – Faculté des Sciences de la Matière – pour leurs conseils, leur bienveillance et les moments partagés.

À tous ceux que j'ai croisés, de près ou de loin, et qui ont laissé une empreinte dans ma vie... je vous dédie humblement ce travail.

Remerciements

Je remercie tout d'abord Dieu ALLAH, le Tout-Puissant, qui m'a donné la volonté et le courage tout au long de mes années d'études.

Ce travail a été réalisé au département de physique de l'université de Skikda, sous la direction de Monsieur Samir LABIOD, Maître de Conférences A au département des Sciences de la Matière.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à mon encadreur, pour son accompagnement précieux, sa confiance, ses encouragements et son soutien constant qui ont été essentiels à la réussite de ce travail.

Je remercie également tous les membres du jury Prof. Kamel Khounfais et Dr. Farid Khelili pour avoir accepté d'examiner mon travail et pour leurs remarques constructives.

Enfin, je remercie tous ceux qui, de près ou de loin, m'ont aidée et soutenue durant cette aventure.

Sommaire

INTRODUCTION GÉNÉRALE	1
-----------------------	---

Chapitre I : État de l'art sur la diode tunnel

I.1. Introduction	3
I.2. Diode tunnel	3
I.2.1. Structure générale d'une diode tunnel	4
I.2.2. Niveaux d'énergies dans la diode tunnel	5
I.2.3. Caractéristique Volt-Ampère (V-I)	6
I.2.4. Comment fonctionne une diode tunnel	7
I.2.5. Résistance négative dans la diode tunnel	10
I.2.6. Exemple d'utilisation de la diode tunnel (circuit oscillateur)	11
I.3. Système d'équations des semi-conducteurs	12
I.3.1. Équation de Poisson	12
I.3.2. Équation de Schrödinger	12
I.3.2.1. Présentation de l'équation de Schrödinger	13
I.3.3. Conditions aux limites	14
I.3.4. Densité d'électrons	15
I.4. Conclusion	16

Chapitre II : Modélisation numérique d'une diode tunnel

II.1. Introduction	17
II.2. La méthode des différences finies	17
II.3. Principe de la méthode des différences finies	18
II.4. Discrétisation de l'équation de Schrödinger	19
II.5. Conditions aux limites transparentes	20
II.6. Discrétisation de l'équation de Poisson	23
II.7. Conditions aux contacts de type Dirichlet	24
II.8. Système d'équations obtenues	25
II.9. Méthode de résolution du couple Poisson-Schrödinger	25
II.10. Conclusion	28

Chapitre III : Simulation quantique et résultats numérique d'une diode tunnel

III.1. Introduction	29
III.2. Simulation d'une diode tunnel	29
III.2.1. Définition du domaine de calcul	29
III.2.2. Définition du dopage	30
III.3. Solution de couple Poisson-Schrödinger	30
III.3.1. Elaboration du maillage spatial	31
III.3.2. Résultats de la simulation	31

III.3.2.1. Solution initiale	31
III.3.2.2. Solution finale	32
III.3.3. 3. Fonctions d'ondes	33
III.3.3.4. Concentration des électrons	34
III.3.3.5. Energie potentielle	34
III.3.3.6. Densité de courant	35
III .4. Conclusion	36

N	Titre de figure	Page
Chapitre I : Etat de l'art sur la diode tunnel		
I.1	Profil de barrière et profil de dopage d'une hétérostructure à double barrière.	5
I.2	Transport des électrons à travers la barrière.	6
I.3	Caractéristique courant-tension typique d'une diode tunnel.	6
I.4	Diode tunnel sans polarisation.	7
I.5	Faible tension directe.	8
I.6	Tension directe maximale.	9
I.7	La tension appliquée est encore augmentée.	9
I.8	La tension appliquée est fortement augmentée.	10
I.9	Circuit équivalent pour une diode tunnel.	11
I.10	Oscillateur RLC à base de la diode tunnel.	12
Chapitre III : Simulation quantique et résultats numérique d'une diode tunnel		
III.1	définition du domaine de calcul	29
III.2	définition du profil de dopage	30
III.3	L'énergie cinétique en fonction de nombre d'onde	31
III.4	Potentiel de barrière le long de la diode tunnel.	32
III.5	Erreur en fonction des itérations.	33
III.6	Fonctions d'onde pour différent valeur de k , (a : $k=-k_m$, b : $k=-k_m/2$, c : $k=k_m/2$, d : $k=k_m$).	33-34
III.7	Distribution de la concentration des électrons sur toute la structure.	34

III.8	Énergie potentielle.	35
III.9	Caractéristique densité de courante tension (J (V)).	35

INTRODUCTION GENERALE

Introduction générale

L'industrie des semi-conducteurs a connu une évolution spectaculaire ces dernières années, avec les géométries nanométriques devenant un élément clé dans la quête de cette industrie pour améliorer les performances des appareils électroniques et réduire leur consommation d'énergie. Avec la réduction continue des tailles des composants, il est devenu essentiel d'adopter des modèles physiques plus précis pour comprendre le comportement de ces matériaux, car les modèles analytiques traditionnels ne sont plus suffisants pour traiter les effets secondaires qui apparaissent avec la miniaturisation continue des composants, tels que les réponses temporelles et fréquentielles, les profils de dopage, ainsi que les modèles de mobilité et de génération-recombinaison des électrons et des trous. L'industrie des semi-conducteurs est constamment confrontée à un défi majeur pour gérer ces effets secondaires. Cette nécessité de modélisation précise et fiable a conduit à une transition vers des modèles numériques qui reposent sur des solutions numériques des équations fondamentales des semi-conducteurs. L'un de ces modèles repose sur les équations de Schrödinger et de Poisson, qui sont essentielles pour comprendre les phénomènes quantiques dans les matériaux nanométriques. Ces modèles permettent également de traiter les effets dynamiques et interactifs entre les électrons et les trous. Ce travail a pour objectif de simuler le comportement d'une diode tunnel en utilisant des modèles numériques, et d'analyser les résultats obtenus à l'échelle nanométrique grâce à des techniques telles que la méthode des différences finies et la méthode de Gummel qui permettent de résoudre les équations couplées de manière plus efficace. Cette simulation permet d'étudier la relation courant-tension d'une diode tunnel, d'analyser la résistance négative, ainsi que d'examiner l'impact des dopages et des effets nanométriques sur les propriétés du composant. Le travail est divisé en trois chapitres principaux :

Le premier chapitre présente le fonctionnement de la diode tunnel et ses propriétés physiques de base.

Le deuxième chapitre porte sur la modélisation numérique de la diode tunnel en utilisant MATLAB, où un modèle sera développé pour calculer la caractéristique courant-tension et la résistance négative, avec un accent particulier sur les solutions numériques des équations de Schrödinger et de Poisson, ainsi que sur le traitement des conditions aux limites et l'utilisation de la méthode de Gummel.

INTRODUCTION GENERALE

Le troisième chapitre présente les résultats obtenus à partir de la simulation numérique, où seront analysées les fonctions d'ondes pour différentes énergies, ainsi que le distribué de l'énergie et la concentration des électrons dans le matériau, dans le but de tirer des conclusions quantitatives sur le comportement de la diode tunnel à l'échelle nanométrique.

CHAPITRE I :

ETAT L'ART SUR LA DIODE TUNNEL

I. 1. Introduction

Les semi-conducteurs jouent un rôle fondamental dans la conception des dispositifs électroniques modernes. Parmi eux, la diode tunnel se distingue par son mode de fonctionnement basé sur l'effet tunnel quantique. Contrairement aux diodes conventionnelles, cet effet permet aux électrons de traverser une barrière de potentiel sans apport d'énergie supplémentaire, grâce au principe du tunneling quantique.

Cette caractéristique confère à la diode tunnel des propriétés uniques, notamment la présence d'une zone de résistance négative dans sa courbe courant-tension. Cette propriété est exploitée dans diverses applications, telles que les oscillateurs haute fréquence, les circuits à commutation rapide, ainsi que certaines technologies de nanoélectronique.

Dans ce chapitre, nous présenterons une étude détaillée de la structure de la diode tunnel, de ses niveaux d'énergie et de son principe de fonctionnement. Nous explorerons également les équations fondamentales qui régissent son comportement, notamment les équations de Poisson et de Schrödinger, essentielles pour modéliser les interactions électroniques au sein du dispositif.

I.2. Diode tunnel

La diode tunnel est un dispositif semi-conducteur qui exploite l'effet tunnel quantique pour permettre un passage rapide des électrons à travers une jonction p-n fortement dopée. Cette caractéristique lui confère une résistance négative dans une certaine plage de tension, ce qui la différencie des diodes classiques.

Découverte par Leo Esaki en 1957, la diode tunnel a rapidement trouvé des applications dans les circuits à haute fréquence et les oscillateurs à cause de sa capacité à commuter à des vitesses extrêmement élevées. Son fonctionnement repose sur le fait que les porteurs de charge traversent la barrière de potentiel sans acquérir l'énergie nécessaire pour le faire selon la physique classique, grâce à l'effet tunnel [1-2].

Ce composant est fabriqué à partir de matériaux tels que le germanium, l'arséniure de gallium et le silicium, qui optimisent ses performances. Son utilisation s'étend aux détecteurs de fréquence, aux convertisseurs et aux systèmes électroniques de pointe qui nécessitent une commutation ultrarapide.

I.2.1. La structure générale d'une diode tunnel

La diode tunnel est composée d'un corps en céramique recouvert d'un capot hermétique assurant son isolation et sa protection. Une petite pastille d'étain est soit alliée, soit soudée à une puce semi-conductrice fortement dopée en germanium (Ge) de type n. Cette pastille est fixée avec précision afin de garantir une conductivité électrique optimale [3].

Le dispositif unidimensionnel se compose de trois régions : deux régions fortement dopées, $[0, a_1]$, et $[a_6, L]$ avec une concentration de dopage n_D^1 , et une région faiblement dopée, $[a_1, a_6]$, avec une densité de dopage n_D^2 (voir Figure 1). L'intervalle central contient un double barrière, décrite par le potentiel de barrière.

$$V_{barr}(x) = \begin{cases} V_0 & \text{pour } x \in [a_2, a_3] \cup [a_4, a_5], \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (I.1)$$

Le profil de dopage est défini par :

$$n_D(x) = \begin{cases} n_D^1 & \text{pour } x \in [0, a_1] \cup [a_6, L] \\ n_D^2 & \text{sinon} \end{cases} \quad (I.2)$$

$$\text{Les paramètres sont pris de : } \begin{cases} a_1, a_2, a_3 \\ a_4, a_5, a_6 \\ L, n_D^1, n_D^2 \end{cases}$$

Et la hauteur de la barrière es $V_0 = 0.3eV$

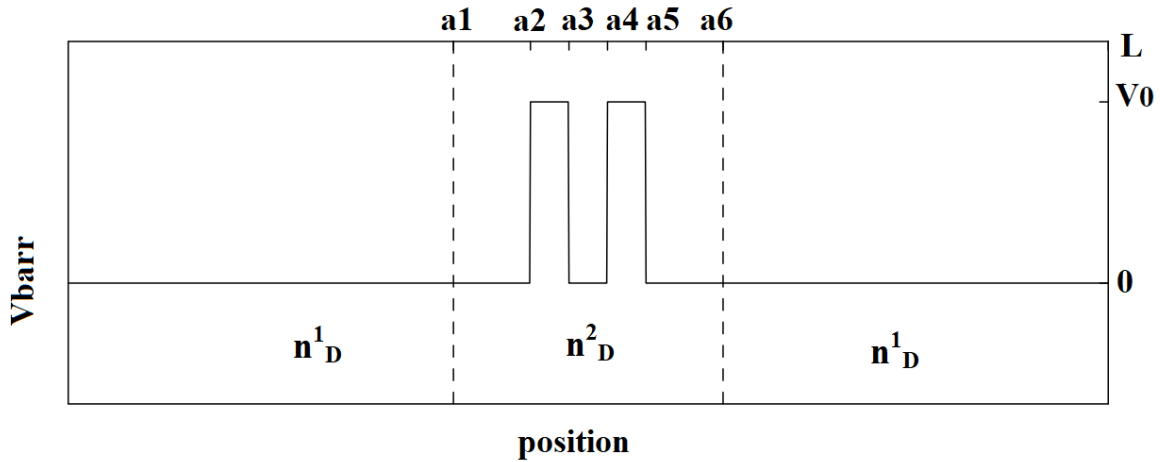


Figure I.1 : profil de barrière et profil de dopage d'une hétérostructure à double barrière [3].

I.2.2. Niveaux d'énergies dans la diode tunnel

Dans un semi-conducteur, les électrons occupent différents niveaux d'énergie organisés en bandes électroniques : La bande de valence est la bande énergétique où les électrons sont fortement liés aux atomes du cristal et ne peuvent pas se déplacer librement. La bande de conduction est située juste au-dessus et contient les électrons libres responsables du transport de charge. Entre ces deux bandes se trouve le gap énergétique (E_g), une zone interdite où aucun état électronique n'est autorisé.

Dans une diode tunnel, qui est un semi-conducteur fortement dopé, ce gap énergétique est très réduit, ce qui rapproche fortement la bande de conduction de la région et la bande de valence de la région. Cette proximité permet aux électrons de traverser la barrière de potentiel par effet tunnel sans acquérir une énergie suffisante pour atteindre la bande de conduction de manière classique. Ce phénomène entraîne une caractéristique courant-tension unique, où l'on observe une région de résistance négative. Cela signifie que lorsque la tension augmente après un certain seuil, le courant diminue temporairement avant d'augmenter à nouveau. Ce comportement est exploité dans des applications comme les oscillateurs hauts fréquence et les circuits ultrarapides.

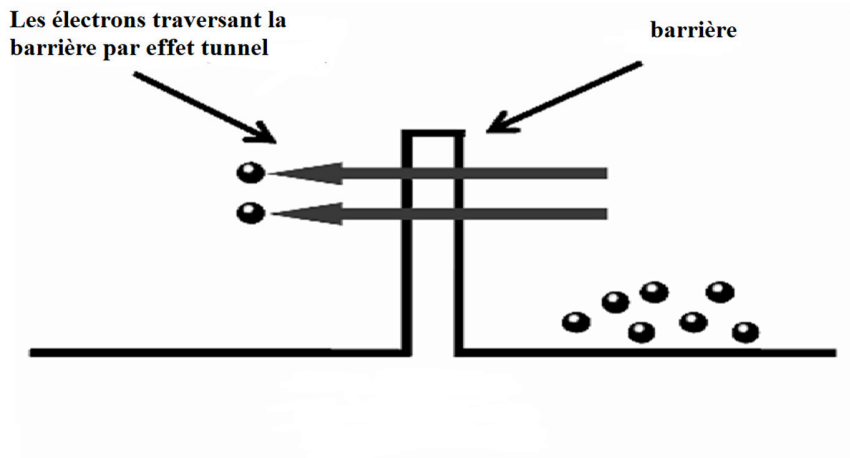


Figure I.2 : Transport des électrons à travers la barrière [4].

I.2.3. Caractéristiques de courant-tension

Si la tension appliquée aux bornes du conducteur augmente considérablement, le courant tunnel devient nul. Dans cette situation, la bande de conduction du côté N et la bande de valence du côté P ne se chevauchent plus. La diode se comporte alors comme une diode de jonction PN classique. Lorsque l'amplitude de la tension dépasse la tension intégrée, un courant direct traverse la diode.

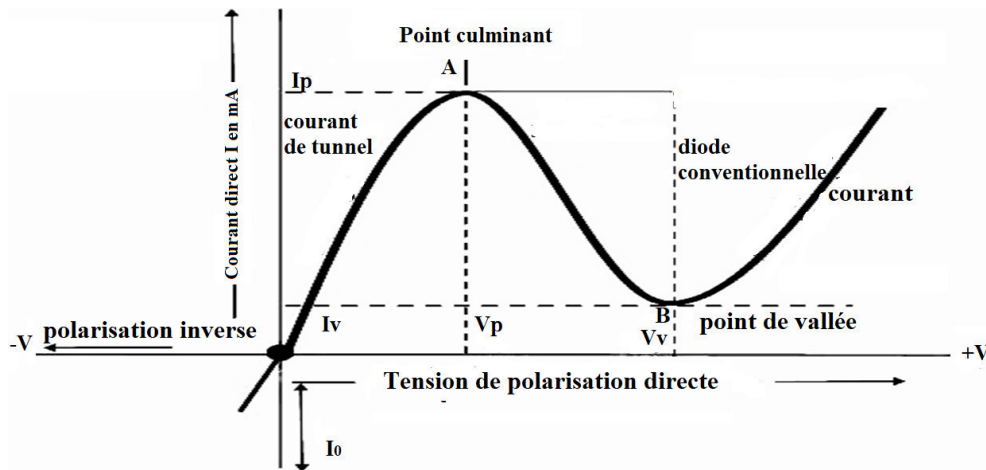


Figure I.3 : caractéristique courant-tension typique d'une diode tunnel [5].

Le graphique illustre la relation entre le courant (I) et la tension (V) dans une diode tunnel, mettant en évidence les trois phases principales du comportement du courant en fonction de la

CHAPITRE I : ETAT L'ART SUR LA DIODE TUNNEL

tension appliquée. Dans la première phase, lorsque la tension augmente de zéro à V_P , le courant augmente rapidement en raison de l'effet tunnel quantique, atteignant un maximum au point (V_P, I_P) . Ensuite, la deuxième phase commence, correspondant à la région de résistance négative entre V_P et V_v , où le courant diminue malgré l'augmentation de la tension, un comportement inhabituel dans les circuits électroniques classiques. Dans cette zone, la diode tunnel renvoie de l'énergie au circuit au lieu de la consommer, ce qui permet de générer des oscillations et d'amplifier des signaux haute fréquence. Enfin, dans la troisième phase, lorsque la tension dépasse V_v , le courant recommence à augmenter et la diode se comporte comme une diode conventionnelle.

I.2.4. Comment fonctionne une diode tunnel

Etape1: diode tunnel non polarisée

Lorsqu'aucune tension n'est appliquée à la diode tunnel, on dit qu'elle est non polarisée. Dans une diode tunnel, la bande de conduction du matériau de type n chevauche la bande de valence du matériau de type p en raison du dopage élevé [4].

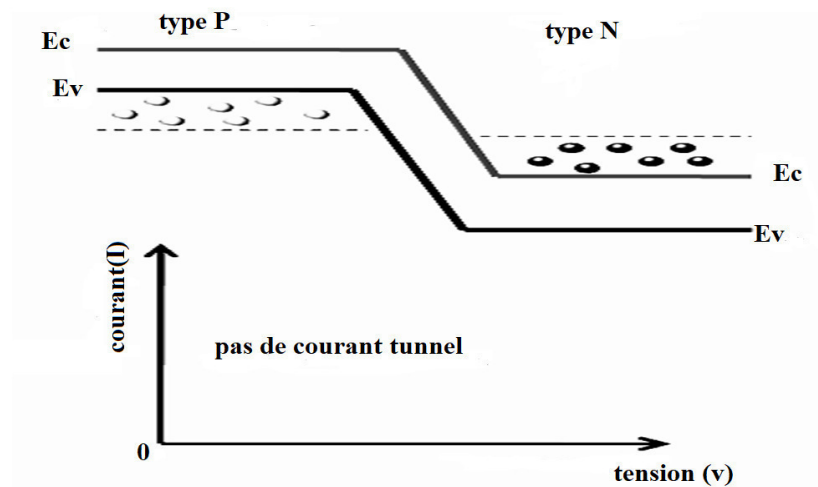


Figure I.4 : diode tunnel sans polarisation [4].

En raison de ce chevauchement, les électrons de la bande de conduction du côté n et les trous de la bande de valence du côté p se trouvent presque au même niveau d'énergie. Ainsi, lorsque la température augmente, certains électrons traversent par effet tunnel de la bande de conduction de la région n vers la bande de valence de la région p. De la même manière, les trous traversent par effet tunnel de la bande de valence de la région p vers la bande de conduction de la région n.

CHAPITRE I : ETAT L'ART SUR LA DIODE TUNNEL

Cependant, le courant net sera nul, car un nombre égal de porteurs de charge (électrons libres et trous) circulent dans des directions opposées.

Étape 2 : Application d'une faible tension à la diode tunnel

Lorsqu'une faible tension est appliquée à la diode tunnel, inférieure à la tension de construction de la couche de déplétion, aucun courant de conduction ne traverse la jonction.

Cependant, un petit nombre d'électrons dans la bande de conduction de la région **n** traversent par effet tunnel vers les états vides de la bande de valence dans la région **p**. Cela crée un petit courant tunnel en polarisation directe. Ainsi, un courant tunnel commence à circuler avec une faible application de tension [4].

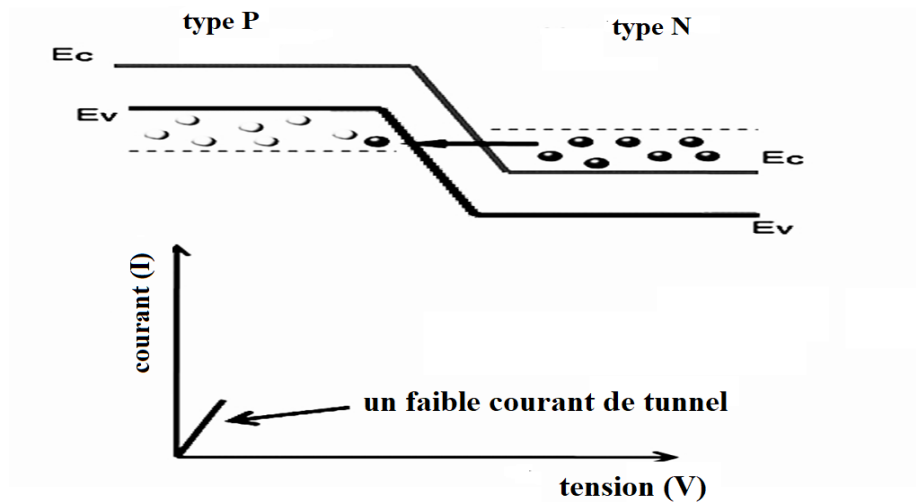


Figure .I.5 : faible tension directe [4].

Etape 3 : la tension appliquée est légèrement augmentée

Lorsque la tension appliquée à la diode tunnel est légèrement augmentée, un grand nombre d'électrons libres du côté n et de trous du côté p sont générés. En raison de cette augmentation de tension, le chevauchement entre la bande de conduction et la bande de valence augmente [4].

CHAPITRE I : ETAT L'ART SUR LA DIODE TUNNEL

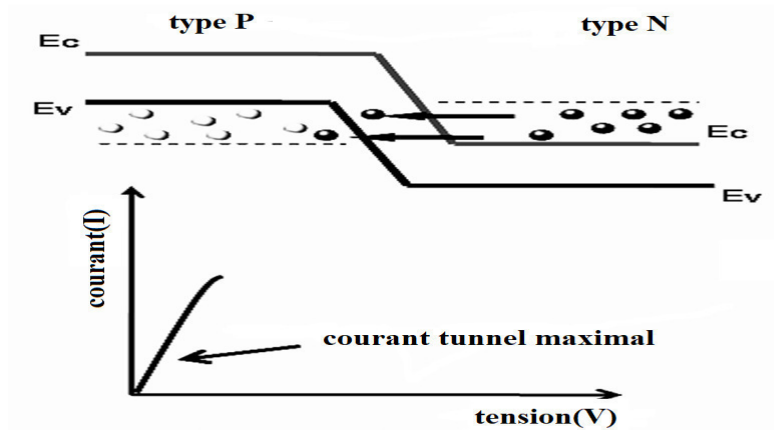


Figure .I.6 : tension directe maximale [4].

En termes simples, le niveau d'énergie de la bande de conduction du côté n devient exactement égal au niveau d'énergie de la bande de valence du côté p. En conséquence, le courant tunnel atteint son maximum.

Étape 4 : La tension appliquée est encore augmentée

Si la tension appliquée est encore augmentée, un léger désalignement entre la bande de conduction et la bande de valence se produit [4].

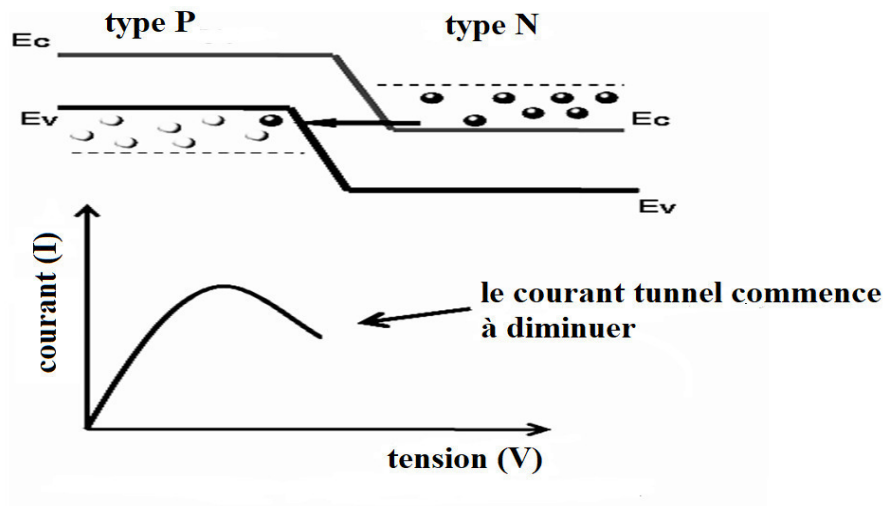


Figure .I.7 : la tension appliquée est encore augmentée [4].

CHAPITRE I : ETAT L'ART SUR LA DIODE TUNNEL

Comme la bande de conduction du matériau de type n et la bande de valence du matériau de type p se chevauchent encore, les électrons passent de la bande de conduction de la région n à la bande de valence de la région p, générant un faible courant. Ainsi, le courant de tunnel commence à diminuer.

Étape 5: la tension appliquée est considérablement augmentée

Si la tension appliquée est fortement augmentée, le courant de tunnel tombe à zéro. À ce stade, la bande de conduction et la bande de valence ne se chevauchent plus, et la diode tunnel fonctionne de la même manière qu'une diode à jonction p-n normale [4].

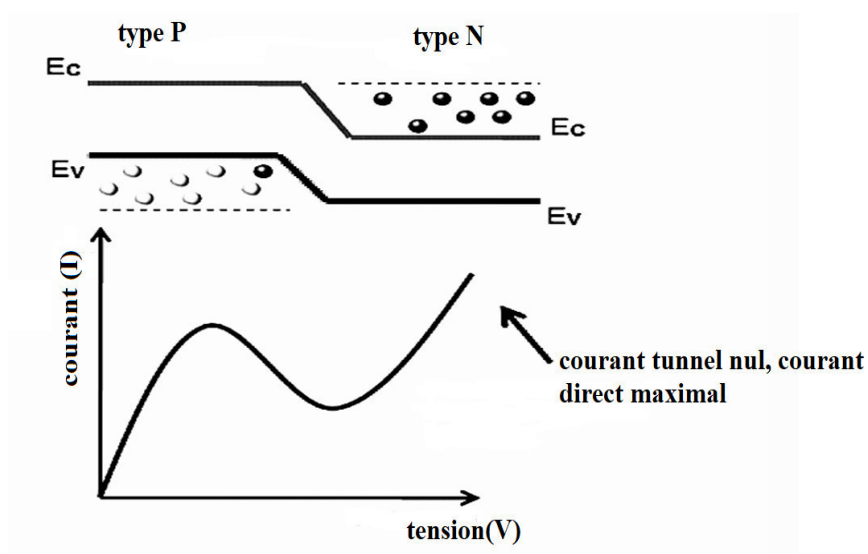


Figure. I.8 : la tension appliquée est fortement augmentée [4].

Si cette tension appliquée est supérieure au potentiel de la couche de déplétion, le courant direct normal commence à circuler à travers la diode tunnel. La partie de la courbe où le courant diminue à mesure que la tension augmente correspond à la région de résistance négative de la diode tunnel. La région de résistance négative est la caractéristique la plus importante et la plus largement utilisée de la diode tunnel. Une diode tunnel fonctionnant dans la région de résistance négative peut être utilisée comme amplificateur ou oscillateur.

I.2.5. Résistance négative d'une diode tunnel

La diode tunnel se distingue par le phénomène de résistance différentielle négative. Le courant commence à diminuer après avoir atteint la valeur de crête (I_p) malgré l'augmentation continue de la tension. Ce comportement est dû à l'effet de tunnel quantique, qui permet aux

CHAPITRE I : ETAT L'ART SUR LA DIODE TUNNEL

électrons de traverser la barrière au lieu de la surmonter avec de l'énergie thermique, ce qui entraîne la génération d'énergie plutôt que son absorption. Grâce à cette propriété, la diode tunnel est utilisée dans les applications micro-ondes et les communications à haute fréquence. Elle se caractérise par une vitesse de réponse rapide, une faible consommation d'énergie, une faible luminosité, une longue durée de vie et une bonne résistance aux conditions environnementales. Cependant, elle présente certains inconvénients, tels que la réduction du rapport du courant de crête au courant de vallée et la difficulté de reproduction dans le processus de fabrication, ce qui peut limiter son utilisation dans certaines applications avancées. Malgré ces défis, la diode tunnel reste un composant essentiel des circuits électroniques nécessitant des performances élevées, une grande vitesse et une efficacité énergétique.

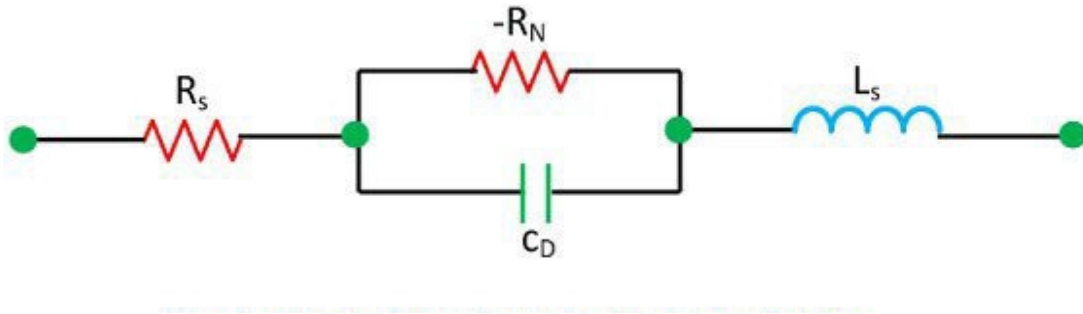


Figure I.9 : Circuit équivalent pour une diode tunnel.

I.2.6. Exemple d'utilisation de la diode tunnel (circuit oscillateur)

La diode tunnel est utilisée dans les circuits oscillateurs grâce à sa région de résistance négative, qui permet de compenser les pertes d'énergie dans le circuit. Un exemple typique est l'oscillateur à diode tunnel, où la diode est insérée dans un circuit résonant LC (composé d'une inductance L et d'un condensateur C). Ce montage permet de maintenir des oscillations continues sans signal d'entrée externe, car la diode fournit l'énergie nécessaire au maintien de l'oscillation. La fréquence de fonctionnement dépend des valeurs de L et C, et elle est donnée par l'expression

$$W = \frac{1}{\sqrt{Lc}} \quad (I.3)$$

Ce type de circuit est utilisé dans les systèmes à haute fréquence, comme les générateurs de signaux RF ou les dispositifs radar.

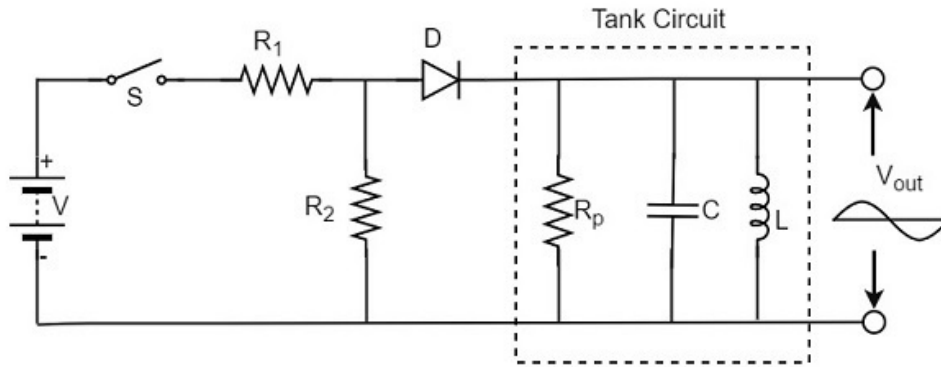


Figure .I10 : Oscillateur RLC à base de la diode tunnel [6].

I.3. Système d'équations de semi-conducteurs :

I.3.1. Équation de Poisson

L'équation de Poisson est un outil mathématique fondamental permettant de calculer la distribution du potentiel électrique dans un semi-conducteur. Elle établit un lien entre le potentiel électrostatique et la densité de charge présente dans le matériau. Cette charge résulte du déplacement des porteurs libres (électrons et trous) ainsi que des impuretés ionisées, supposées totalement ionisées. L'équation de Poisson en une dimension s'écrit comme suit [7-8].

$$\nabla^2 V(x) = \frac{e^2}{\varepsilon} (n(x) - n_D) \quad (I.4)$$

Cette équation joue un rôle clé dans l'étude de la distribution du champ électrique dans les structures semi-conductrices telles que les diodes et les transistors. Elle est couramment utilisée dans la simulation et la caractérisation des dispositifs électroniques et nanoélectroniques avancés.

I.3.2. Equation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger est une équation fondamentale de la physique quantique, comme l'est la loi de Newton en physique classique. On la retrouve pour décrire des phénomènes assez variés que ce soit dans l'optique quantique (propagation d'un faisceau de laser), la physique atomique (supraconductivité, condensation de Bose-Einstein), la technologie électronique (semi-

CHAPITRE I : ETAT L'ART SUR LA DIODE TUNNEL

conducteurs, transistors, mémoires), la physique des plasmas, l'astrophysique, la microscopie électronique, la neutronique, la chimie ou encore la biologie, ... [9].

Comme exemple, on va regarder la description du transport électronique dans des dispositifs semi-conducteurs de taille nanométrique (MOSFET, RTD, guides d'onde,...). Ces dispositifs sont les composants essentiels de l'industrie électronique d'aujourd'hui. En raison de leur petite taille, atteignant des échelles nanométriques, des effets quantiques commencent à jouer un rôle important, comme l'effet tunnel, les interférences, la quantification, etc. Les modèles classiques (équation de Newton entre autres) ne sont plus valables et l'approche quantique (équation de Schrödinger) devient nécessaire.

L'équation de Schrödinger est également largement utilisée dans la modélisation des nano dispositifs, tels que les diodes tunnel. Elle permet de décrire avec précision les phénomènes quantiques comme l'effet tunnel et les résonances, qui deviennent dominants à l'échelle nanométrique [10].

I.3.2.1. Présentation de l'équation de Schrödinger

Nous associons à une particule une quantité ψ que nous appelons fonction d'onde

$$\phi(x, t) = Ae^{i(px-Et)/\hbar} \quad (I.5)$$

On considère l'équation générale du mouvement non relativiste

$$E = E_c + E_p = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (I.6)$$

Avec V est énergie potentielle et E_c présente l'énergie cinétique

On calcule aussi la dérivée de $\psi(x, t)$ par rapport au temps :

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi(x, t) = \frac{E}{i\hbar} \phi(x, t) \quad (I.7)$$

Ce qui permet d'écrire finalement

$$E\phi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(x, t) \quad (I.8)$$

Pour différents états quantiques, l'équation I.6 devient

CHAPITRE I : ETAT L'ART SUR LA DIODE TUNNEL

$$\frac{p^2}{2m} \phi(x,t) + V(x) \phi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(x,t) \quad (I.9)$$

Nous calculons alors les dérivées de $\psi(x, t)$ par rapport à x :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} \phi(x,t) = \frac{ip}{\hbar} \phi(x,t) \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x,t) = -\frac{p^2}{\hbar^2} \phi(x,t) \end{cases} \quad (I.10)$$

Alors

$$p^2 \phi(x,t) = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x,t) \quad (I.11)$$

Et enfin en utilisant les résultats précédents, nous allons avoir

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x,t) + V(x,t) \phi(x,t) \quad (I.12)$$

Avec $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05457 \times 10^{-34} Js$

Pour calculer l'équation de Schrödinger indépendant du temps On a :

$$\phi(x,t) = \phi(x) e^{-iEt/\hbar} \quad (I.13)$$

Dans ce cas, $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(x,t) = E\phi(x,t)$, Un électron dans un domaine de calcul a une fonction d'onde qui satisfait l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi_k}{dx^2}(x) + V(x) \phi_k(x) = E(k) \phi_k(x) \quad (I.14)$$

I.3.3. Conditions aux limites

Pour les régions p et n, nous pouvons utiliser les solutions standard de particules libres, en supposant que l'électron est incident depuis la gauche pour $k > 0$, La fonction d'onde dans les dérivations est donnée par :

$$\phi_k(x) = e^{ikx} + r(k)e^{-ikx} \quad x < 0 \quad (I.15)$$

CHAPITRE I : ETAT L'ART SUR LA DIODE TUNNEL

$$\phi_k(x) = t(k) \exp\left(i\sqrt{2m(E(k) - V(L)) / \hbar^2} x\right) \quad x > L \quad (I.16)$$

Avec $t(k)$ et $r(k)$ sont des coefficients de transmission et de réflexion respectivement [11-12].

Et l'énergie totale des électrons est celle de l'énergie cinétique qui est donnée par :

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (I.17)$$

Pour $k < 0$, les électrons entrent par la droite, l'énergie totale et la fonction d'onde donnée par :

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - eU \quad (I.18)$$

$$\phi_k(x) = t(k) \exp\left(-i\sqrt{2mE(k) / \hbar^2} x\right) \quad x < 0 \quad (I.19)$$

$$\phi_k(x) = e^{ikx} + r(k)e^{-ikx} \quad x > L \quad (I.20)$$

I.3.4. La densité des électrons

La densité des électrons est calculée à l'aide de la fonction d'onde, en fonction de la distribution des électrons selon leur nombre d'onde k . Lorsque $k > 0$, cela représente les électrons venant de la gauche, tandis que lorsque $k < 0$, cela correspond aux électrons venant de la droite.

Cette distribution est déterminée par la statistique de Fermi-Dirac, qui exprime la probabilité de présence des électrons à une énergie donnée. L'équation qui décrit cette distribution est la suivante.

$$g(k) = \frac{mk_B T_0}{2\pi^2 \hbar^2} \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_f - \hbar^2 k^2 / (2m)}{k_B T_0} \right) \right) \quad (I.21)$$

Cette relation montre que la densité des électrons dépend principalement du niveau de Fermi et de la température. Une augmentation de la température entraîne un accroissement de l'agitation thermique des électrons, favorisant leur transition vers des niveaux d'énergie plus élevés et leur dispersion à travers le matériau. Par ailleurs, la position du niveau de Fermi détermine le nombre

CHAPITRE I : ETAT L'ART SUR LA DIODE TUNNEL

électriques du matériau. Cette relation est essentielle pour l'étude des solides, notamment des semi-conducteurs et des métaux, où elle joue un rôle clé dans la compréhension du comportement des électrons et de l'effet des facteurs externes sur leurs caractéristiques.

I.4. Conclusion :

La diode tunnel exploite l'effet tunnel quantique, ce qui lui confère une grande rapidité de conduction et une faible consommation d'énergie. Grâce à sa région de résistance négative, elle est utilisée dans diverses applications telles que les oscillateurs, les amplificateurs et les circuits de commutation haute fréquence.

L'étude théorique et numérique du couplage Poisson-Schrödinger permet d'analyser précisément son comportement électronique, contribuant ainsi à l'optimisation de son design et à l'amélioration de ses performances, notamment dans les domaines de la microélectronique et des nanotechnologies. Avec ses propriétés uniques, la diode tunnel reste un élément clé pour le développement des dispositifs électroniques avancés.

CHAPITRE II :

MODELISATION NUMERIQUE D'UNE DIODE TUNNEL

CHAPITRE II : MODELISATION NUMERIQUE D'UNE DIODE TUNNEL

II.1. Introduction

La modélisation numérique constitue un outil fondamental pour comprendre et analyser le comportement des dispositifs électroniques modernes, en particulier ceux qui reposent sur des phénomènes quantiques tels que la diode tunnel. Ce type de composant présente des caractéristiques spécifiques qui ne peuvent être expliquées uniquement par des modèles classiques, d'où la nécessité d'utiliser des approches numériques combinant la mécanique quantique et la physique classique.

Après avoir étudié dans le premier chapitre les aspects théoriques expliquant le principe de fonctionnement de la diode tunnel, ce chapitre sera dédié à la modélisation numérique visant à simuler le comportement du dispositif et à étudier ses propriétés électriques. Pour cela, nous allons nous appuyer sur une résolution auto-cohérente de l'équation de Poisson, qui décrit la répartition du potentiel électrique, et de l'équation de Schrödinger, qui permet d'analyser le mouvement des électrons au sein de la structure quantique de la diode.

La méthode des différences finies a été choisie comme outil numérique adapté pour discrétiser et résoudre ce système complexe.

Ce chapitre se concentrera sur la présentation des étapes de mise en place du modèle numérique, l'explication de la méthode de discrétisation appliquée, puis l'analyse et l'interprétation des résultats obtenus à partir de la simulation.

II.2. La méthode des différences finies

La méthode des différences finies est une technique numérique qui consiste à approximer les dérivées d'une fonction en les remplaçant par des différences discrètes calculées sur un maillage régulier ou irrégulier. Cette méthode est couramment utilisée pour résoudre des équations différentielles ordinaires (EDO) et des équations aux dérivées partielles (EDP) dans de nombreux domaines de l'ingénierie et des sciences appliquées. [13-14].

Elle permet de transformer des problèmes continus en systèmes linéaires ou non-linéaires plus simples à traiter numériquement. En pratique, les approximations peuvent se faire selon différentes schémas : différences avant, arrière ou centrées.

II.3. Le principe des différences finies

Le principe des différences finies est une méthode numérique qui permet d'approcher les dérivées d'une fonction en remplaçant l'opérateur différentiel par des expressions algébriques utilisant des points discrets sur un maillage. [15].

L'approche repose sur la discrétisation du domaine continu en un ensemble de points espacés d'un pas constant Δx . Les dérivées de la fonction sont alors remplacées par des approximations basées sur les valeurs de la fonction aux points voisins.

1. Approximation de la dérivée première :

Différence avant (ForwardDifference) :

$$f'(x) \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad (\text{II.1})$$

Différence arrière (BackwardDifference) :

$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x + \Delta x)}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad (\text{II.2})$$

Différence centrée (Central Difference)

$$f'(x) \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (\text{II.3})$$

2. Approximation de la dérivée seconde :

La dérivée seconde est approximée par la différence centrée :

$$f''(x) \approx \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) \quad (\text{II.4})$$

Cette méthode est largement utilisée pour résoudre numériquement des équations différentielles ordinaires ou partielles. [16].

CHAPITRE II : MODELISATION NUMERIQUE D'UNE DIODE TUNNEL

II.4. Discrétisation de l'équation de Schrödinger :

Dans le cadre de l'étude de l'équation de Schrödinger, nous avons appliqué la méthode des différences finies afin de transformer l'équation continue en une équation discrétisée pouvant être résolue numériquement. L'espace de résolution est représenté sur une grille unidimensionnelle où les indices correspondent aux points de discrétisation avec un pas Δx .

Équation discrétisée sous forme matricielle

À partir de l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi_k}{dx^2} + V(x) \phi_k(x) = E(k) \phi_k(x) \quad (\text{II.5})$$

En utilisant la méthode des différences finies pour approximer la dérivée seconde, on obtient l'équation discrétisée sous la forme suivante :

$$\phi_{j+1} + \phi_{j-1} + \left(\frac{2m\Delta x^2}{\hbar^2} (E(K) - V_j) - 2 \right) \phi_j = 0 \quad (\text{II.6})$$

Ce qui permet de représenter le système sous une forme matricielle :

$$A \phi = b \quad (\text{II.7})$$

Où A est une matrice tridiagonale représentant les coefficients du système et ψ est le vecteur des valeurs propres.

Pour $k > 0$

CHAPITRE II : MODELISATION NUMERIQUE D'UNE DIODE TUNNEL

$$\begin{cases} \phi_k(x) = t(k) \exp\left(-i\sqrt{2mE(k)/\hbar^2} x\right) & x < 0 \\ \phi_k(x) = e^{ikx} + r(k) e^{-ikx} & x > L \end{cases} \quad (\text{II.8})$$

En approchant l'équation de Schrödinger par la méthode des différences finies, on obtient une relation sous la forme : $\phi_j = (\alpha_{0j}^\pm)^j$

Ce qui conduit à l'équation suivante :

$$\alpha^{j+1} + \alpha^{j-1} + \left(\frac{2m\Delta x^2}{\hbar^2} (E(k) - V_j) - 2 \right) \alpha^j = 0 \quad (\text{II.9})$$

Pour $j=1$ on a:

$$\alpha^2 + \left(\frac{2m\Delta x^2}{\hbar^2} (E(k) - V_1) - 2 \right) \alpha + 1 = 0 \quad (\text{II.10})$$

C'est une équation 2^{ème} ordre, avec

$$\Delta = \frac{4m^2\Delta x^4}{\hbar^4} (E(k) - V_1)^2 - \frac{8m\Delta x^2}{\hbar^2} (E - V_1) \quad (\text{II.11})$$

Et on général:

$$\alpha_{0j}^\pm = 1 - \frac{m(E(k) - V_{0j})\Delta x^2}{\hbar^2} \pm i\sqrt{\frac{2m(E(k) - V_{0j})\Delta x^2}{\hbar^2} - \frac{m^2(E(k) - V_{0j})^2\Delta x^2}{\hbar^4}} \quad (\text{II.13})$$

Alors les conditions aux limites dans le cas k est

Pour: $k > 0$

$x < 0$:

D'après l'équation (II.7) nous avons

CHAPITRE II : MODELISATION NUMERIQUE D'UNE DIODE TUNNEL

$$\phi_j = \alpha^j + B\alpha^{-j} \quad (\text{II.14})$$

Alors:

$$\begin{aligned} \phi_{-1} &= \alpha^{-1} + B\alpha^1 \\ \phi_0 &= 1 + B \end{aligned} \quad (\text{II.15})$$

Ce qui permet d'écrire

$$-\alpha^{-1}\phi_{-1} = 1 - \frac{1}{\alpha^2} \quad (\text{II.16})$$

$x > L$

A partir de l'équation (II.7) on aura :

$$\phi_j = c\alpha^j \quad (\text{II.17})$$

Alors:

$$\begin{aligned} \phi_j &= c\alpha^j \\ \phi_{j+1} &= \phi_j\alpha \end{aligned} \quad (\text{II.18})$$

Donc:

$$\phi_j - \frac{1}{\alpha}\phi_{j+1} = 0 \quad (\text{II.19})$$

Pour $k < 0$

$x < 0$:

D'après l'équation (II.8) nous avons :

$$\phi_j = c\alpha^{-j} \quad (\text{II.20})$$

Alors:

CHAPITRE II : MODELISATION NUMERIQUE D'UNE DIODE TUNNEL

$$\begin{aligned}\phi_{-1} &= c\alpha^1 \\ \phi_0 &= c\end{aligned}\tag{II.18}$$

Donc:

$$\phi_{-1} - \alpha\phi_0 = 0\tag{II.19}$$

$x > L$

A partir de l'équation (II.8) on aura :

$$\phi_j = \alpha^j + B\alpha^{-j}\tag{II.14}$$

Alors:

$$\begin{aligned}\phi_{N_x} &= \alpha^{N_x} + B\alpha^{-N_x} \\ \phi_{N_x-1} &= \alpha^{N_x-1} + B\alpha^{-N_x+1}\end{aligned}\tag{II.15}$$

Ce qui permet d'écrire

$$\phi_{N_x-1} - \alpha\phi_{N_x} = \alpha^{N_x-1} - \alpha^{N_x+1}\tag{II.16}$$

II.6. Discrétisation de l'équation de poisson

L'équation de Poisson joue un rôle fondamental dans l'analyse des semi-conducteurs, décrivant la répartition du potentiel électrostatique selon l'expression suivante :

$$\nabla^2 V_{self} = -\frac{\rho}{\varepsilon} (n - n_d)\tag{II.17}$$

Où ρ représente la charge de l'électron, ε est la permittivité du matériau, et n et n_d correspondent respectivement à la densité des électrons et des donneurs. En raison du caractère non linéaire de cette équation, sa résolution analytique est difficile, nécessitant ainsi l'emploi de méthodes numériques. [17-18].

CHAPITRE II : MODELISATION NUMERIQUE D'UNE DIODE TUNNEL

L'application de la méthode des différences finies permet d'obtenir une formulation discrète de l'équation sous la forme :

$$V_{j+1}^{k+1} + V_{j-1}^{k+1} - 2V_j^{k+1} = -\frac{e^2 \Delta x^2}{\epsilon} (n_j^{k+1} - n_d) \quad (\text{II.18})$$

Pour gérer la non-linéarité de l'équation, la méthode de Gummel est employée, reposant sur une mise à jour progressive des valeurs de. Cela aboutit à l'expression améliorée suivante : [19].

$$V_{j+1}^{p+1} + V_{j-1}^{p+1} + \left(2 + \frac{e^2 \Delta x^2}{\epsilon} \frac{n_j^p}{V_{ref}} \right) V_j^{p+1} = -\frac{e^2 \Delta x^2}{\epsilon} \left(n_j^p + \frac{n_j^p}{V_{ref}} V_j^p - n_d \right) \quad (\text{II.19})$$

II.7. Conditions aux contacts de type Dirichlet :

Lors de l'étude de la distribution du potentiel électrique dans les semi-conducteurs, il est possible d'appliquer la condition de Dirichlet aux limites, où la valeur du potentiel est directement spécifiée à la surface de contact. Dans ce cas, le potentiel électrostatique est donné par la relation suivante :

$$V = V_{app} + u_T \ln \left(\frac{n}{n_i} \right) \quad (\text{II.20})$$

Explication des variables :

V_{app} : le potentiel appliqué extérieurement à la matière.

u_T : le potentiel thermique, qui dépend de la température.

n : la concentration des électrons libres dans le semi-conducteur.

n_i : la concentration intrinsèque des porteurs de charge.

Cette relation est utilisée pour déterminer la distribution du potentiel aux frontières de contact entre un semi-conducteur et un autre matériau, en particulier dans les zones dopées de type N. Cela aide à étudier et à caractériser les propriétés électriques des composants électroniques tels que les transistors et les diodes.

CHAPITRE II : MODELISATION NUMERIQUE D'UNE DIODE TUNNEL

La condition de convergence est définie par la relation suivante :

$$Norm \left\| \frac{V_{self}^{(p+1)} - V^{(p)}}{V^{p+1}} \right\| \leq \delta \quad (\text{II.22})$$

Où représente le seuil de tolérance pour le changement de potentiel entre deux itérations successives. Grâce à cette méthode, une convergence rapide et stable vers la solution finale peut être assurée, à condition de bien choisir l'estimation initiale.

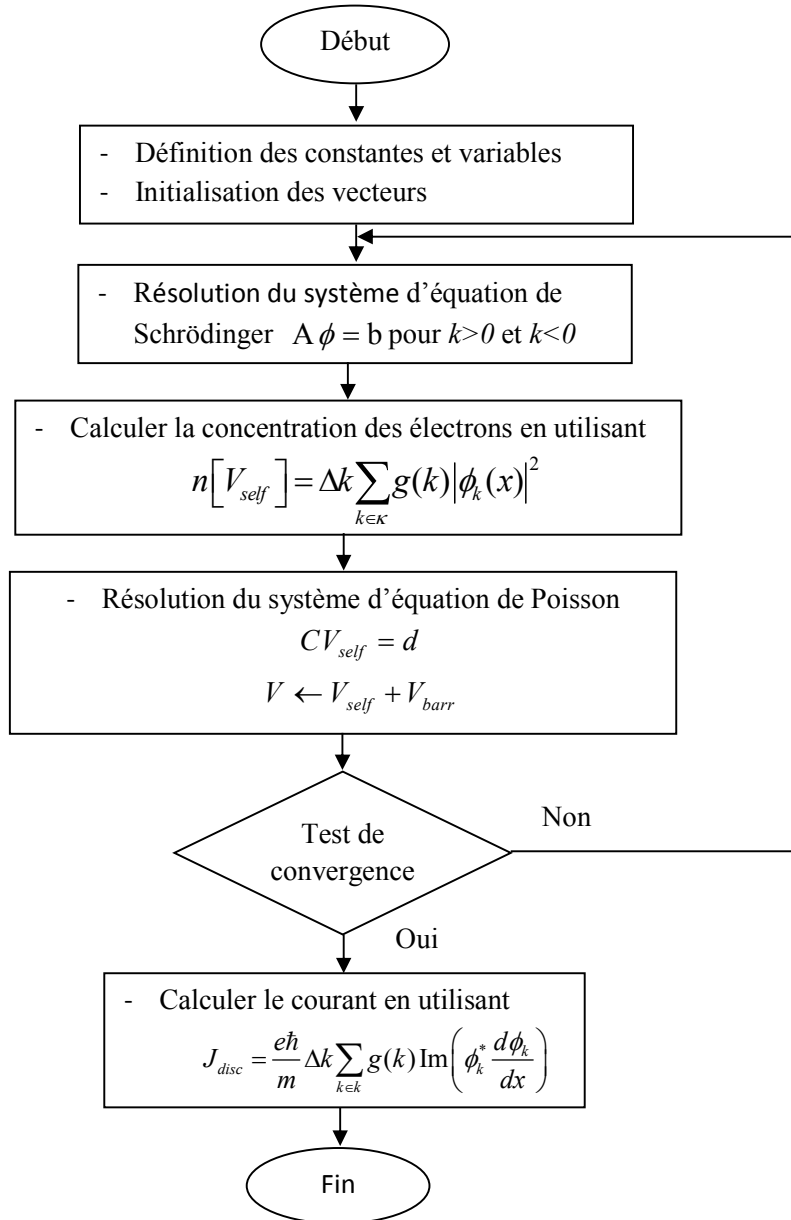
Pour calculer la densité de courant, nous allons utiliser la formule souvent :

$$J_{cond} = \frac{e\hbar}{m} \int_R g(k) \text{Im} \left(\phi_k^* \frac{d\phi_k}{dx} \right) dk \quad (\text{II.23})$$

La forme discrétiser et approximer comme suite :

$$J_{disc} = \frac{e\hbar}{m} \Delta k \sum_{k \in k} g(k) \text{Im} \left(\phi_k^* \frac{d\phi_k}{dx} \right) \quad (\text{II.24})$$

CHAPITRE II : MODELISATION NUMERIQUE D'UNE DIODE TUNNEL



II.10. Conclusion

Dans ce travail, nous avons conçu un modèle numérique pour simuler le comportement d'une diode tunnel en régime stationnaire. Le modèle repose sur la résolution de deux équations fondamentales en physique des semi-conducteurs : l'équation de Schrödinger, qui prend en compte les effets quantiques à l'échelle nanométrique, et l'équation de Poisson, qui lie la distribution des charges électriques au potentiel électrostatique. Pour résoudre ces deux équations, nous avons choisi une méthode auto-cohérente inspirée de celle proposée par Gummel dans un contexte unidimensionnel. Les équations ont été discrétisées en utilisant la méthode des différences finies, ce qui nous a permis de les transformer en systèmes algébriques linéaires. Ces systèmes ont ensuite été résolus numériquement à l'aide d'une méthode directe sous MATLAB. Grâce à ce modèle, nous avons pu calculer avec précision des grandeurs importantes telles que le potentiel électrostatique et les densités de porteurs libres.

CHAPITRE III :

SIMULATION QUANTIQUE ET RESULTATS NUMERIQUE D'UNE DIODE TUNNEL

CHAPITRE III: SIMULATION QUANTIQUE ET RESULTATS NUMERIQUE D'UNE DIODE TUNNEL

III.1. Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons les résultats principaux obtenus à partir de notre modèle numérique proposé pour résoudre le couple Poisson-Schrödinger dans l'espace. La résolution est basée sur la méthode des différences finies, cette dernière permet de discrétiser le modèle proposé avec une bonne précision et d'obtenir des résultats fiables.

L'algorithme proposé repose sur la méthode de Gummel. Ce processus itératif garantit l'obtention de solutions précises tout en respectant les contraintes du modèle.

Nous examinerons les fonctions d'onde correspondant à chaque niveau d'énergie. Nous avons pu calculer avec succès les paramètres clé qui sont la concentration des électrons et le potentiel électrostatique sur tout le domaine de calcul en se basant sur la statistique de Fermi-Dirac. D'autre part, et à partir de ces paramètres clé nous avons calculé la caractéristique $J(V)$. Cette dernière montre clairement l'effet tunnel qui est traduit par une résistance négative.

III.2. Simulation d'une diode tunnel

Le composant considéré dans notre simulation est une diode tunnel de longueur $L=135nm$ avec un dopage de type N. La géométrie est divisée en sous intervalles et le dopage est divisé sur trois régions. Les paramètres sont tirés à partir des articles [20-21].

III.2.1. Définition du domaine de calcul

Les dimensions de la diode tunnel sont représentés dans la figure III.1

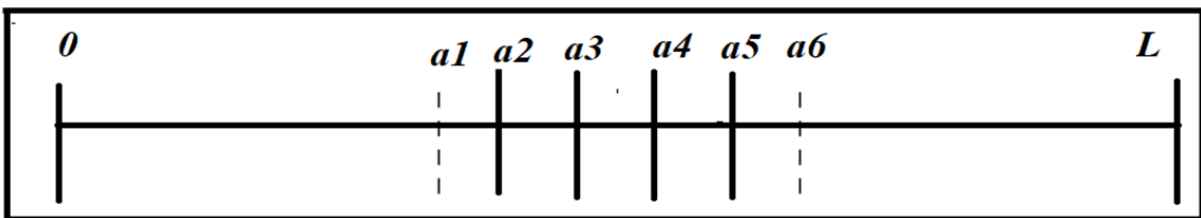


Figure III.1: définition du domaine de calcul.

Avec : $a_1=50nm, a_2=60nm, a_3=65nm, a_4=70nm, a_5=75nm, a_6=85nm$

III.2.2. définition du dopage

Le profil de dopage n_d est présenté dans la figure III.2

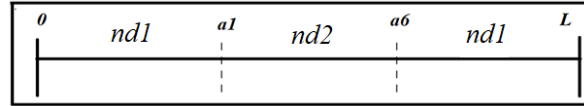


Figure III.2: définition du profil de dopage.

Avec :

$$n_D(x) = \begin{cases} n_D^1 & x \in [0, a_1] \cup [a_6, L] \\ n_D^2 & x \in [a_1, a_6] \end{cases}$$

Les paramètres tirés dans l'article [21] sont :

$$n_D^1 = 10^{24} m^{-3} \text{ et } n_D^2 = 5.10^{21} m^{-3}$$

III .3. Solution de couplepoisson –Schrödinger

Afin de résoudre l'équation de Schrödinger pour différents états d'énergie, il est essentiel de définir un intervalle pour différent nombre d'ondes qui couvre toutes les configurations possibles.

L'intervalle choisi est exprimé par : $k = [-k_m (-k_m + \Delta k) (-k_m + 2\Delta k) \dots k_m]$ Pour plus de détails (Voir le chapitre II).

Dans notre simulation, nous avons déterminé la valeur de Δk comme étant $\Delta k = 2 * k_m / 300$ Cette valeur a été choisie de manière à assurer un bon compromis entre la précision des résultats et le coût computationnel. Ce choix d'intervalle permet ainsi de calculer l'énergie cinétique en

utilisant l'expression $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ dans l'équation de Schrödinger.

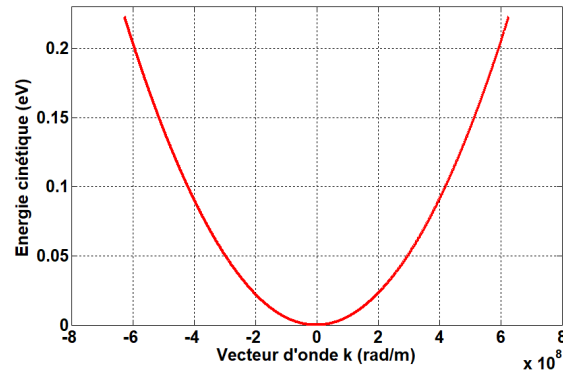


Figure III.3 :L'énergie cinétique en fonction de nombre d'onde

III .3.1. Elaboration du maillage spatial

Le maillage constitue une première étape essentielle dans toute simulation numérique, en particulier pour les dispositifs à l'échelle nanométrique tels que la diode tunnel. Il consiste à discrétiser l'espace en un réseau de points sur lesquels seront appliqués les calculs numériques. La qualité de la solution obtenue dépend largement de la finesse du maillage : un maillage très fin améliore la résolution spatiale et permet de reproduire avec précision les phénomènes physiques locaux, tels que l'effet tunnel. Cependant, il entraîne une augmentation significative du temps de calcul ainsi que des ressources mémoire nécessaires. Il est donc crucial de rechercher un compromis entre les ressources de calcul disponibles et la précision souhaitée.

Dans cette étude, nous avons adopté un maillage uniforme suivant l'axe x , avec une marche spatiale fixée à $\Delta x = 10^{-9}$ nm, afin d'assurer une description précise du transport quantique à l'intérieur de la diode tunnel.

III.3.2. Résultats de la simulation

III.3.2.1. Solution finale du couple poisson Schrödinger

Le couple Poisson-Schrödinger a été résolu suivant un processus itératif, premièrement nous avons commencé par la résolution de l'équation de Schrödinger pour différents états d'énergie, dans cette partie de simulation, nous avons considéré la solution initiale est celle de l'énergie de la barrière.

La deuxième étape est calculer la concentration des électrons en utilisant les différents fonctions d'onde (voire chapitre I).

CHAPITRE III: SIMULATION QUANTIQUE ET RESULTATS NUMERIQUE D'UNE DIODE TUNNEL

La dernière étape est de calculer la potentielle énergie self consistant. Cette opération ce répète jusqu'à obtenir la solution final avec une bonne convergence.

Pour vérifier la convergence, nous avons calculé l'erreur Er absolue pour chaque itération en utilisant cette formule.

$$Er = \left\| \frac{V_{self}^{p+1} - V_{self}^p}{V_{self}^{p+1}} \right\|$$

Pour la figure La solution stationnaire de la densité électronique et du potentiel d'énergie totale a été obtenue en tenant compte de l'illumination optique. La Fig. 4 illustre la norme de l'erreur résiduelle dans la densité électronique pour différentes tensions appliquées. Une bonne convergence est atteinte après un faible nombre d'itérations, avec un temps moyen par itération d'environ 0.6219 s.

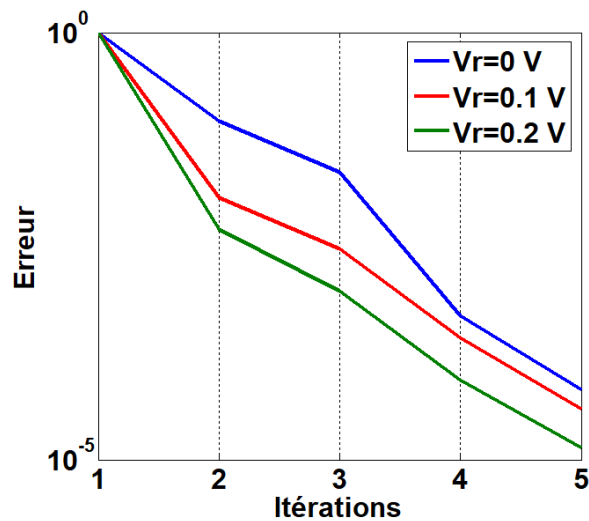


Figure III.4 : Erreur en fonction des itérations

III.3.2.2. Fonctions d'ondes

La figure III.5 représente la distribution de la fonction d'onde pour différents états d'énergies. Les figures III.5.a et b présentent le cas où l'onde arrive de la droite $k < 0$, par contre les figures III.5.c et d présentent le cas où l'onde arrive de la gauche $k > 0$

CHAPITRE III: SIMULATION QUANTIQUE ET RESULTATS NUMERIQUE D'UNE DIODE TUNNEL

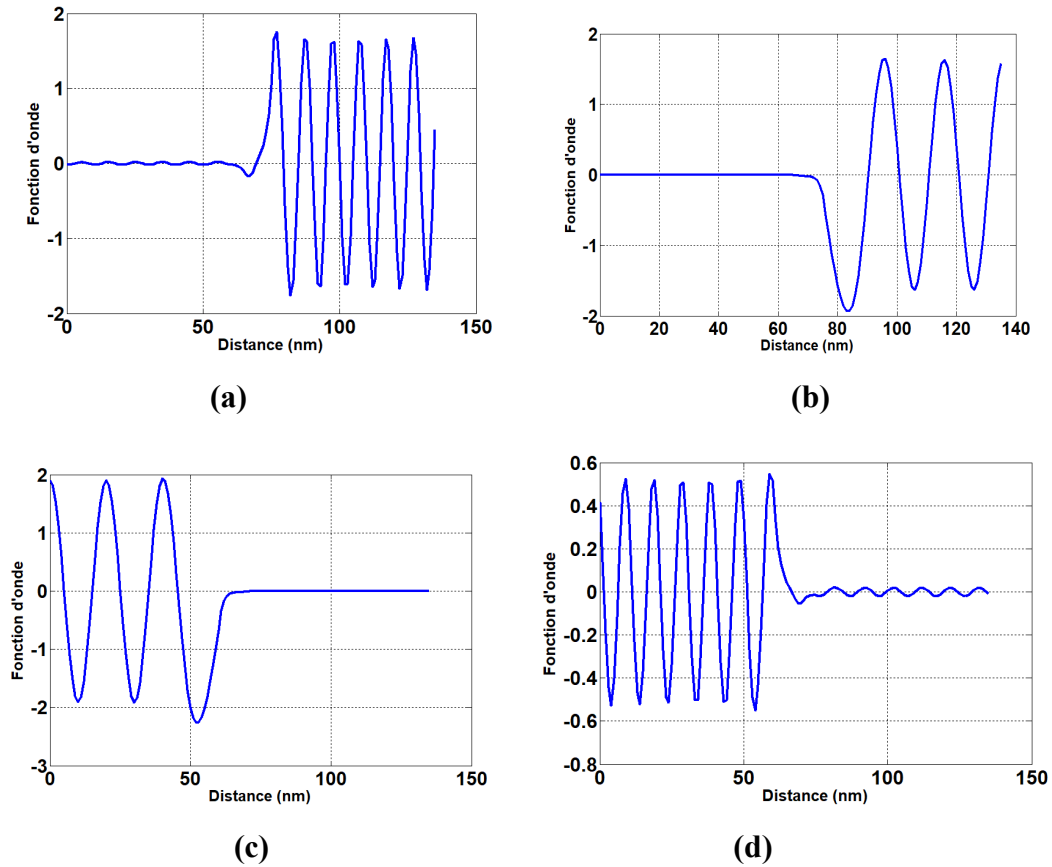


Figure III.5 : Fonctions d'onde pour différent valeur de k , ($a : k = -k_m, b : k = -k_m/2, c : k = k_m/2, d : k = k_m$)

III.3.2.3. Concentration des électrons

La figure III.6 présente la concentration des électrons pour différentes tensions appliquées. On observe que la densité électronique dans le puits quantique commence à décroître à partir d'une tension de 0.23 V. Il est à noter que toutes les fonctions d'onde n'ont pas le même impact, celles est associées à des énergies plus élevées modifient la densité des électrons.

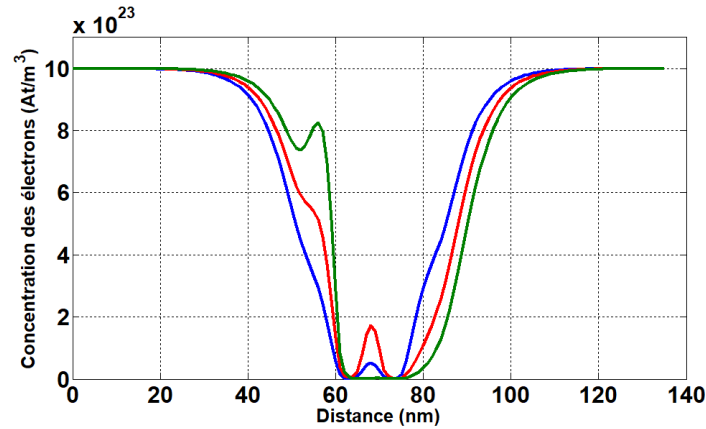


Figure III.6 : Distribution de la concentration des électrons sur toute la structure.

III.3.2.4. Energie potentielle

La figure III.7 montre le potentiel d'énergie totale pour différentes tensions appliquées. Dans nos calculs, le nombre de points de maille peut être réduit à 1000 lorsque la tension maximale reste inférieure à 0.8 V. Si cette valeur est dépassée, la longueur d'onde des électrons diminue, ce qui nécessite un raffinement du maillage spatial. En résumé, la solution stationnaire auto-cohérente du système Poisson-Schrödinger a été obtenue avec succès pour des tensions appliquées importantes.

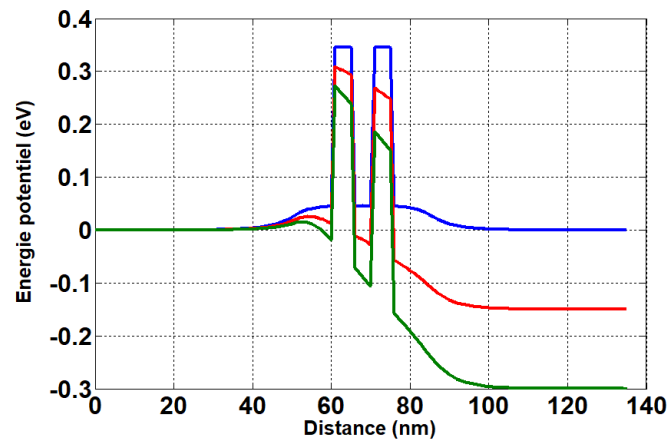


Figure III.7: Énergie potentielle

III.3.2.5. Densité de courant

Pour compléter l'analyse, les caractéristiques courant-tension (I-V) en fonction des tensions appliquées sont illustrées dans la figure III.8. Les courbes obtenues sont en bon accord avec les résultats expérimentaux rapportés dans [1]. À partir de ces courbes, on voit clairement une région

CHAPITRE III: SIMULATION QUANTIQUE ET RESULTATS NUMERIQUE D'UNE DIODE TUNNEL

avec résistance différentielle négative (NDR), caractérisée par un pic à $0.21V$ et un creux à $0.26V$ et un rapport pic-à-creux (PVR) de 2.08 .

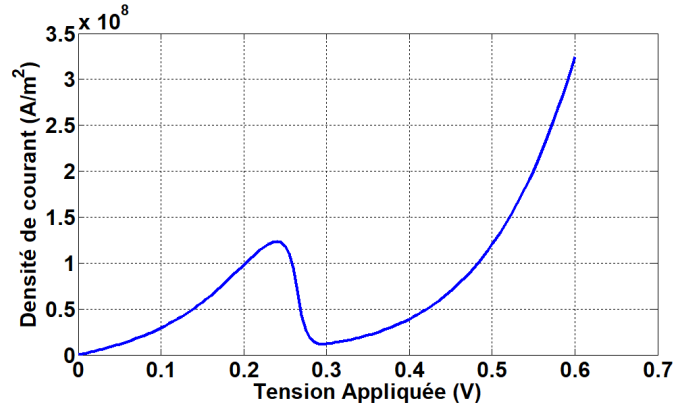


Figure III.8 : caractéristique densité de courante tension ($J(V)$)

III.4. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons traité le système couplé formé par les équations de Poisson et de Schrödinger afin de simuler une diode tunnel à l'échelle nanométrique.

Nous avons adopté un algorithme numérique avancé permettant une convergence efficace vers la solution finale.

Nous avons également étudié les fonctions d'onde correspondant à différents états d'énergie, analysé la répartition des électrons dans la structure, ainsi que représenté le potentiel électrique et son influence sur les propriétés électroniques du dispositif.

CONCLUSION GENERALE

Conclusion générale

Ce travail s'est inscrit dans le cadre de l'étude théorique et numérique du couple Poisson-Schrödinger appliqué à la simulation d'une diode tunnel, un composant électronique dont le comportement est fortement influencé par les effets quantiques, notamment à l'échelle nanométrique.

Dans un premier temps, nous avons présenté un état de l'art détaillé sur la diode tunnel. Cette partie nous a permis de mieux comprendre ses propriétés physiques et électriques, son principe de fonctionnement, ainsi que ses principales applications dans les circuits de commutation, d'amplification et d'oscillation.

Dans le deuxième chapitre, nous avons élaboré un modèle numérique basé sur les équations couplées de Poisson et de Schrödinger, décrivant avec précision le transport quantique dans les semi-conducteurs. La discrétisation de ces équations a été réalisée à l'aide de la méthode des différences finies. Pour la résolution, nous avons adopté la méthode de Gummel pour l'équation de Poisson, tandis que l'équation de Schrödinger a été traitée par la méthode des valeurs propres, garantissant ainsi une approche auto-cohérente robuste.

Enfin, la dernière partie a été réservée à la simulation numérique de la diode tunnel au niveau nanométrique. Les résultats obtenus, tels que le profil du potentiel électrostatique, la distribution de la densité électronique et la fonction d'onde, ont permis de valider la méthodologie proposée et d'analyser en détail le comportement quantique du dispositif.

En résumé, cette étude constitue une contribution pertinente à la modélisation numérique des dispositifs semi-conducteurs à l'échelle nanométrique. Elle ouvre également la voie à des recherches futures visant à optimiser la précision des simulations, en intégrant par exemple les effets dynamiques, les conditions de non-équilibre ou des approches multi-échelles adaptées aux technologies émergentes.

REFERENCES
BIBLIOGRAPHIQUES

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] Kwok K. Ng, *Physics Of Semiconducteur Devices*, Third Edition, A John Wiley& Sons, Inc, Publication, ISBN: 0-471-14323-5, (2007).
- [2] **Sze, S. M.**, *Physics of Semiconductor Devices*, 3rd Edition, Wiley, (2007).
- [3] **N. Ben Abdallah**, “A Hybrid Kinetic-Quantum Model for Stationary Electron Transport in a Resonant Tunneling Diode”. *J. Stat. Phys*, 90 (3–4), 627–662, (1998).
- [4]. Rohini College of Engineering and Technology, “Tunnel Diode – Lecture Notes”, Département d’électronique, Inde, 2024. Document PDF interne, consulté précédemment en ligne.
- [5] <https://www.quora.com/What-is-negative-resistance-on-tunnel-diode>
- [6] https://www.tutorialspoint.com/sinusoidal_oscillators/sinusoidal_tunnel_diode_oscillator.htm
- [7] **Kwok K. Ng**, “*Physics of Semiconducteur Devices*”, Third Edition, A John Wiley&Sons, Inc, Publication, ISBN: 0-471-14323-5, (2007).
- [8] **S. Selberherr**, “*Analysis and Simulation of Semi-Conductor Devices*”, New York, Springer-Verlag, (1984).
- [9] C. Negulescu, **L’équation de Schrödinger — Aspects mathématiques et numériques**. Cours de Master 2, Université Toulouse III - Paul Sabatier, (2017).
- [10] D. K. Ferry, S. M. Goodnick, *Transport in Nanostructures*, Cambridge University Press, (1997).
- [11] **A. Arnold, M. Ehrhardt, I. Sofronov**. Discrete transparent boundary conditions for the Schrödinger equation: Fast calculation, approximation, and stability. *Commun. Math. Sci.* 1 (2003), 501–556.
- [12] **V. A. Baskoakov, A. V. Popov**. Implementation of transparent boundaries for numerical solution of the Schrödinger equation. *Wave Motion* 14, 123–128, (1991).
- [13] **Steven E. Pav**, “*Numerical Methods Course Notes*”, University of California at San Diego, (2005).
- [14] **Won Y. Yang**, “*Applied Numerical Methods Using MATLAB*”, A JOHN WILEY&SONS, LTD, New Jersey, ISBN: 0-0-471-69833-4, (2005).
- [15] **P. Viot**, “*Méthodes D’analyse Numérique*”, Laboratoire de Physique théorique des liquides, Paris, (2004).
- [16] **J. C. Butcher**, “*Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*”, Second Edition, A JOHN WILEY& SONS, LTD, England, ISBN: 978-0-470-72335-7, (2008).
- [17] **Gummel, H.K.**, “*A Self-Consistent Iterative Scheme For One Dimensional Steady State Transistor Calculations*”, *IEEE Trans. Electron devices*, Vol. 16, pp. 64-77, (1969).
- [18] **D. L. Schafetter and H. K. Gummel**, “*Large-Signal Analysis Of A Silicon Read Diode Oscillator*”, *IEEE Transaction on Electron Devices*, pp. 64-77, (1969).
- [19] **S. Selberherr**, “*Analysis and Simulation of Semi-Conductor Devices*”, New York, Springer-Verlag, (1984).
- [20] **O. Pinaud**, *Transient simulations of a resonant tunneling diode*, *J. Appl. Phys.* 92 (4), 1987–1994 (2002).
- [21] **J.F. Mennemann, A. Jungel, and H. Kosina**, *Transient Schrödinger–Poisson simulations of a high-frequency resonant tunneling diode oscillator*, *Journal of Computational Physics.* 239, 187-205 (2013).

Résumé

ملخص

يتناول هذا العمل دراسة نظرية وعددية للديود النفقي، اعتمادًا على اقتران معادلتَي شرودنجر وبواسون. تم نمجة السلوك الكومي للإلكترونات على مقياس نانومتري في نظام ثابت وبالسلي. تم استخدام طريقة الفروقات المحدودة في تفكيك المعادلات، مع تطبيق شروط حدود شفافة. تستخدم طريقة جيمال لمعالجة اقتران شرودنجر-بواسون بشكل تكراري، ولتسريع التقارب بين الحلول. تسمح هذه النمجة بمحاكاة الجهد وكثافة الإلكترونات والتيار الكومي. وتبرز النتائج المحصل عليها تأثير التطعيم على بنية الجهاز وتؤكد وجود المقاومة السالبة المميزة للديود النفقي.

Abstract

This work presents a theoretical and numerical study of a tunnel diode, based on the coupling of Schrödinger and Poisson equations.

The quantum behavior of electrons is modeled at the nanometer scale, in a stationary and ballistic regime.

The equations are discretized using the finite difference method with the application of transparent boundary conditions.

The Gummel method is used to iteratively handle the Schrödinger–Poisson coupling and accelerate convergence.

This modeling allows the simulation of the potential, electron density, and quantum current.

The obtained results highlight the influence of doping on the device structure and confirm the presence of the negative resistance characteristic of tunnel diodes.

Résumé

Ce travail porte sur l'étude théorique et numérique d'une diode tunnel, en s'appuyant sur le couplage des équations de Schrödinger et de Poisson. Le comportement quantique des électrons est modélisé à l'échelle nanométrique dans un régime stationnaire et balistique. Les équations sont discrétisées à l'aide de la méthode des différences finies, en appliquant des conditions aux limites transparentes. La méthode de Gummel est employée pour traiter le couplage entre Schrödinger et Poisson de manière itérative et accélérer la convergence. Cette modélisation permet de simuler le potentiel, la densité électronique ainsi que le courant quantique. Les résultats obtenus permettent d'analyser l'effet du dopage sur la structure et de mettre en évidence la résistance négative caractéristique de la diode tunnel.