

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITÉ DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE HOUARI BOUMEDIENE
FACULTÉ DE PHYSIQUE



THESE

Présentée pour l'obtention du grade de DOCTORAT

EN PHYSIQUE

Spécialité : Physique des Matériaux

Par : **Saâd MESBAH**

Intitulé :

**CALCUL DES EQUATIONS HYDRODYNAMIQUES
GENERALISEES DANS LES SEMI-CONDUCTEURS.**

Soutenue publiquement le 31/10/2010, devant le Jury composé de :

Mr. M.BENDAOUD	Professeur à l'USTHB	Président
Mme K. BENDIB-KALACHE	Professeur à l'USTH	Directrice de Thèse
Mr. M. BELHADI	Professeur à l'UMMTO	Examineur
Mr. R. TIGRINE	Professeur à l'UMMTO	Examineur
Mr. A. ZOUAOUI	Maître de Conférences à l'USTHB	Examineur
Mme Dj. BENNACEUR-DOUMAZ	Maître de Recherche au CDTA	Examinatrice

Remerciements

Cette thèse de Doctorat est le fruit d'un travail laborieux réalisé au laboratoire d'Électronique Quantique de la Faculté de physique de l'USTHB, sous la direction du Professeur K. Bendib-Kalache.

D'abord, Je tiens à remercier Mme K. Bendib-kalache d'avoir dirigé ce travail et je lui exprime toute ma gratitude et reconnaissance pour sa précieuse aide et ses conseils qui m'ont été très utiles. Je tiens aussi à remercier beaucoup le Professeur A. Bendib de m'avoir accueilli dans son équipe de physique des plasmas du L. E. Q.

Ensuite, j'exprime vivement ma gratitude et reconnaissance aux professeurs M. Belhadi et R. Tigrine de l'Université de Mouloud Maâmri de Tizi-ouzou d'avoir accepté d'examiner ce travail. Je remercie également le maître de recherche D.j Bennaceur-Doumaz, chercheur au CDTA, et le maître de Conférences A. Zouaoui, enseignant et chercheur à l'USTHB, d'avoir accepté d'examiner ce travail. Qu'ils trouvent ici toute ma gratitude et ma reconnaissance.

Enfin, je remercie le professeur M. Bendaoud d'avoir accepté de Présider mon jury de thèse malgré ses énormes taches administratives et pédagogiques. Qu'il trouve ici toute ma reconnaissance.

Je remercie tous les membres de notre équipe de recherche et tous les gens qui ont contribué de près ou de loin dans la réalisation de ce modeste travail.

Table des matières

Introduction Générale.....	1
Chapitre I : Modélisation dans les semi-conducteurs.....	5
I. Introduction.....	5
II. Semi-conducteur : propriétés et applications.....	5
III. Modèles d'équations	7
III.1. Modèle quantique de Wigner.....	8
III.2. Modèle semi-classique.....	15
III.2.1. Équation de Boltzmann dans l'approximation classique.....	15
III.2.2. Passage à la limite semi classique	17
III.2.3. Équation de Boltzmann semi-classique.....	21
IV. Mécanismes de collision dans les semi-conducteurs.....	21
IV.1. Collision électron-impureté.....	21
IV.2. Collision électron-phonon.....	25
IV.3. Collision électron-électron.....	30
V. Modèles hydrodynamiques.....	31
V.1. Modèles Hydrodynamiques à trois moments.....	32
V.2. Modèles Hydrodynamiques à plus de trois moments.....	35
VI. Conclusion.....	37
Chapitre II : Méthode de résolution des équations cinétiques.....	38
I. Introduction.....	38
II. Méthode basée sur la fonction de corrélation.....	38
II.1. L'opérateur de Wigner et la fonction de corrélation de Wigner.....	39
II.2. Les fonctions de corrélation à l'équilibre thermodynamique.....	41
III. Méthode basée sur le développement de Chapman-Enskog	44
IV. Méthode basée sur le développement sur les harmoniques sphériques.....	46
V. Approches numériques.....	47

VI.	Résultats de la littérature.....	48
VI.1.	Résultats de A. Greiner et	48
VI.2.	Résultats de A. Rangel-Huerta et al.....	53
VII.	Conclusion.....	61
Chapitre III : Résolution analytique de l'équation de Boltzmann.....		62
I.	Introduction.....	62
II.	Modèle cinétique.....	62
II.1.	Equation de Boltzmann semi-classique.....	62
II.2.	Approximations utilisées.....	64
II.3.	Développement sur la base des polynômes de Legendre.....	65
III.	Résolution Analytique de l'équation de Boltzmann.....	73
III.1.	Calcul des opérateurs de Projection.....	73
III.2.	Application des opérateurs de projection sur l'équation isotrope.....	76
III.3.	Méthode des fractions continues.....	77
III.4.	Calcul des trois premières composantes de la fonction de distribution.....	79
IV.	Conclusion.....	81
Chapitre IV : Calcul des relations de fermeture des équations hydrodynamiques		82
I.	Introduction.....	82
II.	Système d'équations hydrodynamiques.....	82
III.	Calcul des coefficients de transport.....	87
IV.	Expressions des coefficients de transport en fonction de T , V et J_x	94
V.	Résultats numériques et discussion.....	96
VI.	Comportement asymptotique et comparaison avec la littérature.....	107
VI.1.	Régime collisionnel (local).....	107
VI.2.	Régime balistique.....	111
VII.	Conclusion.....	116
Conclusion générale.....		117
Références bibliographiques.....		191

INTRODUCTION GENERALE

Les semi-conducteurs sont des matériaux qui jouent un rôle d'une importance considérable dans le domaine de la recherche et de l'industrie. Ils interviennent dans de nombreux secteurs tels que les télécommunications, l'électronique et la microélectronique qui est à la base de l'informatique, pour ne citer que ceux là [53, 57]. Ils ont permis l'élaboration de nombreux dispositifs actifs tels que les éléments discrets qui n'assurent qu'une seule fonctionnalité comme les transistors, les circuits intégrés, qui sur une même plaquette de semi-conducteur regroupent plusieurs éléments de base, et les microprocesseurs qui assurent des fonctions logiques complexes et multiples. L'étude des semi-conducteurs est par conséquent un axe de recherche très dynamique et en plein essor.

C'est dans ce domaine que s'inscrit le travail de cette thèse et plus précisément il porte sur l'étude du transport dans les semi-conducteurs avec pour objectif d'établir un système d'équations hydrodynamique valable au delà du régime classique décrit par le modèle de dérive-diffusion [1]. Cette étude est d'une importance cruciale que ce soit dans le cadre de la physique fondamentale ou dans le cadre de la physique appliquée, notamment dans le domaine de la microélectronique.

En physique fondamentale, l'analyse des phénomènes de transport permet de mieux comprendre les interactions microscopiques entre les porteurs de charges et le réseau, la structure de bande du cristal, etc. Cette étude est très difficile voire impossible, à partir de mesures expérimentales.

En physique appliquée, il est de plus en plus important d'utiliser la simulation dans les procédés de fabrication des dispositifs à base de semi-conducteurs. Cette importance s'est considérablement accrue avec la miniaturisation de ces dispositifs qui ont atteint actuellement des dimensions de l'ordre du nanomètre. En effet l'élaboration de ces dispositifs nécessite beaucoup de temps avant l'obtention des conditions d'élaboration désirées et cela coûte par conséquent extrêmement cher. La solution utilisée est la modélisation et la simulation qui sont une alternative beaucoup moins coûteuse. Dans la microélectronique cela permet de modéliser et simuler efficacement et rapidement de nouveaux composants électroniques. Cette simulation permet *in fine* d'obtenir la caractéristique des dispositifs. Les circuits intégrés qui

sont à la base de la microélectronique sont constitués de milliers de composants élémentaires (diodes et transistors principalement).

Avec les dimensions sub-micrométriques actuelles de ces composants, toute la physique sous-jacente doit être revisitée sur la base de nouveaux modèles théoriques basés sur la théorie cinétique et les équations hydrodynamiques. Ces modèles dépendent considérablement des connaissances de plus en plus sophistiquées sur le transport des charges dans les semi-conducteurs.

Actuellement, il y a une très forte demande pour ces modèles cinétiques et hydrodynamiques capables de mieux comprendre la physique qui est à la base de ces dispositifs semi-conducteurs, et capables de faire des prédictions très précises sur leur fonctionnement. Il existe en fait quatre classes de modèles pour simuler les propriétés de transport dans les dispositifs semi-conducteurs que sont : *i)* les modèles quantiques, *ii)* les modèles semi-classiques, *iii)* les modèles hydrodynamiques, *iv)* et le modèle de dérive-diffusion. Les deux premiers modèles sont microscopiques, c'est à dire que l'on décrit la dynamique des porteurs de charge dans tout l'espace des phases (position-impulsion) tandis que les deux derniers, ils décrivent la dynamique d'un très grand nombre de particules (assimilé à un élément de fluide) dans l'espace réel. Il est évident que du modèle *i)* au modèle *iv)* la complexité des équations mises en jeu décroît de façon significative.

Le modèle quantique fournit la description la plus fine du transport dans les semi-conducteurs. Il n'est utilisé que pour décrire des systèmes qui exhibent des comportements purement quantiques, tels que les semi-conducteurs mésoscopiques, les nanotubes de carbone, etc. Les phénomènes quantiques mis en jeu sont par exemple le confinement des porteurs de charges, les interférences quantiques et l'effet tunnel.

L'approche semi-classique est basée sur l'équation de Boltzmann semi-classique où l'évolution de la trajectoire des porteurs de charge est décrite par la dynamique Newtonienne (mouvement classique des particules) et par des taux de diffusion quantiques (processus dissipatifs d'un état d'énergie à un autre). A l'inverse de la description purement quantique l'énergie des états propres des particules n'est pas calculée de façon self-consistante mais de façon indépendante. Cette approche permet de décrire le transport dans les semi-conducteurs jusqu'à des échelles inférieures au micron.

Les modèles de dérive-diffusion et hydrodynamiques sont nettement plus simples que les modèles cinétiques et ils sont par conséquent de loin les modèles les plus utilisés dans les simulations pour prédire les propriétés des dispositifs électroniques. Ces deux modèles sont obtenus en prenant les moments de l'équation de Boltzmann. Les modèles de dérive-diffusion sont basés sur les deux premiers moments tandis que pour les modèles hydrodynamiques, il faut rajouter des moments d'ordre supérieur. Le modèle de dérive-diffusion est un modèle simplifié qui ne répond plus aux impératifs résultant de l'évolution de la technologie des composants électroniques et des circuits électroniques actuels. En revanche les modèles hydrodynamiques constituent une alternative particulièrement intéressante aux modèles cinétiques dans la mesure où ils allient aussi bien la simplicité mathématique des équations utilisées par rapport aux modèles cinétiques, que l'aptitude de pouvoir décrire des systèmes de tailles sub-micrométrique.

Dans cette thèse l'objectif visé est d'établir un système d'équations hydrodynamiques valable du régime classique défini par de nombreuses interactions entre les porteurs de charge (électron ou trou) et le réseau, au régime balistique défini comme une limite asymptotique du transport non collisionnel. A notre connaissance il n'existe pas dans la littérature de résultats similaires valables quelque soit le régime de collision dans les semi-conducteurs. Pour développer ce modèle nous avons dû limiter sa validité à des dispositifs soumis à des champs électriques d'intensité modérée, typiquement inférieure au kilovolt par centimètre. Cette restriction conduit à une dépendance linéaire des moments responsables du transport (densité de courant, flux de chaleur, etc.) par rapport aux forces thermodynamiques (champ électrique, gradient de température, etc.).

Dans le chapitre I, on présente les principaux modèles théoriques cinétiques et hydrodynamiques (quantique, semi-classique et classique) utilisés dans la littérature pour décrire le transport des porteurs de charge dans les semi-conducteurs. En premier, pour faciliter la lecture du manuscrit, on a résumé les principales propriétés des semi-conducteurs en relation avec le transport des porteurs de charge.

Le chapitre II est consacré aux méthodes de résolution des équations cinétiques (formalisme de la fonction de corrélation, méthode basée sur le développement sur la base des harmoniques sphériques, méthode de Chapman-Enskog,...). On a aussi présenté deux résultats de la littérature établis dans la limite quasi-collisionnelle [2] et non collisionnelle [3], qui ont fait l'objet d'une comparaison avec les résultats obtenus dans ce travail [4-7].

Le chapitre III porte sur la résolution de l'équation de Boltzmann semi-classique. Toutes les étapes de calcul sont explicitement présentées. En particulier, la procédure qui utilise le développement sur les polynômes de Legendre, le calcul des opérateurs de projection qui assurent les propriétés d'invariance de l'opérateur de collision, la résolution du système infini d'équations des composantes anisotropes de la fonction de distribution, à l'aide des fractions continues, sont explicitement exposés.

Le dernier chapitre est dédié au calcul des coefficients de transport et des termes de production qui représentent l'objectif central de cette thèse. Ces grandeurs physiques ont été calculées analytiquement en fonction d'intégrales qui dépendent des fractions continues et de la fonction de distribution de Fermi-Dirac. Le calcul numérique des coefficients de transport et des termes de production est également rapporté dans ce chapitre. Le comportement asymptotique, dans la limite collisionnelle et balistique, a fait l'objet d'une étude particulière. Des comparaisons avec les résultats de la littérature sont aussi présentées.

Enfin, on résume les principaux résultats de cette thèse ainsi que les perspectives dans une conclusion générale.

CHAPITRE I

Equation Chapter 1 Section 1

MODELISATION DANS LES SEMI-CONDUCTEURS

I. INTRODUCTION

Dans ce chapitre on va présenter les modèles d'équations pour les semi-conducteurs qui représentent l'objectif central de ce travail. Ces modèles se subdivisent en deux modèles microscopiques que sont les modèles quantique et cinétiques et deux modèles macroscopiques que sont les modèles de dérive-diffusion et les modèles hydrodynamiques. On a consacré le premier paragraphe à la présentation du semi-conducteur en précisant ses propriétés et ses domaines d'application. Le deuxième paragraphe porte sur les modélisations utilisées dans les simulations des dispositifs à base de semi-conducteurs. A cet égard une attention particulière est consacrée à la modélisation semi-classique qui fait l'objet de cette thèse. Enfin, les principaux résultats sont résumés dans une brève conclusion.

II. SEMI-CONDUCTEUR : propriétés et applications

La microélectronique a pris son essor grâce aux propriétés spécifiques des semi-conducteurs. Ces propriétés ont permis la fabrication de composants électroniques de plus en plus sophistiqués. Cette évolution s'est faite de façon progressive. D'abord sont apparus les dispositifs à base de semi-conducteurs discrets, c'est à dire ne réalisant qu'une seule fonction par exemple les transistors découverts par Shockley, Bardeen et Brattain en 1947 [8]. Puis au sein d'une même plaquette de semi-conducteurs, il a été possible d'insérer de multiples interfaces (jonctions). Ces interfaces reliées entre elles constituent un circuit électronique intégré au substrat et remplissant une fonction de traitement de l'information. Le microprocesseur représente le stade le plus avancé de la technique ; les fonctionnalités qu'il intègre sont tellement nombreuses et complètes que le microprocesseur constitue l'image, à l'échelle microscopique, de l'ordinateur. Les semi-conducteurs ont apporté trois avantages essentiels : une diminution de la consommation d'énergie, une rapidité accrue de fonctionnement et la miniaturisation.

Le semi-conducteur le plus connu et dont l'usage est le plus répandu est le silicium. Il en existe d'autres. Les corps simples du groupe IV de la classification de Mendeleïev, autre que le silicium, comme le germanium, sont aussi des semi-conducteurs. Des composés peuvent être aussi des semi-conducteurs, par exemple les composés des corps des groupes III et IV, comme l'arséniure de Gallium (AsGa) et l'antimoniure d'Indium (InSb).

Leurs caractéristiques résultent de leurs propriétés électriques particulières, intermédiaires entre les isolants et les métaux. Leur conductivité électrique ($10^{-8} \Omega^{-1} m^{-1} - 10^7 \Omega^{-1} m^{-1}$) se situe en effet entre celle des métaux ($10^7 \Omega^{-1} m^{-1} - 10^8 \Omega^{-1} m^{-1}$) et celle des isolants ($< 10^{-8} \Omega^{-1} m^{-1}$). On peut citer deux propriétés remarquables des semi-conducteurs. La première est leur interaction particulière avec la lumière. Les semi-conducteurs photosensibles recevant de la lumière la convertissent en courant électrique. Comme application potentielle de cette propriété, on peut citer les cellules photovoltaïques. La deuxième propriété est qu'en présence d'impuretés (dopage), ses propriétés de conduction peuvent être profondément modifiées. En fait les semi-conducteurs purs sans présence d'impureté n'ont que peu d'intérêt en eux mêmes. Dans le cas du silicium par exemple, chaque atome, à l'état isolé possède quatre électrons sur sa couche périphérique. Au sein du cristal, chaque atome est relié à quatre voisins par quatre liaisons covalentes résultant de la mise en commun d'un électron par chaque partenaire. Statistiquement huit électrons gravitent sur la couche externe de chaque atome de silicium du réseau. Ceci est un état stable pour les électrons et une telle configuration est au total peu intéressante dans les applications d'électronique. Si par diffusion dans le solide d'un gaz de nature chimique différente, l'on remplace quelques atomes du réseau cristallin de silicium par des atomes de ce gaz, le semi-conducteur qui est dit alors, dopé, a lui beaucoup plus d'intérêt.

Les interactions entre les atomes d'impureté et ceux du réseau vont permettre l'apparition de multiples effets, générateurs d'applications. Ainsi dans le cas d'atomes de phosphore diffusés dans le silicium : l'atome de phosphore comprend sur sa couche externe cinq électrons au lieu de quatre pour le silicium. Quatre d'entre eux vont être inclus dans des liaisons covalentes avec les atomes voisins de silicium. Un autre sera quasi-libre. Des électrons de l'atome de phosphore vont donc rester inoccupés et vont pouvoir se déplacer quasi-librement à la recherche d'orbitales incomplètes. Ce type de semi-conducteur est dit de type N. Par ailleurs, si on dope le silicium avec des atomes de bore qui possèdent trois électrons sur la couche périphérique, on va pouvoir satisfaire uniquement trois liaisons

covalentes avec les atomes de silicium. Ce semi-conducteur va donc présenter un manque d'électron dans la bande de valence qui se comporte comme une charge positive mobile. Il est alors commode de considérer cette lacune comme une quasi-particule, c'est le concept de trou. Ces trous pourront être comblés dans un endroit et réapparaître ailleurs. Ce type de semi-conducteur est dit de type *P*. Les propriétés de conduction vont donc être améliorées de façon significative. Ce qui est encore plus intéressant avec les semi-conducteurs dopés, ce sont les interfaces (jonction) entre deux semi-conducteurs de types différents. En effet une jonction *N-P* (une diode dans la pratique) laisse passer le courant dans un sens mais le bloque dans l'autre. Une autre application non moins importante est le transistor, où dans ce cas deux jonctions sont utilisées. Les diodes et les transistors ont de nombreuses applications en électronique et en microélectronique tels que le redressement, la commutation, l'amplification, etc.

Les semi-conducteurs ont ajouté l'avantage supplémentaire de l'intégration. Des interfaces sont ainsi réalisées en très grand nombre au sein d'une même tranche de semi-conducteur. Elles sont reliées entre elles par des connexions microscopiques, en fonction des besoins de fonctionnalités très précises : traitement du signal, opérateurs de calcul ou de logiques simulés par des circuits électriques ou électroniques, etc. Il faut noter que leur intégration s'est continûment accrue depuis leur invention en 1958 et cette intégration est à la base de la conception des circuits intégrés et des microprocesseurs.

III. MODÈLES D'ÉQUATIONS

En général le choix d'un modèle approprié est déterminé par plusieurs facteurs, incluant le temps des simulations, la précision des calculs numériques et sa validité physique. Il est nécessaire par conséquent de comprendre aussi bien la nature que le domaine de validité des modèles de transport dans le contexte des observations expérimentales, pour qu'ils soient appliqués correctement aux simulations des dispositifs semi-conducteurs.

On s'intéresse dans ce paragraphe aux modèles théoriques en vue de décrire les propriétés des semi-conducteurs et les caractéristiques des dispositifs à base de semi-conducteur. Dans la littérature de très nombreux modèles ont été rapportés et ils se subdivisent en modèles microscopiques et modèles macroscopiques. En outre, ces modèles peuvent être classiques ou quantiques.

III.1. Modèle quantique de Wigner

Actuellement, les dispositifs semi-conducteurs ont atteint des tailles de l'ordre de quelques nanomètres. A ces échelles de longueur, les modèles classiques ne sont plus valables. Seule l'approche quantique permet de les décrire correctement. On est alors en face d'un nouveau défi qui consiste à établir des modèles quantiques pour prendre en compte des effets quantiques inhérents à ces dispositifs. Un deuxième aspect, non moins important est qu'à ces échelles spatiales, le transport devient faiblement collisionnel et sa description nécessite une modélisation spécifique différente des modélisations des semi-conducteurs de taille supérieure au micromètre. A titre d'exemple, des observations expérimentales ont montré que lorsqu'un MOSFET est conçu à des échelles plus petites que 60 nm , il fonctionne dans un régime quasi-balistique [9]. A l'inverse des exemples usuels sur l'application de l'équation de Schrödinger d'une particule dans un potentiel bien défini, le transport quantique dans les semi-conducteurs est un système de particules en interaction avec des conditions aux limites et plusieurs types de collisions. Plusieurs approches sont utilisées pour décrire le transport quantique, dont notamment les transformations de Wigner [10], l'équation maîtresse de Pauli [11] et les fonctions de Green [12]. Toutes ces méthodes sont équivalentes dans la mesure où elles représentent différentes transformations du même problème physique. Elles diffèrent cependant entre elles par leur facilité à prendre en compte les effets de diffusion, les transitions d'une région cohérente à une région non cohérente et d'une région confinée à une région non confinée.

Dans ce travail on va présenter le formalisme basé sur les transformations de Wigner qui est le plus utilisé pour décrire le transport quantique. Pour établir un modèle quantique, on décrit le gaz de porteurs de charge (électron ou trou) par l'équation de Schrödinger appliquée à une particule soumise à un champ self-consistant

$$i\hbar \frac{\partial \psi_\lambda}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \psi_\lambda + V(r,t) \psi_\lambda = H \psi_\lambda \quad (\text{I.1})$$

où ψ_λ est la fonction d'onde correspondant aux énergies propres E_λ définies par :

$$H \psi_\lambda = E_\lambda \psi_\lambda. \quad (\text{I.2})$$

$V(\vec{r}, t)$ est l'énergie potentielle self-consistante, et m^* est la masse effective des porteurs de charge.

L'approximation de la masse effective signifie que l'équation de Schrödinger avec des porteurs de charge libres et une énergie potentielle totale $V_{tot}(\vec{r}, t) = V_{rés}(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t)$ où $V_{rés}(\vec{r}, t)$ est l'énergie potentielle du réseau, soit

$$i\hbar \frac{\partial \psi_\lambda}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_\lambda + V_{tot}(\vec{r}, t) \psi_\lambda \quad (I.3)$$

peut être réécrite sous la forme (I.1), en remplaçant l'énergie potentielle totale $V_{tot}(\vec{r}, t)$ par l'énergie potentielle self-consistante $V(\vec{r}, t)$ et en remplaçant la masse m des porteurs de charge libre par la masse effective m^* .

Pour un état quantique pur décrit par une fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$, on définit la fonction de Wigner par

$$f_w(\vec{r}, \vec{p}) = \int \frac{d^3 \vec{r}'}{(\pi\hbar)^3} \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') \psi(\vec{r} - \vec{r}') e^{\frac{2i\vec{p}\vec{r}'}{\hbar}} \quad (I.4)$$

où $\vec{p}$ est l'impulsion et la notation « * », signifie complexe conjugué. Pour la simplicité, on suppose que $\psi(\vec{r}, t)$, $f_w(\vec{r}, \vec{p})$, etc, ne dépendent pas explicitement du temps. Par ailleurs, pour un état quantique non pur, décrit par les fonctions d'ondes $\psi_\lambda(\vec{r}, t)$ avec des nombres d'occupation N_λ , la fonction de Wigner s'écrit

$$f_w(\vec{r}, \vec{p}) = \sum_\lambda N_\lambda \int \frac{d^3 \vec{r}'}{(\pi\hbar)^3} \psi_\lambda^*(\vec{r} + \vec{r}') \psi_\lambda(\vec{r} - \vec{r}') e^{\frac{2i\vec{p}\vec{r}'}{\hbar}}. \quad (I.5)$$

On note que $\sum_\lambda N_\lambda = N$ est le nombre total de porteurs de charge dans le système.

La fonction de Wigner donne un puissant outil pour faire le lien entre la mécanique classique et la mécanique quantique. Une propriété fondamentale est que les observables de la

mécanique quantique qui sont quadratiques en $\psi(\vec{r}, t)$, sont linéaires en $f_w(\vec{r}, \vec{p})$. Par exemple, la probabilité de présence d'une particule dépendant de $\vec{r}$ est donnée par

$$n(\vec{r}) = |\psi|^2 = \int f_w d\vec{p} \quad (\text{I.6})$$

Pour établir l'équation de Wigner qui donne l'évolution de la fonction de Wigner, on dérive par rapport au temps l'équation (I.5),

$$\frac{\partial f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial t} = \sum_{\lambda} N_{\lambda} \int \frac{d^3 r'}{(\pi \hbar)^3} \left[\frac{\partial \psi^*(\vec{r} + \vec{r}')}{\partial t} \psi(\vec{r} - \vec{r}') + \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') \frac{\partial \psi(\vec{r} - \vec{r}')}{\partial t} \right] e^{2i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}'}{\hbar}}. \quad (\text{I.7})$$

En utilisant l'équation de Schrödinger (I.1) appliquée à $\psi(\vec{r} - \vec{r}')$:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r} - \vec{r}')}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \psi(\vec{r} - \vec{r}') + V(\vec{r} - \vec{r}', t) \psi(\vec{r} - \vec{r}') \quad (\text{I.8})$$

et à la fonction d'onde conjuguée, $\psi^*(\vec{r} + \vec{r}')$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*(\vec{r} + \vec{r}')}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') + V(\vec{r} + \vec{r}', t) \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') \quad (\text{I.9})$$

on obtient alors

$$\frac{\partial f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \sum_{\lambda} N_{\lambda} \int \frac{d^3 r'}{(\pi \hbar)^3} \left[\left\{ \frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') - V(\vec{r} + \vec{r}', t) \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') \right\} \psi(\vec{r} - \vec{r}') \right. \\ \left. + \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \psi(\vec{r} - \vec{r}') + V(\vec{r} - \vec{r}', t) \psi(\vec{r} - \vec{r}') \right\} \right] e^{2i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}'}{\hbar}}. \quad (\text{I.10})$$

En séparant les termes des gradients des termes qui contiennent l'énergie potentielle self-consistante, on réécrit l'équation (I.10) sous la forme

$$\frac{\partial f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{(\pi\hbar)^3} \sum_{\lambda} N_{\lambda} \int d^3r' \left[\frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ \nabla^2 \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') \psi(\vec{r} - \vec{r}') - \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') \nabla^2 \psi(\vec{r} - \vec{r}') \right\} - \left\{ V(\vec{r} + \vec{r}', t) - V(\vec{r} - \vec{r}', t) \right\} \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') \psi(\vec{r} - \vec{r}') \right] e^{2i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}'}{\hbar}}. \quad (I.11)$$

Intégrant par partie l'intégrale qui contient les gradients, il résulte,

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial t} = & \frac{1}{i\hbar} \sum_{\lambda} N_{\lambda} \int \frac{d^3r'}{(\pi\hbar)^3} \frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ \nabla^2 \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') \psi(\vec{r} - \vec{r}') - \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') \nabla^2 \psi(\vec{r} - \vec{r}') \right\} e^{2i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}'}{\hbar}} \\ & - \frac{1}{i\hbar} \sum_{\lambda} N_{\lambda} \int \frac{d^3r'}{(\pi\hbar)^3} \left\{ V(\vec{r} + \vec{r}', t) - V(\vec{r} - \vec{r}', t) \right\} \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') \psi(\vec{r} - \vec{r}') e^{2i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}'}{\hbar}}. \end{aligned} \quad (I.12)$$

Simplifions davantage cette équation (I.12). Pour cela on pose

$$A_1 = \int \frac{d^3r'}{(\pi\hbar)^3} \left[\left\{ \nabla^2 \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') \right\} \psi(\vec{r} - \vec{r}') e^{2i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}'}{\hbar}} - \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') e^{2i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}'}{\hbar}} \left\{ \nabla^2 \psi(\vec{r} - \vec{r}') \right\} \right] \quad (I.13)$$

et

$$A_2 = \int \frac{d^3r'}{(\pi\hbar)^3} e^{2i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}'}{\hbar}} \left[\left\{ V(\vec{r} + \vec{r}', t) - V(\vec{r} - \vec{r}', t) \right\} \right] \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') \psi(\vec{r} - \vec{r}') \quad (I.14)$$

et l'équation (I.12) s'écrit comme,

$$\frac{\partial f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \sum_{\lambda} N_{\lambda} \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} A_1 \right) - \frac{1}{i\hbar} \sum_{\lambda} N_{\lambda} (A_2). \quad (I.15)$$

i) Transformons l'expression A_1 comme suit,

$$A_1 = \int \frac{d^3r'}{(\pi\hbar)^3} \left[\left\{ \left\{ \nabla_{r'} \cdot (\nabla_{r'} \psi^*(\vec{r} + \vec{r}')) \right\} \psi(\vec{r} - \vec{r}') e^{2i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}'}{\hbar}} - \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') e^{2i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}'}{\hbar}} \left\{ \nabla_{r'} \cdot (\nabla_{r'} \psi(\vec{r} - \vec{r}')) \right\} \right\} \right]$$

et en intégrant par partie et en notant que $\psi(\pm\infty) \rightarrow 0$, il vient

$$A_1 = -\int \frac{d^3 r'}{(\pi\hbar)^3} \nabla_{r'} \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') \cdot \nabla_{r'} \left(\psi(\vec{r} - \vec{r}') e^{2i\frac{\vec{p}}{\hbar} \cdot \vec{r}'} \right) + \int \frac{d^3 r'}{(\pi\hbar)^3} \nabla_{r'} \left(\psi^*(\vec{r} + \vec{r}') e^{2i\frac{\vec{p}}{\hbar} \cdot \vec{r}'} \right) \cdot \nabla_{r'} \psi(\vec{r} - \vec{r}') .$$

En développant les dérivées des produits par rapport à r' et en réarrangeant les différents termes on obtient finalement,

$$A_1 = 2i \frac{\vec{p}}{\hbar} \int \frac{d^3 r'}{(\pi\hbar)^3} \left\{ \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') \cdot \nabla_{r'} \psi(\vec{r} - \vec{r}') - \nabla_{r'} \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') \cdot \psi(\vec{r} - \vec{r}') \right\} e^{2i\frac{\vec{p}}{\hbar} \cdot \vec{r}'} . \quad (I.16)$$

ii) Simplifions à présent l'expression A_2 . Pour cela on développe l'énergie potentielle en série de Taylor comme suit,

$$V(\vec{r} \pm \vec{r}') = V(\vec{r}) \pm \sum_i r'_i \frac{\partial V}{\partial r'_i} + \frac{(\pm 1)^2}{2!} \sum_i \sum_j r'_i r'_j \frac{\partial^2 V}{\partial r'_i \partial r'_j} + \dots + \frac{(\pm 1)^n}{n!} \sum_i \sum_j (r'_i r'_j \dots r'_n) \frac{\partial^n V}{\partial r'_i \partial r'_j \dots \partial r'_n} + \dots \quad (I.17)$$

En utilisant ces expressions (I.17) on obtient la différence d'énergie potentielle,

$$V(\vec{r} + \vec{r}') - V(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{2}{n_1! n_2! n_3!} \sum_{n_1} \sum_{n_2} \sum_{n_3} r_1'^{n_1} r_2'^{n_2} r_3'^{n_3} \frac{\partial^{n_1+n_2+n_3} V}{\partial r_1'^{n_1} \partial r_2'^{n_2} \partial r_3'^{n_3}} \quad (I.18)$$

En injectant ces expressions (I.18) dans l'équation (I.14), on obtient après quelques manipulations mathématiques

$$A_2 = \frac{2}{n_1! n_2! n_3!} \sum_{n_1} \sum_{n_2} \sum_{n_3} \int \frac{d^3 r'}{(\pi\hbar)^3} e^{2i\frac{\vec{p}}{\hbar} \cdot \vec{r}'} \left[r_1'^{n_1} r_2'^{n_2} r_3'^{n_3} \frac{\partial^{n_1+n_2+n_3} V}{\partial r_1'^{n_1} \partial r_2'^{n_2} \partial r_3'^{n_3}} \right] \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') \psi(\vec{r} - \vec{r}') \quad (I.19)$$

où $n_1 + n_2 + n_3 = n = 1, 3, 5, \dots$ est un nombre impair. Posons

$$\frac{\partial f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial t} = \frac{\partial f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial t} \Big|_1 + \frac{\partial f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial t} \Big|_2 \quad (\text{I.20})$$

où

$$\frac{\partial f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial t} \Big|_1 = \sum_{\lambda} N_{\lambda} \left(\frac{\vec{p}}{m^*} \right) \int \frac{d^3 r'}{(\pi \hbar)^3} \int d^3 r' \left\{ \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') \cdot \nabla_r \psi(\vec{r} - \vec{r}') - \nabla_r \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') \cdot \psi(\vec{r} - \vec{r}') \right\} e^{2i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}'}{\hbar}} \quad (\text{I.21})$$

et

$$\frac{\partial f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial t} \Big|_2 = \sum_{\lambda} N_{\lambda} \left(\int \frac{d^3 r'}{(\pi \hbar)^3} \frac{2i}{\hbar} \sum_{n_1} \sum_{n_2} \sum_{n_3} \frac{r_1'^{n_1} r_2'^{n_2} r_3'^{n_3}}{n_1! n_2! n_3!} \frac{\partial^{n_1+n_2+n_3} V}{\partial r_1'^{n_1} \partial r_2'^{n_2} \partial r_3'^{n_3}} \psi^*(\vec{r} + \vec{r}') \psi(\vec{r} - \vec{r}') e^{2i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}'}{\hbar}} \right) \quad (\text{I.22})$$

On remplace $\nabla_{r'}$ par ∇_r dans l'équation (I.21) et en utilisant la définition

$$f_w(\vec{r}, \vec{p}) = \sum_{\lambda} N_{\lambda} \int \frac{d^3 r'}{(\pi \hbar)^3} \left\{ \psi_{\lambda}^*(\vec{r} + \vec{r}') \cdot \psi_{\lambda}(\vec{r} - \vec{r}') \right\} e^{2i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}'}{\hbar}} \quad (\text{I.23})$$

Il vient

$$\frac{\partial f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial t} \Big|_1 = - \left(\frac{\vec{p}}{m^*} \right) \cdot \nabla_r f_w(\vec{r}, \vec{p}) \quad (\text{I.24})$$

Par ailleurs, en calculant la dérivée de la fonction de Wigner par rapport aux variables impulsions, on trouve

$$\frac{\partial^{n_1+n_2+n_3} f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial p_1^{n_1} \partial p_2^{n_2} \partial p_3^{n_3}} = \sum_{\lambda} N_{\lambda} \int \left(\frac{2ir_1}{\hbar} \right)^{n_1} \left(\frac{2ir_2}{\hbar} \right)^{n_2} \left(\frac{2ir_3}{\hbar} \right)^{n_3} \psi_{\lambda}^*(\vec{r} + \vec{r}') \psi_{\lambda}(\vec{r} - \vec{r}') e^{\frac{2i\vec{p} \cdot \vec{r}'}{\hbar}} \frac{d^3 r'}{(\pi \hbar)^3} \quad (\text{I.25})$$

Ce qui donne en utilisant les équations (I.23) et (I.25)

$$f_w(\vec{r}, \vec{p}) = \left(\frac{\hbar}{2ir_1} \right)^{n_1} \left(\frac{\hbar}{2ir_2} \right)^{n_2} \left(\frac{\hbar}{2ir_3} \right)^{n_3} \frac{\partial^{n_1+n_2+n_3} f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial p_1^{n_1} \partial p_2^{n_2} \partial p_3^{n_3}} \quad (\text{I.26})$$

En utilisant cette expression (I.26) dans l'équation (I.22), on trouve

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial t} + \left(\frac{\vec{p}}{m^*} \right) \nabla_r f_w(\vec{r}, \vec{p}) = \\ \frac{2i}{\hbar} \sum_{n_1} \sum_{n_2} \sum_{n_3} \frac{r_1^{n_1} r_2^{n_2} r_3^{n_3}}{n_1! n_2! n_3!} \frac{\partial^{n_1+n_2+n_3} V}{\partial r_1^{n_1} \partial r_2^{n_2} \partial r_3^{n_3}} \left\{ \left(\frac{\hbar}{2ir_1} \right)^{n_1} \left(\frac{\hbar}{2ir_2} \right)^{n_2} \left(\frac{\hbar}{2ir_3} \right)^{n_3} \frac{\partial^{n_1+n_2+n_3} f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial p_1^{n_1} \partial p_2^{n_2} \partial p_3^{n_3}} \right\} \end{aligned} \quad (\text{I.27})$$

que l'on peut réécrire comme

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial t} = - \left(\frac{\vec{p}}{m^*} \right) \nabla_r f_w(\vec{r}, \vec{p}) + \\ \left(\frac{\hbar}{2i} \right)^{n_1+n_2+n_3-1} \sum_{n_1} \sum_{n_2} \sum_{n_3} \frac{1}{n_1! n_2! n_3!} \left\{ \frac{\partial^{n_1+n_2+n_3} V}{\partial r_1^{n_1} \partial r_2^{n_2} \partial r_3^{n_3}} \right\} \left\{ \frac{\partial^{n_1+n_2+n_3} f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial p_1^{n_1} \partial p_2^{n_2} \partial p_3^{n_3}} \right\} \end{aligned} \quad (\text{I.28})$$

ou bien sous une forme plus compacte comme

$$\frac{\partial f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial t} = - \left(\frac{\vec{p}}{m^*} \right) \nabla_r f_w(\vec{r}, \vec{p}) - \left(\frac{2}{\hbar} \right) \sin \left\{ \frac{\hbar}{2} \nabla_{\vec{r}} \cdot \nabla_{\vec{p}} \right\} V(\vec{r}) f_w(\vec{r}, \vec{p}) \quad (\text{I.29})$$

où l'opérateur $\nabla_{\vec{r}}$ agit uniquement sur le potentiel $V(\vec{r})$.

Dans l'approximation semi-classique $\hbar \rightarrow 0$, $-\left(\frac{2}{\hbar} \right) \sin \left\{ \frac{\hbar}{2} \nabla_{\vec{r}} \cdot \nabla_{\vec{p}} \right\} V(\vec{r}) \approx q \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{p}}$ et

l'équation (I.29) devient l'équation de Vlasov, si on assimile la fonction de Wigner à la fonction de distribution.

L'équation (I.29) peut aussi être modifiée sous une autre forme habituellement utilisée dans la littérature [13] en réécrivant l'équation (I.28) dans l'approximation 1D,

$$\frac{\partial f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial t} + \left(\frac{p_x}{m^*} \right) \frac{\partial f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial x} = \sum_{n=1} \frac{1}{\hbar} \frac{1}{(2)^{n-1}} \frac{1}{n!} \frac{\partial^n V}{\partial x^n} \frac{\partial^n f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial k^n} \quad (\text{I.30})$$

Sachant que $\left(\frac{1}{i}\right)^{n-1} = (-1)^{\frac{n-1}{2}}$ pour $n = 1, 3, 5, \dots$ il résulte

$$\frac{\partial f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial t} = -\left(\frac{p_x}{m^*}\right) \frac{\partial f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial x} + \sum_{n=1} \frac{(-1)^{\frac{n-1}{2}}}{(2)^{n-1} n! \hbar} \frac{\partial^n V}{\partial x^n} \frac{\partial^n f_w(\vec{r}, \vec{p})}{\partial k^n} \quad (\text{I.31})$$

III.2. Modèle semi-classique

III.2.1. Equation de Boltzmann dans l'approximation classique

Le formalisme basé sur la théorie cinétique est probablement celui qui est le plus utilisé dans la littérature pour décrire les propriétés de transport dans les gaz neutres, les plasmas et les semi-conducteurs. Il fait appel à la physique statistique hors équilibre pour décrire un système constitué d'un très grand nombre de particules. Pour souci de clarté, on présente dans ce paragraphe le formalisme dans l'approximation classique. On fera ensuite les modifications pour prendre en compte les effets quantiques dans le cadre de la théorie semi-classique.

L'équation de départ est l'équation de Liouville qui décrit l'évolution de la fonction de distribution N -particules $f_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N, t)$ dans l'espace des phases $(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N)$ au cours du temps t ,

$$\frac{\partial f_N}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \frac{d\vec{r}_i}{dt} \cdot \frac{\partial f_N}{\partial \vec{r}_i} + \sum_{i=1}^N \frac{d\vec{p}_i}{dt} \cdot \frac{\partial f_N}{\partial \vec{p}_i} = 0. \quad (\text{I.32})$$

Cela suppose que les particules remplissent tout l'espace des phases (hypothèse d'ergodicité). Cette équation décrit de façon exacte le comportement du gaz de particules mais vu sa forme très complexe elle n'est pas tractable ni analytiquement ni numériquement. Il est nécessaire de la simplifier considérablement pour obtenir une équation utilisable. Pour cela cette équation est intégrée successivement sur les variables $d\vec{r}_N d\vec{p}_N, d\vec{r}_{N-1} d\vec{p}_{N-1}, \dots, d\vec{r}_2 d\vec{p}_2$, générant ainsi un système d'équations couplées appelées hiérarchie BBGKY (acronyme de Bogoliubov, Born, Green, Kirkwood et Yvon) [14]. A un ordre p quelconque l'équation obtenue relie la fonction de distribution $f_p(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_p, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_p, t)$ d'ordre p à la fonction de distribution $f_{p-1}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{p-1}, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_{p-1}, t)$ d'ordre $p-1$. L'équation la plus simple est la dernière équation de la

hiérarchie qui contient la fonction de distribution une-particule et la fonction de distribution deux-particules et qui s'écrit comme

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \frac{\vec{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{r}_1} - \frac{\partial \Psi}{\partial \vec{r}_1} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{p}_1} = \int d\vec{p}_2 d\vec{r}_2 \frac{\partial \phi_{1,2}}{\partial \vec{r}_1} \cdot \frac{\partial f_2}{\partial \vec{p}_1} \quad (\text{I.33})$$

où Ψ est l'énergie potentielle due à une source externe et $\phi_{1,2}$ est l'énergie potentielle d'interaction entre la particule 1 et la particule 2 (énergie potentielle self-consistante). En utilisant le développement de Mayer

$$f_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_1, \vec{p}_2, t) = f_1(\vec{r}_1, \vec{p}_1, t) f_1(\vec{r}_2, \vec{p}_2, t) + g(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_1, \vec{p}_2, t) \quad (\text{I.34})$$

où g est la fonction de corrélation de paire, l'équation (I.33) prend la forme

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \frac{\vec{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{r}_1} - \left(\frac{\partial \phi_{1,2}}{\partial \vec{r}_1} + \frac{\partial \Psi}{\partial \vec{r}_1} \right) \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{p}_1} = \int d\vec{p}_2 d\vec{r}_2 \frac{\partial \phi_{1,2}}{\partial \vec{r}_1} \cdot \frac{\partial g}{\partial \vec{p}_1} \quad (\text{I.35})$$

Dans un milieu chargé, on pose

$$-\frac{\partial(\Psi + \phi_{1,2})}{\partial \vec{r}_1} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (\text{I.36})$$

où q est la charge de la particule et, $\vec{E}(\vec{r}, t)$ et $\vec{B}(\vec{r}, t)$ sont les vecteurs champs électrique et magnétique respectivement. Ces champs prennent compte aussi bien les champs créés par des sources externes que les champs créés par les particules. L'équation (I.35) devient

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \frac{\vec{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{r}_1} + q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{p}_1} = \int d\vec{p}_2 d\vec{r}_2 \frac{\partial \phi_{1,2}}{\partial \vec{r}_1} \cdot \frac{\partial g}{\partial \vec{p}_1}. \quad (\text{I.37})$$

Cette équation est une équation cinétique qui nécessite une relation de fermeture qui consiste à exprimer la fonction de corrélation de paire g en fonction de la fonction de distribution une-particule f_1 . Pour des systèmes faiblement corrélés le membre de droite est remplacé par

l'opérateur de collision de Boltzmann. En posant $f_1 = f(\vec{r}, \vec{p})$ (appelée dorénavant fonction de distribution), elle s'écrit formellement

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (\text{I.38})$$

où le membre de droite qui tient compte des collisions de l'espèce de particule considérée, avec les autres espèces de particules, est l'opérateur de Boltzmann défini dans le cas classique par

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = \int d\vec{v}_2 \sigma d\Omega |\vec{v}_2 - \vec{v}_1| \left[f(\vec{v}'_2) f(\vec{v}'_1) - f(\vec{v}_2) f(\vec{v}_1) \right] \quad (\text{I.39})$$

où $(\vec{v}'_1, \vec{v}'_2)$ sont les vitesses des deux particules avant la collision et $(\vec{v}_1, \vec{v}_2)$, leur vitesses après la collision, σ est la section efficace différentielle de collision et $d\Omega$ est l'élément d'angle solide à travers lequel diffuse la particule de vitesse $\vec{v}_2$ après la collision, l'autre particule jouant le rôle de particule cible.

III.2.2. Passage à la limite semi-classique

Nous allons dans une première étape présenter la notion de fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ dans l'approximation quantique.

III.2.2.1. Fonction de distribution des électrons d'une bande donnée

Dans les semi-conducteurs, les électrons et les trous sont des fermions et ils doivent être décrits rigoureusement par la mécanique quantique. Il est donc nécessaire de modifier l'équation (I.38) pour qu'elle soit valable dans un régime semi-classique. Dans ce modèle un électron (un trou) est repéré à la fois par sa position $\vec{r}$, par son vecteur d'onde $\vec{k}$, et un indice de bande n . Le mouvement entre deux collisions d'un électron d'une bande donnée d'indice n soumis à des champs électrique et magnétique, $\vec{E}(\vec{r}, t)$, $\vec{B}(\vec{r}, t)$ est régi par les équations semi-classiques du mouvement

$$\begin{cases} \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}_k = \frac{1}{\hbar} \nabla_k \varepsilon_k \\ \frac{d\hbar\vec{k}}{dt} = q[\vec{E}(\vec{r}, t) + \vec{v}_k \times \vec{B}(\vec{r}, t)] \end{cases} \quad (\text{I.40})$$

Dans ces équations, $\vec{v}_k$ et ε_k sont respectivement la vitesse moyenne (vitesse de groupe de l'onde associée) et l'énergie des électrons.

Pour décrire les propriétés microscopiques des électrons, on introduit la fonction de distribution une-particule des électrons dans une bande donnée. Étant donnée la forme des équations (I.40), il convient d'utiliser la fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ qui en plus de la position $\vec{r}$ et du temps t , a pour argument le vecteur d'onde $\vec{k}$. La quantité $\frac{2}{(2\pi)^{3/2}} f(\vec{r}, \vec{k}, t) d\vec{r} d\vec{k}$ représente alors le nombre moyen d'électrons qui, à l'instant t , ont une position dans un élément de volume $d\vec{r}$, centré en $\vec{r}$ et un vecteur d'onde dans un élément de volume $d\vec{k}$, centré en $\vec{k}$. Le facteur 2 prend en compte les deux orientations de spin. La densité locale des électrons de la bande considérée est donnée par :

$$n(\vec{r}, t) = \frac{2}{(2\pi)^{3/2}} \int f(\vec{r}, \vec{k}, t) d\vec{k} \quad (\text{I.41})$$

A l'équilibre thermodynamique la fonction de distribution est la fonction de distribution de Fermi-Dirac. A la température $0K$, les électrons dans un solide occupent les états d'énergie conformément à la structure de bande et en accord avec le principe d'exclusion de Pauli. Deux électrons seulement, de nombres quantiques de spin opposés, peuvent occuper chaque état quantique. Il y a autant de paires d'électrons que d'états quantiques. A $T = 0K$, la densité d'état électronique est définie par

$$D(\varepsilon) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon}. \quad (\text{I.42})$$

Cette densité d'état tient compte des deux orientations possibles de spin. Par intégration sur tous les états d'énergie on obtient la densité électronique,

$$n = \int_0^{\mu_c} D(\varepsilon) d\varepsilon \quad (\text{I.43})$$

où μ_c est l'énergie de Fermi qui est l'énergie maximale occupée par des électrons à $T=0K$. Aux températures finies, des électrons sont excités dans des niveaux supérieurs à l'énergie de Fermi en libérant des niveaux inférieurs. Dans les semi-conducteurs en particulier, l'excitation thermique peut faire passer des électrons de la bande de valence au-dessous du niveau de Fermi, dans la bande de conduction située au-dessus de ce dernier. L'effet de la température crée des trous au sommet de la bande de valence. Il s'agit d'une production de paires électron-trou. La probabilité d'occupation d'un niveau d'énergie ε , à une température finie T , est donnée par la fonction de distribution de Fermi-Dirac,

$$f_{FD}(\varepsilon) = \left[1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_c}{k_B T}\right) \right]^{-1} \quad (\text{I.44})$$

où $k_B \approx 1.3810^{-23} \text{ J/K}$ est la constante de Boltzmann et μ_c est l'énergie de Fermi, qui apparaît également en tant que potentiel chimique. La densité d'électron s'écrit dans ce cas,

$$n = \int_0^{\infty} D(\varepsilon) f_{FD} d\varepsilon \quad (\text{I.45})$$

On peut noter que la fonction $f_{FD}(\varepsilon)$ dépend de la différence d'énergie $\varepsilon - \mu_c$ et non du choix de l'origine sur l'échelle des énergies. Pour les métaux, l'origine est choisie en général au minimum de la bande de conduction. Dans les semi-conducteurs l'origine peut correspondre avec le fond de la bande de valence, donc loin de la bande interdite et du niveau de Fermi. En pratique, on fait correspondre l'origine de l'échelle des énergies avec le sommet de la bande de valence. La fonction (I.44) ne peut prendre que des valeurs entre 1 et 0, soit

$$0 \leq f_{FD}(\varepsilon) \leq 1.$$

En particulier :

$$T = 0K \quad \begin{cases} \varepsilon > \mu_c \rightarrow f_{FD}(\varepsilon) = 0 \\ \varepsilon \leq \mu_c \rightarrow f_{FD}(\varepsilon) = 1 \end{cases}$$

$$T > 0K \quad \begin{cases} \varepsilon \gg \mu_c \rightarrow f_{FD}(\varepsilon) = 0 \\ \varepsilon \ll \mu_c \rightarrow f_{FD}(\varepsilon) = 1 \\ \varepsilon = \mu_c \rightarrow f_{FD}(\varepsilon) = 1/2 \end{cases}$$

Lorsque le potentiel chimique est négatif et $|\mu_c| \gg k_B T$ la fonction de Fermi-Dirac tend vers une Maxwellienne, c'est à dire vers la limite classique,

$$f_{FD}(\varepsilon) = \left[1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_c}{k_B T}\right) \right]^{-1} \approx \exp\left(\frac{-\varepsilon + \mu_c}{k_B T}\right) = \exp\left(\frac{\mu_c}{k_B T}\right) \exp\left(\frac{-\varepsilon}{k_B T}\right). \quad (I.46)$$

Lorsque le potentiel chimique est proche de zéro les effets de dégénérescence ne sont plus négligeables et dans la limite $\mu_c \gg k_B T$ le système est fortement dégénéré.

En outre, dans un semi conducteur, en plus des électrons dans la bande de conduction, il y a des trous qui sont des quasi-particules correspondant à des états électroniques inoccupés au sommet d'une bande. Le nombre de trous sur des niveaux d'énergie compris entre les valeurs ε et $\varepsilon + d\varepsilon$ est la fonction de distribution statistique des trous, soit

$$f_t(\varepsilon) = 1 - f_{FD}(\varepsilon), \quad (I.47)$$

III.2.3. Equation de Boltzmann semi-classique

En tenant compte des équations (I.40), l'équation (I.38) s'écrit

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v}_k \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{q}{\hbar} (\vec{E} + \vec{v}_k \times \vec{B}) \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (I.48)$$

Les collisions sont décrites avec l'opérateur de Boltzmann établi à l'origine pour les gaz neutres dilués. Il faut donc aussi le modifier pour tenir compte des effets quantiques. La modification de cet opérateur passe par le calcul de la section efficace de collision entre les particules (ou les quasi-particules) considérées. En outre la probabilité pour qu'une particule effectue une collision avec une autre particule doit aussi être corrigée pour tenir compte de la nature quantique des particules. Sa dérivation nécessite donc de spécifier la nature des particules qui subissent des collisions. Les principaux mécanismes collisionnels sont ceux des porteurs de charge (électron ou trou) avec les impuretés, les phonons (vibrations du réseau du cristal semi-conducteur), et les interactions électron-électron.

IV. MÉCANISMES DE COLLISIONS DANS LES SEMI-CONDUCTEURS

IV.1. Collision électron-impureté

Le processus de collision est celui d'un électron avec un centre diffuseur localisé représenté par une impureté. Dans une telle collision, l'électron passe d'un état $|\vec{k}\rangle$ à un état $|\vec{k}'\rangle$; la différence de quantité de mouvement correspondante, $\Delta\vec{p} = \hbar(\vec{k} - \vec{k}')$ étant absorbée par l'impureté. L'énergie de celle-ci change donc de $(\Delta\vec{p})^2 / 2M$, M étant sa masse. Comme cette masse est beaucoup plus grande que celle de l'électron, ce changement d'énergie est très petit par rapport à l'énergie initiale de l'électron. Cette énergie initiale n'est donc pratiquement pas modifiée par ce type diffusion, qui est dite pour cette raison, diffusion élastique. Le seul paramètre nécessaire à la description de la collision est le vecteur d'onde $\vec{k}$ de l'électron; la position $\vec{r}$ et le temps t étant fixés. La fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$,

notée pour souci de simplification, f_k , représente la probabilité pour que l'état $|\vec{k}\rangle$ soit occupé par un électron (la probabilité pour que l'état $|\vec{k}\rangle$ soit vide est donc $(1 - f_k)$).

Pour écrire l'intégrale de collision électron-impureté, il convient d'introduire la probabilité conditionnelle $W_{\vec{k}',\vec{k}}dt$ pour qu'une transition de l'état $|\vec{k}\rangle$ vers l'état $|\vec{k}'\rangle$ se produise dans l'intervalle de temps dt . Si le potentiel d'interaction est suffisamment faible, on peut utiliser l'approximation de Born de la diffusion. Si en plus on utilise l'approximation élastique et la règle d'or de Fermi, on obtient l'expression du taux de transition de l'état $|\vec{k}\rangle$ vers l'état $|\vec{k}'\rangle$ [14,15],

$$W_{\vec{k}',\vec{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \vec{k}' | V_i | \vec{k} \rangle \right|^2 \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}). \quad (\text{I.49})$$

Dans la formule (I.49), V_i désigne le potentiel d'interaction électron-impureté et la fonction de Dirac $\delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'})$ signifie que l'énergie de l'électron n'est pas modifiée par la collision. Étant donné qu'initialement l'électron est dans l'état $|\vec{k}\rangle$ et que l'état $|\vec{k}'\rangle$ est vide, il faut multiplier $W_{\vec{k}',\vec{k}}$ par la probabilité f_k pour que l'état $|\vec{k}\rangle$ contienne un électron et par la probabilité $(1 - f_{k'})$ pour que l'état $|\vec{k}'\rangle$ soit vide. L'intégrale de collision pour des collisions sur des impuretés s'écrit donc

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = \sum_{k'} [W_{k,k'} f_{k'} (1 - f_k) - W_{k',k} f_k (1 - f_{k'})] \quad (\text{I.50})$$

soit encore

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int [W_{k,k'} f_{k'} (1 - f_k) - W_{k',k} f_k (1 - f_{k'})] d\vec{k}' \quad (\text{I.51})$$

où V désigne le volume de l'échantillon considéré. En fait l'intégrale (I.51) est générale et elle peut aussi bien être appliquée à l'interaction d'un électron avec un phonon. Pour faire le lien

avec l'opérateur de Boltzmann (I.39), on peut montrer que la section efficace différentielle est reliée à l'élément de matrice du potentiel perturbateur par

$$\sigma(\theta) = \frac{m^2 V^2}{(2\pi)^2 \hbar^4} \left| \langle \vec{k}' | V_i | \vec{k} \rangle \right|^2 \quad (\text{I.52})$$

Le principe du bilan détaillé permet d'écrire

$$\left(\frac{\partial f_{FD}}{\partial t} \right)_{coll} = 0 \quad (\text{I.53})$$

ce qui implique que

$$W_{k,k'} f_{FDk'} (1 - f_{FDk}) - W_{k',k} f_{FDk} (1 - f_{FDk'}) = 0. \quad (\text{I.54})$$

où f_{FD} est la fonction de distribution locale de Fermi-Dirac. Comme pour une diffusion élastique on a $\varepsilon(k) = \varepsilon(k')$, alors l'équation (I.54) implique que

$$W_{k,k'} = W_{k',k} \quad (\text{I.55})$$

qui est la propriété de microréversibilité. Dans ce cas l'opérateur de Boltzmann (I.51) s'écrit

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int W_{k,k'} (f_{k'} - f_k) d\vec{k}' \quad (\text{I.56})$$

On peut noter que l'opérateur sous cette nouvelle forme, en tenant compte de la diffusion élastique et de la microréversibilité, est devenu linéaire. Habituellement ce type d'opérateur est réécrit sous une forme d'opérateur de relaxation de la forme

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = - \frac{f - f_{FD}}{\tau(k)} \quad (\text{I.57})$$

où $\tau(k)$ est le temps de relaxation qu'il faut calculer en utilisant quelques hypothèses simplificatrices. En supposant que le semi-conducteur est soumis à un champ électrique externe de magnitude relativement faible on peut décomposer la fonction de distribution en une fonction d'ordre zéro (la fonction de Fermi-Dirac) et une fonction qui décrit les perturbations créées par ce champ, soit

$$f(\vec{k}) = f_{FD}(\vec{k}) + f_1(\vec{k}), \quad (I.58)$$

on peut montrer que

$$\frac{1}{\tau(k)} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int W_{k,k'} \left(1 - \frac{\vec{k}' \cdot \vec{E}}{\vec{k} \cdot \vec{E}} \right) d\vec{k}' \quad (I.59)$$

qui peut s'écrire aussi sous une forme plus explicite, indépendante du champ électrique appliquée, $\vec{E}$, sous la forme

$$\frac{1}{\tau(k)} = \frac{\hbar k}{mV} \int \sigma(\theta) (1 - \cos \theta) d\Omega \quad (I.60)$$

où θ est l'angle entre les vecteurs $\vec{k}$ et $\vec{k}'$. A titre d'exemple on donne la formule de Conwell-Weisskopf [15] qui calcule la section différentielle pour des impuretés ionisées et qui conduit au temps de relaxation suivant

$$\frac{1}{\tau(k)} = \frac{1}{16\pi} \frac{Z^2 e^4 n_i \varepsilon_k^{-3/2}}{(\varepsilon_0 \varepsilon_d)^2 \sqrt{2m}} \ln \left(1 + \cot^2 g^2 \left(\frac{\theta_{\min}}{2} \right) \right) \quad (I.61)$$

où Ze est la charge de l'impureté, ε_d est la constante diélectrique du semi-conducteur, n_i est la densité des impuretés et $\theta_{\min}$ est l'angle minimum de déflexion de l'électron correspondant au plus grand paramètre d'impact. Il est important de noter que la diffusion des porteurs de charge avec les impuretés doit être prise en compte pour des températures du réseau typiquement inférieure à 100K. Par conséquent à température ambiante (300K), ces interactions sont négligeables devant les interactions électron-phonon.

IV.2. Collision électron-phonon

Les ions ne sont pas exactement disposés en un arrangement périodique, mais subissent par rapport à leur position d'équilibre des oscillations (correspondant à des vibrations du réseau) dont l'amplitude croît avec la température. Ces oscillations donnent lieu à une diffusion des électrons, que l'on décrit généralement en termes d'interaction électron-phonon.

Considérons la collision d'un électron avec un phonon. Il existe deux branches d'oscillation dans les solides, la branche acoustique et la branche optique.

IV.2.1. Diffusion par les phonons acoustiques

C'est une diffusion que l'on peut considérer comme élastique dans la mesure où l'énergie des phonons échangée lors de l'interaction est relativement faible par rapport à l'énergie des électrons,

$$\hbar\omega \ll \varepsilon(k) \quad (I.62)$$

où la fréquence ω est relié à l'impulsion $\vec{q}$ des phonons par la relation de dispersion des phonons acoustiques,

$$\omega = v_s q \quad (I.63)$$

Dans la relation (I.63), v_s est la vitesse du son dans le cristal. Dans le cadre de l'approximation du temps de relaxation, la constante de temps est donnée par l'équation (I.59). Cette expression dépend de la probabilité de transition et d'un facteur qui dépend du champ électrique appliqué.

i) Calcul de la probabilité de transition

Dans le cas des phonons acoustiques, la probabilité de transition est définie par

$$W_{\vec{k}', \vec{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} \left\{ \left| \langle \vec{k}' | V_{ac} | \vec{k} \rangle \right|^2 \delta[\varepsilon(k') - \varepsilon(k) + \hbar\omega] + \left| \langle \vec{k}' | V_{ac} | \vec{k} \rangle \right|^2 \delta[\varepsilon(k') - \varepsilon(k) - \hbar\omega] \right\} \quad (\text{I.64})$$

Le premier terme rend compte de l'émission d'un phonon et le deuxième terme de l'absorption d'un phonon. Les fonctions de Dirac assurent la conservation de l'énergie dans les deux cas.

Le calcul des éléments de matrice dans l'expression (I.64) est relativement long, nous en donnons seulement les principales étapes.

L'énergie potentielle de déformation dans un cristal est reliée à la variation du volume δV d'un cristal, soit

$$V_{ac} = D_{ac} \frac{\delta V}{V} = D_{ac} \nabla \cdot \vec{u}(\vec{r}) \quad (\text{I.65})$$

où D_{ac} est le potentiel de déformation et $\vec{u}(\vec{r})$ est le vecteur déplacement d'un phonon que l'on peut écrire sous la forme

$$\vec{u}(\vec{r}) = \sum_q \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V \omega}} \vec{e}_q \left(a_q \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) + a_q^\dagger \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}) \right) \quad (\text{I.66})$$

où $\vec{e}_q$ est un vecteur unitaire qui précise la polarisation (parallèle à la direction du déplacement, ρ est la densité de masse du cristal et $(a_q, a_q^\dagger)$ sont les opérateurs de création et d'annihilation des bosons. Les expressions (I.65) et (I.66) permettent d'exprimer l'opérateur de déformation dans l'espace de Fourier sous la forme

$$V_{ac}(\vec{q}) = C(\vec{q}) a_q + C^\dagger(-\vec{q}) a_{-q}^\dagger \quad (\text{I.67})$$

où

$$C(\vec{q}) = D_{ac} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V \omega}} (i\vec{e}_q \cdot \vec{q}). \quad (\text{I.68})$$

En utilisant l'opérateur (I.67), le calcul de l'élément de matrice du potentiel de déformation donne

$$\langle \vec{k}' | V_{ac} | \vec{k} \rangle_+ = C(q) \sqrt{n_q} \quad (\text{I.69})$$

$$\langle \vec{k}' | V_{ac} | \vec{k} \rangle_- = C(q) \sqrt{n_q + 1} \quad (\text{I.70})$$

où

$$n_q = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1} \quad (\text{I.71})$$

est le nombre d'occupation des phonons (statistique de Bose-Einstein) et T est la température du semi-conducteur. En tenant compte de l'inégalité $\frac{\hbar\omega}{k_B T} \ll 1$, vérifiée par les phonons acoustiques, on obtient finalement,

$$\left| \langle \vec{k}' | V_{ac} | \vec{k} \rangle_{\pm} \right|^2 \approx \frac{D_{ac}^2 k_B T}{2\rho V v_s^2} \quad (\text{I.72})$$

ii) Calcul du facteur en champ électrique

Explicitons le terme en champ électrique dans l'équation (I.59) comme

$$1 - \frac{\vec{k}' \cdot \vec{E}}{\vec{k} \cdot \vec{E}} = 1 - \frac{k'E \cos \theta'}{kE \cos \theta} \quad (\text{I.73})$$

On donne sur la figure I.1 la géométrie du champ électrique et des vecteurs d'onde $\vec{k}$ et $\vec{k}'$ de l'électron avant et après l'interaction avec le réseau, respectivement. L'impulsion du phonon est définie par

$$\hbar \vec{q} = \hbar \vec{k}' - \hbar \vec{k} . \quad (\text{I.74})$$

On peut montrer à partir des équations (I.73) et (I.74) que

$$1 - \frac{k' \cos \theta'}{k \cos \theta} = \frac{q(\cos \beta \cos \theta + \sin \beta \sin \theta \cos \varphi)}{k \cos \theta} \quad (\text{I.75})$$

où φ est l'angle entre les plans constitués par les vecteurs $(\vec{k}', \vec{k})$ et $(\vec{k}, O\mathbf{x})$.

iii) Calcul du temps de relaxation

En utilisant les expressions (I.64) et (I.75) dans la relation du temps de relaxation des phonons acoustiques on obtient

$$\frac{1}{\tau_{ac}(k)} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{(2\pi)^2}{\hbar} \frac{D_{ac}^2 k_B T}{2\rho V v_s^2} \int_0^\pi \sin \beta d\beta \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \frac{qn_q}{k} \cos \beta q^2 dq \left[\begin{array}{l} (\delta(k') - \delta(k) + \hbar\omega) \\ + (\delta(k') - \delta(k) - \hbar\omega) \end{array} \right] \quad (\text{I.76})$$

qui s'écrit plus explicitement comme [14,15]

$$\frac{1}{\tau_{ac}(v)} = \frac{D_{ac}^2 k_B T m^2}{\pi \hbar^4 \rho v_s^2} v \quad (\text{I.77})$$

où v est la vitesse des électrons définie par

$$\varepsilon = mv^2 / 2. \quad (\text{I.78})$$

On note que ce temps de relaxation est inversement proportionnel à la vitesse v des électrons, i.e., plus les électrons sont rapides et plus les collisions avec le réseau sont efficaces.

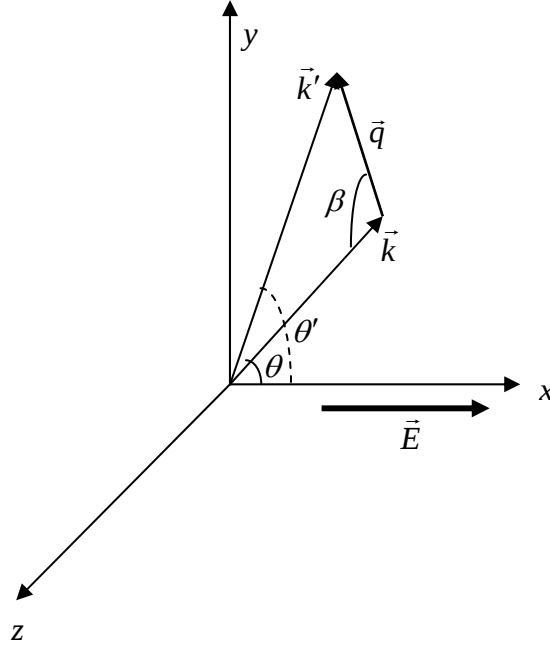


Figure I.1 : Géométrie du champ électrique $\vec{E}$ et des vecteurs d'onde $\vec{k}$, $\vec{k}'$ et $\vec{q}$.

IV.2.2. Diffusion par les phonons optiques

La branche optique des ondes acoustiques dans les cristaux contribue aux diffusions des électrons par le réseau de façon moins importante que la branche acoustique [54]. La principale caractéristique de ces diffusions est qu'elles sont inélastiques. Cela signifie que l'on doit tenir compte de l'énergie des phonons dans le calcul de l'opérateur de collision électron-phonon optique. Les calculs sont en grande partie similaires à ceux rapportés dans la section IV.2.1. Nous allons donner l'expression de cet opérateur de collision sans en présenter les détails de calcul, qui conduisent à sa dérivation. Cet opérateur ne peut pas être approximé par un opérateur de relaxation et son expression est [15],

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{opt} = \frac{1}{\tau_{opt}(\mathbf{v})} \left\{ \sqrt{v^2 + \chi} \left[f - \frac{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)}{4\pi} \int f^+ d\Omega \right] + \sqrt{v^2 - \chi} \left[f \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - \frac{1}{4\pi} \int f^- d\Omega \right] \right\} \quad (\text{I.79})$$

où

$$\frac{1}{\tau_{opt}} = \frac{1}{2\pi} \frac{m^2 (D_t)^2}{\hbar^2 \rho \hbar \omega} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right) - 1}, \quad (I.80)$$

$$f^\pm = f\left(\sqrt{v^2 \pm \chi}\right). \quad (I.81)$$

$$\text{et } \sqrt{v^2 \pm \chi} = \begin{cases} \sqrt{v^2 \pm \chi} & \text{pour } v^2 \geq \chi \\ 0 & \text{pour } v^2 < \chi \end{cases} \quad \text{avec } \chi = \frac{2\hbar\omega}{m^*}$$

L'opérateur (I.79) conserve le nombre de particule mais il ne conserve pas l'énergie (opérateur inélastique).

IV.3. Collision électron-électron

Les collision électron-électron jouent un rôle significatif que dans les semi-conducteurs fortement dégénérés (typiquement pour des densités de porteurs de charge supérieures à 10^{18} cm^{-3}). Sous sa forme la plus complète, cet opérateur se présente sous une forme mathématique relativement complexe,

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{e-e} = \int_{\text{ZB}} \left\{ f' f'_1 (1-f)(1-f_1) - f f_1 (1-f')(1-f'_1) \right\} \delta_E \delta_{\vec{k}} S_{ee}(\vec{k}, \vec{k}', \vec{k}_1, \vec{k}'_1) d\vec{k}_1 d\vec{k}'_1$$

où le domaine d'intégration est restreint à la première zone de Brillouin B ,

$$\delta_E = \delta(\varepsilon + \varepsilon_1 - \varepsilon' - \varepsilon'_1)$$

$$\delta_{\vec{k}} = \delta(\vec{k} + \vec{k}_1 - \vec{k}' - \vec{k}'_1)$$

sont les fonctions de Dirac qui modélisent la conservation de l'énergie cinétique et de l'impulsion lors d'une collision d'un état $(\vec{k}, \vec{k}_1)$ à un état $(\vec{k}', \vec{k}_1')$, $S_{ee}(\vec{k}, \vec{k}', \vec{k}_1, \vec{k}_1')$ est la section efficace de collision et les facteurs $(1-f)$, $(1-f_1)$, $(1-f')$ et $(1-f'_1)$ prennent en compte le principe d'exclusion de Pauli.

En général, cet opérateur est simplifié sous une forme d'un opérateur de relaxation. D'après la référence [15], il s'écrit comme

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{e-e} = -\frac{f - f_{FD}}{\tau_{e-e}(\mathbf{v})} \quad (\text{I.82})$$

où $\tau_{e-e}(\mathbf{v}) \propto v^3$ est le temps de relaxation électron-électron. Notons que sous cette forme, cet opérateur de relaxation n'est pas conservatif. On peut y remédier en prenant un temps de relaxation constant.

V. MODÈLES HYDRODYNAMIQUES

Les modèles hydrodynamiques sont incontestablement les modèles les plus populaires pour décrire les propriétés de transport dans les dispositifs semi-conducteurs. Au lieu d'utiliser la fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ où $\vec{v} = \hbar \vec{k} / m$, ce sont les moments de cette fonction de distribution qui sont à la base de ces modèles. Ces moments représentent des moyennes statistiques de grandeurs physiques microscopiques et dans le cas général ils sont définis à l'ordre n par la relation,

$$M_n(\vec{r}, t) \sim \int (\vec{v})^n f(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3v \quad (\text{I.83})$$

Cette approche nécessite d'utiliser plusieurs moments reliés entre eux par des équations de conservation que l'on établit à partir des équations cinétiques aussi bien quantique que semi-classique. On mesure alors l'intérêt de cette approche en notant que les moments ainsi que les

équations hydrodynamiques ne dépendent que des variables espace et temps. Cela simplifie considérablement les équations du modèle. De plus les moments sont des grandeurs moyennes qui peuvent donc être directement mesurable, telles que la densité, la température, etc.

V.1. Equations hydrodynamiques à trois moments

Dans son domaine de validité le modèle de dérive-diffusion fournit une bonne approximation à travers les équations de bilan de la densité de charge et de la densité de courant, couplées de façon self-consistante au champ électrique appliqué au dispositif semi-conducteur. Cependant pour décrire le comportement du transport dans les semi-conducteurs sub-micrométriques, il est nécessaire d'aller au delà de l'approximation diffusive pour prendre en compte des processus collisionnels plus complexes entre les porteurs de charge et d'autres excitations élémentaires dans le matériau. En particulier il est nécessaire de considérer d'autres paramètres physiques pertinents pour décrire le transport tels que la densité de courant, le tenseur des contraintes, le flux de chaleur pour inclure notamment les effets thermoélectriques.

La procédure standard pour inclure tous ces effets au plan hydrodynamique consiste à établir une hiérarchie d'équations de bilan pour un ensemble complet de paramètres pertinents. Ces équations constituent un modèle hydrodynamique complet lorsque tous les moments d'ordre supérieur sont exprimés par rapport aux variables hydrodynamiques que sont la densité de particules et d'énergie et la vitesse de dérive.

Pour dériver les équations hydrodynamiques, on démarre donc de l'équation cinétique que l'on écrit sous la forme

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + \frac{q}{m} E_i \frac{\partial f}{\partial v_i} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}. \quad (\text{I.84})$$

On a utilisé la notation des indices répétés et considéré dans le terme de force que le vecteur champ électrique. Il est très aisé de généraliser cette théorie à des systèmes soumis à des champs magnétiques. Tous les termes collisionnels sont représentés formellement par le membre de droite de l'équation (I.84). A l'équilibre thermodynamique l'équation (I.84) se résume à

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = 0 \quad (\text{I.85})$$

qui admet pour solution la fonction de Fermi-Dirac donnée par l'équation (I.44). Les équations hydrodynamiques sont obtenues en multipliant à l'ordre n , l'équation cinétique (I.84) par $(\vec{v})^n$ et on l'intègre dans l'espace des vitesses (ou l'espace des vecteurs d'onde $\vec{k}$). Les modèles d'équations les plus utilisés sont ceux basés sur les trois premières équations correspondant à $n=0, 1$ et 2 .

En multipliant l'équation (I.84) par m , $m\vec{v}$ et $\frac{1}{2}mv^2$ il vient

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{m}{q} \frac{\partial J_i}{\partial x_i} = 0 \quad (\text{I.86})$$

$$\frac{\partial J_j}{\partial t} + \frac{q}{m} \frac{\partial}{\partial x_i} (P\delta_{ij} + \Pi_{ij} + \rho V_i V_j) - \frac{q^2}{m^2} \rho E_j = \frac{q}{m} R_j \quad (\text{I.87})$$

$$\frac{\partial \rho W}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (q_i + \rho W V_i) - E_i J_i = Q \quad (\text{I.88})$$

où

$$\rho(\vec{r}, t) = \frac{2}{h^3} \int m f d^3 p = m n(\vec{r}, t) \quad (\text{I.89})$$

est la densité de masse locale des porteurs de charge et $n(\vec{r}, t)$ est la densité de particule,

$$\vec{V}(\vec{r}, t) = \frac{2}{h^3} \frac{1}{n} \int \vec{v} f d^3 p \quad (\text{I.90})$$

est la vitesse de dérive (appelée aussi vitesse moyenne) des porteurs de charge,

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \frac{2}{h^3} \int q \vec{v} f d^3 p \quad (\text{I.91})$$

est la densité de courant

$$\rho W = \frac{2}{h^3} \int \frac{1}{2} m (\vec{v} - \vec{V})^2 f d^3 p \quad (\text{I.92})$$

est la densité d'énergie locale des porteurs de charge

$$P(\vec{r}, t) = \frac{2}{3} \rho W \quad (\text{I.93})$$

est la pression isotrope,

$$\Pi_{ij} = \frac{2}{h^3} \int m \left[(\vec{v} - \vec{V})_i (\vec{v} - \vec{V})_j - \frac{1}{3} (\vec{v} - \vec{V})^2 \delta_{ij} \right] f d^3 p \quad (\text{I.94})$$

est le tenseur des contraintes qui est symétrique et de trace nulle,

$$q_i(\vec{r}, t) = \frac{2}{h^3} \int \frac{1}{2} m (\vec{v} - \vec{V})^2 (\vec{v} - \vec{V})_i f d^3 p \quad (\text{I.95})$$

est le flux de chaleur.

On définit aussi les termes de production que sont, le taux de transfert d'impulsion entre les porteurs de charge et les autres particules (ou quasi-particules),

$$R_j = \frac{2}{h^3} \int m (\vec{v} - \vec{V})_j \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} d^3 p \quad (\text{I.96})$$

et le taux de transfert d'énergie entre les porteurs de charge et les autres particules (ou quasi-particules),

$$Q = \frac{2}{h^3} \int \frac{1}{2} m (\vec{v} - \vec{V})^2 \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} d^3 p. \quad (\text{I.97})$$

On peut noter que le système d'équations (I.86)-(I.88) n'est pas self-consistant. En effet ce système d'équations décrit l'évolution spatio-temporelle des variables hydrodynamiques que sont la densité, la vitesse de dérive et la température des porteurs de charge. Mais d'autres moments d'ordre supérieur, le tenseur des contraintes, le flux de chaleur ainsi que les termes de production, doivent être exprimés en fonction des trois variables hydrodynamiques n , $\vec{V}$ et T . Cette opération nécessite de réétudier le traitement cinétique en résolvant analytiquement l'équation cinétique (I.84) et de calculer les expressions des relations de fermeture Π_{ij} , q_i , $\vec{R}$ et Q en fonction de n , $\vec{V}$ et T . Le calcul de ces relations de fermeture est l'un des plus important problème dans la modélisation des semi-conducteurs. C'est un problème physique toujours ouvert qui fait toujours l'objet de travaux de recherche intensifs dans le domaine des semi-conducteurs. Le domaine de validité physique des relations de fermeture induit celui des équations hydrodynamiques. En particulier, dans les semi-conducteurs de tailles sub-micrométriques les relations de fermeture doivent être valables dans le régime faiblement collisionnel.

V.2. Equations hydrodynamiques à plus de trois moments

Une deuxième approche établie par Grad [16] pour les gaz neutres est une approche qui nécessite de considérer plus d'équations hydrodynamiques et de calculer des relations de fermeture en utilisant le développement de la fonction de distribution sur la base des polynômes d'Hermite tensoriels. Ces polynômes tensoriels ont été établis par Grad dans la référence [17]. Cette méthode se distingue de l'approche de Chapman-Enskog [18] par le fait qu'elle n'utilise pas un développement par rapport à un paramètre d'échelle (nombre de Knudsen), et c'est le nombre d'équations fluides mis en œuvre qui va limiter son domaine de validité. Plus le nombre d'équations fluides est important, plus le domaine de validité est large.

En plus des trois équations (I.86)-(I.88), on prend en considération les équations fluides d'ordre 2 et 3 qui vont décrire l'évolution du tenseur des contraintes et du flux de chaleur. La première s'écrit

$$\frac{\partial \Pi_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\Pi_{ijk} + \Pi_{ij} V_k) - 2J_i E_j = P_{ij} \quad (\text{I.98})$$

où le moment d'ordre supérieur

$$\Pi_{ijk} = \frac{2}{h^3} \int m (\vec{v} - \vec{V})_i (\vec{v} - \vec{V})_j (\vec{v} - \vec{V})_k f d^3 p$$

est un tenseur symétrique et de trace nulle par rapport aux indices, i et j , et où les tenseurs, $V_i E_j$ et P_{ij} sont des tenseurs symétriques et de trace nulle.

La deuxième équation a pour expression,

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_{ij} + q_i V_j + q_j V_i + \rho W V_i V_j) - \frac{q}{m} \Pi_{ij} E_j - \frac{5q}{2m} P E_i = Q_i \quad (\text{I.99})$$

où

$$u_{ij} = \frac{2}{h^3} \int \frac{1}{2} m (\vec{v} - \vec{V})^2 (\vec{v} - \vec{V})_j (\vec{v} - \vec{V})_k f d^3 p.$$

Le problème des relations de fermeture dans cette méthode concerne les relations constitutives $\Pi_{ijk}(\rho, \vec{V}, W)$, $u_{ij}(\rho, \vec{V}, W)$, et celles fournies par les termes de production $\vec{R}$, Q , $\vec{Q}$ et P_{ij} . La méthode la plus connue est celle des 13 moments de Grad dans les gaz neutres et les semi-conducteurs faiblement dégénérés. Elle consiste dans une première étape à écrire la fonction de distribution sous la forme,

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t) = f_M(\vec{r}, \vec{v}, t) \sum_{n=0}^{\infty} H_{[i]}^n(\vec{v}) M_{[i]}^n(\vec{r}, t) \quad (\text{I.100})$$

où

$$H_{[i]}^n(\vec{v}) = (-1)^n \exp(\vec{v}^2 / 2) \left(\frac{\partial}{\partial v_{i1}} \dots \frac{\partial}{\partial v_{in}} \right) \exp(-\vec{v}^2 / 2) \quad (\text{I.101})$$

est le polynômes d'Hermite tensoriel de rang n et f_M est la fonction de distribution de Maxwell qui décrit les semi-conducteurs non dégénérés à l'équilibre. Dans l'expression (I.100) $M_{[i]}^n(\vec{r}, t)$ est un moment hydrodynamique. On injectant ce type de solution dans

l'équation cinétique, en intégrant l'équation cinétique une fois multipliée par un polynôme d'Hermite d'ordre donné, on génère ainsi des équations hydrodynamiques couplées. La méthode des 13 moments de Grad fait intervenir les paramètres, ρ , $\vec{V}$, W , P_{ij} et $\vec{q}$.

Une autre approche est utilisée pour calculer les relations de fermeture des équations hydrodynamiques dans les semi-conducteurs basée sur la maximisation de l'entropie. Pour déterminer les relations de fermeture on a besoin d'exprimer la fonction de distribution sous une forme particulière

$$f = f(\vec{r}, \vec{v}, t, A_n) \quad (\text{I.102})$$

où les A_n expriment les n moments fluides considérés (les 13 moments par exemple décrits plus haut). Cette fonction (I.102) est calculée en utilisant le principe variationnel qui maximise l'entropie à l'aide des multiplicateurs de Lagrange [19-21].

VI. CONCLUSION

Dans ce chapitre on a présenté les modèles théoriques utilisés dans la littérature pour décrire les propriétés de transport dans les semi-conducteurs. Ces modèles se subdivisent en modèles cinétiques et hydrodynamiques. Les modèles cinétiques quantiques sont basés sur l'équation de Schrödinger et les modèles semi-classiques sur l'équation de Boltzmann semi-classique. Ce dernier qui fait l'objet de cette thèse a été présenté de façon plus détaillée. En particulier l'équation de Boltzmann semi-classique a été rapportée de façon quantitative et les principaux mécanismes de diffusion des porteurs de charge avec le réseau sont décrits avec le formalisme de la mécanique quantique et de la théorie cinétique.

Chapitre II

Equation Chapter 2 Section 1

METHODES DE RESOLUTION DES EQUATION CINETIQUES

I. INTRODUCTION

Dans ce chapitre on s'intéresse aux méthodes de résolution des équations cinétiques utilisées dans la littérature. L'objectif principal visé est d'établir des relations de fermeture des équations hydrodynamiques présentées dans le chapitre I. Deux travaux particuliers rapportés dans la littérature avec lesquels nous avons comparé nos résultats sont également exposés dans ce chapitre.

II. MÉTHODE BASÉE SUR LA FONCTION DE CORRÉLATION

L'approche quantique pour étudier les phénomènes de transport dans les cristaux semi-conducteurs est celle basée sur les fonctions de corrélation. Ces fonctions de corrélation jouent le même rôle en mécanique statistique des phénomènes hors équilibre que celui de la fonction de partition en mécanique statistique des phénomènes à l'équilibre thermodynamique. Cette fonction se définit par

$$C(t) = \langle A(0)A(t) \rangle \quad (\text{II.1})$$

où $A(t)$ est une observable fluctuante, et où la moyenne s'effectue dans tout l'espace des phases $(\vec{p}, \vec{q})$ par rapport à une fonction de distribution à l'équilibre thermodynamique, soit :

$$C(t) = \int A(p, q, 0)A(p, q, t) f(p, q) dp_1 \dots dp_N dq_1 \dots dq_N \quad (\text{II.2})$$

où N est le nombre de particule du système et $f(p, q)$ est la fonction de distribution des porteurs de charge à l'équilibre thermodynamique. Dans le cas des électrons, c'est la fonction de distribution de Fermi-Dirac.

Nous présentons, dans ce qui suit, le formalisme permettant de calculer les coefficients de transport en utilisant les fonctions de corrélation de Wigner [13].

II.1) L'opérateur de Wigner et la fonction de corrélation de Wigner

La fonction de Wigner contient toutes les informations nécessaires pour calculer les valeurs moyennes d'un opérateur à une particule, en particulier les variables de transport telles que la densité de courant et d'énergie. Le point de départ de la théorie est basée sur l'opérateur de Wigner, donné par

$$g_{\alpha\alpha'}(k, z, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq e^{iqz} c_{\alpha}^*(k - \frac{q}{2}, t) c_{\alpha'}(k + \frac{q}{2}, t). \quad (\text{II.3})$$

Cet opérateur est déterminé à partir des opérateurs d'annihilation c_{α}^* et de création c_{α} des porteurs de charge en tenant compte de la corrélation entre deux bandes d'indices α et α' . Il est intéressant de rappeler que la fonction d'onde des porteurs de charge est en général projetée sur la base des fonctions propres dont les opérateurs de création et d'annihilation en sont les coefficients. En conséquence, la fonction de Wigner est une valeur moyenne de l'opérateur de Wigner défini par l'équation (II.3).

Dans le cadre de la configuration à une particule, l'opérateur de Wigner satisfait les mêmes équations du mouvement que la fonction de Wigner. En introduisant les collisions, il satisfait l'équation quantique de Langevin, *i. e.*, en plus du terme de relaxation, il contient un terme de fluctuation. Les fluctuations et le bruit du transport des porteurs de charge peuvent être décrits par les fonctions de corrélations de transport.

Ces fonctions de corrélation de transport sont obtenues à partir de la fonction de corrélation de Wigner et dans une description 1D, elles s'écrivent sous la forme de la variance

$$\begin{aligned} \delta f_{\alpha\alpha',\beta\beta'}(k, z, t; k', z', t') &= \frac{1}{2} \langle g_{\alpha\alpha'}(k, z, t) g_{\beta\beta'}(k', z', t') \rangle \\ &+ \frac{1}{2} \langle g_{\beta\beta'}(k', z', t') g_{\alpha\alpha'}(k, z, t) \rangle - \langle g_{\alpha\alpha'}(k, z, t) \rangle \langle g_{\beta\beta'}(k', z', t') \rangle \end{aligned} \quad (\text{II.4})$$

Dans le cas stationnaire, les fonctions de corrélation dépendent de la variable $t - t'$, et pour la simplicité, on peut poser $t' = 0$. Dans le cadre de l'approximation à une seule particule, l'évolution temporelle de la fonction de corrélation est déterminée par l'équation de mouvement de la même manière que celle de la fonction de corrélation de Wigner,

$$\frac{\partial}{\partial t} f_{\alpha\alpha',\beta\beta'}(k, z, t; k', z', 0) = \hat{L}_W f_{\alpha\alpha',\beta\beta'}(k, z, t; k', z', 0) \quad (\text{II.5})$$

où le second membre de cette équation est donné par le second membre de l'équation (I.31). L'équation du mouvement doit être complétée par les conditions initiales et les conditions aux limites. La condition initiale, c'est-à-dire $t' = t$, est la variance de l'opérateur de Wigner. Elle satisfait l'équation du mouvement suivante

$$\frac{\partial}{\partial t} f_{\alpha\alpha',\beta\beta'}(k, z, t; k', z', t) = (\hat{L}_W + \hat{L}_W') f_{\alpha\alpha',\beta\beta'}(k, z, t; k', z', t). \quad (\text{II.6})$$

Dans le cas stationnaire, on a alors :

$$(\hat{L}_W + \hat{L}_W') f_{\alpha\alpha',\beta\beta'}(k, z, 0; k', z', 0) = 0 \quad (\text{II.7})$$

où l'opérateur $\hat{L}_W$ agit uniquement sur les variables correspondantes (notées prime) et sur la seconde paire d'indices de la bande d'énergie. Le zéro du membre de droite indique que dans le cas du régime balistique, les fluctuations ne sont ni créées ni détruites, mais sont uniquement transportées du fait du mouvement des porteurs de charge. Donc, les collisions ont un effet double : elles détruisent les corrélations et créent les fluctuations.

Ces phénomènes donnent lieu à un terme de source de relaxation et de bruit dans l'équation (II.6) donnée ci-dessus. Ces deux phénomènes sont reliés par le théorème de fluctuation-dissipation en donnant naissance à la variance dans la limite balistique selon l'équation suivante [22,23]

$$\delta f_{\alpha\alpha',\beta\beta'}(k, z, 0; k', z', 0) = \frac{1}{2\pi} \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'} f_{\alpha}^s(k) [1 - f_{\alpha}^s(k)] \delta(k - k') \delta(z - z') \quad (\text{II.8})$$

où la fonction $f_{\alpha}^s(k)$ désigne la fonction de Wigner stationnaire.

La procédure de calcul de la fonction de corrélation à l'état stationnaire et par conséquent de la fonction de corrélation de n'importe quelle variable de transport nécessite trois étapes,

- i) Le calcul de la fonction de Wigner stationnaire
- ii) A partir de cette fonction, on calcule la variance de la fonction de Wigner stationnaire,
- iii) La résolution de l'équation du mouvement de la fonction de corrélation en utilisant les conditions initiales données par la variance.

II.2. Les fonctions de corrélation à l'équilibre thermodynamique

Dans ce paragraphe, le formalisme général établi précédemment peut être appliqué dans le cas d'un système de longueur finie à l'équilibre thermique pour lequel des expressions analytiques peuvent être obtenues. En se basant sur ces expressions, on peut calculer des coefficients de transport linéaires. Les expressions obtenues permettent de décrire les phénomènes de transport du régime balistique au régime diffusif.

On choisit comme exemple, un système limité de longueur l avec $-l/2 < z < l/2$, sans aucun potentiel externe et de structure de bande d'énergie de forme parabolique. De ce fait, l'évolution temporelle est déterminée par l'opérateur $\hat{L}_w^B = -v_\alpha(k) \partial/\partial z$, avec $F_\alpha(z) = 0$. Le système est situé entre deux contacts idéaux qui permettent d'injecter des porteurs selon la fonction de distribution de Fermi-Dirac.

i) La fonction de corrélation de Wigner

A l'équilibre thermodynamique, les deux premières étapes *i)* et *ii)* sont simples. La solution stationnaire pour la fonction de Wigner, qui peut être interprétée comme une fonction de distribution, est donnée par la fonction de distribution de Fermi-Dirac,

$$f_{\alpha\alpha'}(k, z) = \delta_{\alpha\alpha'} \left[\exp \left(\frac{\varepsilon_\alpha(k) - \mu}{k_B T} + 1 \right) \right]^{-1} \quad (\text{II.9})$$

Tous les paramètres donnés sont supposés comme étant connus. La fonction de corrélation initiale est donnée par l'équation (II.8). En incluant les collisions par le biais de l'opérateur de relaxation, la fonction de corrélation de Wigner satisfait l'équation du mouvement

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + v_{\alpha}(k) \frac{\partial}{\partial k} - \frac{1}{\tau_c} \right] \delta f_{\alpha\alpha',\beta\beta'}(k, z, t; k', z', 0) = 0 \quad (\text{II.10})$$

dont la solution est obtenue avec la condition initiale (II.8) sous la forme,

$$\delta f_{\alpha\alpha',\beta\beta'}(k, z, t; k', z', 0) = \frac{1}{2\pi} e^{\frac{-t}{\tau_c}} \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'} f_{\alpha}^0(k) [1 - f_{\alpha}^0(k)] \delta(k - k') \delta(z - v_{\alpha}(k).t - z') \quad (\text{II.11})$$

ii) Les fonctions de corrélation des variables de transport

Les opérateurs du courant électrique local $I_1(z, t)$ et du courant d'énergie local $I_2(z, t)$ dans la direction Oz sont obtenus à partir de l'opérateur de Wigner selon l'équation suivante

$$I_{\mu}(z, t) = e^{2-\mu} \sum_{\alpha} \int g_{\alpha\alpha}(k, z, t) v_{\alpha}(k) [\varepsilon_{\alpha}(k)]^{\mu-1} dk \quad (\text{II.12})$$

où e est la charge des porteurs de charge et $\mu = 1, 2$. En conséquence, les densités de charge et d'énergie à 1D sont obtenues avec la même équation mais sans la vitesse de groupe. On définit des opérateurs de courant électrique et d'énergie comme suit,

$$I_{\mu}(t) = \frac{1}{l} \int_{-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}} I_{\mu}(z, t) dz \quad (\text{II.13})$$

et la matrice des éléments des fonctions de corrélation des courants est donc donnée par

$$\begin{aligned} C_{\mu\nu}(t) &= \frac{1}{2} \langle \delta I_{\mu}(t) \delta I_{\nu}(0) \rangle + \frac{1}{2} \langle \delta I_{\nu}(0) \delta I_{\mu}(t) \rangle \\ &= \frac{e^{4-\mu-\nu}}{l^2} \sum_{\alpha, \beta} \int_{-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}} dz dz' \int_{-\infty}^{+\infty} dk dk' v_{\alpha}(k) [\varepsilon_{\alpha}(k)]^{\mu-1} v_{\beta}(k) [\varepsilon_{\beta}(k)]^{\nu-1} \delta f_{\alpha\alpha',\beta\beta'}(k, z, t; k', z', 0). \end{aligned} \quad (\text{II.14})$$

Ce qui donne, en utilisant la fonction de corrélation de Wigner à l'équilibre donnée dans l'équation (II.11), le résultat final suivant,

$$\begin{aligned} C_{\mu\nu}(t) &= \frac{e^{4-\mu-\nu}}{2\pi l^2} e^{-t/\tau_c} \sum_{\alpha} \int_{-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}} dz dz' \int_{-\infty}^{+\infty} dk dk' v_{\alpha}^2(k) [\varepsilon_{\alpha}(k)]^{\mu+\nu-2} \\ &\times f_{\alpha}^0(k) [1 - f_{\alpha}^0(k)] (l - |v_{\alpha}(k)|.t) \Theta(l - |v_{\alpha}(k)|.t) \end{aligned} \quad (\text{II.15})$$

où $\Theta(x)$ est la fonction de Heaviside.

La matrice des densités spectrales de courant correspondantes est obtenue par la transformée de Fourier-Laplace de la fonction de corrélation respective et elle est donnée par

$$S_{\mu\nu}(\omega) = \int C_{\mu\nu}(t) e^{-i\omega t} dt = \frac{e^{4-\mu-\nu}}{2\pi l^2} \sum_{\alpha} \int dk |v_{\alpha}(k)|^3 [\varepsilon_{\alpha}(k)]^{\mu+\nu-2} \times f_{\alpha}^0(k) [1 - f_{\alpha}^0(k)] \left(\tau_1(\omega) \tau_{\alpha}(k) - \tau_1^2(\omega) \left(1 - e^{-\frac{\tau_{\alpha}(k)}{\tau_1(\omega)}} \right) \right). \quad (\text{II.16})$$

Ici $\tau_{\alpha}(k) = l/|v_{\alpha}(k)|$ est le temps de transit microscopique des porteurs de charge dans l'état $|k\rangle$, et $\tau_1(\omega) = \tau_c/(1 + i\omega\tau_c)$. Cette équation (II.16) décrit une transition continue du régime diffusif au régime balistique. Les deux régimes correspondent aux limites $\tau_{\alpha}(k)/\tau_c \rightarrow \infty$ et $\tau_{\alpha}(k)/\tau_c \rightarrow 0$, respectivement.

iii) Les coefficients de transport linéaires

Les coefficients cinétiques linéaires permettent de relier les flux aux forces thermodynamiques. Dans des systèmes homogènes, une telle relation est donnée par :

$$J_{\mu} = \sum_{\nu} L_{\mu\nu} X_{\nu} \quad (\text{II.17})$$

où J_1 et J_2 sont les densités de courant électrique et d'énergie respectivement,

$X_1 = E - \frac{T}{e} \nabla \left(\frac{\mu}{T} \right)$ et $X_2 = - \left(\frac{1}{T} \right) \nabla T$ sont les forces thermodynamiques et E est le champ

électrique. Les coefficients cinétiques $L_{\mu\nu}$ sont des tenseurs de rang deux pouvant être obtenus à partir de la connaissance du système approprié des fonctions de corrélation des densités de courant à l'équilibre thermodynamique en utilisant le théorème de fluctuation-dissipation [24]. Les coefficients $L_{\mu\nu}$ sont proportionnels à la densité spectrale définie dans l'équation (II.16).

III. MÉTHODE BASÉE SUR LE DÉVELOPPEMENT DE CHAPMAN-ENSKOG

Pour résoudre analytiquement les équations cinétiques dans le cas le plus général (non linéaire) la méthode la plus utilisée est celle de Chapman-Enskog. C'est probablement le formalisme le plus rigoureux et le plus exploité dans la littérature.

Dans cette section nous présentons cette méthode en utilisant par simplicité un opérateur de collision de relaxation qui inclut tous les processus collisionnels. Cette méthode est efficace lorsque les forces thermodynamiques et tous les gradients (spatiaux et temporels) sont de faible magnitude comparativement aux effets collisionnels. Ceci se traduit par l'équation cinétique

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}_z \frac{\partial f}{\partial z} + \frac{q}{m} E_z \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}_z} = \frac{1}{\varepsilon} [-\nu (f - f_{FD})] \quad (\text{II.18})$$

où $\varepsilon \ll 1$ est un paramètre d'échelle correspondant au nombre de Knudsen $K = \frac{v_c}{\nu L} \sim \varepsilon$, où L est la longueur typique des gradients et v_c est la vitesse caractéristique du système. Cette condition traduit le fait que les processus collisionnels sont dominants par rapport aux forces thermodynamiques. La méthode de Chapman-Enskog [18] consiste à développer la fonction de distribution, le flux de chaleur, etc, par rapport au paramètre d'échelle $\varepsilon \ll 1$

$$f = f^0 + \varepsilon f^1 + \varepsilon^2 f^2 + \dots \quad (\text{II.19})$$

$$q_x = \varepsilon q_x^1 + \varepsilon^2 q_x^2 + \dots \quad (\text{II.20})$$

$$\Pi_{xx} = \varepsilon \Pi_{xx}^1 + \varepsilon^2 \Pi_{xx}^2 + \dots \quad (\text{II.21})$$

En plus la méthode de Chapman-Enskog est basée sur l'hypothèse que les relations conservatives suivantes sont remplies

$$\frac{2}{h^3} \int f^0 d^3 p = n, \quad (\text{II.22})$$

$$\frac{2}{h^3} \int m \vec{v} f^0 d^3 p = n \vec{V}, \quad (\text{II.23})$$

$$\frac{2}{h^3} \int \frac{m(\vec{v} - \vec{V})^2}{2} f^0 d^3 p = \rho W \quad (\text{II.24})$$

et pour $\alpha > 0$

$$\frac{2}{h^3} \int \left(1, m \vec{v}, \frac{m v^2}{2} \right) f^\alpha d^3 p = 0. \quad (\text{II.25})$$

A titre d'exemple nous allons calculer la solution pour un problème 1D où l'inhomogénéité du système est suivant l'axe Oz. En injectant les solutions (II.19)-(II.21) dans l'équation cinétique (II.18) on obtient à l'ordre un

$$f^1 = \left\{ -\sqrt{2} \frac{v_t}{v} y^{1/2} \frac{\partial f_{FD}}{\partial z} - \sqrt{2} \frac{v_t}{v} y^{1/2} \frac{qE}{k_B T} \frac{\partial f_{FD}}{\partial y} \right\} \cos \theta + \left\{ -\frac{2}{v} y \frac{\partial f_{FD}}{\partial y} \frac{\partial V}{\partial z} \right\} \left(\cos^2 \theta - \frac{1}{3} \right). \quad (\text{II.26})$$

où $v_t = \sqrt{\frac{k_B T}{m}}$, $y = v^2 / 2 v_t^2$ et $\cos \theta = v_z / v$.

Le premier terme décrit les flux (densité de courant et flux de chaleur) tandis que le deuxième terme, décrit les tenseurs d'ordre 2 (tenseur des contraintes).

Notons toutefois que le développement de Chapman-Enskog n'a pas été capable de décrire des systèmes très inhomogènes avec des nombres de Knudsen de l'ordre un ou supérieur à un. Pour décrire ces systèmes, il faut garder un nombre très important de termes (quelques dizaines) dans le développement de Chapman-Enskog, ce qui rend cette méthode peu efficace. En revanche, elle reste très adaptée dans les semi-conducteurs dont les dimensions sont très importantes par rapport au libre parcours moyen ($L \gg \lambda_{mfp}$).

IV. METHODE BASÉE SUR LE DÉVELOPPEMENT SUR LES HARMONIQUES SPHÉRIQUES.

Cette méthode consiste à développer la fonction de distribution sur la base des harmoniques sphériques dans l'espace des vecteurs d'onde $\vec{k}$,

$$f(\vec{k}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=+l} Y_l^m(k, \theta, \varphi) f_l^m(k) \quad (\text{II.27})$$

où $Y_l^m(k, \theta, \varphi)$ est l'harmonique sphérique d'ordre (l, m) et $f_l^m(k)$ est la composante de la fonction de distribution d'ordre (l, m) . Les variables k , θ et φ sont les coordonnées sphériques définies par la relation

$$\vec{k} = (k \cos \theta, k \sin \theta \cos \varphi, k \sin \theta \sin \varphi). \quad (\text{II.28})$$

Ensuite ce développement (II.28) est injecté dans l'équation cinétique. En multipliant l'équation résultante par les $Y_l^m(k, \theta, \varphi)$ [25] et en intégrant sur θ et φ on génère ainsi une infinité d'équations qui décrivent l'évolution des composantes $f_l^m(k)$ dans l'espace $(k, \vec{r}, t)$.

Pour résoudre ces équations couplées il est nécessaire d'opérer une troncature à un ordre n donné du système d'équations, i.e.,

$$f(\vec{k}) = \sum_{l=0}^n \sum_{m=-l}^{m=+l} Y_l^m(k, \theta, \varphi) f_l^m(k) \quad (\text{II.29})$$

Cette troncature n'est réalisée que pour rendre le problème solvable. La troncature la plus simple usuellement utilisée est $n = 1$ ou 2 [26, 27]. Comme le terme isotrope $f_0^0(k)$ est en général la fonction de distribution de Fermi-Dirac, les composantes anisotropes $f_{l>0}^m(k)$, vont prendre en compte l'écart à l'équilibre thermodynamique. Comme en pratique l'ordre du développement est petit, il résulte que cette méthode est efficace pour décrire les systèmes très proches de l'équilibre thermodynamique. Par ailleurs la résolution analytique du système

d'équations pour déterminer les relations de fermeture désirées, est une tâche difficile et sa résolution n'est possible qu'en utilisant des approximations.

V. APPROCHES NUMERIQUES.

On peut aussi simuler les semi-conducteurs avec les équations cinétiques sans l'utilisation des équations hydrodynamiques et par conséquent le calcul analytique des relations de fermeture. Elles sont plus précises puisque elles utilisent des équations microscopiques mais elles sont nettement plus complexes à résoudre que les équations hydrodynamiques.

Les méthodes numériques pour simuler les dispositifs semi-conducteurs avec l'équation de Boltzmann se scindent en méthodes non stochastique et stochastique. L'approche numérique directe non stochastique consiste à discrétiser l'équation de Boltzmann couplée aux équations du champ de façon self-consistante (équation de Poisson) dans tout l'espace des phases en tenant compte des conditions initiales et des conditions aux limites, appropriées. Cette approche est la méthode la plus lourde, qui nécessite un temps de calcul trop important et en générale elle est très peu utilisée dans ces simulations.

Les simulations Monte Carlo en revanche sont plus utilisées pour analyser le transport dans les semi-conducteurs [28,29]. Elles se heurtent également au problème du temps de calcul mais aussi au bruit numérique qui accompagne les résultats obtenus, inhérents aux méthodes stochastiques. Elle consiste à suivre l'évolution des positions et des vitesses d'un ensemble de particules soumises d'une part au champ électrique et d'autre part à des forces aléatoires. Les mécanismes de diffusion des particules avec le réseau sont simulés avec des nombres aléatoires. Ce processus est répété typiquement entre 10^4 et 10^6 pour simuler le trajet des porteurs de charge à travers le dispositif. Bien que le bruit statistique décroît lorsque le nombre de particules choisi N_{sim} , augmente, il décroît cependant seulement en $\sqrt{N_{sim}}$ ce qui nécessite pour le réduire de façon significative une valeur de N_{sim} , extrêmement élevée, qui rend non raisonnable l'utilisation de ce type de simulations.

En fait les méthodes utilisées en pratique pour simuler les dispositifs semi-conducteurs sont les méthodes hydrodynamiques.

VI. RESULTATS DE LA LITTERATURE.

Dans cette section on rapporte deux résultats de la littérature. Ceux de Greiner et al., [3] qui utilisent le formalisme de la fonction de corrélation pour calculer les coefficients de transport balistique dans l'approximation quantique et ceux de Rangel-Huerta et Velasco [2] , qui utilisent la méthode des moments. Ces deux résultats ont fait l'objet de comparaison avec la littérature.

VI.1. Résultat de Greiner et al.

Plusieurs travaux ont été réalisés, durant ces dernières années, concernant le transport balistique dans les systèmes mésoscopiques. La finalité de ces recherches est de calculer les relations de fermeture des équations hydrodynamiques non collisionnelles. En outre cela permet aussi de déterminer les unités fondamentales de la conductance électrique, de la conductance thermique quantique, etc. [30].

Parmi ces travaux, ceux de Greiner et al. [3] concernent le calcul de l'expression explicite de la conductivité thermique dans le régime balistique pour des systèmes mésoscopiques dégénérés et non dégénérés. Ces auteurs ont suivi la même démarche que celle utilisée dans le calcul de la conductivité électrique développée dans la référence [31, 32]. Elle consiste à utiliser la théorie de la réponse linéaire avec la formalisme de la fonction de corrélation. Dans le cadre de la réponse linéaire, on exprime les flux en fonction des forces thermodynamiques selon l'équation (II.17).

L'application du théorème de fluctuation-dissipation [24], dans le cas des systèmes faiblement perturbés par rapport à l'équilibre thermodynamique, a permis d'établir les densités de courant électrique et du flux de chaleur à partir des propriétés spectrales des fluctuations. A l'équilibre thermodynamique, ces fonctions de corrélation s'écrivent

$$C_{\mu\nu}(t) = \frac{1}{2} \langle J_{\mu}(0) J_{\nu}(t) + J_{\nu}(0) J_{\mu}(t) \rangle \quad (\text{II.30})$$

où la notation $\langle \dots \rangle$ correspond à la moyenne statistique. En appliquant ces deux dernières équations à un système 1D, de longueur caractéristique L suivant la direction Oz , placé entre deux contacts parfaits, c'est-à-dire complètement absorbants et thermalisants, et en utilisant le

formalisme de la fonction de Wigner [33], les fonctions de corrélation généralisées sont données par,

$$C_{\mu\nu}(t) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{e\hbar}{m^*L} \right)^2 \left(\frac{\hbar^2}{2m^*e} \right)^{\mu+\nu-2} \exp\left(-\frac{t}{\tau_c}\right) \int_{-L/2}^{L/2} dz \int_{k^-}^{k^+} k^{2(\mu+\nu-1)} F_{FD}(1-F_{FD}) dk \quad (\text{II.31})$$

où e est la charge élémentaire des porteurs de charge, $\hbar$ est la constante de Planck réduite, m^* est la masse effective des électrons, τ_c est le temps de diffusion des électrons, $\vec{k}$ est le vecteur d'onde des électrons diffusés et F_{FD} est la fonction de distribution de Femi-Dirac. Les bornes d'intégration pour le vecteur d'onde sont définies par,

$$k^\pm = \pm \frac{L m^*}{2 \hbar t}. \quad (\text{II.32})$$

L'équation (II.31) décrit la transition continue du régime balistique (non collisionnel) au régime diffusif (très collisionnel). Comme indiqué plus haut, les coefficients cinétiques dynamiques $L_{\mu\nu}(\omega)$ peuvent être calculés par le biais de la densité spectrale qui est la transformée de Fourier-Laplace $S_{\mu\nu}(\omega)$ des fonctions de corrélation $C_{\mu\nu}(t)$ à travers la relation [34],

$$L_{\mu\nu}(\omega) = \frac{L S_{\mu\nu}(\omega)}{k_B T} \quad (\text{II.33})$$

où k_B est la constante de Boltzmann et T est la température du système. Après quelques manipulations mathématiques, l'expression de la densité spectrale s'écrit comme,

$$S_{\mu\nu}(\omega) = \frac{2^{3/2} e^{4-\mu-\nu}}{\pi L \hbar m^{*1/2}} \int_0^\infty dE E^{\mu+\nu-3/2} F_{FD}(1-F_{FD}) \times \Gamma(\omega) \left[1 - \frac{\Gamma(\omega)}{\tau(E)} \left(1 - e^{-\tau(E)/\Gamma(\omega)} \right) \right] \quad (\text{II.34})$$

où $\tau(E) = L\sqrt{m^*/2E}$ est le temps de transit microscopique des électrons ayant une énergie E et $\Gamma(\omega) = \tau_c/(1+i\omega\tau_c)$. L'équation (II.34) décrit la transition continue du régime diffusif au

régime balistique caractérisée par les situations limites $\tau/\tau_c \rightarrow \infty$ et $\tau/\tau_c \rightarrow 0$ respectivement. En utilisant l'approximation balistique $\tau/\Gamma \ll 1$ et en considérant le cas statique (c'est-à-dire $\omega = 0$), l'équation (II.34) devient, en développant le terme exponentielle $\exp(-\tau/\Gamma)$ jusqu'au deuxième ordre par rapport au paramètre τ/Γ ,

$$S_{\mu\nu}(0) = \frac{2e^2}{h} \int_0^\infty dE \left(\frac{E}{e} \right)^{\mu+\nu-2} F_{FD}(1 - F_{FD}) \quad (\text{II.35})$$

Par ailleurs, en introduisant un temps moyen de transit τ_T , défini selon le régime choisi, les coefficients cinétiques statiques dans le régime balistique sont donnés par les équations suivantes pour le cas non dégénéré et dégénéré, respectivement,

$$\begin{cases} L_{11}^{ndg} = \frac{e^2 n}{m^*} \tau_T^{ndg} \\ L_{22}^{ndg} = \frac{2n(k_B T)^2}{m^*} \tau_T^{ndg} \\ L_{12}^{ndg} = L_{21}^{ndg} = \frac{en k_B T}{m^*} \tau_T^{ndg} \end{cases} \quad (\text{II.36})$$

et

$$\begin{cases} L_{11}^{dg} = \frac{e^2 n}{2m^*} \tau_T^{dg} = L \frac{2e^2}{h}, \\ L_{22}^{dg} = \frac{n}{2m^*} \tau_T^{dg} E_F^2 \left(1 + \frac{\pi^2 (k_B T)^2}{3 E_F^2} \right), \\ \quad = L \frac{2}{h} E_F^2 \left(1 + \frac{\pi^2 (k_B T)^2}{3 E_F^2} \right), \\ L_{12}^{dg} = L_{21}^{dg} = \frac{en}{2m^*} \tau_T^{dg} E_F = L \frac{2e}{h} E_F \end{cases} \quad (\text{II.37})$$

Dans les deux systèmes d'équations précédents (II.36) et (II.37), on utilise la concentration des électrons n pour un système à 1D et l'énergie de Fermi des électrons est donnée par $E_F = (\pi \hbar n)^2 / 8m^*$. Le temps moyen de transit balistique τ_T est donné par les équations suivantes,

$$\begin{cases} \tau_T^{ndg} = L \left(\frac{m^*}{2\pi k_B T} \right)^{1/2} = \frac{L}{v_{ndg}} \\ \tau_T^{dg} = L \left(\frac{m^*}{2E_F} \right)^{1/2} = \frac{L}{v_{deg}} \end{cases} \quad (\text{II.38})$$

où v_{ndg} et v_{deg} sont des vitesses moyennes des électrons pouvant se déplacer entre les deux contacts parfaits dans le cas non dégénéré et dégénéré respectivement. Ces deux cas limites sont caractérisés par les approximations $\delta = E_F/k_B T \ll -1$ et $\delta = E_F/k_B T \gg 1$, respectivement.

On peut déduire ainsi, la conductivité thermique dynamique qui peut être calculée à partir de la relation standard,

$$\kappa(\omega) = \frac{L_{11}(\omega)L_{22}(\omega) - L_{12}(\omega)L_{21}(\omega)}{L_{11}(\omega)T} \quad (\text{II.39})$$

Dans le cas statique 1D, cette conductivité thermique peut être calculée explicitement dans le cas non dégénéré et dégénéré, soit

$$\begin{aligned} \kappa^{balis,ndg} &= \frac{nk_B^2 T}{m^*} \tau_T^{ndg} = \frac{nLk_B^{3/2} T^{1/2}}{(2\pi m^*)^{1/2}}, \\ \kappa^{balis,deg} &= \frac{\pi^2}{6} \frac{nk_B^2 T}{m^*} \tau_T^{deg} = \frac{2\pi^2}{3} \frac{Lk_B^2 T}{h}. \end{aligned} \quad (\text{II.40})$$

Le comportement de la conductivité thermique balistique en fonction du paramètre $\omega\tau_T$ est représenté sur les figures (II.1) et (II.2) dans les cas non dégénéré et fortement dégénéré respectivement.

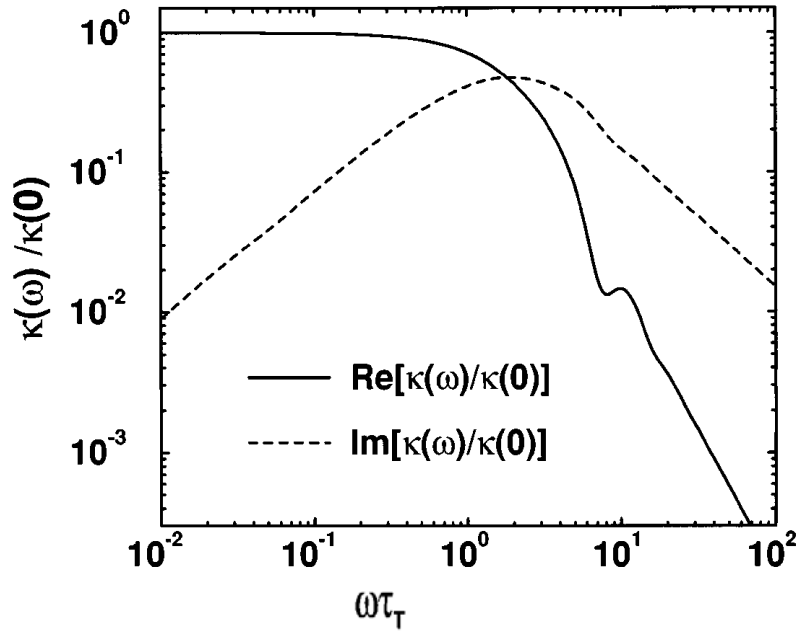


Figure II.1 : La conductivité thermique balistique en fonction $\omega\tau_T$ dans un système classique (non dégénéré). La partie réelle est en trait continu et la partie imaginaire est en trait pointillé.

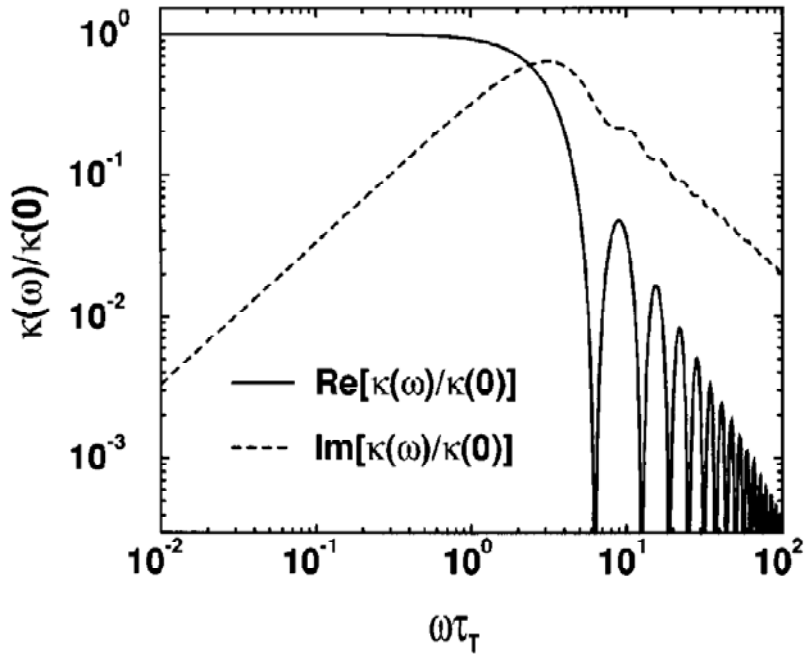


Figure II.2 : La conductivité thermique balistique en fonction de $\omega\tau_T$ dans un système fortement dégénéré. La partie réelle est en trait continu et la partie imaginaire est en trait pointillé.

On définit aussi la notion de conductance thermique quantique (cas dégénéré) comme étant la conductivité thermique par unité de longueur [30,35], soit

$$K^{balis} = \kappa^{balis} / L . \quad (II.41)$$

Son expression explicite se déduit aisément à partir de l'équation (II.40),

$$K^{balis,deg} = \frac{2\pi^2}{3} \frac{k_B^2 T}{h} . \quad (II.42)$$

Ces résultats de Greiner *et al.* feront l'objet dans le chapitre IV, d'une étude comparative avec les résultats obtenus dans ce travail.

VI.2. Résultat de Rangel-Huerta et Velasco

Rangel-Huerta et Velasco [2] ont développé un modèle cinétique semi-classique basé sur la résolution de l'équation de Boltzmann par la méthode des treize moments [16]. La fermeture des équations de transport dans les semi-conducteurs est effectuée en faisant un développement de la fonction de distribution autour de la fonction de Fermi-Dirac. Dans leur modèle, ils considèrent que les temps de relaxation jouent un rôle central dans la détermination des quantités constitutives généralisées.

Dans le régime collisionnel, il est bien admis dans la littérature que le modèle dérive-diffusion constitue une bonne approximation dans l'établissement des équations constitutives de transport. En effet, ce modèle couplé à l'équation de Poisson associée au champ électrique appliqué, permet d'établir les densités des électrons et du courant électrique [36,37]. Dans leur modèle les auteurs ont établi un système d'équations hydrodynamiques généralisées valable au-delà de l'approximation de dérive-diffusion. Pour cela ils ont pris en compte d'autres quantités de transport telles que le tenseur de contraintes et le flux de chaleur. Ceci permet d'inclure les effets thermo-électriques dans le transport des électrons dans les systèmes mésoscopiques. Ce système d'équations formé de quantités constitutives de transport et de termes de source constituent un système d'équations auto-consistant [38].

L'approche utilisée est basée sur le calcul de la fonction de distribution à partir de l'équation de Boltzmann semi-classique. La méthode de résolution est celle de Grad basée sur les treize premiers moments de la fonction de distribution. En outre le principe de maximisation de l'entropie a été utilisée. En tenant compte de toutes ces considérations les auteurs ont déduit les coefficients de transport généralisés dans le cadre de l'approximation linéaire, où les forces thermodynamiques sont considérées de faible magnitude. Enfin les termes de production (termes de source) sont évalués dans le cadre de l'approximation du temps de relaxation.

Plus précisément ils supposent que les électrons de conduction sont faiblement dégénérés et décrits par la fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ telle que $f(\vec{r}, \vec{k}, t) d\vec{k} d\vec{r}$ correspond au nombre d'état $\vec{k}$ occupé par les électrons autour de $\vec{r}$ à l'instant t . Cette fonction de distribution obéit à l'équation semi classique de Boltzmann sous l'action d'une force électrique appliquée, soit

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\hbar k_i}{m^*} \frac{\partial f}{\partial r_i} - \frac{e}{\hbar} E_i \frac{\partial f}{\partial k_i} = Q(f_k, f_k) \quad (\text{II.43})$$

où E_i est le champ électrique et le terme de collision est donné par

$$Q(f_k, f_k) = \int S(k_i, k'_i) \left[f'_k - f_k \right] d\vec{k}' \quad (\text{II.44})$$

Seules les interactions électrons-réseau sont prises en compte avec un taux de diffusion $S(k_i, k'_i)$. La vitesse de groupe des électrons est liée à l'énergie microscopique qui caractérise une bande de conduction de forme parabolique. Les expressions explicites de la vitesse de groupe et de l'énergie sont données respectivement par,

$$c_i = \frac{\partial \varepsilon(k)}{\hbar \partial k_i} = \frac{\hbar k_i}{m} \quad (\text{II.45})$$

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{II.46})$$

L'équation générale de transport pour une propriété arbitraire moyenne $\langle \psi(\vec{r}, t) \rangle$ est obtenue par multiplication de l'équation (II.43) par la quantité $\psi(\vec{r}, t)$ suivie d'une intégration dans l'espace des vecteurs d'onde $\vec{k}$, ce qui donne

$$\frac{\partial \langle \psi \rangle}{\partial t} + \frac{\hbar}{m^*} \frac{\partial \langle k_i \psi \rangle}{\partial r_i} = \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\rangle + \left\langle \frac{\hbar k_i}{m^*} \frac{\partial \psi}{\partial r_i} \right\rangle - \frac{e}{\hbar} E_i \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial k_i} \right\rangle + \langle Q_\psi \rangle \quad (\text{II.47})$$

où

$$\langle \psi(\vec{r}, t) \rangle = \int \psi(\vec{r}, \vec{k}, t) f(\vec{r}, \vec{k}, t) d\vec{k}$$

et

$$\langle Q_\psi(\vec{r}, t) \rangle = \int S(k'_i, k_i) (\psi' - \psi) f_k d\vec{k}$$

Le modèle cinétique développé repose sur le fait que l'état macroscopique du système est caractérisé par les treize variables, $(n, W, J_i, q_i, P_{\langle ij \rangle})$. Leur définition sont

- La densité des électrons

$$n(\vec{r}, t) = \int f(\vec{r}, \vec{k}, t) d\vec{k} \quad (\text{II.48})$$

permettant de définir la densité de masse

$$\rho_m(\vec{r}, t) = m^* n(\vec{r}, t)$$

et la densité de charge

$$\rho_e(\vec{r}, t) = en(\vec{r}, t).$$

- Le vecteur densité de courant électrique,

$$J_i(\vec{r}, t) = -\frac{e\hbar}{m^*} \int k_i f_k d\vec{k} = -en(\vec{r}, t)V_i(\vec{r}, t) \quad (\text{II.49})$$

- La densité d'énergie est définie par

$$\rho_m W = \int \frac{1}{2} m^* v^2 f d\vec{v} \quad (\text{II.50})$$

où $v_i(\vec{r}, t) = c_i(\vec{r}, t) - V_i(\vec{r}, t)$ est la vitesse aléatoire.

- Le tenseur de contraintes est donné comme un moment de second ordre de la fonction de distribution,

$$P_{ij}(\vec{r}, t) = \int m^* v_i v_j f_k d\vec{k}. \quad (\text{II.51})$$

Ce tenseur par définition a une trace nulle, i.e., $p_{rr} = \sum_1^3 P_{ii} = 0$ et il est symétrique. Ce type de tenseur est désigné par la notation, $P_{\langle ij \rangle}$. Notons aussi que dans la littérature, on relie souvent ce tenseur à la densité d'énergie des électrons par les relations suivantes

$$P_{ij} = P_{\langle ij \rangle} + \frac{1}{3} \delta_{ij} p_{rr} = P_{\langle ij \rangle} + \frac{2}{3} W \delta_{ij} = P_{\langle ij \rangle} + p \delta_{ij} \quad (\text{II.52})$$

où la densité d'énergie est reliée à la pression hydrostatique par $p = \frac{2}{3} W$.

- Enfin, le flux de chaleur est défini par

$$q_i(\vec{r}, t) = \int \frac{1}{2} m^* v^2 v_i f d\vec{k}. \quad (\text{II.53})$$

Ainsi les treize variables fondamentales utilisées dans le modèle sont

$$\psi(v_i) = \left\{ m^*, \frac{1}{2} m^* v^2, -ec_i, m^* v_i v_j, \frac{1}{2} m^* v^2 v_i \right\}. \quad (\text{II.54})$$

Les équations hydrodynamiques correspondant à ces variables sont

- L'équation de la conservation de masse,

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} - \frac{m^*}{e} \frac{\partial J_i}{\partial r_i} = 0 \quad (\text{II.55})$$

- L'équation de la conservation de la densité d'énergie,

$$\frac{\partial \rho_m W}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r_i} (q_i + \rho_m W) - E_i J_i = Q_w \quad (\text{II.56})$$

- L'équation du vecteur densité de courant

$$\frac{\partial J_i}{\partial t} - \frac{e}{m^*} \frac{\partial}{\partial r_i} (P_{ij} + \rho_m V_i V_j) - \frac{e^2}{m^{*2}} \rho_m E_i = P_i \quad (\text{II.57})$$

- L'équation du flux de chaleur

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r_j} (u_{ij} + q_j V_i + q_i V_j + \rho_m W V_i V_j) + \frac{e}{m^*} P_{\langle ij \rangle} E_j + \frac{5e}{2m^*} p E_i = Q_i \quad (\text{II.58})$$

- Enfin l'équation du tenseur des contraintes

$$\frac{\partial P_{\langle ij \rangle}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r_k} (P_{\langle ij \rangle k} + P_{\langle ij \rangle} V_k) - 2 J_{< i} E_{j >} = P_{\langle ij \rangle} \quad (\text{II.59})$$

On peut noter que les relations constitutives désirées sont celles qui consistent à exprimer les quantités

$$u_{ij} = \int \frac{1}{2} m v^2 v_i v_j f d\vec{k} \quad (\text{II.60})$$

et

$$P_{< ij > l} == \int m v_{< i} v_{j >} v_l f d\vec{k} \quad (\text{II.61})$$

en fonction des treize variables pertinentes présentées plus haut. Ainsi le système d'équations hydrodynamiques sera self-consistant si en plus, on exprime explicitement les termes de production, Q_w , P_i , $P_{< ij >}$ et Q_i en fonction de ces variables.

Pour calculer toutes ces quantités de transport, la première étape consiste à résoudre l'équation de Boltzmann avec la méthode de Grad [16] et à utiliser en plus le principe de maximisation de l'entropie [39-41]. La fonction de distribution calculée par les auteurs a pour expression,

$$f^{(13)}(\vec{r}, \vec{k}, t) = F_{FD}(\vec{k}) [1 + \Phi^{(13)}] \quad (\text{II.62})$$

où $\Phi^{(13)}$ représente la fonction qui tient compte de l'écart à l'équilibre thermodynamique,

$$\begin{aligned} \Phi^{(13)} = & \frac{1}{4I_4} P_{\langle ij \rangle} v_i v_j + (1 - F_{FD}(\vec{k})) \frac{3m^{*2}}{\nu k_B^2 T^{7/2}} \frac{1}{25I_4^2 - 21I_2 I_6} \\ & \times \left[\left[7 \frac{k_B T}{e} \left(I_6 - \frac{5}{14} \frac{m^* v^2}{k_B T} I_4 \right) \right] J_i v_i + 5 \left(I_4 - \frac{3}{10} \frac{m^* v^2}{k_B T} I_2 \right) q_i v_i \right] \end{aligned} \quad (\text{II.63})$$

où $\nu = (2^{9/2} k_B^{3/2} m^{5/2} \pi) / h^3$ et les intégrales I_n sont les intégrales de Fermi définies par,

$$I_n \left(\frac{\mu}{k_B T} \right) = \int_0^\infty x^n \left[\exp \left(x^2 - \frac{\mu}{k_B T} \right) + 1 \right]^{-1} dx \quad (\text{II.64})$$

Les relations constitutives sont établies à partir des définitions (II.60) et (II.61) et de la fonction de distribution de Grad (II.62) et (II.63). Les expressions obtenues sont

$$P_{\langle ij \rangle l} = \frac{4}{5} q_{\langle i} \delta_{j \rangle l} \quad (\text{II.65})$$

$$u_{\langle ij \rangle} = \frac{14 k_B T}{5m} \frac{I_6}{I_4} P_{\langle ij \rangle} \quad (\text{II.66})$$

et

$$U = \frac{2k_B^2}{3m^2} \nu I_6 T^{7/2} \quad (\text{II.67})$$

où

$$u_{ij} = u_{\langle ij \rangle} + U \delta_{ij} \quad (\text{II.68})$$

et

$$q_{<i}\delta_{j>l} = q_i\delta_{jl} + q_j\delta_{il} + q_l\delta_{ij}. \quad (\text{II.69})$$

En ce qui concerne les termes de production, ils ont été établis par la même approche. En considérant un système homogène, les coefficients de transport linéaires ne dépendent donc que de la fréquence ω , et ils sont définis par,

$$\begin{aligned} J_i(\omega) &= L_{11}(\omega)E_i(\omega) + L_{12}(\omega)T \frac{\partial T^{-1}(\omega)}{\partial r_i} \\ q_i &= L_{21}(\omega)E_i(\omega) + L_{22}(\omega)T \frac{\partial T^{-1}(\omega)}{\partial r_i} \end{aligned} \quad (\text{II.70})$$

où les coefficients cinétiques de transport sont

$$L_{11}(\omega) = \frac{e^2 \nu T^{5/2}}{3m^{*2}} \tau_J \frac{3I_2(1-i\omega\tau_q) + 5I_4(\tau_q/\tau_{Jq})}{(1-i\omega\tau_J)(1-i\omega\tau_q) - \tau_J\tau_q/\tau_{Jq}\tau_{qJ}}, \quad (\text{II.71})$$

$$L_{12}(\omega) = -\frac{ek_B \nu T^{7/2}}{3m^{*2}} \tau_J \frac{5I_4(1-i\omega\tau_q) + 7I_6(\tau_q/\tau_{Jq})}{(1-i\omega\tau_J)(1-i\omega\tau_q) - \tau_J\tau_q/\tau_{Jq}\tau_{qJ}}, \quad (\text{II.72})$$

$$L_{21}(\omega) = -\frac{ek_B \nu T^{7/2}}{3m^{*2}} \tau_q \frac{5I_4(1-i\omega\tau_J) + 3I_2(\tau_J/\tau_{qJ})}{(1-i\omega\tau_J)(1-i\omega\tau_q) - \tau_J\tau_q/\tau_{Jq}\tau_{qJ}}, \quad (\text{II.73})$$

$$L_{22}(\omega) = \frac{k_B^2 \nu T^{9/2}}{3m^{*2}} \tau_q \frac{7I_6(1-i\omega\tau_J) + 5I_4(\tau_J/\tau_{qJ})}{(1-i\omega\tau_J)(1-i\omega\tau_q) - \tau_J\tau_q/\tau_{Jq}\tau_{qJ}}. \quad (\text{II.74})$$

et

$$E_i = \varepsilon_i + \frac{T}{e} \frac{\partial \mu T^{-1}}{\partial r_i}. \quad (\text{II.75})$$

Les temps de relaxation τ_x utilisées dans les équations (II.71-II.74) sont des intégrales complexes qui s'expriment en fonction des intégrales de Fermi et des taux de diffusion des électrons avec le réseau. Les auteurs ont rapporté un exemple numérique de ces résultats analytiques en calculant la conductivité thermique en fonction du paramètre adimensionnelle $\omega\tau_q$. Ces courbes sont représentées sur les figures II.3 et II.4, correspondant respectivement à

la partie réelle et imaginaire de la conductivité thermique. Ces résultats feront aussi l'objet d'une comparaison avec les résultats obtenus par notre modèle.

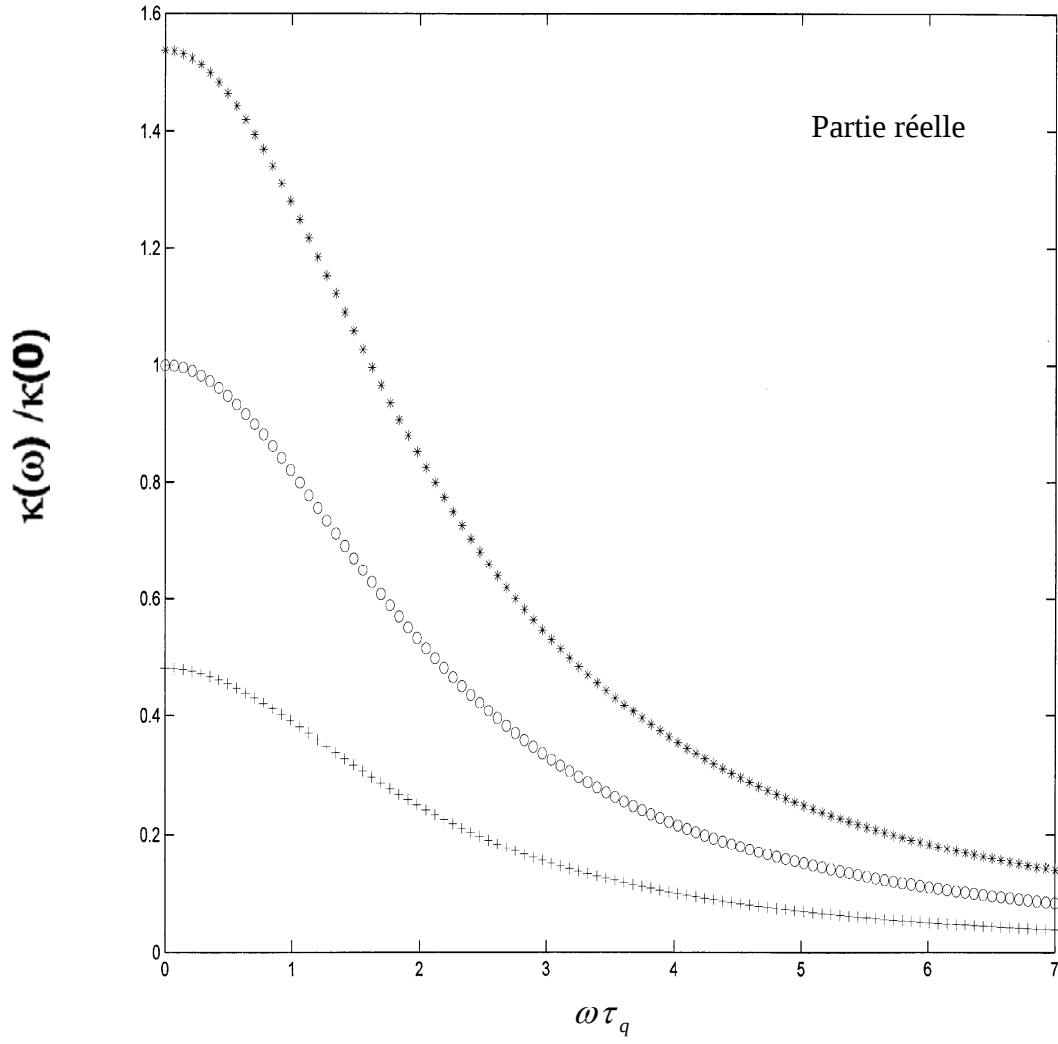


Figure II.3: Partie réelle du coefficient de la conductivité thermique en fonction de $\omega\tau_q$, pour différentes valeurs du paramètre de dégénérescence,

$$\frac{\mu}{k_b T} = 0 \text{ (+++), } \frac{\mu}{k_b T} = 0,5 \text{ (ooo), } \frac{\mu}{k_b T} = 1 \text{ (***)}.$$

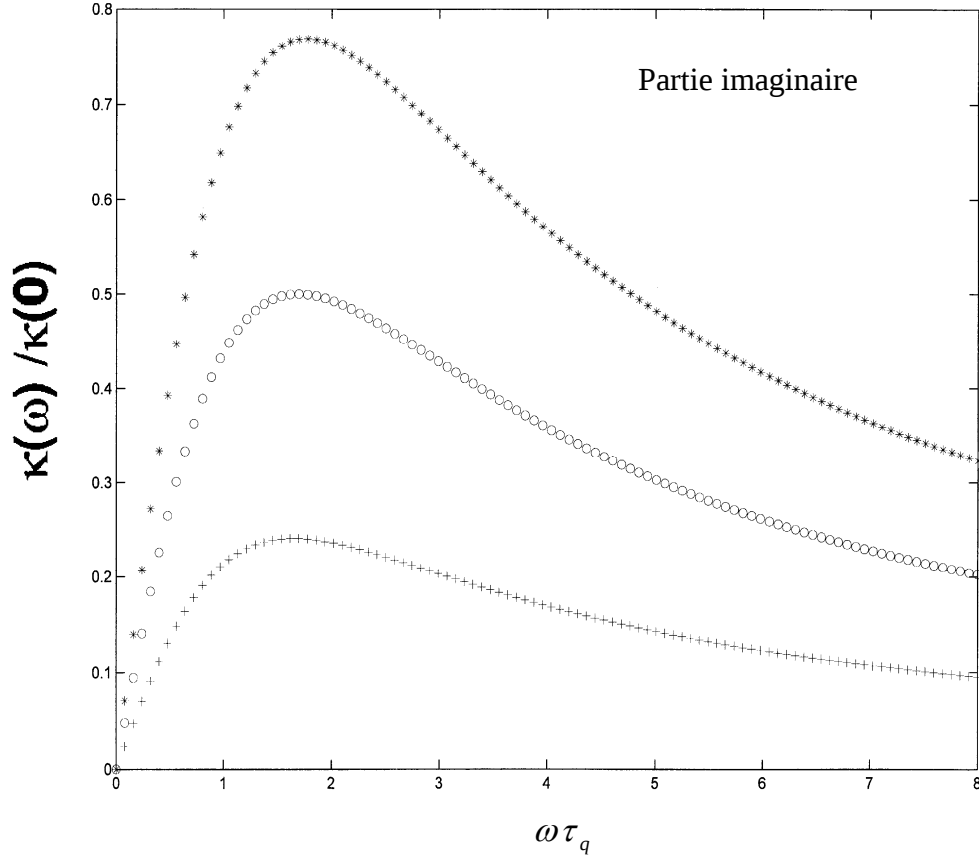


Figure II.4: Partie imaginaire du coefficient de la conductivité thermique en fonction de $\omega\tau_q$, pour différentes valeurs du paramètre de dégénérescence,

$$\frac{\mu}{k_b T} = 0 \text{ (+++), } \frac{\mu}{k_b T} = 0,5 \text{ (ooo), } \frac{\mu}{k_b T} = 1 \text{ (***)}.$$

VII. CONCLUSION

Dans ce chapitre nous allons présenter les méthodes de résolution des équations cinétiques que sont la méthode basée sur les fonctions de corrélation, la méthode de Chapman-Enskog basée sur un développement asymptotique par rapport au nombre de Knudsen, la méthode basée sur le développement sur les harmoniques sphériques et enfin les approches numériques. En outre, deux résultats de la littérature qui ont fait l'objet de comparaison avec nos résultats, ont aussi été rapportés dans ce chapitre.

Chapitre III

Equation Chapter 3 Section 1

RESOLUTION DE L'EQUATION DE BOLTZMANN

I. INTRODUCTION

Ce chapitre est consacré à la résolution analytique de l'équation semi-classique de Boltzmann dans les semi conducteurs. C'est une équation cinétique permettant de mettre en évidence la diffusion et la dérive des porteurs de charge sous l'effet des champs extérieurs appliqués, en utilisant une approche classique. Son caractère quantique réside dans la contribution des processus internes de diffusion des porteurs de charge au sein du semi-conducteur. Le calcul de la fonction de distribution des porteurs de charge est effectué pour un dispositif semi-conducteur inhomogène suivant une direction (axe Ox), ce qui correspond en général aux situations physiques rencontrées dans les expériences. Dans une première étape la fonction de distribution est développée sur la base des polynômes de Legendre. Cette base est choisie à cause de la symétrie axiale dans l'espace des vitesses induite par l'inhomogénéité 1D. La technique de resommation à l'aide des fractions continues est ensuite utilisée pour tenir compte de toutes les composantes de Legendre de la fonction de distribution. Enfin les opérateurs de projection de l'opérateur de collision électron-électron sont utilisés pour assurer les propriétés conservatives de cet opérateur.

II. MODELE CINETIQUE

II.1. Équation de Boltzmann-semi-classique

L'équation de base utilisée dans ce travail est l'équation semi-classique de Boltzmann présentée de façon détaillée dans le chapitre I. On a limité notre analyse à un seul type de porteurs de charge, les électrons, et à un problème 1D dans l'espace réel. Notons que la généralisation de cette théorie aux trous ne pose aucune difficulté particulière.

Le point de départ du calcul est l'équation de Boltzmann 1D dans l'espace réel, qui décrit l'évolution de la fonction de distribution des électrons dans l'espace des phases $(\vec{p}, \vec{r})$ à un instant t donné [14,15],

$$\frac{\partial F(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} + \vec{v}_x \frac{\partial F(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial x} + \frac{q}{m} E \frac{\partial F(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial v_x} = C(F) \quad (\text{III.1})$$

où $F(\vec{r}, \vec{v}, t)$ est la fonction de distribution des électrons à une particule, $\vec{v} = \hbar \vec{k}$ est le vecteur vitesse (vitesse de groupe associée à l'onde), $\vec{k}$ est le vecteur d'onde du réseau réciproque de la première zone de Brillouin, $q = -e$ est la charge des électrons, m est la masse effective électronique, et $\vec{E}$ est le champ électrique supposé suivant l'axe Ox . La vitesse du groupe des électrons est donnée dans l'approximation parabolique et sphérique,

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \varepsilon(k). \quad (\text{III.2})$$

où l'expression de l'énergie (obtenue à partir de la théorie des bandes) s'écrit

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (\text{III.3})$$

L'équation est considérée comme classique du fait qu'on peut prédire la position des porteurs de charge alors qu'en mécanique quantique, la connaissance de la position et de la vitesse de façon simultanée, n'est pas possible.

Le membre de droite de l'équation (III.1) tient compte des processus diffusifs des électrons dans le semi-conducteur. Il est constitué dans notre modèle par trois contributions : l'opérateur d'interaction électron-électron, l'opérateur d'interaction électron-phonon acoustique et l'opérateur d'interaction électron-phonon optique. Notons qu'on a négligé dans notre modèle la diffusion électron-impureté, considérée comme négligeable à température ambiante. La prise en compte des diffusions des électrons avec les impuretés ne pose aucune difficulté pour incorporer dans notre modèle. Il suffit en effet de rajouter dans la fréquence de collision totale, la contribution de ces mécanismes de diffusion.

L'effet cumulatif de ces trois contributions est donné formellement par l'équation

$$C(F) = C_{ee}(F) + C_{ac}(F) + C_{op}(F) \quad (\text{III.4})$$

Ces trois opérateurs sont décrits dans le chapitre I.

II.2. Approximations utilisées

Afin de pouvoir résoudre analytiquement l'équation semi-classique de Boltzmann de façon exacte, on suppose que les forces thermodynamiques appliquées sont de faible amplitude. En particulier le champ électrique appliqué est supposé inférieur à quelques kV/cm . Ceci nous permet de décrire l'état du semi-conducteur comme étant constitué d'un équilibre global représenté par la fonction de distribution de Fermi-Dirac F_{FD} et d'un état hors équilibre représenté par une fonction de distribution f qui décrit cette déviation par rapport à l'équilibre, soit

$$F = F_{FD} + f$$

où

$$F_{FD} \left(\varepsilon, \frac{\mu_0}{T_0} \right) = \frac{1}{\exp \left(\frac{\varepsilon - \mu_0}{T_0} \right) + 1} \quad (III.5)$$

La température globale T_0 des électrons est donnée en unité énergie et μ_0 est le potentiel chimique global.

On effectue le changement de repère dans l'espace des vitesses suivant

$$\vec{v} = \vec{v}' + \vec{V} \quad (III.6)$$

où $\vec{V} = V\hat{x}$ est la vitesse fluide (vitesse moyenne ou vitesse de dérive) des électrons et $\vec{v}'$ est la vitesse aléatoire électronique. Cette dernière a donc une moyenne statistique nulle. En effectuant ce changement de variable et en tenant compte de l'approximation d'un champ électrique appliqué de faible amplitude, l'équation de Boltzmann semi-classique devient,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_x \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{eE}{m} \frac{\partial F_{FD}}{\partial v_x} - \frac{\partial V}{\partial t} \frac{\partial F_{FD}}{\partial v_x} - v_x \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial F_{FD}}{\partial v_x} = C_{ee}(f) + C_{ac}(f) + C_{op}(f) \quad (III.7)$$

Dans cette équation des termes non linéaires de magnitude relativement faible ont été négligés, et on a aussi utilisé par souci de simplification la notation $\tilde{v}$ au lieu de $\tilde{v}'$ qui sera comprise dorénavant comme étant la vitesse aléatoire.

L'étape suivante dans la résolution de l'équation (III.7) est d'utiliser la transformée de Fourier ($t \leftrightarrow \omega, x \leftrightarrow K$), où ω et K sont la fréquence et le nombre d'onde dans l'espace de Fourier. Après transformation dans l'espace de Fourier, l'équation (III.7) s'écrit

$$\begin{aligned}
-i\omega \tilde{f}(\tilde{v}, K, \omega) + iK v_x \tilde{f}(\tilde{v}, K, \omega) &= \frac{e\tilde{E}(K, \omega)}{m} \frac{\partial F_{FD}}{\partial v_x} \\
-i\omega \tilde{V}(K, \omega) \frac{\partial F_{FD}}{\partial v_x} + iK \tilde{V}(K, \omega) v_x \frac{\partial F_{FD}}{\partial v_x} &+ \\
C_{ee}(\tilde{f}) + C_{ac}(\tilde{f}) + C_{op}(\tilde{f}) &
\end{aligned} \tag{III.8}$$

La notation « $\sim$ », signifie que les grandeurs physiques sont définies dans l'espace de Fourier. Sous cette forme l'équation (III.8) est difficile à résoudre analytiquement. Pour le faire, on va la développer sur la base des polynômes de Legendre [25].

II.3. Développement sur la base des polynômes de Legendre

Parmi les méthodes utilisées en théorie du transport dans les semi conducteurs, le développement sur les harmoniques sphériques est une approche souvent utilisée. Elle permet de transformer l'équation brute (III.8) en une infinité d'équations couplées. En général sur ces équations on peut opérer des troncatures qui dépendent de l'inhomogénéité du système. Plus précisément plus le système est inhomogène et plus on doit garder un nombre d'harmoniques sphériques plus important. Dans notre cas la symétrie du problème est axiale, et dans ce cas les harmoniques sphériques deviennent les polynômes de Legendre.

Désormais pour plus de commodité, nous omettons « $\sim$ » sur les grandeurs f , E et V . Afin de clarifier notre méthode de calcul, on rappelle en premier les principales propriétés des polynômes de Legendre. Ce sont des polynômes définis par la relation

$$P_n(\alpha) = \frac{\sqrt{2n+1}}{2^n n!} \left(\frac{d}{d\alpha} \right)^n (\alpha^2 - 1)^n \tag{III.9}$$

$$\text{où } \alpha = \cos \theta = \frac{v_x}{v} \quad (\text{III.10})$$

et v_x est la composante de la vitesse aléatoire des porteurs de charge suivant la direction de l'inhomogénéité Ox . On note que la vitesse $\vec{v}$ est définie dans l'espace des vitesses 3D. Ces polynômes vérifient la condition de ortho-normalisation

$$\int_{-1}^{+1} P_n(\alpha) P_m(\alpha) d\alpha = 2\delta_{nm} \quad (\text{III.11})$$

où δ_{nm} est le symbole de Kronecker. A titre d'exemple, les trois premiers polynômes de Legendre qui sont utilisés dans le calcul des différents coefficients de transport sont donnés par

$$\begin{aligned} P_0 &= 1, \\ P_1 &= \sqrt{3}\alpha, \\ P_2 &= \frac{3\sqrt{5}}{2} \left(\alpha^2 - \frac{1}{3} \right). \end{aligned} \quad (\text{III.12})$$

Par ailleurs la relation de récurrence sur ces polynômes, que nous utilisons est

$$\alpha P_n(\alpha) = \frac{n}{\sqrt{2n-1}} \frac{P_{n-1}}{\sqrt{2n+1}} + \frac{n+1}{\sqrt{2n+1}} \frac{P_{n+1}}{\sqrt{2n+3}} \quad (\text{III.13})$$

Développons à présent la fonction de distribution sur la base des polynômes de Legendre,

$$f(\vec{v}, K, \omega) = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\alpha) f_n(v, K, \omega) \quad (\text{III.14})$$

où $f_n(v)$ est la composante d'ordre n de la fonction de distribution. Il est à noter que les différentes composantes de la fonction de distribution sont fonction du module de la vitesse aléatoire uniquement. Ainsi le développement (III.14) permet de séparer la partie angulaire de la fonction de distribution de sa partie énergie.

En introduisant le développement (III.14) dans l'équation de Boltzmann (III.8) et en tenant compte de la définition (III.10), nous obtenons,

$$\begin{aligned}
& -i\omega \sum_{n=0}^{\infty} f_n(v, K, \omega) P_n + iK v \sum_0^{\infty} f_n(v, K, \omega) \alpha P_n = \\
& \frac{eE(K, \omega)}{m} v \alpha \frac{\partial F_{FD}}{\partial v} - i\omega V(K, \omega) v \alpha \frac{\partial F_{FD}}{\partial v} \\
& + iKV(K, \omega) v^2 \alpha^2 \frac{\partial F_{FD}}{\partial v} + C_{ee} \left(\sum_{n=0}^{\infty} f_n(v, K, \omega) P_n \right) \\
& + C_{ac} \left(\sum_{n=0}^{\infty} f_n(v, K, \omega) P_n \right) + C_{op} \left(\sum_{n=0}^{\infty} f_n(v, K, \omega) P_n \right).
\end{aligned} \tag{III.15}$$

En utilisant la relation de récurrence (III.13) nous obtenons une équation de transport en fonction des polynômes de Legendre d'ordre $(n, n-1, n+1)$,

$$\begin{aligned}
& -i\omega \sum_{n=0}^{\infty} f_n P_n + iK v \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \frac{n}{\sqrt{2n-1}} \frac{P_{n-1}}{\sqrt{2n+1}} f_n + \frac{n+1}{\sqrt{2n+1}} \frac{P_{n+1}}{\sqrt{2n+3}} f_n \right\} = \\
& + \frac{eE}{m} v \alpha \frac{\partial F_{FD}}{\partial v} - i\omega V v \alpha \frac{\partial F_{FD}}{\partial v} \\
& + iKV v^2 \alpha^2 \frac{\partial F_{FD}}{\partial v} + C_{ee} \left(\sum_{n=0}^{\infty} f_n P_n \right) + C_{ac} \left(\sum_{n=0}^{\infty} f_n P_n \right) + C_{op} \left(\sum_{n=0}^{\infty} f_n P_n \right)
\end{aligned} \tag{III.16}$$

En permutant les indices entre la n ème composante de la fonction de distribution d'ordre n et les polynômes de Legendre d'ordre $n-1$ et $n+1$, on ramène l'équation (III.16) à une équation en fonction des polynômes d'ordre n uniquement, soit

$$\begin{aligned}
& -i\omega \sum_0^n f_n P_n + \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \frac{n-1}{\sqrt{2n-1}} \frac{iK v f_{n-1}}{\sqrt{2n+1}} + \frac{n+1}{\sqrt{2n+1}} \frac{iK v f_{n+1}}{\sqrt{2n+3}} \right\} P_n = \\
& + \frac{eE}{m} v \alpha \frac{\partial F_{FD}}{\partial v} - i\omega V v \alpha \frac{\partial F_{FD}}{\partial v} + iKV v^2 \alpha^2 \frac{\partial F_{FD}}{\partial v} \\
& + C_{ee} \left(\sum_{n=0}^{\infty} f_n P_n \right) + C_{ac} \left(\sum_{n=0}^{\infty} f_n P_n \right) + C_{op} \left(\sum_{n=0}^{\infty} f_n P_n \right)
\end{aligned} \tag{III.17}$$

En remplaçant α et α^2 en fonction des polynômes de Legendre et en utilisant la variable adimensionnelle, $y = \varepsilon/T_0 = mv^2 / 2T_0$ (où T_0 est définie en unité énergie), nous obtenons,

$$\begin{aligned}
& -i\omega \sum_0^n f_n P_n + \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \frac{\sqrt{2}(n-1)}{\sqrt{2n-1}} \frac{iK v_t y^{1/2} f_{n-1}}{\sqrt{2n+1}} + \frac{\sqrt{2}(n+1)}{\sqrt{2n+1}} \frac{iK v_t y^{1/2} f_{n+1}}{\sqrt{2n+3}} \right\} P_n = \\
& + \frac{eE}{m} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} v_t y^{1/2} \frac{\partial F_{FD}}{\partial v} P_1 - i\omega V \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} v_t y^{1/2} \frac{\partial F_{FD}}{\partial v} P_1 + iKV \frac{2}{3} v_t^2 y \left(\frac{2}{\sqrt{5}} P_2 + P_0 \right) \frac{\partial F_{FD}}{\partial v} \\
& + C_{ee} \left(\sum_{n=0}^{\infty} f_n P_n \right) + C_{ac} \left(\sum_{n=0}^{\infty} f_n P_n \right) + C_{op} \left(\sum_{n=0}^{\infty} f_n P_n \right). \tag{III.18}
\end{aligned}$$

L'utilisation de la condition d'orthogonalité des polynômes de Legendre donnée par l'équation (III.11), permet d'obtenir un système infini d'équations couplées constituées des composantes successives de la fonction de distribution perturbée f_{n-1} , f_n et f_{n+1}

$$-i\omega f_0 + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} iK v_t y^{1/2} f_1 - \frac{2}{3} iK V y \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} = C_{ee}|_0 + C_{op}|_0 \tag{III.19}$$

$$\begin{aligned}
& -i\omega f_1 + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} iK v_t y^{1/2} f_0 + \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{15}} iK v_t y^{1/2} f_2 - \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \frac{eE}{m v_t} y^{1/2} \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \\
& + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} i\omega \frac{V}{v_t} y^{1/2} \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} = C_{ee}|_1 + C_{ac}|_1 + C_{op}|_1 \tag{III.20}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -i\omega f_2 + \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{15}} iK v_t y^{1/2} f_1 + \frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{35}} iK v_t y^{1/2} f_3 \\
& - \frac{4}{3\sqrt{5}} iK V y \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} = C_{ee}|_2 + C_{ac}|_2 + C_{op}|_2 \tag{III.21}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -i\omega f_n + \frac{n\sqrt{2}}{\sqrt{(2n-1)(2n+1)}} iK v_t y^{1/2} f_{n-1} \\
& + \frac{(n+1)\sqrt{2}}{\sqrt{(2n+1)(2n+3)}} iK v_t y^{1/2} f_{n+1} = C_{ee}|_n + C_{ac}|_n + C_{op}|_n \tag{III.22}
\end{aligned}$$

pour $(n \geq 3)$

Comme nous pouvons le constater, le système d'équations, (III.19)-(III.22), ainsi obtenu représentent une hiérarchie infinie d'équations qui doit être résolu dans son intégralité pour obtenir une solution exacte. Nous remarquons que les trois premières équations du système sont en fonction des forces hydrodynamiques correspondant au gradient de température, au gradient du potentiel chimique, au champ électrique et à la vitesse fluide. Par contre, les composantes de la fonction de distribution, pour $n \geq 3$, sont reliées entre elles par une relation de récurrence. Il est important de noter que les composantes de la fonction de distribution ne sont pas du même ordre de grandeur

dans les systèmes fortement collisionnels. Plus l'ordre est faible, plus la composante est importante ($f_0 \gg f_1 \gg f_2 \dots$). Cela est dû à l'ordre de grandeur, $K\lambda_{lpm} \sim \varepsilon$, où λ_{lpm} est le libre parcours moyen des électrons. En fait chaque composante de la fonction de distribution d'ordre n sera proportionnelle $(K\lambda_{lpm})^n$. En revanche lorsque le régime est non collisionnel soit, $K\lambda_{lpm} > 1$, ce paramètre $K\lambda_{lpm}$ ne joue plus le rôle d'un paramètre d'échelle et dans ces conditions, toutes les composantes de la fonction de distribution sont du même ordre de grandeur.

En utilisant les opérateurs de collision électron-phonon acoustique et électron-phonon optique définis par les temps de relaxation (I.77) et (I.80) respectivement, leurs composantes sur la base des polynômes de Legendre s'écrivent [4],

$$C_{ac}|_{n>0} = -4\pi S_{ac} N(y) [f_n(y) - f_0(y)] \quad (III.23)$$

$$\begin{aligned} C_{op}|_0 = & -4\pi S_{op} \left\{ N(y + \Omega_{ph}) [N_{ph} f_0(y) - (N_{ph} + 1) f_0(y + \Omega_{ph})] \right. \\ & \left. + N^+(y - \Omega_{ph}) [(N_{ph} + 1) f_0(y) - N_{ph} f_0(y - \Omega_{ph})] \right\} \\ & -4\pi S_{op} F_{FD}(y) [N(y + \Omega_{ph}) f_0(y + \Omega_{ph}) - N^+(y - \Omega_{ph}) f_0(y - \Omega_{ph})] \\ & -4\pi S_{op} [N(y + \Omega_{ph}) F_{FD}(y + \Omega_{ph}) - N^+(y - \Omega_{ph}) F_{FD}(y - \Omega_{ph})] f_0(y) \end{aligned} \quad (III.24)$$

$$\begin{aligned} C_{op}|_{n>0} = & -4\pi S_{op} [N(y + \Omega_{ph}) N_{ph} + N^+(y - \Omega_{ph}) (N_{ph} + 1)] f_n(y) \\ & -4\pi S_{op} [N(y + \Omega_{ph}) F_{FD}(y + \Omega_{ph}) - N^+(y - \Omega_{ph}) F_{FD}(y - \Omega_{ph})] f_n(y) \\ & -4\pi S_{op} [N(y + \Omega_{ph}) F_{FD}(y + \Omega_{ph}) - N^+(y - \Omega_{ph}) F_{FD}(y - \Omega_{ph})] f_n(y) \end{aligned} \quad (III.25)$$

où les section efficaces des collisions élastiques et inélastiques sont données par les équations suivantes [42,43]

$$S_{ac} = \frac{T_L D_{ac}^2}{4\pi^2 \hbar \rho v_s^2} \quad (III.26)$$

$$S_{op} = \frac{\hbar (D_t)^2}{8\pi^2 \rho \varepsilon_{ph}} \quad (III.27)$$

où T_L est la température du réseau en unité énergie, et où N_{ph} est la fonction de distribution de Bose-Einstein (I.71°).

La densité d'état des électrons dans le cadre de l'approximation parabolique des bandes d'énergie s'écrit en fonction de la variable réduite d'énergie y comme

$$N(y) = k^2 \frac{dk}{d\varepsilon} = \sqrt{2} \frac{m^{3/2} T_0^{1/2}}{\hbar^3} \sqrt{y}. \quad (\text{III.28})$$

D'autre part, nous avons introduit dans les équations (III.24) et (III.25) une grandeur réduite donnée par l'équation (III.29), qui constitue la limite supérieure de l'énergie au delà de laquelle la densité d'état d'énergie est non nulle,

$$\Omega_{ph} = \frac{\varepsilon_{ph}}{T_L} \quad (\text{III.29})$$

où ε_{ph} est l'énergie des phonons.

Ainsi la condition nécessaire sur l'expression de densité d'état d'énergie des électrons dans les semi-conducteurs est donnée par l'équation [42,43],

$$N^+(y - \Omega_{ph}) = \begin{cases} N(y - \Omega_{ph}), & \text{pour } y \geq \Omega_{ph} \\ 0, & \text{pour } y < \Omega_{ph} \end{cases} \quad (\text{III.30})$$

Dans les équations précédentes (III.26) et (III.27), nous avons utilisé les paramètres physiques, D_{ac} et D_t dont on rappelle qu'ils représentent le potentiel de déformation dans le cas des collisions électron-phonon acoustique et électron-phonon optique respectivement. De même, ρ représente la densité du réseau cristallin et v_s est la vitesse sonore longitudinale. Dans ces opérateurs de collision, l'approximation élastique a été utilisée pour les interactions électron-phonon acoustique, mais les interactions électron-phonon optique sont inélastiques. Ces deux approximations sont liées aux transitions effectuées par les électrons en absorbant ou en émettant un

phonon d'énergie ε_{ph} qui peut être négligeable (approximation élastique) ou non négligeable (processus inélastique) par rapport à l'énergie cinétique des électrons. De plus, on note que les potentiels de déformations D_{ac} et D_i utilisés dans notre modèle sont considérés constants du fait que les semi conducteurs étudiés ont une géométrie à symétrie maximale. Dans le prochain chapitre, nous allons choisir le silicium qui a une symétrie cubique à faces centrées comme modèle de simulation. Cette symétrie correspond bien à notre modèle des opérateurs de collision. En outre, notre modèle nous permet d'étudier des systèmes de dégénérescence arbitraire, *i.e.*, des valeurs arbitraires (négatives et positives) du paramètre μ_0 / T_0 .

Afin de pouvoir résoudre l'équation de transport analytiquement tout en respectant le principe de la conservation de la densité et de l'énergie des porteurs de charge, nous avons choisi un temps de relaxation isotrope constant pour les deux opérateurs de collision. Ceci est dû à la complexité des deux opérateurs de collision qui se présentent sous une forme intégral-différentielle.

Dans la littérature, l'opérateur de collision électron-électron est modélisé comme suit [44]

$$C_{ee}|_n = \nu_{ee} \left[f_{FD} \left(y, \frac{\mu_0}{T_0} \right) - f_n(y) \right] \quad (\text{III.31})$$

avec,

$$f_{FD} = \left(\frac{\mu_0}{T_0} \frac{T}{T_0} - \frac{\mu}{T_0} \right) \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} - y \frac{T}{T_0} \frac{\partial F_{FD}}{\partial y}, \quad (\text{III.32})$$

où ν_{ee} est une fréquence de collision phénoménologique considérée comme constante. Cette propriété d'une fréquence de collision constante est nécessaire pour assurer les propriétés conservatives de cet opérateur. Il est important de noter que cet opérateur de collision ne joue pas un rôle significatif dans le cas des semi-conducteurs non dégénérés (typiquement pour des densités d'électrons inférieure à 10^{18} cm^{-3}) et il est souvent négligé dans la littérature.

En ce qui concerne la contribution isotrope de l'opérateur de collision électron-phonon optique, nous avons proposé la relation donnée par l'équation

$$C_{op}|_0 = \nu_{op0}(y_c) \left[f_{FD}(y, n_0, T_L) - f_0(y) \right] \quad (\text{III.33})$$

où

$$\begin{aligned} \nu_{op0}(y_c) = & 4\pi S_{op} \left\{ N_{ph} \left[N(y_c + \Omega_{ph}) + \exp(\Omega_{ph}) N^+(y_c - \Omega_{ph}) \right] \right\} \\ & + 4\pi S_{op} \left[N(y_c + \Omega_{ph}) F_{FD}(y_c + \Omega_{ph}) - N^+(y_c - \Omega_{ph}) F_{FD}(y_c - \Omega_{ph}) \right] \end{aligned} \quad (\text{III.34})$$

est la même expression de la fréquence de collision utilisée dans l'équation (III.25) avec une énergie caractéristique y_c . Il est à noter que l'expression (III.33) peut être obtenue approximativement de l'équation (III.24) en supposant que la composante isotrope de la fonction distribution $f_0(y \pm \Omega_{ph})$ est donnée en fonction de la fonction de distribution de Fermi-Dirac comme

$$f_0(y \pm \Omega_{ph}) \approx \exp(\mp \Omega_{ph}) f_{FD}(y) \quad (\text{III.35})$$

Rigoureusement, cette approximation est valable uniquement pour un gaz de porteurs de charge proche de l'état d'équilibre thermodynamique. De plus, la contribution inélastique est supposée moins importante que la contribution élastique. Ceci s'explique par fait que les processus de thermalisation exigent plusieurs collisions pour qu'ils soient significatifs.

Dans les équations (III.20)-(III.22) les composantes anisotropes $f_n(\varepsilon)$ de la fonction de distribution relaxent vers la valeur zéro pour 'isotropiser' le système. On peut aussi noter que dans l'équation isotrope (III.19), les collisions électron-électron $C_{ee}(f_0)|_0$ font relaxer la fonction de distribution vers la fonction de Fermi-Dirac $f_{FD}(\varepsilon, T_0)$ qui dépend de la température des électrons T_0 , tandis que les collisions électron-phonon optique $C_{op}(f_0)|_0$ font relaxer la composante isotrope vers la même Fermi-Dirac $f_{FD}(\varepsilon, T_L)$ qui dépend de la température du réseau T_L . En outre, nous pouvons aussi appliquer notre modèle cinétique pour calculer les propriétés de transport des trous dans les semi conducteurs. Nous avons juste à changer dans l'équation semi-classique de Boltzmann les paramètres des électrons par celles des trous (mobilité, masse effective ...) et réécrire les opérateurs de collision avec les probabilités appropriées de diffusion trou-trou et trou-réseau.

III. RESOLUTION ANALYTIQUE DE L'EQUATION DE BOLTZMANN

En adoptant les approximations indiquées plus haut sur les opérateurs de collision électron-électron et électron-phonon optique, l'opérateur total de collision peut être exprimé en fonction de l'opérateur de collision de relaxation. Ainsi, nous pouvons résoudre par intégration directe dans l'espace de Fourier, l'équation semi-classique de Boltzmann. En plus du développement de la fonction de distribution sur la base des polynômes de Legendre, nous utilisons aussi les opérateurs de projection qui vont assurer les propriétés d'invariance collisionnelle.

De même, nous allons résoudre la partie anisotrope sans les termes de source de l'équation de Boltzmann avec la technique des fractions continues [25].

III.1. Calcul des opérateurs de Projections

Ces opérateurs de projection sont appliqués uniquement sur la première équation isotrope (III.19) du système infini d'équations couplées. Il faut noter que cette dernière telle qu'elle a été écrite ne peut pas garantir le principe de conservation évoqué précédemment. Dans ce qui suit on va exposer les calculs de ces opérateurs.

Ces opérateurs P et Q sont définis par les propriétés d'orthogonalité et de complémentarité entre eux, c'est à dire,

$$\begin{aligned} PQ &= 0 \\ \text{et} \\ P + Q &= 1 \end{aligned} \tag{III.36}$$

Par ailleurs l'opérateur P projette l'équation cinétique isotrope dans un sous-espace hydrodynamique où les propriétés conservatives des opérateurs de collision sont vérifiées. Par définition cet opérateur de projection est défini par l'équation

$$PC_{ee}(f) = 0 \tag{III.37}$$

où dans notre cas $C_{ee}(f)$ est l'opérateur de collision électron-électron exprimé dans le cadre de l'approximation du temps de relaxation, *i.e.*,

$$PC_{ee}(f) = P(f - f_{FD}) = 0 \quad (\text{III.38})$$

Par analogie avec l'expression de la fonction de distribution f_{FD} (III.32), nous supposons que $P(f_0)$ est construit sur la base des vecteurs linéairement indépendants donnés par $\frac{\partial F_{FD}}{\partial y}$ et $y \frac{\partial F_{FD}}{\partial y}$, tel que,

$$P(f_0) = A_1(f_0) \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} + A_2(f_0) y \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \quad (\text{III.39})$$

Les coefficients A_1 et A_2 peuvent être développés sur la base des moments fondamentaux, $M_0^{1/2}$ (densité de particule) et $M_0^{3/2}$ (densité d'énergie), de la composante isotrope de la fonction de distribution f_0 , comme suit

$$\begin{aligned} A_1(f_0) &= a_1 M_0^{1/2} + a_2 M_0^{3/2} \\ A_2(f_0) &= a_3 M_0^{1/2} + a_4 M_0^{3/2} \end{aligned} \quad (\text{III.40})$$

où la notation $M_n^m = \int_0^{+\infty} f_n y^m dy$ a été utilisée. Ce sont les moments d'ordre m de la composante de la fonction de distribution d'ordre n .

Pour calculer l'expression de ces opérateurs il suffit donc de calculer les coefficients numériques, a_{1-4} .

Pour cela nous rappelons la propriété des opérateurs de projection, $P^2 = P$, que l'on obtient aisément à partir des équations (III.36),

$$P(P(f_0)) = (1 - Q)P(f_0) = P(f_0). \quad (\text{III.41})$$

Puis, nous posons $P(f_0) = g(f_0)$ et en lui appliquant l'opérateur P , il résulte

$$P[g(f_0)] = A_1(g(f_0)) \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} + A_2(g(f_0)) y \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \quad (\text{III.42})$$

où

$$\begin{aligned} A_1[g(f_0)] &= a_1 M_{g(f_0)}^{1/2} + a_2 M_{g(f_0)}^{3/2} \\ A_2[g(f_0)] &= a_3 M_{g(f_0)}^{1/2} + a_4 M_{g(f_0)}^{3/2} \end{aligned} \quad (\text{III.43})$$

Ce qui nous donne :

$$P[g(f_0)] = \left[a_1 M_{g(f_0)}^{1/2} + a_2 M_{g(f_0)}^{3/2} \right] \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} + \left[a_3 M_{g(f_0)}^{1/2} + a_4 M_{g(f_0)}^{3/2} \right] y \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \quad (\text{III.44})$$

qui s'écrit plus explicitement comme,

$$\begin{aligned} P[g(f_0)] &= \left[a_1 \int y^{1/2} g(f_0) dy \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} + a_2 \int y^{3/2} g(f_0) dy \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \right] \\ &+ \left[a_3 \int y^{1/2} g(f_0) dy + a_4 \int y^{3/2} g(f_0) dy \right] y \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \end{aligned} \quad (\text{III.45})$$

En identifiant l'équation (III.45) à l'équation (III.39), on calcule les expressions explicites des quatre coefficients cités ci-dessus :

$$a_1 = \frac{-10F_{3/2}}{5F_{-1/2}F_{3/2} - 9F_{1/2}F_{1/2}} \quad ; \quad a_2 = \frac{6F_{1/2}}{5F_{-1/2}F_{3/2} - 9F_{1/2}F_{1/2}} \quad (\text{III.46})$$

$$a_3 = \frac{-6F_{1/2}}{9F_{1/2}F_{1/2} - 5F_{-1/2}F_{1/2}} \quad ; \quad a_4 = \frac{2F_{-1/2}}{9F_{1/2}F_{1/2} - 5F_{-1/2}F_{1/2}} \quad (\text{III.47})$$

où les F_n sont les intégrales de Fermi

$$F_n\left(\frac{\mu}{T}\right) = \int_0^\infty \frac{y^n}{\exp\left(y - \frac{\mu}{T}\right) + 1} dy \quad (\text{III.48})$$

En tenant des équations (III.46) et (III.47), la forme finale de l'expression (III.44) devient alors :

$$\begin{aligned}
P[g(y)] = & \frac{1}{9F_{1/2}F_{1/2} - 5F_{-1/2}F_{3/2}} \left\{ \left[10F_{3/2} \int_0^\infty y^{1/2} g(y) dy - 6F_{1/2} \int_0^\infty y^{3/2} g(y) dy \right] \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \right\} \\
& + \frac{1}{9F_{1/2}F_{1/2} - 5F_{-1/2}F_{3/2}} \left\{ \left[-6F_{1/2} \int_0^\infty y^{1/2} g(y) dy + 2F_{-1/2} \int_0^\infty y^{3/2} g(y) dy \right] y \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \right\}
\end{aligned} \tag{III.49}$$

III.2. Applications des opérateurs de projection sur l'équation isotrope.

Nous pouvons maintenant appliquer l'opérateur de projection P sur l'équation isotrope (III.19). Cette équation doit assurer les propriétés de conservation de la densité et de l'énergie des porteurs de charge c'est à dire,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} C_{ee}(f) \frac{2d\vec{p}}{h^3} = 0 \tag{III.50}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} C_{ee}(f) \varepsilon(\vec{p}) \frac{2d\vec{p}}{h^3} = 0 \tag{III.51}$$

En couplant le résultat obtenu avec l'équation isotrope (III.19), (ce qui revient à multiplier l'équation isotrope par l'opérateur Q), nous obtenons,

$$\begin{aligned}
-i\omega [f_0 - f_{FD}(y, T_0)] + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} iKv_t y^{1/2} f_1 = & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} iKv_t \frac{(10F_{3/2}M_1^1 - 6F_{1/2}M_1^2)}{9(F_{1/2})^2 - 5F_{-1/2}F_{3/2}} \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} + \\
\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} iKv_t \frac{(-6F_{1/2}M_1^1 + F_{-1/2}M_1^2)}{9(F_{1/2})^2 - 5F_{-1/2}F_{3/2}} y \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} - & \nu_0 [f_0 - f_{FD}(y, T_0)] +
\end{aligned} \tag{III.52}$$

$$\nu_{op0}(y_c) [f_{FD}(y, T_L) - S_{inel}(y, \mu_0, T_0, T_L)]$$

où

$$\nu_0 = \nu_{op0} + \nu_{ee}$$

est la fréquence totale de collision isotrope et il apparaît dans cette équation un terme de source inélastique qui s'écrit comme,

$$S_{inel} = f_{FD}(y, T_L) - \frac{1}{D} \left\{ \left[\left(\frac{\mu_0}{T_0} \frac{T}{T_0} \theta - \frac{\mu}{T_0} \right) (9F_{1/2}(T_0)F_{1/2}(T_L) - 5F_{-1/2}(T_L)F_{3/2}(T_0)) + \right. \right. \\ \left. \left. 15 \frac{T}{T_0} \theta (F_{3/2}(T_0)F_{1/2}(T_L) - F_{1/2}(T_0)F_{3/2}(T_L)) \right] \frac{\partial F_{FD}\left(y, \frac{\mu_0}{T_0}\right)}{\partial y} \right. \\ \left. - \frac{1}{D} \left[\frac{T}{T_0} \theta (5F_{-1/2}(T_0)F_{3/2}(T_L) - 9F_{1/2}(T_0)F_{1/2}(T_L)) + \right. \right. \\ \left. \left. 3 \left(\frac{\mu_0}{T_0} \frac{T}{T_0} \theta - \frac{\mu}{T_0} \right) (F_{1/2}(T_0)F_{-1/2}(T_L) - F_{-1/2}(T_0)F_{1/2}(T_L)) \right] y \frac{\partial F_{FD}\left(y, \frac{\mu_0}{T_0}\right)}{\partial y} \right\} \quad (III.53)$$

Par ailleurs dans l'équation (III.53), les notations suivantes sont utilisées,

$$\begin{aligned} \text{➤ la température adimensionnelle, } \theta &= \frac{T_0}{T_L}, \\ \text{➤ } D &= 9 \left[F_{1/2}\left(\frac{\mu_0}{T_0}\right) \right]^2 - 5F_{-1/2}\left(\frac{\mu_0}{T_0}\right)F_{3/2}\left(\frac{\mu_0}{T_0}\right) \end{aligned} \quad (III.54)$$

Nous pouvons facilement vérifier que pour $\theta=1$, le terme inélastique (III.53) devient nul comme il se doit.

On peut noter que cette équation (III.52) dépend de la composante isotrope de la fonction de distribution et de la première anisotropie à travers les intégrales M_1^1 et M_1^2 . La prochaine étape nécessaire pour calculer les expressions explicites des différentes composantes de la fonction de distribution est l'utilisation de la méthode des fractions continues pour résoudre les équations anisotropes sans terme de source.

III.3. Méthode des fractions continues

La technique mathématique des fractions continues est utilisée souvent en physique statistique pour resommer les composantes de la fonction de distribution dans la base des harmoniques sphériques (donc aussi des polynômes de Legendre) et d'obtenir ainsi une solution sous forme d'une fraction continue d'un ordre donné. L'équation anisotrope sans terme de source (III.22) s'écrit en regroupant la contribution des processus collisionnels sous forme d'une fréquence $\nu(y)$, sous la forme,

$$\begin{aligned}
& \left[-i\omega + \nu(y) \right] f_n + \frac{n\sqrt{2}}{\sqrt{(2n-1)(2n+1)}} iKv_t y^{1/2} f_{n-1} \\
& + \frac{(n+1)\sqrt{2}}{\sqrt{(2n+1)(2n+3)}} iKv_t y^{1/2} f_{n+1} = 0
\end{aligned} \tag{III.55}$$

Nous pouvons résoudre cette équation en utilisant des relations de récurrence, mais nous pouvons aussi opérer de façon plus simple en calculant la composante f_3 avec des ordres successifs, et ensuite généraliser le résultat. La première approximation est celle qui consiste à négliger f_4 et à calculer la composante f_3 en fonction de f_2 , soit

$$f_3 = -3\sqrt{\frac{2}{35}} \frac{iKv_t y^{1/2}}{-i\omega + \nu(y)} f_2 \tag{III.56}$$

L'ordre suivant consiste à garder la composante f_4 et à l'exprimer en utilisant l'équation (III.56) en fonction de f_3 , soit

$$f_3 = -3\sqrt{\frac{2}{35}} \left(\frac{iKv_t y^{1/2}}{-i\omega + \nu(y) + \frac{\frac{32}{63} K^2 v_t^2 y}{-i\omega + \nu(y)}} \right) f_2 \tag{III.57}$$

En généralisant cette expression à l'ordre n arbitraire on trouve,

$$f_3 = -iKv_t y^{1/2} \frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{35}} F_c^3 f_2$$

où F_c^3 est la fraction continue définie par la relation de récurrence suivante

$$F_c^n = \left[-i\omega + \nu(y) + \frac{2(n+1)^2}{4(n+1)^2 - 1} K^2 v_t^2 y F_c^{n+1} \right]^{-1}. \tag{III.58}$$

La fréquence de collision totale est donnée par la relation suivante

$$\begin{aligned} \nu(y) = & 4\pi S_{ac} N(y) + 4\pi S_{op} \left[N(y + \Omega) N_{ph} + N^+(y - \Omega) (N_{ph} + 1) \right] + \\ & 4\pi S_{op} \left[N(y + \Omega) F_{FD}(y + \Omega) - N^+(y - \Omega) F_{FD}(y - \Omega) \right] + \nu_{ee}. \end{aligned} \quad (III.59)$$

L'utilisation simultanée de la technique des fractions continues et l'application des opérateurs de projection va permettre de calculer les expressions analytiques des composantes de la fonction de distributions des porteurs de charge.

III.4. Calcul des trois premières composantes de la fonction de distribution

Les composantes de la fonction de distribution dont on a besoin pour calculer les relations de fermeture sont les deux premières composantes anisotropes. Pour les calculer explicitement, nous écrivons les trois premières équations du développement de l'équation semi-classique de Boltzmann sur la base des polynômes de Legendre,

$$\begin{aligned} (-i\omega + \nu_0) [f_0 - f_{FD}(y, T_0)] = & -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} iKv_t y^{1/2} f_1 + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} iKv_t \frac{(10F_{3/2}M_1^1 - 6F_{1/2}M_1^2)}{9(F_{1/2})^2 - 5F_{-1/2}F_{3/2}} \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} + \\ & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} iKv_t \frac{(-6F_{1/2}M_1^1 + F_{-1/2}M_1^2)}{9(F_{1/2})^2 - 5F_{-1/2}F_{3/2}} y \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} + \nu_{op0}(y_c) [f_{FD}(y, T_L) - S_{inel}(y, \mu_0, T_0, T_L)] \end{aligned} \quad (III.60)$$

$$\begin{aligned} f_1 = & -iKv_t \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} F_c^1 y^{1/2} f_0 + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} y^{1/2} F_c^1 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \left(\frac{eE}{mv_t} \right) - \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} y^{1/2} F_c^1 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \left(i\omega \frac{V}{v_t} \right) - \\ & iKv_t \frac{8\sqrt{2}}{15\sqrt{3}} y^{3/2} F_c^1 F_c^2 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} (iKV) \end{aligned} \quad (III.61)$$

$$\begin{aligned} f_2 = & -\frac{4}{3\sqrt{5}} K^2 v_t^2 y F_c^1 F_c^2 f_0 - \frac{4}{3\sqrt{5}} iKv_t y F_c^1 F_c^2 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \left(\frac{eE}{mv_t} \right) \\ & + \frac{4}{3\sqrt{5}} iKv_t y \nu(y) F_c^1 F_c^2 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \left(\frac{V}{v_t} \right) \end{aligned} \quad (III.62)$$

La résolution du système d'équations (III.60)-(III.62) conduit aux expressions explicites des trois composantes de la fonction de distribution en fonction des forces thermodynamiques de magnitude relativement faible,

$$\begin{aligned}
f_0 = & \left\{ -\frac{2}{3} K^2 v_t^2 y^{3/2} G_c^0 F_c^1 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} + \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \right\} \left(\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \frac{iKv_t}{-i\omega + \nu_0} \right) \left(\frac{10F_{3/2}M_1^1 - 6F_{1/2}M_1^2}{9(F_{1/2})^2 - 5F_{-1/2}F_{3/2}} \right) \\
& + \left(-\frac{2}{3} K^2 v_t^2 y^{5/2} G_c^0 F_c^1 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} + y \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \right) \left(\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \frac{iKv_t}{-i\omega + \nu_0} \right) \left(\frac{-6F_{1/2}M_1^1 + F_{-1/2}M_1^2}{9(F_{1/2})^2 - 5F_{-1/2}F_{3/2}} \right) \\
& \left\{ \frac{2}{3} \left(\frac{1}{-i\omega + \nu_0} \right)^2 (Kv_t)^2 y G_c^0 F_c^1 + 1 \right\} \nu_{op0}(y_c) [f_{FD}(y, T_L) - S_{inel}(y, \mu_0, T_0, T_L)] \\
& \left\{ \frac{2}{3} (Kv_t)^2 y G_c^0 F_c^1 + 1 \right\} f_{FD} - \frac{2}{3} \frac{e}{m} y G_c^0 F_c^1 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} (iKE) + \frac{16}{45} (Kv_t)^2 G_c^0 F_c^1 F_c^2 y^2 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} (iKV) \\
& + \frac{2}{3} y G_c^0 F_c^1 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} (iKv_t) \left(i\omega \frac{V}{v_t} \right)
\end{aligned}
\tag{III.63}$$

$$\begin{aligned}
f_1 = & \frac{2}{3} K^2 v_t^2 y^{1/2} G_c^0 F_c^1 \left(\frac{10F_{3/2}M_1^1 - 6F_{1/2}M_1^2}{9(F_{1/2})^2 - 5F_{-1/2}F_{3/2}} \right) \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} + \left(\frac{2}{3} K^2 v_t^2 G_c^0 F_c^1 y^{1/2} \right) \left(\frac{-6F_{1/2}M_1^1 + F_{-1/2}M_1^2}{9(F_{1/2})^2 - 5F_{-1/2}F_{3/2}} \right) y \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \\
& - \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} iKv_t G_c^0 F_c^1 y^{1/2} \nu_{op0}(y_c) [f_{FD}(y, T_L) - S_{inel}(y, \mu_0, T_0, T_L)] - \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} iKv_t G_c^0 F_c^1 y^{1/2} f_{FD} \\
& + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \frac{eE}{mv_t} G_c^0 F_c^1 y^{1/2} \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} - \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \left(i\omega \frac{V}{v_t} \right) G_c^0 F_c^1 y^{1/2} \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \\
& - \frac{8}{15} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} (iKV) iKv_t G_c^0 F_c^1 F_c^2 y^{3/2} \frac{\partial F_{FD}}{\partial y}
\end{aligned}
\tag{III.64}$$

$$\begin{aligned}
f_2 = & \left(-\frac{8}{9\sqrt{15}} (K^2 v_t^2)^2 y^{5/2} G_c^0 (F_c^1)^2 F_c^2 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} + \frac{4}{3\sqrt{15}} K^2 v_t^2 y F_c^1 F_c^2 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \right) \left(\frac{-i\sqrt{2} K v_t}{-i\omega + \nu_0} \right) \frac{10 F_{3/2} M_1^1 - 6 F_{1/2} M_1^2}{9 (F_{1/2})^2 - 5 F_{-1/2} F_{3/2}} \\
& \left(-\frac{8}{9\sqrt{15}} (K^2 v_t^2)^2 y^{7/2} G_c^0 (F_c^1)^2 F_c^2 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} + \frac{4}{3\sqrt{15}} K^2 v_t^2 y^2 F_c^1 F_c^2 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \right) \left(\frac{-i\sqrt{2} K v_t}{-i\omega + \nu_0} \right) \frac{-6 F_{1/2} M_1^1 + F_{-1/2} M_1^2}{9 (F_{1/2})^2 - 5 F_{-1/2} F_{3/2}} \\
& - \left(\left(\frac{8}{9\sqrt{5}} (K^2 v_t^2)^2 y^2 G_c^0 (F_c^1)^2 F_c^2 \right) \left(\frac{1}{-i\omega + \nu_0} \right)^2 + \left(\frac{4}{3\sqrt{5}} K^2 v_t^2 y F_c^1 F_c^2 \right) \left(\frac{1}{-i\omega + \nu_0} \right) \right) \nu_{op0}(y_c) [f_{FD}(y, T_L) - S_{inel}(y, \mu_0, T_0, T_L)] \\
& - \left\{ \frac{8}{9\sqrt{5}} (K^2 v_t^2)^2 y^2 G_c^0 (F_c^1)^2 F_c^2 + \frac{4}{3\sqrt{5}} K^2 v_t^2 y F_c^1 F_c^2 \right\} f_{FD} \\
& \left\{ -\frac{4\sqrt{2}}{9\sqrt{5}} K^2 v_t^2 y^2 G_c^0 (F_c^1)^2 F_c^2 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} + \frac{2\sqrt{2}}{3\sqrt{5}} y F_c^1 F_c^2 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \right\} \left(-i\sqrt{2} K v_t \right) \frac{eE}{m v_t} \\
& \left\{ -\frac{64}{135\sqrt{5}} (K^2 v_t^2)^2 y^3 G_c^0 (F_c^1)^2 (F_c^2)^2 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} + \frac{4}{3\sqrt{5}} y \nu(y) F_c^1 F_c^2 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \right\} (i K V) \\
& - \frac{4\sqrt{2}}{9\sqrt{5}} K^2 v_t^2 y^2 G_c^0 (F_c^1)^2 F_c^2 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \left[-i\sqrt{2} K v_t \right] \left(i\omega \frac{V}{v_t} \right)
\end{aligned} \tag{III.65}$$

$$\text{où } G_c^0 = \left(-i\omega + \nu_0 + K^2 v_t^2 \frac{2}{3} y F_c^1 \right)^{-1}.$$

Nous notons que les équations (III.63)-(III.65) constituent un système d'équations couplées pour les composantes f_0 , f_1 et f_2 .

IV. CONCLUSION

Dans ce chapitre, un nouveau modèle cinétique basé sur l'équation de Boltzmann semi-classique, est présenté. Ce modèle prend en compte les mécanismes collisionnels électron-électron et électron-phonon (acoustique et optique). L'approximation 1D dans l'espace réel ainsi que l'approximation des forces thermodynamiques d'intensité de faible magnitude ont été considérées.

L'équation de Boltzmann semi-classique a été résolue analytiquement de façon exacte en utilisant les opérateurs de projection et la technique des fractions continues. La fonction de distribution a été calculée dans la base des polynômes de Legendre en fonction d'intégrales qui dépendent des fractions continues et de la fonction de distribution de Fermi-Dirac.

CHAPITRE IV

CALCUL DES RELATIONS DE FERMETURE DES ÉQUATIONS HYDRODYNAMIQUES DANS LES SEMI-CONDUCTEURS

I. INTRODUCTION

Ce chapitre est consacré au calcul analytique des coefficients de transport et des termes de production généralisés. En préliminaire, nous rappelons les expressions des équations hydrodynamiques dans le cadre de l'approximation des forces thermodynamiques faibles magnitude. Ensuite, nous présentons le calcul des relations de fermeture. Des résultats numériques de ces coefficients sont présentés en fonction du paramètre de Knudsen du régime collisionnel au régime non collisionnel, pour différentes vitesses de phase normalisées $\omega / \sqrt{2}Kv_t$. Une étude plus détaillée est réservée au phénomène de transport dans le régime balistique (non collisionnel). Enfin, nous achevons notre discussion par une comparaison de nos résultats avec ceux de la littérature dans le cas quasi-collisionnel et balistique.

II. SYSTEME D'EQUATIONS HYDRODYNAMIQUES

Les équations hydrodynamiques ont été présentées dans le chapitre I, dans le cas général. On va les réécrire dans ce chapitre dans le cadre de l'approximation des forces thermodynamiques d'intensité relativement faible. On rappelle que ces équations décrivent l'évolution des moments hydrodynamiques (densité, vitesse de dérive et densité d'énergie) dans l'espace spatio-temporel à travers les trois lois de la conservation du nombre de particule, de l'impulsion et de l'énergie. Leurs expressions explicites s'écrivent comme,

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial n_0 V}{\partial x} = 0$$

Equation Chapter 4 Section 1(IV.1)

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \frac{e}{m} E + \frac{2}{3mn_0} \frac{\partial W}{\partial x} + \frac{1}{mn_0} \frac{\partial \Pi_{xx}}{\partial x} = \frac{R_x}{mn_0} \quad (\text{IV.2})$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(W_0 V) + \frac{2}{3} W_0 \frac{\partial V}{\partial x} + \frac{\partial q_x}{\partial x} = Q_{inel} \quad (IV.3)$$

où l'indice '0', signifie que la grandeur est calculée à l'équilibre global défini par la fonction de distribution de Fermi-Dirac

$$F_{FD}\left(\varepsilon, \frac{\mu_0}{T_0}\right) = \left(\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_0}{T_0}\right) + 1\right)^{-1}. \quad (IV.4)$$

Les paramètres physiques qui définissent ces équations sont les grandeurs hydrodynamiques n , V et W et les grandeurs de transport et de production. Les variables hydrodynamiques sont définies par les expressions,

i) la densité des électrons,

$$n = \int_{-\infty}^{+\infty} f \frac{2d^3 p}{h^3}. \quad (IV.5)$$

Il est important de noter que la densité de particules peut s'exprimer en fonction du potentiel chimique en utilisant la définition standard,

$$n = \int \left[1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{T}\right) \right]^{-1} \frac{2d^3 p}{h^3}.$$

ii) la composante du vecteur vitesse fluide des porteurs de charge, parallèle à l'axe d'inhomogénéité

$$nV = \int_{-\infty}^{+\infty} v_{lx} f \frac{2d^3 p}{h^3} \quad (IV.6)$$

où v_{lx} est la vitesse des électrons par rapport au repère du laboratoire.

iii) la densité d'énergie

$$W = F_{3/2} / F_{1/2} (n_0 T + n T_0)$$

où les F_n sont les intégrales de Fermi définies par l'équation (III.48). Par ailleurs, les grandeurs de transport sont les suivantes,

- iv) la composante parallèle à l'axe d'inhomogénéité du vecteur flux de chaleur généralisé,

$$q_x = \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon v_x f \frac{2d^3 p}{h^3} \quad (IV.7)$$

- v) l'élément x - x du tenseur de contraintes,

$$\Pi_{xx} = \int_{-\infty}^{+\infty} m \left(v_x^2 - \frac{v^2}{3} \right) f \frac{2d^3 p}{h^3}. \quad (IV.8)$$

Enfin les termes de production sont,

- vi) la composante du vecteur taux de transfert d'impulsion, parallèle à l'axe d'inhomogénéité

$$R_x = \int_{-\infty}^{+\infty} m v_x \left[C_{ac}(f) + C_{op}(f) + C_{ee}(f) \right] \frac{2d^3 p}{h^3} \quad (IV.9)$$

- vii) Le taux de transfert d'énergie entre les électrons et le réseau qui est un terme de transport inélastique et il caractérise le transfert d'énergie entre les électrons et les phonons optiques.

$$Q_{inel} = \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon C_{op}(f) \frac{2d^3 p}{h^3} \quad (IV.10)$$

Les quantités de transport ainsi que les termes de production sont des relations de fermeture des équations hydrodynamiques si on les exprime en fonction des variables hydrodynamiques, n , V et W . Ce qui va conduire à un système self-consistant d'équations hydrodynamiques.

On peut réécrire les grandeurs de transport et les termes de production en fonction de variables adimensionnelles, plus adaptées pour les calculs numériques. Pour cela on utilise la notation des moments de la fonction de distribution

$$M_i^n = \int_0^\infty y^n f_i dy \quad (IV.11)$$

où $y = mv^2 / 2T_0$ et f_i est la composante 'i' de la fonction de distribution développée sur la base des polynômes de Legendre (voir chapitre III). En utilisant ces notations, on obtient

i) La densité de courant dans le repère fluide électronique, suivant l'axe Ox ,

$$J_x = -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}F_{1/2}} en_0 v_t M_1^1 \quad (IV.12)$$

ii) Le flux de chaleur généralisé suivant l'axe Ox ,

$$q_x = \frac{2}{\sqrt{6}F_{1/2}} n_0 T_0 v_t M_1^2 \quad (IV.13)$$

iii) L'élément x - x du tenseur de contraintes,

$$\Pi_{xx} = \frac{4}{3\sqrt{5}F_{1/2}} n_0 T_0 M_2^{3/2} \quad (IV.14)$$

iii) Le taux de transfert d'impulsion électron-réseau

$$R_x = \frac{4F_1}{3F_{1/2}} \frac{mv_{ac}}{e} J_x - \frac{\sqrt{2}}{F_{1/2}\sqrt{3}} n_0 mv_t \int_0^\infty y v(y) f_1(y) dy \quad (IV.15)$$

iv) Le terme de transfert d'énergie dû aux collisions inélastiques électron-phonon optique

$$Q_{inel} = \frac{n_0 T_0}{F_{1/2}} M_{op(f_0)}^{3/2} = -v_{op0} \frac{n_0 T_0}{F_{1/2}} (M_0^{3/2}(T_0) - M_{FD}^{3/2}(T_L)). \quad (IV.16)$$

Les moments, donnés par les équations (IV.12)- (IV.15), peuvent être écrits dans l'espace de Fourier, par rapport aux forces thermodynamiques que sont le gradient de

température iKT , le gradient du potentiel chimique généralisé (qui inclus le champ électrique), $iK\tilde{\mu} = iK\mu + eE$, et la densité de courant de charge

$$J_x = -e \int \mathbf{v}_x f \frac{2d^3p}{h^3}.$$

En plus nous avons rajouté la contribution du vecteur de vitesse de fluide V qui n'est pas une force thermodynamique. Notons que la densité de courant de charge J_x est due aux collisions électron-réseau (second membre de l'équation de Boltzmann) alors que la vitesse fluide V est due à la propagation libre des électrons (premier membre de l'équation de Boltzmann). Cette séparation des vitesses va nous permettre de vérifier si la symétrie d'Onsager des coefficients de transport est bien vérifiée.

Notons que la condition de la moyenne statistique de la vitesse aléatoire des électrons nulle, conduit à

$$M_1^1 = 0. \quad (\text{IV.17})$$

En résumé, la condition de la vitesse aléatoire nulle et les grandeurs de transport se présentent sous la forme,

$$J_x = en_0 \mathbf{v}_t \frac{L_{13}}{L_{14}} \frac{V}{\mathbf{v}_t} + en_0 \mathbf{v}_t \frac{L_{12}}{L_{14}} \frac{iKT}{|K|T_0} + en_0 \mathbf{v}_t \frac{L_{11}}{L_{14}} \frac{iK\tilde{\mu}}{|K|T_0} \quad (\text{IV.18})$$

$$q_x = -n_0 T_0 \mathbf{v}_t L_{21} \frac{iK\tilde{\mu}}{|K|T_0} + n_0 T_0 \mathbf{v}_t L_{22} \frac{iKT}{|K|T_0} - n_0 T_0 \mathbf{v}_t L_{23} \frac{V}{\mathbf{v}_t} - n_0 T_0 \mathbf{v}_t L_{24} \frac{J_x}{en_0 \mathbf{v}_t} \quad (\text{IV.19})$$

$$\Pi_{xx} = -n_0 T_0 L_{31} \frac{\tilde{\mu}}{T_0} - n_0 T_0 L_{32} \frac{T}{T_0} - n_0 T_0 L_{33} \frac{iKV}{|K|\mathbf{v}_t} + n_0 T_0 L_{34} \frac{iKJ_x}{|K|en_0 \mathbf{v}_t} \quad (\text{IV.20})$$

$$R_x = -n_0 m \mathbf{v}_t \nu_{ac} L_{41} \frac{iK\tilde{\mu}}{|K|T_0} + n_0 m \mathbf{v}_t \nu_{ac} L_{42} \frac{iKT}{|K|T_0} - n_0 m \mathbf{v}_t \nu_{ac} L_{43} \frac{V}{\mathbf{v}_t} + L_{44} \frac{m \nu_{ac}}{e} J_x \quad (\text{IV.21})$$

ou les L_{ij} sont les coefficients de transport linéaires et adimensionnels. Leurs calculs passent par la résolution de l'équation de Boltzmann. Notons juste que les flux sont générés par la composante de la première anisotropie et que le tenseur de contraintes est issu de la composante de la seconde anisotropie, calculées dans le chapitre précédent. En revanche les termes de production nécessitent un traitement spécifique qui sera présenté par la suite.

III. CALCUL DES COEFFICIENTS DE TRANSPORT

Pour calculer les coefficients de transport dans une première étape nous recalculons la première et la deuxième anisotropie de façon explicite en éliminant les moments M_1^1 et M_1^2 dans les équations (III.64) et (III.65). Comme précisé plus haut on propose le développement de la première anisotropie sous la forme,

$$f_1 = f_1\left(\frac{T}{T_0}\right) + f_1\left(\frac{\tilde{\mu}}{T_0}\right) + f_1\left(\frac{V}{v_t}\right) + f_1\left(\frac{J_x}{n_0 T_0 v_t}\right). \quad (\text{IV.22})$$

En multipliant l'équation (III.64) par y et y^2 et en intégrant sur l'espace des vitesses nous obtenons deux équations algébriques couplées pour les moments M_1^1 et M_1^2 . En résolvant ce système d'équation, on déduit les expressions explicites de ces deux moments. On les remplace ensuite dans l'expression de la première anisotropie obtenant finalement,

$$\begin{aligned} f_1\left(\frac{T}{T_0}\right) = & -iKv_t \sqrt{\frac{2}{3}} G_c^0 F_c^1 y^{1/2} \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \frac{\left[I_{5/2}^{1,0,0} \left(\frac{3}{2} F_{1/2} - \frac{1}{2} F_{-1/2} \frac{\mu_0}{T_0} \right) - I_{3/2}^{1,0,0} \left(\frac{5}{2} F_{3/2} - \frac{3}{2} F_{1/2} \frac{\mu_0}{T_0} \right) \right]}{\left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} \frac{T}{T_0} \\ & + iKv_t \sqrt{\frac{2}{3}} G_c^0 F_c^1 y^{3/2} \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \frac{\left[I_{3/2}^{1,0,0} \left(\frac{3}{2} F_{1/2} - \frac{1}{2} F_{-1/2} \frac{\mu_0}{T_0} \right) - I_{1/2}^{1,0,0} \left(\frac{5}{2} F_{3/2} - \frac{3}{2} F_{1/2} \frac{\mu_0}{T_0} \right) \right]}{\left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} \frac{T}{T_0} \end{aligned} \quad (\text{IV.23})$$

$$\begin{aligned}
f_1\left(\frac{\tilde{\mu}}{T_0}\right) &= -\sqrt{\frac{2}{3}}G_c^0F_c^1y^{1/2}\frac{\partial F_{FD}}{\partial y}\frac{\left[\frac{1}{2}F_{-1/2}I_{5/2}^{1,0,0}-\frac{3}{2}F_{1/2}I_{3/2}^{1,0,0}\right]}{\left(I_{5/2}^{1,0,0}I_{1/2}^{1,0,0}-I_{3/2}^{1,0,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)}iKv_t\frac{\tilde{\mu}}{T_0} \\
&+ \sqrt{\frac{2}{3}}G_c^0F_c^1y^{3/2}\frac{\partial F_{FD}}{\partial y}\frac{\left[\frac{1}{2}F_{-1/2}I_{3/2}^{1,0,0}-\frac{3}{2}F_{1/2}I_{1/2}^{1,0,0}\right]}{\left(I_{5/2}^{1,0,0}I_{1/2}^{1,0,0}-I_{3/2}^{1,0,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)}iKv_t\frac{\tilde{\mu}}{T_0}
\end{aligned} \tag{IV.24}$$

$$\begin{aligned}
f_1\left(\frac{V}{v_t}\right) &= \sqrt{\frac{2}{3}}G_c^0F_c^1y^{1/2}\frac{\partial F_{FD}}{\partial y}\frac{\left[\frac{1}{2}F_{-1/2}I_{5/2}^{1,0,0}-\frac{3}{2}F_{1/2}I_{3/2}^{1,0,0}\right]}{\left(I_{5/2}^{1,0,0}I_{1/2}^{1,0,0}-I_{3/2}^{1,0,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)}i\omega\frac{V}{v_t} \\
&- \sqrt{\frac{2}{3}}G_c^0F_c^1y^{3/2}\frac{\partial F_{FD}}{\partial y}\frac{\left[\frac{1}{2}F_{-1/2}I_{3/2}^{1,0,0}-\frac{3}{2}F_{1/2}I_{1/2}^{1,0,0}\right]}{\left(I_{5/2}^{1,0,0}I_{1/2}^{1,0,0}-I_{3/2}^{1,0,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)}i\omega\frac{V}{v_t}
\end{aligned} \tag{IV.25}$$

$$\begin{aligned}
&-iKv_t\sqrt{\frac{2}{3}}\frac{8}{15}\left[y^{3/2}F_c^1F_c^2-\frac{2}{3}K^2v_t^2y^{5/2}G_c^0\left(F_c^1\right)^2F_c^2\right]\frac{\partial F_{FD}}{\partial y}\left(iKv_t\frac{V}{v_t}\right) \\
&-iKv_t\sqrt{\frac{2}{3}}\frac{16}{45}K^2v_t^2G_c^0F_c^1y^{3/2}\frac{\partial F_{FD}}{\partial y}\frac{\left(I_{3/2}^{1,0,0}I_{5/2}^{1,1,1}-I_{1/2}^{1,0,0}I_{7/2}^{1,1,1}\right)}{\left(I_{5/2}^{1,0,0}I_{1/2}^{1,0,0}-I_{3/2}^{1,0,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)}\left(iKv_t\frac{V}{v_t}\right)
\end{aligned}$$

avec

$$G_c^0 = \left(-i\omega + \nu_0 + K^2v_t^2\frac{2}{3}yF_c^1\right)^{-1} \tag{IV.26}$$

et où la notation pour les intégrales qui contiennent les fractions continues et la fonction de distribution de Fermi-Dirac,

$$I_n^{i,j,k}(T_{0,L}) = \int_0^\infty y^n (G_c^0)^i (F_c^1)^j (F_c^2)^k \frac{\partial F_{FD}(T_{0,L})}{\partial y} dy \tag{IV.27}$$

a été utilisée. La dépendance des coefficients de transport en fonction du vecteur densité de courant J_x est obtenue en réécrivant l'opérateur de collision électron-phonon acoustique dans le référentiel du laboratoire, soit

$$C_{ac}(f) = -\nu_{ac}y^{1/2}\sum_{n=1}^\infty f_n(y)P_n(\alpha) - \sqrt{\frac{2}{3}}\nu_{ac}y\frac{\partial F_{FD}}{\partial y}\frac{J_x}{en_0v_t}P_1(\alpha) \tag{IV.28}$$

En tenant compte du deuxième terme de l'équation (IV.28) qui est un terme de source, nous déduisons après quelques étapes de calcul,

$$\begin{aligned}
f_1(J_x) = & \sqrt{\frac{2}{3}} v_{ac} \left[y F_1 - \frac{2}{3} K^2 v_t^2 y^2 G_c^0 (F_c^1)^2 \right] \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \frac{J_x}{(-en_0 v_t)} \\
& + K^2 v_t^2 \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2}{3}} v_{ac} G_c^0 F_c^1 y^{1/2} \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \frac{(I_2^{1,1,0} I_{5/2}^{1,0,0} - I_3^{1,1,0} I_{3/2}^{1,0,0})}{(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0})} \frac{J_x}{(-en_0 v_t)} \\
& + K^2 v_t^2 \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2}{3}} v_{ac} G_c^0 F_c^1 y^{3/2} \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \frac{(I_3^{1,1,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_2^{1,1,0} I_{3/2}^{1,0,0})}{(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0})} \frac{J_x}{(-en_0 v_t)}
\end{aligned} \tag{IV.29}$$

De la même façon, l'expression explicite de la deuxième composante anisotrope de la fonction de distribution des porteurs de charge est déduite à partir des équations (III.21) et (III.56) comme suit :

$$f_2(y) = -iKv_t \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{15}} y^{1/2} F_c^2 f_1(y) + iKV \frac{4}{3\sqrt{5}} y F_c^2 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \tag{IV.30}$$

A partir des équations (IV.23)-(IV.25), (IV.29) et (IV.30), nous pouvons calculer les expressions explicites des différents coefficients cinétiques L_{ij} . Il faut noter que leurs expressions sont écrites dans l'espace de Fourier ; ce sont donc des expressions complexes. En calculant les moments M_1^1 et M_1^2 de la fonction de distribution on obtient,

$$\begin{aligned}
L_{11} = & \frac{\left[(3F_{1/2} I_{3/2}^{1,0,0} - F_{-1/2} I_{5/2}^{1,0,0}) \left(\frac{1}{2} F_{-1/2} + (-i\omega + \nu_0) I_{1/2}^{1,0,0} \right) \right]}{2F_{1/2} K v_t (I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0})} \\
& + \frac{\left[(F_{-1/2} I_{3/2}^{1,0,0} - 3F_{1/2} I_{1/2}^{1,0,0}) \left(\frac{3}{2} F_{1/2} + (-i\omega + \nu_0) I_{3/2}^{1,0,0} \right) \right]}{2F_{1/2} K v_t (I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0})}
\end{aligned} \tag{IV.31}$$

$$\begin{aligned}
L_{12} = & \frac{\left(3F_{1/2}I_{3/2}^{1,0,0} - F_{-1/2}I_{5/2}^{1,0,0}\right)\left[\left(\frac{3}{2}F_{1/2} - \frac{1}{2}F_{-1/2}\frac{\mu_0}{T_0}\right) + (-i\omega + \nu_0)\left(I_{3/2}^{1,0,0} - \frac{\mu_0}{T_0}I_{1/2}^{1,0,0}\right)\right]}{2F_{1/2}Kv_t\left(I_{5/2}^{1,0,0}I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)} \\
& + \frac{\left(F_{-1/2}I_{3/2}^{1,0,0} - 3F_{1/2}I_{1/2}^{1,0,0}\right)\left[\left(\frac{5}{2}F_{3/2} - \frac{3}{2}F_{1/2}\frac{\mu_0}{T_0}\right) + (-i\omega + \nu_0)\left(I_{5/2}^{1,0,0} - \frac{\mu_0}{T_0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)\right]}{2F_{1/2}Kv_t\left(I_{5/2}^{1,0,0}I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)}
\end{aligned} \tag{IV.32}$$

$$\begin{aligned}
L_{13} = & \frac{\left(-3F_{1/2}I_{3/2}^{1,0,0} + F_{-1/2}I_{5/2}^{1,0,0}\right)\left[\frac{16}{45}k^2v_t^2I_{5/2}^{1,1,1} - i\omega\frac{2}{3}I_{3/2}^{1,1,0}\right]}{2F_{1/2}\left(I_{5/2}^{1,0,0}I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)} \\
& + \frac{\left(-F_{-1/2}I_{3/2}^{1,0,0} + 3F_{1/2}I_{1/2}^{1,0,0}\right)\left[\frac{16}{45}k^2v_t^2I_{7/2}^{1,1,1} - i\omega\frac{2}{3}I_{5/2}^{1,1,0}\right]}{2F_{1/2}\left(I_{5/2}^{1,0,0}I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)}
\end{aligned} \tag{IV.33}$$

$$\begin{aligned}
L_{14} = & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}\nu_{ac}I_2^{0,1,0} - \frac{2\sqrt{2}}{3\sqrt{3}}K^2v_t^2\nu_{ac}I_3^{1,2,0} + \frac{2\sqrt{2}}{3\sqrt{3}}K^2v_t^2\nu_{ac}I_{3/2}^{1,1,0}\frac{\left(I_2^{1,1,0}I_{5/2}^{1,0,0} - I_3^{1,1,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)}{\left(I_{5/20}^{1,0,0}I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)} \\
& + \frac{2\sqrt{2}}{3\sqrt{3}}K^2v_t^2\nu_{ac}I_{5/2}^{1,1,0}\frac{\left(I_3^{1,1,0}I_{1/2}^{1,0,0} - I_2^{1,1,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)}{\left(I_{5/2}^{1,0,0}I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)}
\end{aligned} \tag{IV.34}$$

$$\begin{aligned}
L_{21} = & \frac{\left[\left(5F_{3/2}I_{3/2}^{1,0,0} - 3F_{1/2}I_{5/2}^{1,0,0}\right)\left(\frac{1}{2}F_{-1/2} + (-i\omega + \nu_0)I_{1/2}^{1,0,0}\right)\right]}{\sqrt{2}F_{1/2}\left(I_{5/2}^{1,0,0}I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)} \\
& + \frac{\left[\left(3F_{1/2}I_{3/2}^{1,0,0} - 5F_{3/2}I_{1/2}^{1,0,0}\right)\left(\frac{3}{2}F_{1/2} + (-i\omega + \nu_0)I_{3/2}^{1,0,0}\right)\right]}{\sqrt{2}F_{1/2}\left(I_{5/2}^{1,0,0}I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)}
\end{aligned} \tag{IV.35}$$

$$\begin{aligned}
L_{22} = & \frac{\left(5F_{3/2}I_{3/2}^{1,0,0} - 3F_{1/2}I_{5/2}^{1,0,0}\right)\left[\left(\frac{3}{2}F_{1/2} - \frac{1}{2}F_{-1/2}\frac{\mu_0}{T_0}\right) + (-i\omega + \nu_0)\left(I_{3/2}^{1,0,0} - \frac{\mu_0}{T_0}I_{1/2}^{1,0,0}\right)\right]}{2F_{1/2}Kv_t\left(I_{5/2}^{1,0,0}I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)} \\
& + \frac{\left(3F_{1/2}I_{3/2}^{1,0,0} - 5F_{3/2}I_{1/2}^{1,0,0}\right)\left[\left(\frac{5}{2}F_{3/2} - \frac{3}{2}F_{1/2}\frac{\mu_0}{T_0}\right) + (-i\omega + \nu_0)\left(I_{5/2}^{1,0,0} - \frac{\mu_0}{T_0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)\right]}{2F_{1/2}Kv_t\left(I_{5/2}^{1,0,0}I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)}
\end{aligned} \tag{IV.36}$$

$$\begin{aligned}
L_{23} = & \frac{\left(-5F_{3/2}I_{3/2}^{1,0,0} + 3F_{1/2}I_{5/2}^{1,0,0}\right)\left[\frac{16}{45}k^2v_t^2I_{5/2}^{1,1,1} - i\omega\frac{2}{3}I_{3/2}^{1,1,0}\right]}{2F_{1/2}\left(I_{5/2}^{1,0,0}I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)} \\
& + \frac{\left(-3F_{1/2}I_{3/2}^{1,0,0} + 5F_{3/2}I_{1/2}^{1,0,0}\right)\left[\frac{16}{45}k^2v_t^2I_{7/2}^{1,1,1} - i\omega\frac{2}{3}I_{5/2}^{1,1,0}\right]}{2F_{1/2}\left(I_{5/2}^{1,0,0}I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)}
\end{aligned} \tag{IV.37}$$

$$\begin{aligned}
L_{24} = & \frac{2}{3F_{1/2}}v_{ac}I_3^{0,1,0} - \frac{4}{9F_{1/2}}K^2v_t^2v_{ac}I_4^{1,2,0} + \frac{4}{9F_{1/2}}K^2v_t^2v_{ac}I_{5/2}^{1,1,0}\frac{\left(I_2^{1,1,0}I_{5/2}^{1,0,0} - I_3^{1,1,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)}{\left(I_{5/2}^{1,0,0}I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)} \\
& + \frac{4}{9F_{1/2}}K^2v_t^2v_{ac}I_{7/2}^{1,1,0}\frac{\left(I_3^{1,1,0}I_{1/2}^{1,0,0} - I_2^{1,1,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)}{\left(I_{5/2}^{1,0,0}I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)}
\end{aligned} \tag{IV.38}$$

$$L_{31} = \frac{8K^2v_t^2I_{5/2}^{1,1,1}\left(F_{-1/2}I_{5/2}^{1,0,0} - 3F_{1/2}I_{3/2}^{1,0,0}\right)}{45F_{1/2}\left(I_{5/2}^{1,0,0}I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)} + \frac{8K^2v_t^2I_{7/2}^{1,1,1}\left(-F_{-1/2}I_{3/2}^{1,0,0} + 3F_{1/2}I_{1/2}^{1,0,0}\right)}{45F_{1/2}\left(I_{5/2}^{1,0,0}I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)} \tag{IV.39}$$

$$\begin{aligned}
L_{32} = & \frac{8K^2v_t^2I_{5/2}^{1,1,1}\left[I_{5/2}^{1,0,0}\left(3F_{1/2} - F_{-1/2}\frac{\mu_0}{T_0}\right) - I_{3/2}^{1,0,0}\left(5F_{3/2} - 3F_{1/2}\frac{\mu_0}{T_0}\right)\right]}{45F_{1/2}\left(I_{5/2}^{1,0,0}I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)} \\
& + \frac{8K^2v_t^2I_{7/2}^{1,1,1}\left[-I_{3/2}^{1,0,0}\left(3F_{1/2} - F_{-1/2}\frac{\mu_0}{T_0}\right) + I_{1/2}^{1,0,0}\left(5F_{3/2} - 3F_{1/2}\frac{\mu_0}{T_0}\right)\right]}{45F_{1/2}\left(I_{5/2}^{1,0,0}I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0}I_{3/2}^{1,0,0}\right)}
\end{aligned} \tag{IV.40}$$

$$\begin{aligned}
L_{33} = & \frac{8|K|\mathbf{v}_t}{45F_{1/2}} \left\{ -I_{5/2}^{001} - (i\omega + \nu_0) \left[-i\omega I_{5/2}^{1,1,1} - \frac{8}{15} K^2 \mathbf{v}_t^2 I_{7/2}^{1,1,2} \right] \right\} \\
& + \frac{16K^3 \mathbf{v}_t^3 I_{5/2}^{1,1,1} \left[I_{5/2}^{1,0,0} \left(-i\omega \frac{2}{3} I_{3/2}^{1,1,0} + \frac{16}{45} K^2 \mathbf{v}_t^2 I_{5/2}^{1,1,1} \right) - I_{3/2}^{1,0,0} \left(-i\omega \frac{2}{3} I_{5/2}^{1,1,0} + \frac{16}{45} K^2 \mathbf{v}_t^2 I_{7/2}^{1,1,1} \right) \right]}{45F_{1/2} \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} \\
& + \frac{16K^3 \mathbf{v}_t^3 I_{7/2}^{1,1,1} \left[-I_{3/2}^{1,0,0} \left(-i\omega \frac{2}{3} I_{3/2}^{1,1,0} + \frac{16}{45} K^2 \mathbf{v}_t^2 I_{5/2}^{1,1,1} \right) + I_{1/2}^{1,0,0} \left(-i\omega \frac{2}{3} I_{5/2}^{1,1,0} + \frac{16}{45} K^2 \mathbf{v}_t^2 I_{7/2}^{1,1,1} \right) \right]}{45F_{1/2} \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}
\end{aligned} \tag{IV.41}$$

$$\begin{aligned}
L_{34} = & \frac{32K^2 \mathbf{v}_t^2}{45\sqrt{2}F_{1/2}} \frac{\nu_{ac}}{\sqrt{2}|K|\mathbf{v}_t} I_3^{0,1,1} - \frac{32\sqrt{2}}{135F_{1/2}} \frac{\nu_{ac}}{\sqrt{2}|K|\mathbf{v}_t} I_4^{1,2,1} \\
& + \frac{32\sqrt{2}}{135F_{1/2}} \frac{\nu_{ac}}{\sqrt{2}|K|\mathbf{v}_t} I_{5/2}^{1,1,1} \frac{\left(I_2^{1,1,0} I_{5/2}^{1,0,0} - I_3^{1,1,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}{\left(I_{5/20}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} \\
& + \frac{32\sqrt{2}}{135F_{1/2}} \frac{\nu_{ac}}{\sqrt{2}|K|\mathbf{v}_t} I_{7/2}^{1,1,1} \frac{\left(I_3^{1,1,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_2^{1,1,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}{\left(I_{5/20}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}
\end{aligned} \tag{IV.42}$$

$$\begin{aligned}
L_{41} = & \frac{2|K|\mathbf{v}_t}{3F_{1/2}} I_2^{0,1,0} + \frac{4K^3 \mathbf{v}_t^3}{9F_{1/2}} I_3^{1,2,0} + \frac{4K^3 \mathbf{v}_t^3}{9F_{1/2}} \frac{I_2^{1,2,0} \left(I_{3/2}^{110} I_{5/2}^{100} - I_{5/2}^{110} I_{3/2}^{100} \right)}{\left(I_{5/2}^{100} I_{1/2}^{100} - I_{3/2}^{100} I_{3/2}^{100} \right)} \\
& + \frac{4K^3 \mathbf{v}_t^3}{9F_{1/2}} \frac{I_3^{1,2,0} \left(I_{5/2}^{110} I_{1/2}^{100} - I_{3/2}^{110} I_{3/2}^{100} \right)}{\left(I_{5/2}^{100} I_{1/2}^{100} - I_{3/2}^{100} I_{3/2}^{100} \right)}
\end{aligned} \tag{IV.43}$$

$$\begin{aligned}
L_{42} = & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}F_{1/2}} \left\{ \frac{\left(4F_1 I_{3/2}^{1,0,0} - 2F_0 I_{5/2}^{1,0,0} \right) \left[\left(\frac{3}{2} F_{1/2} - \frac{1}{2} F_{-1/2} \frac{\mu_0}{T_0} \right) + (-i\omega + \nu_0) \left(I_{3/2}^{1,0,0} - \frac{\mu_0}{T_0} I_{1/2}^{1,0,0} \right) \right]}{|K|\mathbf{v}_t \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} \right\} + \\
& \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}F_{1/2}} \left\{ \frac{\left(2F_0 I_{3/2}^{1,0,0} - 4F_1 I_{1/2}^{1,0,0} \right) \left[\left(\frac{5}{2} F_{3/2} - \frac{3}{2} F_{1/2} \frac{\mu_0}{T_0} \right) + (-i\omega + \nu_0) \left(I_{5/2}^{1,0,0} - \frac{\mu_0}{T_0} I_{3/2}^{1,0,0} \right) \right]}{|K|\mathbf{v}_t \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} \right\}
\end{aligned} \tag{IV.44}$$

$$\begin{aligned}
L_{43} = & \frac{1}{2F_{1/2}} \left(4F_1 I_{3/2}^{1,0,0} - 2F_0 I_{5/2}^{1,0,0} \right) \left(\frac{16}{45} K^2 v_t^2 I_{5/2}^{1,0,0} - \frac{2}{3} i\omega I_{3/2}^{1,1,0} \right) \\
& + \frac{1}{2F_{1/2}} \left(2F_0 I_{3/2}^{100} - 4F_1 I_{1/2}^{100} \right) \left(\frac{16}{45} K^2 v_t^2 I_{5/2}^{100} - \frac{2}{3} i\omega I_{5/2}^{1,1,0} \right)
\end{aligned} \tag{IV.45}$$

$$\begin{aligned}
L_{44} = & \frac{4F_1}{3F_{1/2}} + \frac{2}{3F_{1/2}} v_{ac} I_{5/2}^{0,1,0} \\
& - \frac{4}{9F_{1/2}} v_{ac} K^2 v_t^2 I_{7/2}^{1,2,0} + \frac{4}{9F_{1/2}} v_{ac} K^2 v_t^2 I_2^{1,1,0} \frac{\left(I_2^{1,1,0} I_{5/2}^{1,0,0} - I_3^{1,1,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}{\left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} \\
& + \frac{4}{9F_{1/2}} v_{ac} K^2 v_t^2 I_3^{1,1,0} \frac{\left(I_3^{1,1,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_2^{1,1,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}{\left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}
\end{aligned} \tag{IV.46}$$

L'expression du terme de production de transfert d'énergie inélastique dû aux collisions électron-réseau se calcule à partir de la définition (IV.16) et de l'expression de la fonction isotrope (III.63). Son calcul explicite donne

$$Q_{inel} = -v_{op0} \frac{n_0 T_0}{F_{1/2}} \left(M_0^{3/2} - M_{FD}^{3/2}(T_L) \right) \tag{IV.47}$$

que l'on peut écrire sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}
Q_{inel} = & -v_{op0} \frac{n_0 T_0}{F_{1/2}} \left\{ \left[\frac{3}{2} \frac{\mu_0}{T_0} \left(F_{1/2}(T_0) - \theta F_{1/2}(T_L) \right) + \frac{5}{2} \left(\theta F_{3/2}(T_L) - F_{3/2}(T_0) \right) \right] \frac{T}{T_0} \right\} \\
& - v_{op0} \frac{n_0 T_0}{F_{1/2}} \left\{ \left[\frac{3}{2} \left(\theta F_{1/2}(T_L) - F_{1/2}(T_0) \right) \right] \frac{\mu}{T_0} \right\}
\end{aligned} \tag{IV.48}$$

où $\theta = \frac{T_0}{T_L}$. Nous pouvons aussi exprimer ce terme inélastique en fonction de la densité n et la

température T en utilisant la relation

$$\frac{n}{n_0} = \left(\frac{3}{2} - \frac{\mu_0}{T_0} \frac{F_{-1/2}}{2F_{1/2}} \right) \frac{T}{T_0} + \frac{F_{-1/2}}{2F_{1/2}} \frac{\mu}{T_0}$$

Il faut noter que ce terme de production inélastique Q_{inel} est un terme local. Ceci est dû au fait que nous avons utilisé une fréquence de transition constante $\nu_{op0}(y_c)$ donnée par l'équation (III.33). Nous pouvons avoir un terme non local dans le cas où la fréquence de collision dépend de la vitesse microscopique.

IV. EXPRESSIONS DES COEFFICIENTS DE TRANSPORT EN FONCTION DES Variables T , V et J_x .

En éliminant la contribution directe du potentiel électrochimique généralisé $\tilde{\mu}$ par la condition de la quasi-neutralité du système $M_1^1 = 0$ [Eq. (IV.17)], nous pouvons déduire les expressions des relations de fermeture des équations fluide en fonction de trois paramètres macroscopiques qui sont la température, la vitesse fluide et la densité de courant. Les nouvelles expressions du flux de chaleur, du tenseur de contraintes et du taux d'échange d'impulsion s'écrivent alors comme,

$$q_x = -K_T \sqrt{2} \frac{n_0 T_0 v_t^2}{\nu_{ac}} \frac{iKT}{T_0} + \alpha_q n_0 T_0 v_t \frac{V}{v_t} - \beta_q n_0 T_0 v_t \frac{J_x}{en_0 v_t} \quad (IV.49)$$

$$\Pi_{xx} = \alpha_\Pi n_0 T_0 \frac{T}{T_0} - \eta_V \sqrt{2} \frac{n_0 T_0 v_t}{\nu_{ac}} \frac{iKV}{v_t} + \gamma_\Pi \sqrt{2} \frac{n_0 T_0 v_t}{\nu_{ac}} iK \frac{J_x}{en_0 v_t} \quad (IV.50)$$

$$R_x = \beta_R \sqrt{2} n_0 m v_t^2 \frac{iKT}{T_0} + \gamma_R n_0 m v_t \nu_{ac} \frac{V}{v_t} - \nu_J n_0 m v_t \nu_{ac} \frac{J_x}{en_0 v_t} \quad (IV.51)$$

où les coefficients de transport adimensionnels exprimés dans l'espace de Fourier (ω, K) sont

i) le coefficient de la conductivité thermique,

$$K_T = -\frac{L_{21}L_{12}}{L_{11}} - L_{22} \quad (IV.52)$$

ii) le coefficient de viscosité

$$\eta_V = \frac{L_{13}L_{31}}{L_{11}} + L_{33} \quad (IV.53)$$

iii) le coefficient de friction électron-réseau

$$\nu_J = \frac{L_{41}L_{14}}{L_{11}} - L_{41} \quad (\text{IV.54})$$

iv) le coefficient convectif issu de la vitesse de dérive V

$$\alpha_q = \frac{L_{21}L_{13}}{L_{11}} - L_{23} \quad (\text{IV.55})$$

v) le coefficient de l'anisotropie de température

$$\alpha_{\Pi} = \frac{L_{12}L_{31}}{L_{11}} - L_{32} \quad (\text{IV.56})$$

vi) le coefficient de Peltier issu de la densité de la vitesse de dérive J_x

$$\beta_q = \frac{L_{21}L_{14}}{L_{11}} + L_{24} \quad (\text{IV.57})$$

vii) le coefficient thermique électron-réseau

$$\beta_R = \frac{L_{41}L_{12}}{L_{11}} + L_{42} \quad (\text{IV.58})$$

viii) le coefficient de viscosité dû à J_x

$$\gamma_{\Pi} = \frac{L_{31}L_{14}}{L_{11}} + L_{34} \quad (\text{IV.59})$$

ix) le coefficient de friction électron-réseau dû à V

$$\gamma_R = \frac{L_{41}L_{13}}{L_{11}} - L_{43}. \quad (\text{IV.60})$$

Due à la séparation des termes de transport proportionnels à la vitesse moyenne en deux contributions dans les équations (IV.49)-(IV.51), le coefficient de Peltier, le coefficient de viscosité et le coefficient de friction électron-réseau sont donnés respectivement par

$$\beta = \beta_q + \alpha_q, \quad \eta = \eta_V + \gamma_{\Pi} \quad \text{et} \quad \nu = \nu_J + \gamma_R.$$

V. RESULTATS NUMERIQUES ET DISCUSSION

Nous allons présenter dans ce paragraphe des résultats numériques concernant ces coefficients dans le cas du silicium. Les résultats obtenus sont représentés dans les figures IV.1-IV.8. Chaque coefficient de transport est scindé en deux parties, l'une réelle et l'autre imaginaire. Ces figures illustrent le comportement des coefficients de transport en fonction du paramètre pertinent (paramètre de Knudsen), $\Gamma = K v_t / \nu_{ac} = K \lambda_{ac}$ où λ_{ac} est le libre parcours moyen électron-phonon acoustique. Trois valeurs de la vitesse de groupe normalisée sont considérées, $\xi = \omega / \sqrt{2} K v_t = 10^{-3}$, 0.1, et 10. Les valeurs physiques utilisées sont celles du silicium [42,43]. Nous les résumons dans le tableau ci-dessous.

Paramètre physique	Valeur numérique
Potentiel de déformation	$D_{ac} = 9eV$
Densité de masse	$\rho = 2330kg / m^3$
Masse effective	$m = 2.910^{-31}kg$
Température des électrons	$T_0 = 300K$
Vitesse acoustique longitudinale	$v_s = 9040m / s$
Libre parcours moyen électron-phonon acoustique	$\lambda_{ac} \approx 0.1\mu m$
Fréquence de collision électron-phonon acoustique	$4\pi S_{ac} m^2 / \hbar^3 \approx 10^7 s^{-1}$
Fréquence de collision électron-phonon optique	$4\pi S_{op} N_{ph} m^2 / \hbar^3 \approx 1.710^6 s^{-1}$
Fréquence de collision électron-électron	$\nu_{ee} = 10^6 s^{-1}$

La valeur typique de la vitesse qui a permis de calculer la fréquence de collision électron-phonon optique est donnée par $y_c = 2$, et le potentiel chimique adoptée est, $\mu_0 / T_0 = -10$, ce qui correspond à gaz d'électron très faiblement dégénéré. Nous pouvons remarquer que pour $K\lambda_{ac} = 1$, le transport électronique est nettement non local et la longueur caractéristique du système est submicronique, soit $L \approx 0.63 \mu m$.

On peut aussi noter que les coefficients de transport utilisés dans les équations (IV.52)-(IV.60) dépendent fortement des paramètres Γ et ξ . En outre, les effets non locaux génèrent de nouveaux coefficients de transport, notamment $\alpha_q(K, \omega)$, $\alpha_{\Pi}(K, \omega)$, $\gamma_{\Pi}(K, \omega)$ et $\gamma_R(K, \omega)$. Ces coefficients de transport n'ont aucune contrepartie dans les relations locales du transport et elles s'annulent dans la limite collisionnelle.

Les intégrales (IV.27) ont été calculées numériquement en utilisant un algorithme standard [25] des fractions continues. Ces fractions continues sont calculées avec une précision $\left| \left(F_c^{n+1} - F_c^n \right) / F_c^n \right| < 10^{-9}$ où n est l'ordre de la fraction continue. Notons que ces fractions infinies possèdent la propriété de converger très rapidement et que le temps de calcul numérique de ces fractions ne dépasse pas quelques secondes.

Nous pouvons remarquer dans les figures IV.1 et IV.4 que le coefficient de la conductivité thermique K_T et le coefficient de la viscosité η_V sont réduits par les effets non locaux et dans la limite collisionnelle ($\Gamma \ll 1$) et pour $\xi \sim 1$, la partie imaginaire de ces coefficients de transport est comparable à la partie réelle.

Par ailleurs, pour $\xi \ll 1$ (transport quasi statique) et $\Gamma > 1$ (limite non collisionnelle), dus aux effets purement non locaux, les coefficients de transport dissipatifs, K_T et η_V , présentent un comportement asymptotique proportionnel à $1/|K|$. En général les coefficients de transport diminuent du régime quasi statique au régime transitoire, sauf pour le coefficient de transport ν_j [Fig. IV.7] qui présente une dépendance en fonction de ξ négligeable.

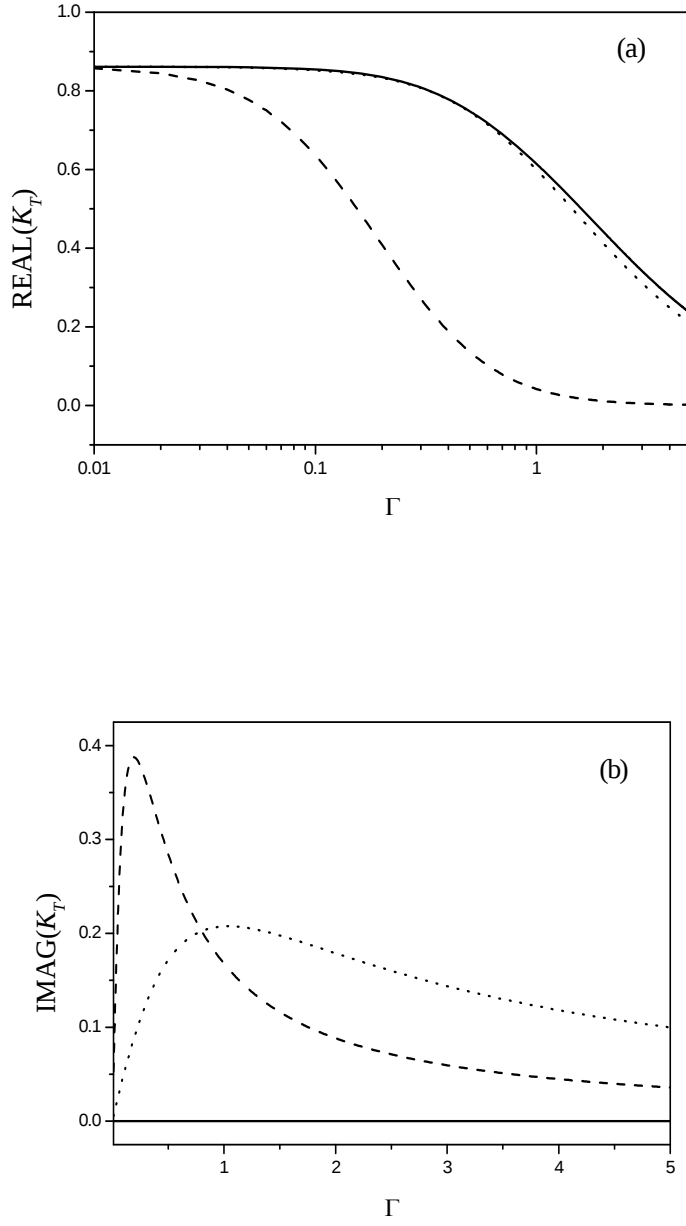


Figure IV.1 :: conductivité thermique K_T , (a) parties réelle et (b) partie imaginaire, en fonction du paramètre de collisionnalité $\Gamma = K v_t / \nu_{ac}$ pour différentes valeurs de $\xi = \omega / \sqrt{2} |K| v_t$, $\xi = \omega / \sqrt{2} |K| v_t, 10^{-3}$ (courbe pleine), 10^{-1} (courbe en pointillés) et 10 (courbe en tirés).

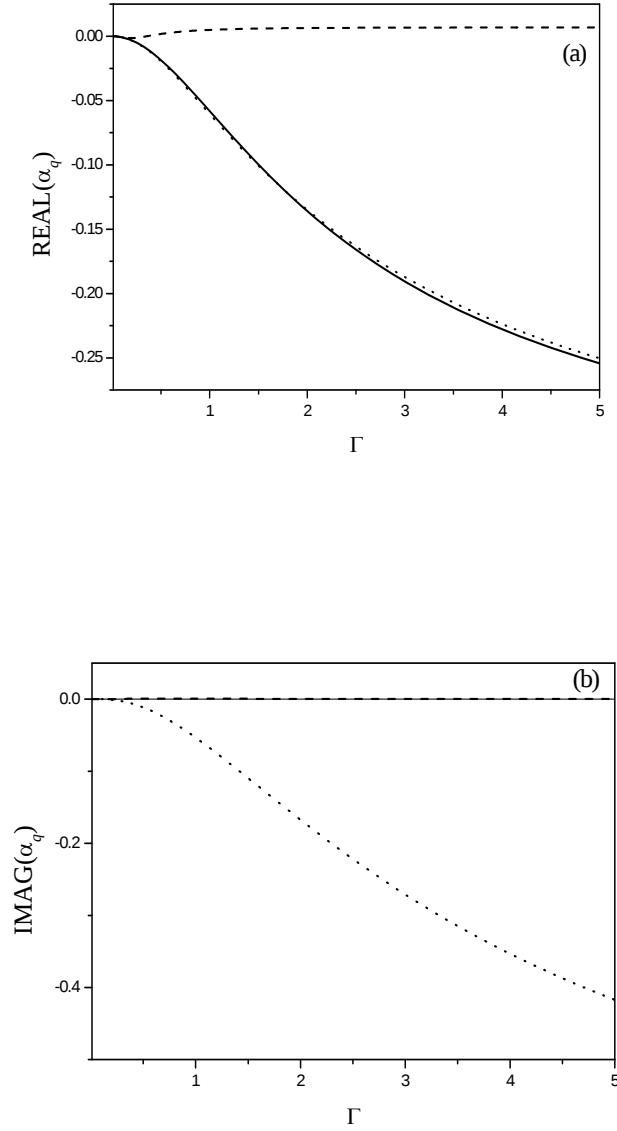


Figure IV.2 : Le coefficient convectif α_q dû à l'effet de la vitesse fluide V , (a) parties réelle et (b) partie imaginaire, en fonction du paramètre de collisionnalité $\Gamma = K v_t / \nu_{ac}$ pour différentes valeurs de

$\xi = \omega / \sqrt{2} |K| v_t$, 10^{-3} (courbe pleine), 10^{-1} (courbe en pointillés) et 10 (courbe en tirés).

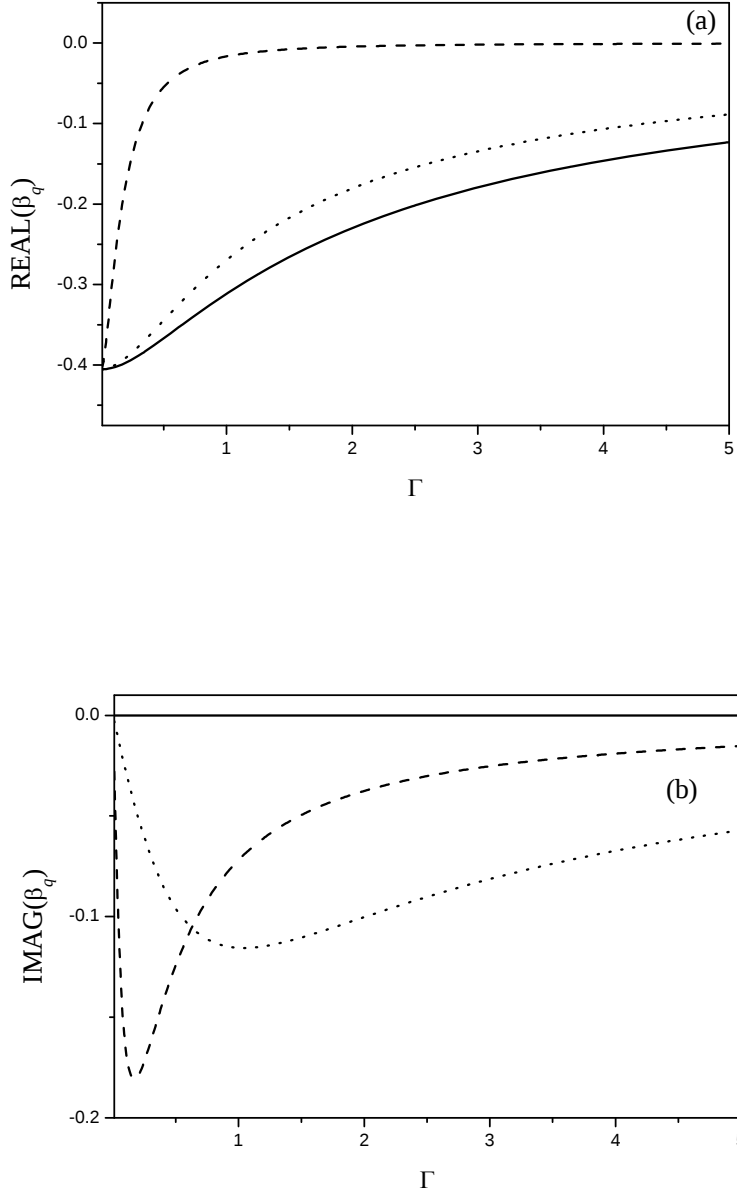


Figure IV. 3 : du coefficient de Peltier β_q dû à l'effet de la densité de courant J_x , (a) partie réelle et (b) partie imaginaire, en fonction du paramètre de collisionnalité $\Gamma = K v_t / \nu_{ac}$ pour différentes valeurs de $\xi = \omega / \sqrt{2} |K| v_t$, 10^{-3} (courbe pleine), 10^{-1} (courbe en pointillés) et 10 (courbe en tirés).

Principe de symétrie d'Onsager $\beta_q = -\beta_R / \Gamma$ est vérifié, où β_R est le coefficient thermique d'interaction électron-réseau

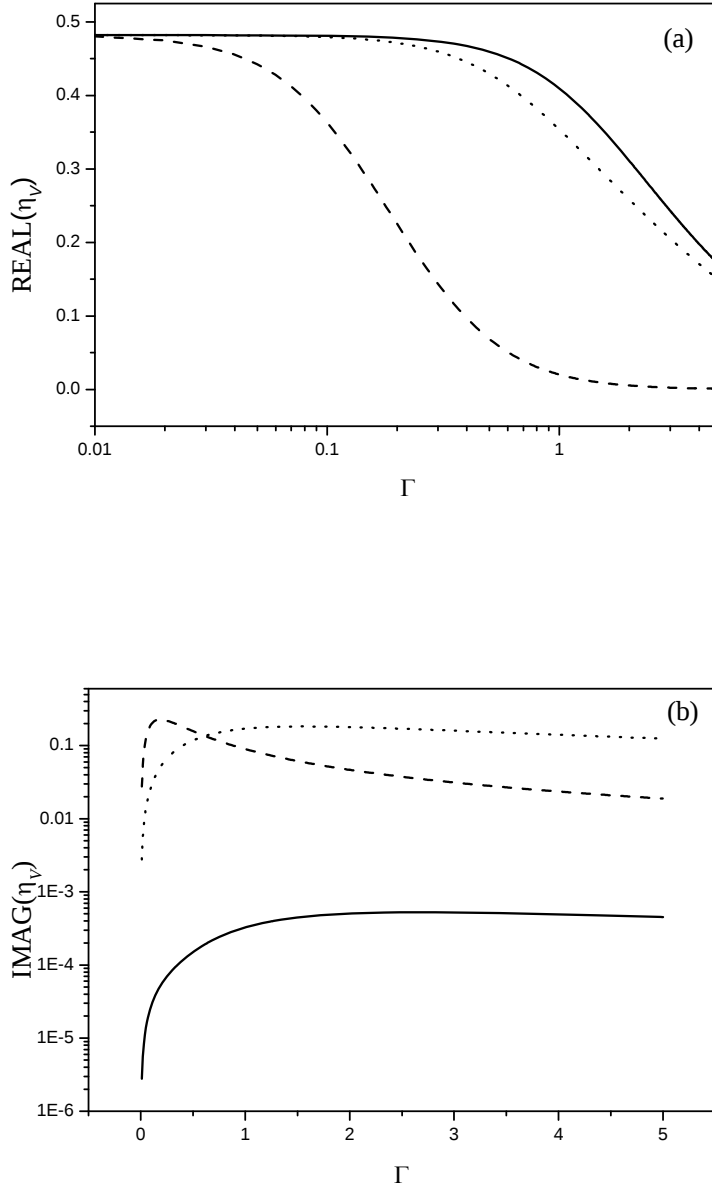


Figure IV.4 : le coefficient de viscosité η_v , (a) partie réelle et (b) partie imaginaire, dû à la vitesse de dérive en fonction du paramètre de collisionnalité $\Gamma = K v_t / \nu_{ac}$ pour différentes valeurs de

$$\xi = \frac{\omega}{\sqrt{2} |K| v_t}, \quad 10^{-3} \text{ (courbe continue), } 10^{-1} \text{ (courbe en pointillés) et } 10 \text{ (courbe en tirés).}$$

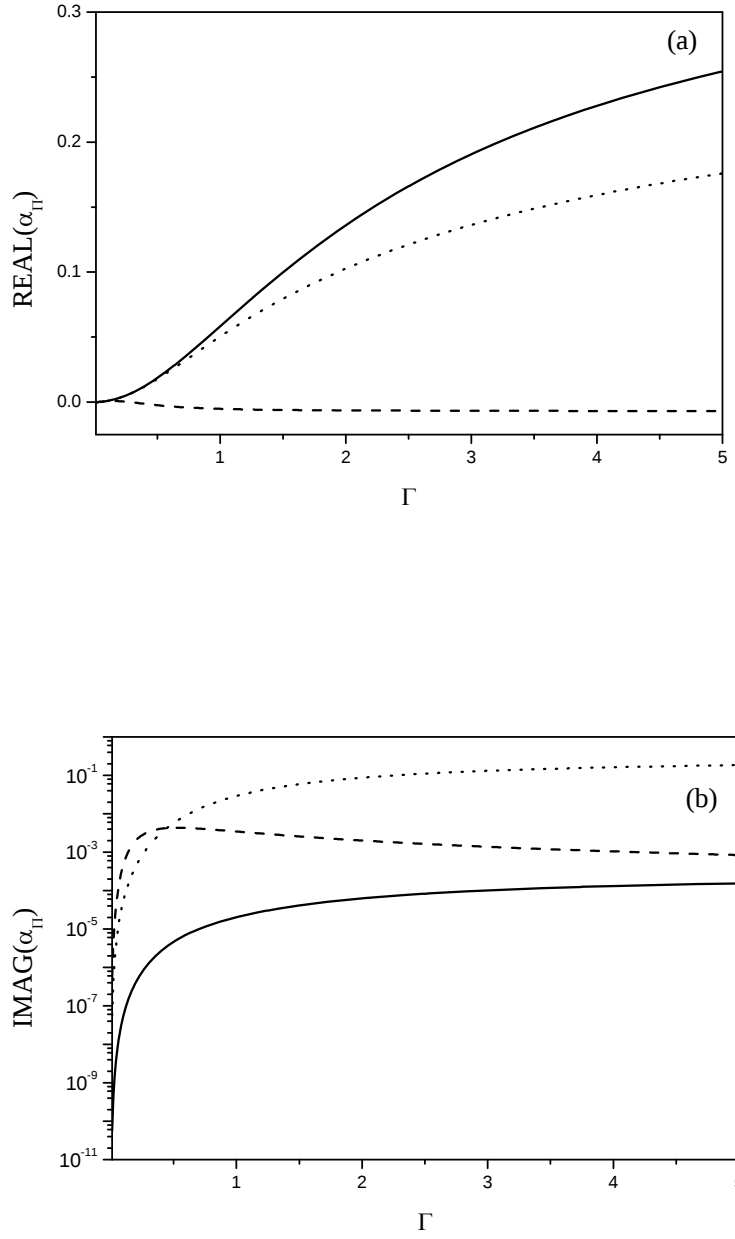


Figure IV.5 : Le coefficient d'anisotropie de température $\alpha_{\parallel}$, (a) partie réelle et (b) partie imaginaire, en fonction du paramètre de collisionnalité $\Gamma = K v_t / \nu_{ac}$ pour différentes valeurs de $\xi = \omega / \sqrt{2} |K| v_t$, 10^{-3} (courbe pleine), 10^{-1} (courbe en pointillés) et 10 (courbe en tirés).

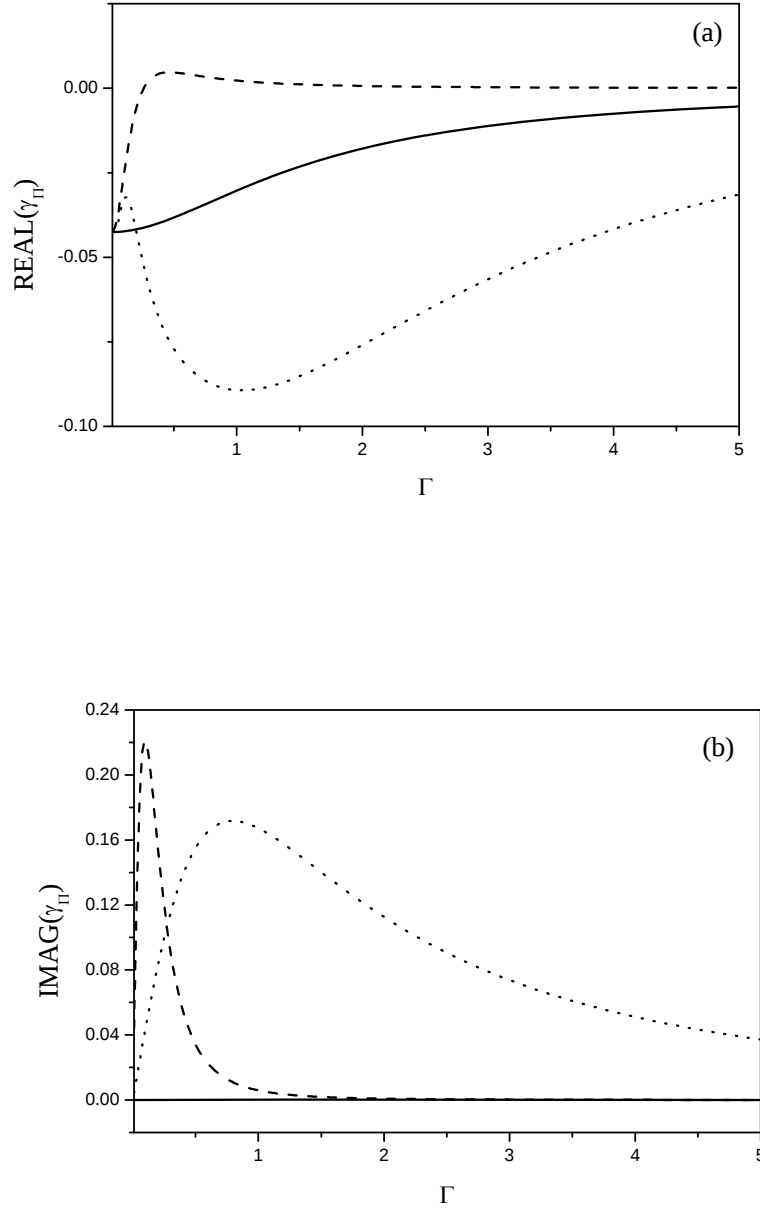


Figure IV.6: Le coefficient de viscosité γ_{II} , (a) partie réelle et (b) partie imaginaire, dû à la densité de courant J_x en fonction du paramètre de collisionnalité $\Gamma = K v_t / \nu_{ac}$ pour différentes valeurs de $\xi = \omega / \sqrt{2} |K| v_t$, 10^{-3} (Courbe noir), 10^{-1} (courbe en pointillés) et 10 (courbe en tirés).

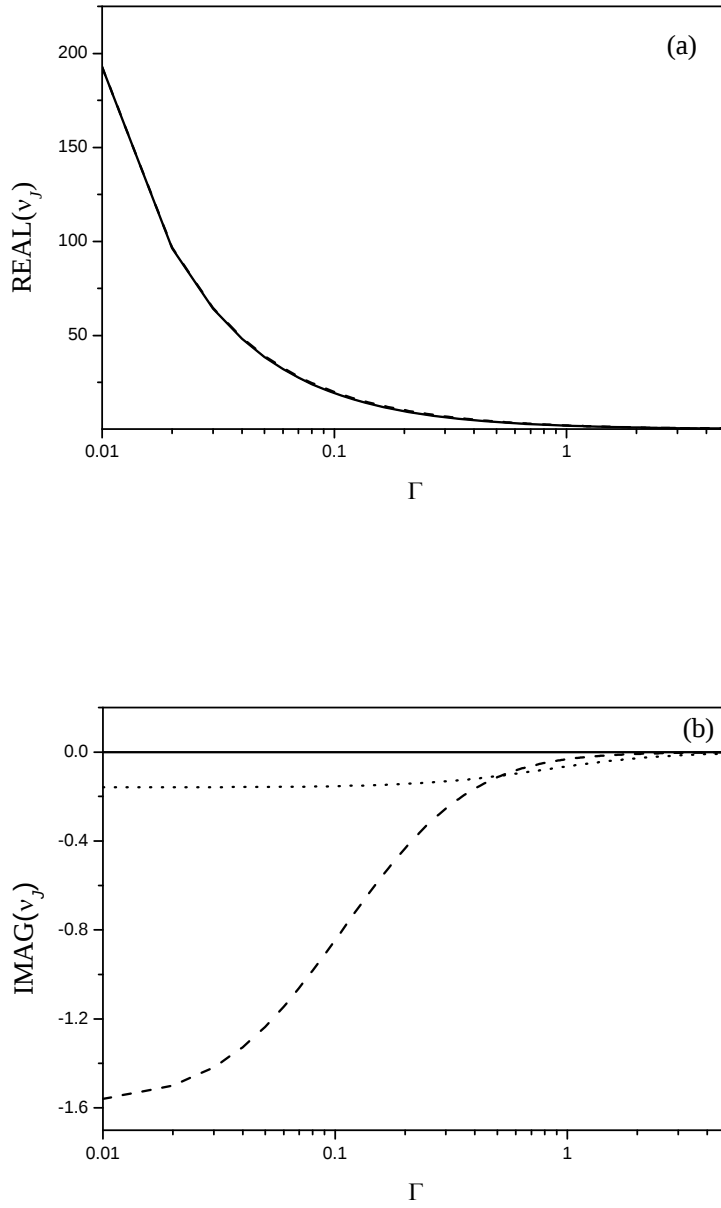


Figure IV.7 : Le coefficient de friction ν_J électron-réseau, (a) partie réelle et (b) partie imaginaire, dû à l'effet de la densité J_x , en fonction du paramètre de collisionnalité $\Gamma = K v_t / \nu_{ac}$ pour différentes valeurs de $\xi = \omega / \sqrt{2} |K| v_t$, 10^{-3} (courbe pleine), 10^{-1} (courbe en pointillés) and 10 (courbe en tirés).

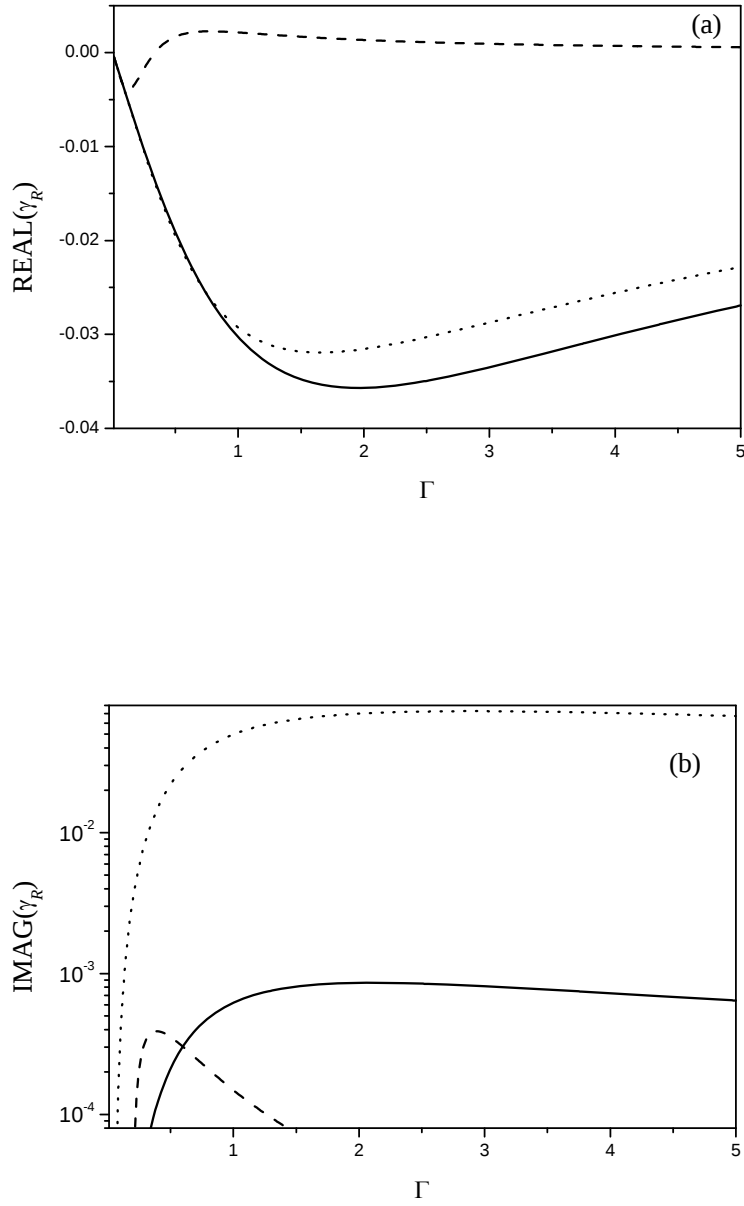


Figure IV.8 : Le coefficient de friction γ_R électron-réseau, (a) partie réelle et (b) partie imaginaire, du dû à l'effet de la vitesse fluide V en fonction du paramètre de collisionnalité $\Gamma = K v_t / \nu_{ac}$, pour différentes valeurs de $\xi = \omega / \sqrt{2} |K| v_t$, 10^{-3} (courbe en trait plein), 10^{-1} (courbe en pointillés) and 10 (courbe en tirés).

Nous avons trouvé numériquement que le principe de symétrie d'Onsager pour les quantités fluides J_x et $\frac{\partial T}{\partial x}$ est vérifié, c'est-à-dire $\beta_q(\omega, K) = -\beta_R(\omega, K)/\Gamma$ pour des valeurs arbitraires de Γ et ξ . De plus, dans la limite quasi statique, la symétrie d'Onsager est aussi valable pour l'ensemble des coefficients de transport non diagonaux, $\gamma_{\Pi}(0, K) = \gamma_R(0, K)/\Gamma$ et $\alpha_q(0, K) = -\alpha_{\Pi}(0, K)$. Il est important de noter que la symétrie Onsager obtenue avec notre modèle est obtenue de façon self-consistante et ainsi elle confirme partiellement la fiabilité de nos résultats; alors que de nombreux travaux dans la littérature utilisent cette symétrie pour calculer les coefficients de transport.

Dans l'espace réel, les expressions non locales des relations de fermeture $X_{nl}(x, t)$ (conductivité thermique et coefficient de viscosité) peuvent être exprimées en termes d'un produit de convolution entre l'expression locale $X_l(x, t)$ et un noyau Φ contenant les effets non locaux, c'est à dire,

$$X_{nl}(x, t) = \iint \Phi(x - x', t - t') X_l(x', t') dx' dt'. \quad (\text{IV.61})$$

Dans le régime quasi statique ($\xi \ll 1$), nous pouvons calculer les expressions explicites du noyau Φ dans le cadre de l'approximation diffusive. Cette approximation consiste à garder le terme local et le premier terme non local d'ordre Γ^2 dans la fonction de distribution. Pour cela, nous développons la fraction continue comme suit,

$$F_c^n \approx \frac{1}{\nu(y) + \frac{2(n+1)^2}{4(n+1)^2 - 1} K^2 v_t^2 y / \nu(y)} \approx \frac{1}{\nu(y)} \left(1 - \frac{2(n+1)^2}{4(n+1)^2 - 1} (K v_t y / \nu(y))^2 \right). \quad (\text{IV.62})$$

Dans l'espace de Fourier, les relations de fermeture non locales se comportent comme des fonctions Lorentziennes,

$$X_{nl}(K) = X_l(K) / \left(1 + (K \lambda_d)^2 \right), \quad (\text{IV.63})$$

où λ_d est une longueur de délocalisation. Dans l'espace réel, nous obtenons l'expression suivante,

$$\Phi(x, x') = \exp\left(-\frac{|x - x'|}{\lambda_d}\right) / 2\lambda_d. \quad (\text{IV.64})$$

Nous ne donnons pas dans ce travail les expressions explicites des coefficients de transport dans la limite diffusive qui peuvent être calculées de façon aisée. Nous tenons à préciser que cette technique est largement utilisée dans la théorie de transport des plasmas créés par laser pour décrire le transport thermique avec des gradients de température raides [45-47].

VI. COMPORTEMENT ASYMPTOTIQUE ET COMPARAISON AVEC LA LITTÉRATURE.

A notre connaissance, il n'existe pas dans la littérature de résultats théoriques ou expérimentaux concernant l'étude du comportement des phénomènes de transport dans les semi-conducteurs dans le régime semi-collisionnel. Dans les limites collisionnel et non collisionnel en revanche plusieurs résultats ont été rapportés. Dans ce qui suit on va étudier le comportement asymptotique des coefficients de transport et comparer le résultat obtenu avec ceux de la littérature.

VI.1. Régime collisionnel (local)

Dans un premier temps, nous étudions le comportement asymptotique des coefficients de transport obtenus (IV.52)-(IV.60) dans la limite de l'approximation très collisionnelle, c'est-à-dire $[(\omega, Kv_t)/\nu_{ac}] \ll 1$. Afin d'obtenir des expressions explicites, pour plus de simplicité, nous avons négligé les corrélations électron-électron et électron-phonon optique. Les collisions importantes que nous avons retenues sont les interactions électron-phonon acoustique uniquement. Dans ce cas, l'expression des fractions continues devient alors,

$$F_c^n \approx \frac{1}{v_{ac} y^{1/2}} \quad (\text{IV.65})$$

où

$$v_{ac} = 4\pi\sqrt{2} \frac{S_{ac} m^{3/2} T_0^{1/2}}{\hbar^3} \quad (\text{IV.66})$$

A partir de l'équation (III.52), nous pouvons déduire que la fonction de distribution isotrope est définie comme étant la fonction de Fermi Dirac locale,

$$f_0(y) \approx f_{FD}(y, T_0) \quad (\text{IV.67})$$

Dans le cadre de cette approximation, le modèle de transport le plus utilisé dans les semi conducteurs est celui de dérive-diffusion. Ce modèle est valable dans des dispositifs de dimensions appréciables et pour de faibles gradients de température. De plus, ce modèle est basé uniquement sur l'équation de continuité couplée au vecteur de densité de courant que nous calculons à partir de l'équation (IV.18) dans la limite collisionnelle. En revenant à l'écriture des résultats précédents dans l'espace réel, nous pouvons obtenir l'équation standard de dérive-diffusion, donnée par

$$J_x = \frac{2}{3} \frac{en_0}{F_{1/2} m v_{ac}} \frac{F_0}{T_0} \left(\frac{\partial \tilde{\mu}}{\partial x} \right) \quad (\text{IV.68})$$

où

$$\frac{\partial \tilde{\mu}}{\partial x} = \frac{\partial \mu}{\partial x} + eE = \frac{2F_{1/2}}{F_{-1/2}} \frac{T_0}{n_0} \frac{\partial n}{\partial x} + eE \quad (\text{IV.69})$$

Dans la littérature, un modèle, dit modèle hydrodynamique a été élaboré, basé sur les équations hydrodynamiques (IV.1)-(IV.3). Il tient compte du gradient de température et des processus collisionnels et du transfert d'énergie et d'impulsion lors des collisions électron-

réseau. En adoptant les notations de Braginskii [48], nous pouvons calculer aisément les relations de fermeture collisionnelles comme suit,

$$R_x = - \left(2 \frac{F_1}{F_0} - \frac{5}{3} \frac{F_{3/2}}{F_{1/2}} \right) \left(n_0 \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{3F_{1/2}}{2F_0} \frac{m\nu_{ac}}{e} J_x \quad (\text{IV.70})$$

$$q_x = \frac{n_0 v_t^2}{\nu_{ac}} \left(\frac{2F_2}{F_{1/2}} - \frac{8(F_1)^2}{3F_{1/2}F_0} \right) \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) + \left(\frac{2F_1}{F_0} - \frac{5F_{3/2}}{3F_{1/2}} \right) \frac{T_0}{e} J_x \quad (\text{IV.71})$$

$$\Pi_{xx} = - \frac{32F_1}{45F_{1/2}} \frac{n_0 T_0}{\nu_{ac}} \frac{dV}{dx} - \frac{16}{45} \left(\frac{2F_1}{F_{1/2}} - \frac{9F_{1/2}}{4F_0} \right) \frac{T_0}{e\nu_{ac}} \frac{dJ_x}{dx} \quad (\text{IV.72})$$

Le terme de source inélastique de transfert d'énergie Q_{inel} , dû aux collisions inélastiques est donnée par l'équation (IV.48), écrite dans l'espace réel.

En général, les coefficients de transport établis à partir des modèles cinétiques théoriques et des simulations Monte Carlo sont principalement comparés aux données expérimentales dans la limite collisionnelle, largement disponible dans la littérature. Nous pouvons citer comme exemple les travaux récents de Smirnov et Jungermann [49] concernant une étude théorique du transport semi-classique des trous dans des semi-conducteurs stationnaires ($\omega = 0$) et homogènes ($K = 0$), en tenant compte des structures de bande complètes pour des champs électrique et magnétique uniformes.

Nous avons comparé nos résultats avec ceux de la littérature concernant la conductivité thermique dans la limite $K\lambda_{ac} \rightarrow 0$. Le résultat de la littérature considéré dans ce travail est celui de la référence [2], où la conductivité thermique est calculée en fonction du paramètre $\omega\tau_q$, τ_q étant le temps de relaxation pour le flux de chaleur en utilisant la méthode des 13-moments. Les quantités constitutives sont établies comme des termes de relaxation par la méthode de Grad [voir chapitre II, §VI.2]. Les résultats obtenus sont représentés dans la figure IV.9 pour la partie réelle et la partie imaginaire de la conductivité thermique.

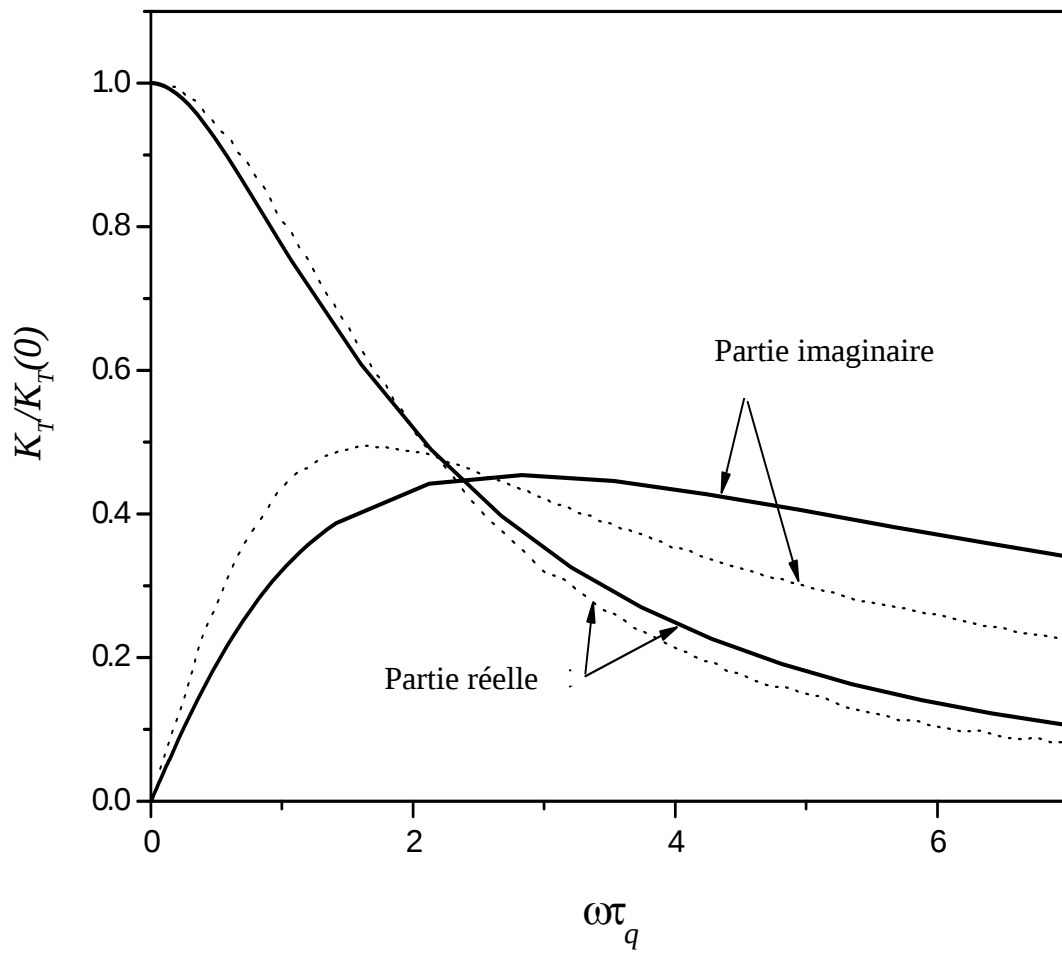


Figure. IV.9 : La conductivité thermique en fonction
du paramètre adimensionnel $\omega\tau_q$ dans le régime collisionnel,
(traits pleins) nos résultats, (traits en pointillés) résultats de la référence [2].

Afin d'effectuer cette comparaison avec la littérature, nous devons exprimer le temps de relaxation macroscopique τ_q en fonction du temps de libre moyen microscopique (temps de vol) τ_{ac} . Cette relation approximative s'exprime comme,

$$\omega\tau_q = 1.322\omega\tau_{ac} \quad (\text{IV.73})$$

Nous pouvons observer un bon accord pour la partie réelle et un accord qualitatif pour la partie imaginaire de la conductivité thermique. Cette différence pour les deux résultats est due essentiellement à la méthode utilisée qui ne tient compte que de 13 moments, alors que notre approche permet de tenir compte de toutes les anisotropies avec l'utilisation de la méthode des fractions continues.

VI.2. Régime balistique

Le régime balistique a gagné en intérêt et en importance ces dernières années dans la mesure où il concerne les dispositifs semi-conducteurs sub-micrométriques et notamment nanométriques, qui sont à la base de la microélectronique moderne. L'étude du transport dans ce régime est cruciale pour une bonne compréhension des phénomènes physiques mis en jeu. Dans le transport collisionnel donc diffusif, le mouvement des électrons soumis à un champ électrique est limité par le libre parcours moyen (typiquement du micromètre à quelques centaines de nanomètres). En plus les effets dissipatifs (chaleur) sont importants dans ce régime diffusif. Dans le régime balistique les électrons ne subissent pas d'interaction avec le réseau et ce n'est donc pas accompagné de dissipation de chaleur.

Expérimentalement les conducteurs balistiques présentent actuellement un intérêt croissant sont les systèmes nanométriques. A l'échelle nanométrique plusieurs expériences ont été conduites pour comprendre le transport balistique dans les semi-conducteurs. Nous pouvons citer notamment celle de Van Wees et al. [50] qui ont mis en évidence expérimentalement la quantification de la conductance. Cette expérience consiste à considérer deux électrodes constituées de deux réservoirs de particules (deux métaux de potentiels chimiques μ_1 et μ_2), reliés par N fils nanométriques.

Les électrons qui contribuent au courant électrique sont ceux qui ont une énergie ε , telle que $\mu_1 < \varepsilon < \mu_2$. Le courant qui circule entre les deux réservoirs est défini par la fonction de distribution de Fermi-Dirac comme suit,

$$I = \frac{2e}{h} \int [F_{FD}(\varepsilon - \mu_1) - F_{FD}(\varepsilon - \mu_2)] N d\varepsilon = \frac{2e}{h} N (\mu_1 - \mu_2)$$

La différence de potentiel entre les deux électrodes est

$$V = (\mu_1 - \mu_2) / e$$

Il résulte une conductance électrique quantique [54]

$$G = I / V = 2Ne^2 / h = NG_0$$

où

$$G_0 = 2e^2 / h = 1 / (12.9k\Omega) = 7,727.10^{-5} \Omega^{-1}$$

est le quantum de conductance électrique [55,56]. Cette quantification de la conductance a été mise en évidence dans la référence [50]. Nous donnons sur la figure IV.10 la mise en évidence de cette quantification de la conductance électrique en fonction de la tension appliquée.

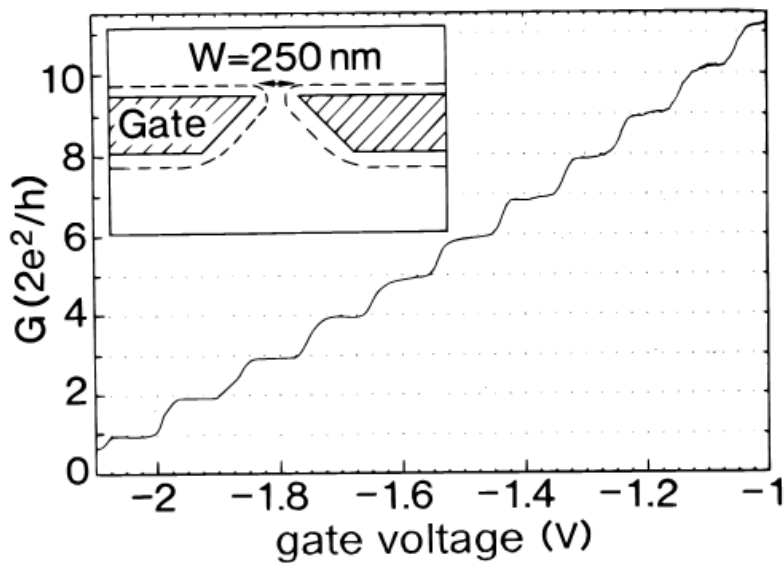


Figure IV.10 : La conductance quantique électrique à 0.6 K en fonction de la tension entre deux contact ponctuel (d'après B. J. van Wees dans la Réf [30])

Dans le cadre de l'approximation semi-classique il est aussi possible de mettre en évidence ce régime balistique. Ce régime est défini par l'approximation $K\lambda_{ac} \gg 1$. Nous allons présenter dans cette étude la conductivité thermique non collisionnelle afin de la comparer avec celle de Greiner *et al.* [3]. Dans cette référence [3] le coefficient de la conductivité thermique 1D a été calculé par le formalisme de la fonction de corrélation. Nous présentons dans les figures IV.11 et IV.12 les résultats obtenus dans notre étude ainsi que ceux établis dans la référence [3].

Nous pouvons remarquer dans la figure IV.11 que dans le cas fortement dégénéré, nos résultats sont en bon accord avec ceux de la littérature. Cependant, nous observons des fluctuations dans la courbe de la référence. [3] pour de larges valeurs de ξ associées à la forme des fonctions de corrélation.

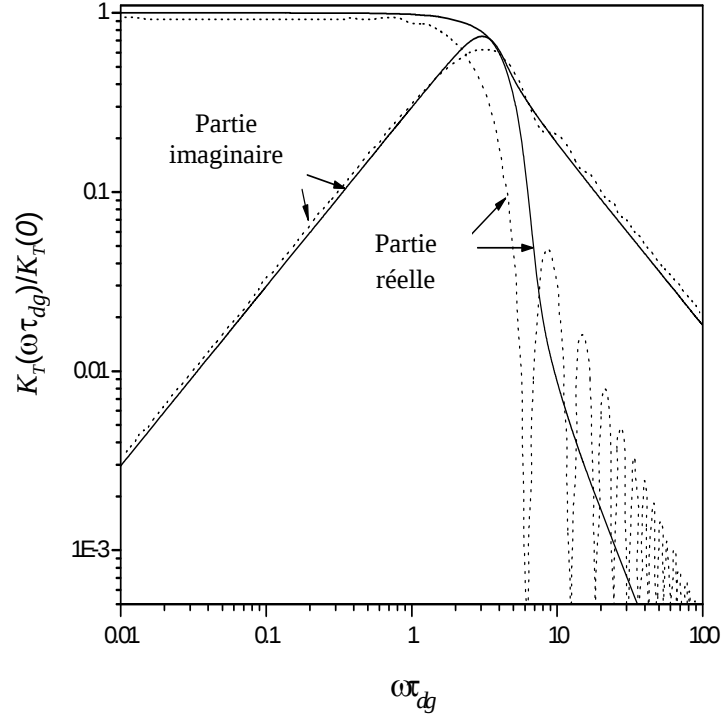


Fig. IV.11 : la conductivité thermique en fonction du paramètre adimensionnel $\omega\tau_{dg}$ pour le cas fortement dégénéré, (traits pleins) nos résultats, (traits en pointillés) résultats de la référence [3].

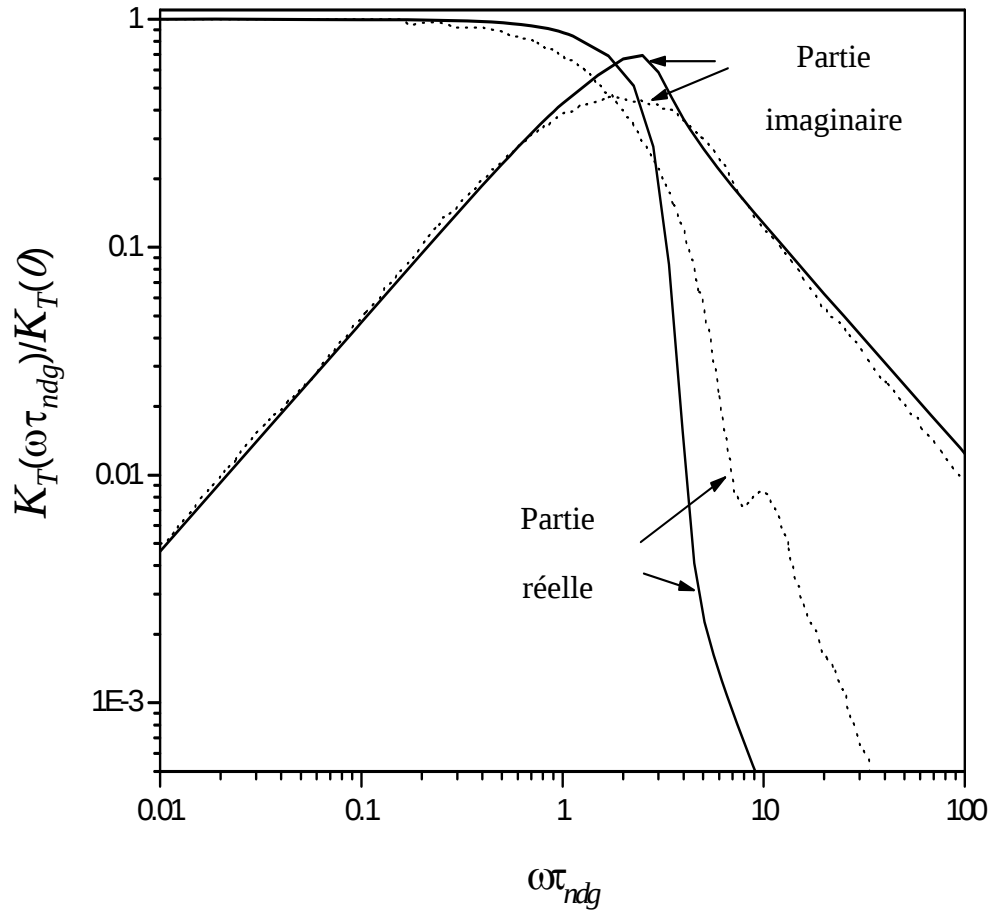


Figure IV.12 : La conductivité thermique en fonction du paramètre adimensionnel $\omega\tau_{ndg}$ pour le cas non dégénéré, (traits pleins) nos résultats, (traits en pointillés) résultats de la référence [3].

Par ailleurs, comme le montre la figure IV.12, nous pouvons noter qu'un accord qualitatif a été obtenu entre les deux résultats dans le cas non dégénéré. On suppose que cet écart est dû du fait que nous avons considéré un modèle de transport à trois dimensions alors

que Greiner et al. ont développé une théorie 1D. Pour confirmer cet argument, on donne sur la figure IV.13 le calcul de la fonction de corrélation à 1D, 2D et 3D calculée dans la référence [13]. On peut observer que dans le cas 3D, les oscillations sont moins importantes et ce comportement s'approche davantage de nos résultats.

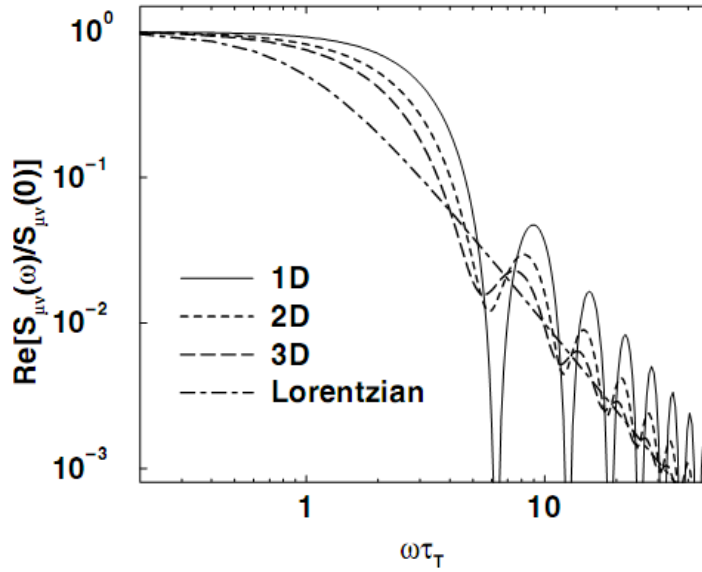


Figure IV.13 : La partie réelle des densités spectrales des fonctions de corrélation des flux dans le régime balistique 1D, 2D et 3D. La Lorentzienne est associée au cas diffusif [13].

Nous avons aussi calculer analytiquement l'expression explicite de la conductivité thermique dans la limite $\xi \rightarrow 0$. En utilisant un développement asymptotique de l'intégrale de Sommerfeld, pour calculer les intégrales $I_n^{ijk}(\omega, K)$, et après quelques manipulations mathématiques, nous obtenons les expressions explicites suivantes, dans le cas non dégénéré et dégénéré respectivement :

$$K_{ndg} = \frac{9}{5} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{n_0 v_t}{|K|} \quad (\text{IV.74})$$

$$K_{dg} = \left(\frac{64\pi^4}{3} \right)^{1/3} \frac{n_0^{2/3} T_0}{|K| h}. \quad (\text{IV.75})$$

Nous retrouvons des expressions similaires à celles établies par Greiner et al. dans la référence [3], avec quelques différences dues à la dimensionnalité du problème. Il est à noter que le coefficient de la conductivité thermique 1D non dégénéré a été déjà calculé par Hammett et Perkins dans la référence [51], en utilisant l'équation cinétique de Vlasov. Leur expression est donnée par :

$$K_{ndg}^{HP} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{n_0 v_t}{|K|} \quad (\text{IV.76})$$

et ce résultat correspond bien à celui établi par Greiner et al., pour $kL = 2$, où L est la longueur active du semi conducteur.

VII. CONCLUSION

Ce chapitre est consacré au calcul des relations de fermeture des trois équations hydrodynamiques. Ces relations sont valables pour un régime de collision et un spectre de fréquence ω , arbitraires. Le calcul des relations de fermeture a nécessité de calculer analytiquement les coefficients de transport et les termes de production à partir de l'équation de Boltzmann semi-classique. La symétrie d'Onsager a été vérifiée ce qui corrobore partiellement la validité de nos résultats. Les résultats numériques sur les coefficients de transport dans le régime collisionnel et balistique sont en agrément avec ceux rapportés dans la littérature.

CONCLUSION GENERALE

Un système d'équations hydrodynamiques généralisées pour décrire les électrons de conduction dans les semi-conducteurs est établi. Pour cela des relations de fermeture correspondant aux coefficients de transport et aux termes de production des équations hydrodynamiques de conservation de l'impulsion et de l'énergie, sont calculées en fonction des potentiels thermodynamiques, que sont le gradient du potentiel chimique, le gradient de température et la vitesse de dérive.

Ces coefficients de transport (conductivité thermique, pouvoir thermoélectrique, coefficient de viscosité, etc.) et ces termes de production (taux d'échange d'impulsion et d'énergie électron-réseau) sont calculés analytiquement en résolvant l'équation de Boltzmann semi-classique dans l'approximation des forces thermodynamiques de faible magnitude. Les mécanismes de diffusion des électrons dans le semi-conducteur sont pris en compte à travers les interactions électron-phonon acoustique, électron-phonon optique et électron-électron, qui constituent les mécanismes collisionnels dominants à température ambiante.

La méthode analytique utilisée est basée sur le développement de la fonction de distribution sur la base des polynômes de Legendre. Toutes les composantes de la fonction de distribution sur cette base sont prises en considération, en utilisant les fractions continues. Par conséquent les résultats obtenus sont valables pour un régime de collision arbitraire. Les propriétés d'invariance des opérateurs de collision sont assurées à l'aide des opérateurs de projection.

Les coefficients de transport ainsi que les termes de production sont calculés dans l'espace de Fourier en fonction d'intégrales dont l'intégrand dépend de la fonction de distribution de Fermi-Dirac et des fractions continues.

Le calcul numérique des coefficients a permis de mettre en évidence le rôle des effets non locaux spatiaux et temporels dans les semi-conducteurs à l'échelle mésoscopique. En particulier, les effets non locaux spatiaux ont tendance à réduire les parties réelles de la conductivité thermique et du coefficient de viscosité qui sont responsables de la dissipation dans le semi-conducteur.

Les coefficients obtenus vérifient de façon self-consistante la symétrie d'Onsager, ce qui corrobore la fiabilité des résultats obtenus. Des expressions explicites des coefficients de transport quasi-statiques dans l'espace réel, valables dans les régimes faiblement non locaux (régime diffusif), sont également proposées.

Par ailleurs, l'étude du régime balistique est aussi abordée dans la limite d'une fréquence de collision nulle. Cette étude a montré que les coefficients de transport dissipatifs dans l'approximation quasi-statique, varient en $1/|K|$ dans l'espace de Fourier spatial. Cette dépendance représente la signature des effets non collisionnels décrit habituellement dans les intégrales de Plemelj de Landau [52].

Les résultats obtenus sont en bon accord avec ceux de la littérature qui utilisent la méthode des moments dans la limite quasi-collisionnelle et le formalisme de la fonction de corrélation dans la limite non collisionnelle.

Ce travail ouvre la voie à quelques perspectives de recherche dans le domaine de la théorie du transport dans les semi-conducteurs mésoscopiques.

- i) La prise en compte d'un champ magnétique à l'ordre zéro permet de sonder les effets du champ magnétique sur le transport. En particulier d'autres coefficients de transport peuvent être calculés dont notamment ceux de Nernst et Righi-Leduc.
- ii) Les effets non linéaires peuvent également être inclus dans ce formalisme. Ceci va nécessiter d'opérer des troncatures sur le nombre d'équations du développement sur la base des polynômes de Legendre. Chaque équation correspondant à un ordre donné devient une équation aux dérivées partielles.
- iii) Ce formalisme peut aussi être adapté au transport quantique balistique en utilisant l'équation de Wigner.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] W. V. van Roosbroeck, Bell Syst. Tech. J. **29**, 560 (1950); H. K. Gummel, IEEE Trans. Electron Devices **11**, 455 (1964).
- [2] A. Rangel-Huerta and R. M. Velasco, Physica A **308**, 161 (2002).
- [3] A. Greiner, L. Reggiani, T Kuhn and L. Varani, Phys. Rev. Lett. **6**, 1114 (1997).
- [4] S. Mesbah, K. Bendib-Kalache, A. Bendib and J.P. Matte, Phys. Scr. **78**, 025704 (2008).
- [5] S. Mesbah, K. Bendib-Kalache, A. Bendib and J. P. Matte, "*Kinetic Theory of the non local transport in submicronic semiconductors*", 2-4th May 2006 CISGM4, Tlemcen, Algeria.
- [6] S. Mesbah, K. Bendib-Kalache, A. Bendib and J. P. Matte, "*Generalized Drift-Diffusion Model in Semiconductors*", 23-26 June 2008 LAPAMS'08, Algiers, Algeria.
- [7] S. Mesbah, K. Bendib-Kalache, A. Bendib and J. P. Matte, "*Collisionless transport theory in semiconductors*", 11- 13 October 2008 International Conference on Knowledge Discovery and databases: Materials Informatics and DFT, Oran, Algeria.
- [8] J. Bardeen, Phys. Rev. **71**, 717 (1947); W. H. Brattain and W. Shockley, Phys. Rev. **72**, 345 (1947).
- [9] G. Timp, J. Bude, K.K. Bourdelle, J. Garno, A. Ghatti, H. Gossmann, M. Green, G. Forsyth, Y. Kim, R. Kleiman, F. Klemens, A. Kornblit, C. Lochstampfor, W. Mansfield, S. Moccio, T. Sorsch, D. M. Tennant, W. Timp, and R. Tung, "*The ballistic nano-transistor*", in IEDM Technical Digest, Vol. Cat. 99CH36318, Electron Devices Society of IEEE, Piscataway NJ, p. 55 (1999).
- [10] P. Bordone, M. Pascoli, R. Brunetti, A. Bertoni, C. Jacoboni, and A. Abramo, Phys. Rev. B **59**, 3060 (1999).
- [11] M. V. Fischetti, Phys. Rev. B **59**, 4901 (1999).
- [12] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press, New York, NY, 1st edition, 1995.
- [13] A. Greiner, L. Reggiani, T Kuhn and L; Varani, Semicond. Sci. Technol. **15**, 1071 (2000).
- [14] R. L. Liboff, "*Kinetic Theory: Classical, Quantum, and Relativistic Descriptions*", Third Edition, Springer-Verlag New York, Inc, 2003.
- [15] C. Hamaguchi, "*Basic Semiconductor Physics*", Springer Berlin Heidelberg, 2006.
- [16] H. Grad, The Physics of Fluids **6**, 147 (1963).
- [17] H. Grad, Comm. Pure and Applied Math. **2**, 325 (1949).

- [18] S. Chapman and T. G. Cowling, “*The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*”, Cambridge University Press, Cambridge, 1970.
- [19] A. M. Anile and O. Muscato, Phys. Rev. B **51**, 16728 (1995).
- [20] A. M. Anile and O. Muscato, Continuum. Mech. Thermodyn. **8**, 131 (1996).
- [21] M. Trovato and L. Reggiani, Phys. Rev. B **61**, 16667 (2000).
- [22] M. Lax, *Rev. Mod. Phys.* **32**, 25 (1960).
- [23] S. Gantsevitch, V. Gurevich and R. Katilius, *Nuovo Cimento* **2**, 1 (1979).
- [24] R. Kubo, M. Toda and N. Hashitsume, “*Statistical Physics II*”, Berlin: Springer, 1991.
- [25] M. Abramowitz and I. A. Stegun, “*Handbook of Mathematical Functions*”, Dover, New York, 1970.
- [26] D. Ventura, A. Gnudi, G. Baccarani and F. Odeh. Appl. Math. Lett. **5**, 85 (1992)
- [27], N. Goldsman, L. Henrickson and J. Frey, Solid-St. Electron, **34**, 389 (1991).
- [28] C. Jacoboni and L. Reggiani, Reviews of Modern Physics **55**, 645 (1983).
- [29] M. V. Fischetti and S. E. Laux, Phys. Rev. B **38**, 9721 (1988).
- [30] C. Beenakker and H. van Houten, “*in Solid State Physics*”, edited by H. Ehrenreich and D. Turnbull, Academic Press, Boston, Vol. **44**, pp. 1–228, 1991.
- [31] C. Castellani, C. DiCastro, G. Kotliar, and P.A. Lee, Phys. Rev. Lett. **59**, 477 (1987).
- [32] P. Golinelli, L. Varani, and L. Reggiani, Phys. Rev. Lett. **77**, 1115 (1996).
- [33] T. Kuhn and L. Reggiani, *Nuovo Cimento D* **14**, 509 (1992).
- [34] F. Mohling, “*Statistical Mechanics*, Wiley New York, 1982.
- [35] R. Landauer, IBM J. Res. Dev. **1**, 223 (1957); *ibid* **32**, 306 (1988).
- [36] D.K. Ferry, “*Semiconductors*”, Macmillan Publishing Company, Inc., 1991,
- [37] A. Sommerfeld, “*Thermodynamics and Statistical Mechanics, Lectures in Theoretical Physics*”, Vol. V, Academic Press, New York, 1955
- [38] A.M. Anile, S. Pennisi, Phys. Rev. B **46** (20), 13186 (1992).
- [39] A.M. Anile, O. Muscato, Phys. Rev. B **51** (23) 16 728 (1995)
- [40] A. M. Anile and O. Muscato, Continuum. Mech. Thermodyn. **8**, 131 (1996).
- [41] M. Trovato and L. Reggiani, Phys. Rev. B **61**, 16667 (2000).
- [42] S. F. Liotta and H. Struchtrup, Solid-St. Electron. **44** 95 (2000).
- [43] H. Struchtrup, *Physica A* **275**, 229 (2000).
- [44] Ned S. Wingreen, Cristopher J. Stanton, and John W. Wilkins, Phys. Rev. Lett. **57**, 1084 (1986).
- [45] J. F. Luciani, P. Mora and R. Pellat, Phys. Fluids **28**, 835 (1985).
- [46] A. Bendib, J. F. Luciani and J. P. Matte, Phys. Fluids **31**, 711 (1988).

- [47] A. Bendib and K. Bendib, Phys. Plasmas **6**, 1500 (1999).
- [48] S. I. Braginskii, “Transport processes in a plasma,” in Review of Plasma Physics, edited by M. A. Leontovich , Consultants Bureau, New York, Vol. **1**, p. 205, 1965.
- [49] S. Smirnov and C. Jungemann, J. Appl. Phys **99**, 63707 (2006).
- [50] B. J. Van Wees et al., Phys. Rev. Lett **60**, 848 (1988).
- [51] G. W. Hammett and F. W. Perkins, Phys. Rev. Lett. **64**, 3019 (1990).
- [52] L. D. Landau, J. Phys. U.S.S.R. **10**, 25 (1946).
- [53] S. Li Sheng, “*semiconductors Physical Electronics*”, second Edition, Springer, 2006.
- [54] M. Lundström, “*Fundamentals of carrier transport*”, Second Edition, Cambridge University Press, 2000
- [55] M. Büttiker, Phy. Rev. Lett. 57, 1761, (1986)
- [56] R. Landauer, IBM J. Res. 1, 223, (1957); 32, 306, (1988)
- [57] N. Miura, “*Physics of Semiconductors in high Magnetic fields*”, première Edition, Oxford University Press, 2008

Semicollisional linear transport theory in semiconductors

S Mesbah¹, K Bendib-Kalache¹, A Bendib¹ and J P Matte²

¹ Laboratoire d'Electronique Quantique, Faculté de Physique, USTHB, El Alia BP 32, Bab Ezzouar 16111, Algiers, Algeria

² INRS-EMT, Université du Québec, Varennes, Québec, Canada

E-mail: karimabendib@hotmail.com

Received 8 December 2007

Accepted for publication 5 June 2008

Published 31 July 2008

Online at stacks.iop.org/PhysScr/78/025704

Abstract

A transport theory in semiconductors, based on the semiclassical Boltzmann equation, is presented. The kinetic equation is solved keeping all the anisotropies of the distribution function with the use of the continued fractions. The solution is derived with the assumption that the deviation of the electron distribution function with respect to the equilibrium is small. The generalized current density, heat flux, stress tensor and the production collisional terms are calculated in the linear approximation, as functions of the lower moments, i.e. the electrochemical potential, the temperature and the drift velocity. The results obtained are valid for arbitrary collision frequency with respect to $K v_t$ and ω , where K^{-1} and ω^{-1} are, respectively, the characteristic length and timescales of the system and v_t is the thermal velocity. These transport coefficients can be used to close the generalized hydrodynamic equations valid in the whole collisionality range.

PACS numbers: 72.10.Bg, 72.20.Ht, 51.10.+y

1. Introduction

In the past, the study of electric behavior in a semiconductor device has been based on the drift-diffusion equation [1]. The drift-diffusion model is a low-order approximation of the Boltzmann transport equation (BTE) [2], which assumes that the mobility of the carriers is a function of the local electrical field only. The application of this model is limited to devices where the spatial variation of the electric field is not very rapid. However, in modern devices, whose size is in the deep submicron region, the drift-diffusion model is no longer applicable.

Three more accurate device simulation methods have recently been widely used in the literature: the Monte Carlo [3], the direct solution of the Boltzmann equation [4, 5] and the hydrodynamic approaches [6–17]. These models have many advantages over the drift-diffusion model, such as their ability to treat hot-electron effects. In addition, the Monte Carlo and the Boltzmann methods also allow a natural treatment of spatially and temporally nonlocal phenomena.

The Monte Carlo simulation of the BTE is habitually used for analyzing carrier transport in bulk semiconductors and it consists of tracking the momentum and position of an ensemble of carriers as they move through a device

under the influence of the thermodynamic and the random scattering forces. This method, which takes into consideration various scattering mechanisms, can provide a more detailed description of carrier transport. However, the noise in the solution and the enormous amounts of computation time required make this model not very practical for device design. A direct solution of the BTE avoids the noise problem, but it is even more prohibitive for device design.

On the other hand, the hydrodynamic approach which constitutes the aim of this work is the most important in predictive device simulation, since it has some advantages over the Monte Carlo simulations. In particular, it can model multidimensional devices without the excessive computational time inherent to the kinetic method. The fluid description of carriers in semiconductors results from the conversion of the BTE into an infinite set of equations for the moments $\Omega_n(\vec{r}, t) = \int F(\vec{k}, \vec{r}, t) (\frac{\hbar \vec{k}}{m} - \vec{V})^n d\vec{k}$ of the distribution function $F(\vec{k}, \vec{r}, t)$ defined at time t , in phase space $(\vec{r}, \vec{k})$, where $\vec{r}$ is the position vector, $\vec{k}$ is the wave vector, $\hbar = h/2\pi$ is the reduced Planck constant, m is the effective mass at the conduction-band edge, $\vec{V}(\vec{r}, t)$ is the drift velocity (or the macroscopic velocity) and $n \geq 0$ is the order of the moment. The resulting set of equations

is equivalent to the BTE and therefore provides an accurate description of the system. These equations are coupled and, in order to find the evolution of Ω_n , knowledge of the higher order moment Ω_{n+1} is required recursively. The usual treatment of this closure problem is to consider only the equations for the first three moments which describe the evolution of the lower moments, i.e. the density $n(\vec{r}, t)$, the drift velocity $\vec{V}(\vec{r}, t)$ and the temperature $T(\vec{r}, t)$ (or the thermal energy). These equations are the carrier continuity equation, the momentum balance equation and the energy balance equation. Therefore, one is faced with the problem of calculating accurate closure relations to model momentum and energy transport, by expressing relationships between the transport coefficients (the higher moments) and the drift velocity $\vec{V}(\vec{r}, t)$ and the usual thermodynamic forces, i.e. the electric field $\vec{E}$, the gradient of the chemical potential $\nabla\mu$ and the gradient of the temperature, ∇T . The validity of the hydrodynamic model depends thus on the range of validity of the transport coefficients and, consequently, it depends on the mathematical method used to solve the kinetic equation. For instance, the well-known Chapman–Enskog method [6] at the first order is applicable only for strongly collisional systems. In the literature, the validity conditions of the hydrodynamic equations are often not fulfilled, particularly when the hydrodynamic scale length L_h and the hydrodynamic scale time t_h are respectively comparable to the electron mean-free-path λ_e and to the electron collision time τ_e .

Several works have been devoted to the derivation of a hydrodynamic-balance-equations model of carrier transport in semiconductor devices. In these models, the various relaxation rates are imported from Monte Carlo calculations or simply assumed to be constant. In this work, we propose a new set of transport coefficients to close the hydrodynamic equations even in cases where the hydrodynamic scale length L_h and the hydrodynamic scale time t_h are respectively comparable to or even smaller than the electron mean-free-path λ_e and the electron collision time τ_e . In particular, the whole anisotropic part of the distribution function is kept and therefore the results are valid for arbitrary collisionality. As in previous work [6], the approach is perturbative, assuming small deviations from equilibrium (weak fields, small temperature variations, etc), but the scale length is not necessarily longer than the mean-free-path. The closure quantities are calculated as functions of the carrier drift velocity, the carrier temperature, as well as the carrier density, without an outside, separate Monte Carlo procedure. Thus, besides the usual advantages of traditional hydrodynamic approaches, the present method enjoys the added convenience of a self-contained treatment of scattering.

To actually use the results, it would be necessary to do an inverse Fourier transform of the results obtained here, to obtain spatial convolution formulae. This is left for future work.

A rigorous generalization of these linear and nonlocal results to nonlinear transport theory is a difficult task. One possible solution is to use the linear theory results (derived in this work) for varying space and time background parameters. It might seem, at first sight, that a perturbation approach as used here will not be a useful basis for future

hydro simulations with larger (nonperturbative) variations. However, we may mention that such an approach has proved successful in hot plasma simulations: nonlocal heat flow formulae based on perturbative solutions of the electron kinetic equations were obtained and incorporated into a hydrodynamic code, and comparative simulations in cases with strong and rapid spatial variations were done with both the modified hydrodynamic code and kinetic codes, showing excellent agreement [18, 19]. Furthermore, an experimental confirmation of the validity of this approach was provided by the thermal filamentation experiments of Young *et al* [20, 21], where a plasma was heated by a laser beam with a controlled intensity modulation, and the density perturbation resulting from the temperature modulation was measured. Epperlein and Short [22, 23] showed that these results could be reproduced only if one took into account the reduction of the plasma thermal conductivity due to nonlocal effects, as obtained by applying a perturbation analysis to an assumed Maxwellian plasma equilibrium, while the classical Spitzer–Härm [24] thermal conductivity (which is based on a Chapman–Enskog approach) leads one to expect that the density modulation would be far less than what was observed. These computational and experimental results therefore give us confidence that for electrons in semiconductors, a perturbative analysis of the Fermi–Dirac distribution function may also be applied for the analysis of transport phenomena, in the regime where the mean-free-paths are not much shorter than the perturbation wavelengths.

This paper is organized as follows. In section 2, we present the kinetic model. Section 3 is devoted to the solution of the BTE and to the computation of the generalized transport coefficients. We present in section 4 a discussion and, in section 5, comparisons with the results reported in the literature. Finally, we summarize our results in the last section.

2. Equations of the model

The basic equation in this work is the BTE for electrons. At space-time coordinates $(\vec{r}, t)$, the electrons constitute an assembly of free charged particles with a distribution of wave vectors $\vec{k}$ and they can be described by the semiclassical BTE,

$$\frac{\partial F(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial F(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial \vec{r}} - \frac{e}{\hbar} (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \cdot \frac{\partial F(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial \vec{k}} = C(F), \quad (1)$$

where $F(\vec{r}, \vec{k}, t)$ is the electron distribution function, $\vec{k}$ is assumed to belong to the first Brillouin zone of the reciprocal lattice, e is the elementary charge, $\vec{E}$ and $\vec{B}$ are the electric and magnetic fields, respectively,

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k}) \quad (2)$$

is the group velocity of electrons and

$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (3)$$

is the energy band dispersion relation in the parabolic approximation. Note that we can easily apply our model to an arbitrary energy band. The right-hand side of equation (1) corresponds to the collisional productions and it is constituted by three contributions, namely, the electron–electron, the electron–acoustic phonon and the electron–optical phonon collision operators,

$$C(F) = C_{ee}(F) + C_{ac}(F) + C_{op}(F). \quad (4)$$

In the more general case (the electron gas could be degenerate), the first term in equation (4) reads

$$C_{ee}(F) = \int_B \{F' F'_1 (1-F)(1-F_1) - F F_1 (1-F')(1-F'_1)\} \times \delta_E \delta_{\vec{k}} S_{ee}(\vec{k}, \vec{k}', \vec{k}_1, \vec{k}'_1) d\vec{k}_1 d\vec{k}'_1, \quad (5)$$

where the domain of integration is restricted to the first Brillouin zone B ;

$$\delta_E = \delta(\varepsilon + \varepsilon_1 - \varepsilon' - \varepsilon'_1), \quad (6)$$

$$\delta_{\vec{k}} = \delta(\vec{k} + \vec{k}_1 - \vec{k}' - \vec{k}'_1) \quad (7)$$

are the Dirac functions and they model the conservation of the kinetic energy and of the momentum during a collision from the state $(\vec{k}, \vec{k}_1)$ to the state $(\vec{k}', \vec{k}'_1)$; $S_{ee}(\vec{k}, \vec{k}', \vec{k}_1, \vec{k}'_1)$ is the cross section; the factors $(1-F)$, $(1-F_1)$, $(1-F')$ and $(1-F'_1)$ account for the Pauli exclusion principle. These were introduced for the first time in the BTE by Uehling and Uhlenbeck [25], and their effect was further analyzed by Kaniadakis [26]. Finally, the notations ε , ε_1 , ε' , ε'_1 and F , F_1 , F' , F'_1 stand respectively for $\varepsilon(\vec{k})$, $\varepsilon(\vec{k}_1)$, $\varepsilon(\vec{k}')$, $\varepsilon(\vec{k}'_1)$ and $F(\vec{k})$, $F(\vec{k}_1)$, $F(\vec{k}')$, $F(\vec{k}'_1)$.

The electron–phonon (acoustic and optical) collisions are modeled by the operator

$$C_{ph}(F) = \int_B \{ (N_{ph} + 1) \delta(\varepsilon - \varepsilon' + \varepsilon_{ph}) + N_{ph} \delta(\varepsilon - \varepsilon' - \varepsilon_{ph}) F'(1-F) \} S_{ph}(\vec{k}, \vec{k}') d\vec{k}' - \int_B \{ (N_{ph} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \varepsilon_{ph}) + N_{ph} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \varepsilon_{ph}) F(1-F') \} S_{ph}(\vec{k}, \vec{k}') d\vec{k}', \quad (8)$$

where ε_{ph} is the phonon energy and N_{ph} is the phonon occupation number given by the Bose–Einstein statistics,

$$N_{ph}(\varepsilon_{ph}) = \frac{1}{\exp((\varepsilon_{ph}/T_L)) - 1}, \quad (9)$$

where T_L is the lattice temperature in energy units (this notation is adopted hereafter for the temperatures). The other notations used in equation (8) are similar to the notations adopted in equation (5). In equations (5) and (8), for nondegenerate electron distribution, $(F, F', F_1, F'_1) \ll 1$, the quantities $(1-F)$, $(1-F')$, $(1-F_1)$ and $(1-F'_1)$ may be replaced by unity and this lead to a significant mathematical simplification of these collision operators. In particular, expression (8) becomes a linear operator. For more details of a general analysis of the effects produced by the presence of nonlinearities (like the one arising from the Pauli exclusion principle), we refer the reader to [26]. We should note that

for simplicity, the electron–impurity interaction is neglected in this work.

As we aim at obtaining an analytic solution of the BTE valid in the whole collisionality range, we assume that the thermodynamic forces have a weak magnitude (typically the applied electric field is smaller than a few kV/cm) and therefore we solve the BTE for small deviations from the electron gas equilibrium represented by the Fermi–Dirac distribution function, i.e. $F = F_{FD} + f$, where

$$F_{FD}\left(\varepsilon, \frac{\mu_0}{T_0}\right) = \frac{1}{\exp((\varepsilon - \mu_0)/T_0) + 1} \quad (10)$$

is the electron Fermi–Dirac distribution function, μ_0 is the associated chemical potential and T_0 is the electron temperature. In addition, we consider unmagnetized semiconductors ($\vec{B} = 0$) and the inhomogeneity of the system is along the x -axis. In the velocity frame of the electron gas, equation (1) becomes

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_x \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{eE}{m} \frac{\partial F_{FD}}{\partial v_x} - \frac{\partial V}{\partial t} \frac{\partial F_{FD}}{\partial v_x} - v_x \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial F_{FD}}{\partial v_x} = C_{ee}(f) + C_{ac}(f) + C_{op}(f), \quad (11)$$

where $\vec{v}$ and $\vec{V} = V\hat{x}$ correspond respectively to the random velocity and to the perturbed fluid velocity. To solve equation (11), we perform the Laplace–Fourier transform ($t \leftrightarrow p$, $x \leftrightarrow K$) and we readily obtain

$$p\tilde{f}(\vec{v}, K, p) - \tilde{f}(\vec{v}, K, t=0) + iK v_x \tilde{f}(\vec{v}, K, p) = \frac{e\tilde{E}(K, p)}{m} \frac{\partial F_{FD}}{\partial v_x} + p\tilde{V}(K, p) \frac{\partial F_{FD}}{\partial v_x} - \tilde{V}(K, t=0) \frac{\partial F_{FD}}{\partial v_x} + iK \tilde{V}(K, p) v_x \frac{\partial F_{FD}}{\partial v_x} + C_{ee}(\tilde{f}) + C_{ac}(\tilde{f}) + C_{op}(\tilde{f}). \quad (12)$$

As is usual in the transport theory for one-dimensional (1D) inhomogeneous semiconductors, we expand the distribution function on the Legendre polynomial basis (henceforth, we drop the tilde over the f , E and V , but these now mean $f(\vec{v}, K, p)$, $E(K, p)$ and $V(K, p)$),

$$f(\vec{v}, K, p) = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\alpha) f_n(v, K, p), \quad (13)$$

where $P_n(\alpha = \frac{v_x}{v})$ is the Legendre polynomial of order n normalized in this work as $P_n(1) = \sqrt{2n+1}$ and $f_n(v)$ is the component of the distribution function of order n . Using expansion (13), we project equation (12) on the Legendre polynomial basis obtaining an infinite set of equations

$$pf_0 - f_0(t=0) + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} iK v_t y^{1/2} f_1 - \frac{2}{3} iK V y \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} = C_{ee}|_0 + C_{op}|_0, \quad (14)$$

$$pf_1 - f_1(t=0) + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} iK v_t y^{1/2} f_0 + \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{15}} iK v_t y^{1/2} f_2 - \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \frac{eE}{m v_t} y^{1/2} \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} - \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \frac{V}{v_t} p y^{1/2} \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} = -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \frac{V(t=0)}{v_t} p y^{1/2} \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} + C_{ee}|_1 + C_{ac}|_1 + C_{op}|_1, \quad (15)$$

$$pf_2 - f_2(t=0) + \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{15}} iK v_t y^{1/2} f_1 + \frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{35}} iK v_t y^{1/2} f_3 - \frac{4}{3\sqrt{5}} iK V y \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} = C_{ee}|_2 + C_{ac}|_2 + C_{op}|_2, \quad (16)$$

$$pf_n - f_n(t=0) + \frac{n\sqrt{2}}{\sqrt{(2n-1)(2n+1)}} iK v_t y^{1/2} f_{n-1} + \frac{(n+1)\sqrt{2}}{\sqrt{(2n+1)(2n+3)}} iK v_t y^{1/2} f_{n+1} = C_{ee}|_n + C_{ac}|_n + C_{op}|_n \quad (n \geq 3), \quad (17)$$

where the notations $v_t = \sqrt{\frac{T_0}{m}}$ and $y = \frac{\varepsilon}{T_0}$ have been used. We assume that the initial value of the perturbed distribution function corresponds to the perturbed Fermi–Dirac distribution function,

$$f(\vec{v}, K, t=0) = f_{FD}(y, K, t=0) = \left(\frac{\mu_0}{T_0} \frac{T(K, t=0)}{T_0} - \frac{\mu(K, t=0)}{T_0} \right) \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} - y \frac{T(K, t=0)}{T_0} \frac{\partial F_{FD}}{\partial y}, \quad (18)$$

where the temperature T and the chemical potential μ stand for the perturbed quantities. The explicit expressions of the electron–lattice collision terms in equations (14)–(17) read

$$C_{ac}|_{n>0} = -4\pi S_{ac} N(y) [f_n(y) - f_0(y)], \quad (19)$$

$$C_{op}|_0 = -4\pi S_{op} \{ N(y+\Omega) [N_{ph} f_0(y) - (N_{ph}+1) f_0(y+\Omega)] + N^+(y-\Omega) [(N_{ph}+1) f_0(y) - N_{ph} f_0(y-\Omega)] \} - 4\pi S_{op} F_{FD}(y) [N(y+\Omega) f_0(y+\Omega) - N^+(y-\Omega) f_0(y-\Omega)] - 4\pi S_{op} [N(y+\Omega) F_{FD}(y+\Omega) - N^+(y-\Omega) F_{FD}(y-\Omega)] \times f_0(y), \quad (20)$$

$$C_{op}|_{n>0} = -4\pi S_{op} [N(y+\Omega) N_{ph} + N^+(y-\Omega) (N_{ph}+1)] \times f_n(y) - 4\pi S_{op} [N(y+\Omega) F_{FD}(y+\Omega) - N^+(y-\Omega) F_{FD}(y-\Omega)] f_n(y), \quad (21)$$

where

$$S_{ac} = \frac{T_L E_{ac}^2}{4\pi^2 \hbar \rho C_1^2}, \quad (22)$$

$$S_{op} = \frac{\hbar E_{op}^2}{8\pi^2 \rho \varepsilon_{ph}}, \quad (23)$$

$$N(y) = k^2 \frac{dk}{d\varepsilon} = \sqrt{2} \frac{m^{3/2} T_0^{1/2}}{\hbar^3} \sqrt{y}, \quad (24)$$

$$\Omega = \frac{\varepsilon_{ph}}{T_L}, \quad (25)$$

$$N^+(y-\Omega) = \begin{cases} N(y-\Omega), & \text{for } y \geq \Omega, \\ 0, & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (26)$$

and where E_{ac} and E_{op} represent the deformation potentials, ρ is the crystal density and C_1 is the longitudinal sound speed. We should note that in our model we consider only electron intravalley scattering for both acoustic and optical phonons. We use the elastic approximation for the acoustic phonons and inelastic approximation for the optical phonons with a constant energy, ε_{ph} . In addition, we consider in this work silicon semiconductors, which are cubic systems with a face-centered lattice. Therefore these semiconductors are isotropic, and the deformation potentials E_{ac} and E_{op} are scalars instead of tensors as they should be in anisotropic semiconductors. In addition, the generality of our model allows us to investigate arbitrary degeneracy, i.e. arbitrary negative and positive values of the parameter, μ_0/T_0 in equation (10).

Each collision operator plays a specific role in the BTE. The anisotropic collision contributions ($C_{ee}|_{n>0}$, $C_{ac}|_{n>0}$, $C_{op}|_{n>0}$) relax the distribution function towards an isotropic function $f_0(\varepsilon)$, the isotropic electron–electron collision operator $C_{ee}|_0$ relaxes the distribution function toward the perturbed Fermi–Dirac function $f_{FD}(\varepsilon, T_0)$ and the isotropic electron–optical phonon collision term relaxes the distribution function toward the perturbed Fermi–Dirac function $f_{FD}(\varepsilon, T_L)$.

To derive analytic solutions of the BTE, we have to simplify the expression of the isotropic part of the electron–optical phonon collision operator $C_{op}(f_0)|_0$ and of the integro-differential electron–electron collision operator $C_{ee}(f)$. The simple way is to propose relaxation operators [27] with constant collision frequency in order to fulfill the conservation requirements. For $C_{op}(f_0)|_0$, we propose the expression

$$C_{op}|_0 = \nu_{op0}(y_c) [f_{FD}(y, n_0, T_L) - f_0(y)], \quad (27)$$

where

$$\nu_{op0}(y_c) = 4\pi S_{op} \{ N_{ph} [N(y_c+\Omega) + \exp(\Omega) N^+(y_c-\Omega)] \} + 4\pi S_{op} [N(y_c+\Omega) F_{FD}(y_c+\Omega) - N^+(y_c-\Omega) F_{FD}(y_c-\Omega)] \quad (28)$$

is the same expression of collision frequency as used in equation (21) with a characteristic normalized energy y_c . We note that expression (27) could be obtained approximately from (20) if we assumed that the shifted distribution functions $f_0(y \pm \Omega)$ (gain terms) are approximated by the perturbed Fermi–Dirac distribution function, $f_0(y \pm \Omega) \approx \exp(\mp \Omega) f_{FD}(y)$. Rigorously, this approximation is valid for an electron gas close to the equilibrium state. In addition, usually the inelastic contribution is less important than the elastic contribution and this ordering is due to the fact that the thermalization processes require many collisions to be efficient.

On the other hand, the electron–electron collision operator (5) is modeled as follows:

$$C_{ee}|_n = \nu_{ee} \left[f_{FD} \left(y, \frac{\mu_0}{T_0} \right) - f_n(y) \right], \quad (29)$$

where ν_{ee} is a phenomenological collision frequency assumed to be constant. It is important to note that this operator does not play a significant role for nondegenerate semiconductors (typically for electron density less than 10^{19} cm^{-3}) and it is often neglected in the literature. As we will see, the conservative properties of (29) are used to eliminate the initial distribution function in equation (14). We emphasize also that we can also apply our kinetic model for calculating the transport properties of holes in semiconductors. We just have to change in the BTE the electron parameters by those of holes (mobility, effective mass, etc) and rewrite the collision operators with the appropriate hole–hole and hole–lattice scattering probabilities (see for instance [3]).

3. Solution of the BTE

With the simplifications carried out on the electron–electron and the electron–optical phonon collision operators, the total collision operator can be expressed as a relaxation collision operator (BGK operator). Thus, we can solve this equation with a direct integration in the Fourier–Laplace space as done for instance in [28] devoted to the solution of the BTE in neutral gases. In this work, we follow the method derived in [29], based on the expansion of the distribution function on the Legendre polynomial and the mathematical technique of the continued fractions. Instead of using pole-integrals in the complex plane, inherent to the direct method, our method has the desirable property to handle the simple integral containing the continued fractions.

Using the approximations (27)–(29) and the invariance properties of the electron–electron collision operator,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} C_{ee}(f) \frac{2d\vec{p}}{h^3} = 0, \quad (30)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} C_{ee}(f) \varepsilon(\vec{p}) \frac{2d\vec{p}}{h^3} = 0, \quad (31)$$

the initial moments $\mu(K, t=0)$ and $T(K, t=0)$ are calculated and equation (14) becomes

$$\begin{aligned} & -i\omega [f_0 - f_{FD}(y, T_0)] + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} iK v_t y^{1/2} f_1 \\ & = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} iK v_t \frac{(10F_{3/2}M_1^1 - 6F_{1/2}M_1^2)}{9(F_{1/2})^2 - 5F_{-1/2}F_{3/2}} \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \\ & + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} iK v_t \frac{(-6F_{1/2}M_1^1 + F_{-1/2}M_1^2)}{9(F_{1/2})^2 - 5F_{-1/2}F_{3/2}} y \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \\ & - \nu_0 [f_0 - f_{FD}(y, T_0)] + \nu_{op0}(\nu_c) \\ & \times [f_{FD}(y, T_L) - S_{inel}(y, \mu_0, T_0, T_L)], \end{aligned} \quad (32)$$

where we have used the notation $M_n^m = \int_0^{+\infty} f_n y^m dy$, $\nu_0 = \nu_{op0} + \nu_{ee}$ and $p = -i\omega$ and where the inelastic source

term has the expression

$$\begin{aligned} S_{inel} = & f_{FD}(y, T_L) - \frac{1}{D} \left\{ \left[\left(\frac{\mu_0}{T_0} \frac{T}{T_0} \theta - \frac{\mu}{T_0} \right) \right. \right. \\ & \times (9F_{1/2}(T_0)F_{1/2}(T_L) - 5F_{-1/2}(T_L)F_{3/2}(T_0)) + 15 \frac{T}{T_0} \theta \\ & \times (F_{3/2}(T_0)F_{1/2}(T_L) - F_{1/2}(T_0)F_{3/2}(T_L)) \left. \right] \\ & \times \frac{\partial F_{FD}(y, (\mu_0/T_0))}{\partial y} \\ & - \frac{1}{D} \left\{ \left[\frac{T}{T_0} \theta (5F_{-1/2}(T_0)F_{3/2}(T_L) - 9F_{1/2}(T_0)F_{1/2}(T_L)) \right. \right. \\ & + 3 \left(\frac{\mu_0}{T_0} \frac{T}{T_0} \theta - \frac{\mu}{T_0} \right) (F_{1/2}(T_0)F_{-1/2}(T_L) \\ & \left. \left. - F_{-1/2}(T_0)F_{1/2}(T_L)) \right] \right\} y \frac{\partial F_{FD}(y, (\mu_0/T_0))}{\partial y} \right\}. \end{aligned} \quad (33)$$

In equation (33),

$$\theta = \frac{T_0}{T_L}, \quad D = 9 \left[F_{1/2} \left(\frac{\mu_0}{T_0} \right) \right]^2 - 5F_{-1/2} \left(\frac{\mu_0}{T_0} \right) F_{3/2} \left(\frac{\mu_0}{T_0} \right),$$

and

$$F_n(T_{0,L}) = \int_0^\infty \frac{y^n}{\exp(y - (\mu_{0,L}/T_{0,L})) + 1} dy. \quad (34)$$

We can easily check that for $\theta = 1$, the inelastic term (33) vanishes as it should. To solve the infinite set of equations (17), we use the techniques of the continued fractions [30], obtaining

$$f_3 = -iK v_t \frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{35}} F_c^3 f_2, \quad (35)$$

where F_c^3 is a continued fraction defined by the recurrence relation

$$F_c^n = \frac{1}{-i\omega + \nu(y) + (2(n+1)^2/(4(n+1)^2 - 1))K^2 v_t^2 y F_c^{n+1}} \quad (36)$$

with

$$\begin{aligned} \nu(y) = & 4\pi S_{ac} N(y) + 4\pi S_{op} [N(y + \Omega) N_{ph} \\ & + N^+(y - \Omega)(N_{ph} + 1)] + 4\pi S_{op} [N(y + \Omega) F_{FD}(y + \Omega) \\ & - N^+(y - \Omega) F_{FD}(y - \Omega)] + \nu_{ee} \end{aligned} \quad (37)$$

Solving the algebraic equations (15), (16) and (35), we deduce the expressions of the relevant components of the anisotropic distribution function, i.e.

$$\begin{aligned} f_1 = & -iK v_t \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} F_c^1 y^{1/2} f_0 + \frac{eE}{m v_t} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} y^{1/2} F_c^1 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \\ & - i\omega \frac{V}{v_t} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} y^{1/2} F_c^1 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \\ & - iK v_t (iK V) \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \frac{8}{15} y^{3/2} F_c^1 F_c^2 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \end{aligned} \quad (38)$$

and

$$f_2 = -\frac{4}{3\sqrt{5}}K^2v_t^2yF_c^1F_c^2f_0 - \frac{4}{3\sqrt{5}}\frac{eE}{mv_t}iKv_t yF_c^1F_c^2\frac{\partial F_{FD}}{\partial y} + \frac{4}{3\sqrt{5}}iK V y v(y)F_c^1F_c^2\frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \quad (39)$$

Equations (32), (38) and (39) constitute a complete set of coupled equations for the f_0 , f_1 and f_2 .

We can now compute from equations (32), (38) and (39) the desired generalized transport quantities, namely, the x -component of the heat flux,

$$q_x = \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon v_x f \frac{2d\vec{p}}{h^3}, \quad (40)$$

the x - x component of the stress tensor

$$\Pi_{xx} = \int_{-\infty}^{+\infty} m \left(v_x^2 - \frac{v^2}{3} \right) f \frac{2d\vec{p}}{h^3}, \quad (41)$$

and for the production terms, the electron–lattice momentum transfer

$$R_x = \int_{-\infty}^{+\infty} m v_x [C_{ac}(f) + C_{op}(f) + C_{ec}(f)] \frac{2d\vec{p}}{h^3} \quad (42)$$

and the electron–lattice energy transfer

$$Q_{inel} = \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon C_{op}(f) \frac{2d\vec{p}}{h^3}. \quad (43)$$

For the sake of clarity, we have relegated the explicit expressions of the transport coefficients to appendix A (equations (A.39)–(A.47)).

The transport coefficients constitute exact closure relations for the perturbed hydrodynamic equations since they are computed self-consistently. However, as usual, we assume that these relations could be used to close the weakly nonlinear hydrodynamic equations, namely the continuity equation

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial nV}{\partial x} = 0, \quad (44)$$

the momentum transport equation

$$\frac{\partial V}{\partial t} + V \frac{\partial V}{\partial x} + \frac{e}{m}E + \frac{2}{3nm} \frac{\partial W}{\partial x} + \frac{1}{nm} \frac{\partial \Pi_{xx}}{\partial x} = \frac{R_x}{mn} \quad (45)$$

and the energy transport equation

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(WV) + \frac{2}{3}W \frac{\partial V}{\partial x} + \Pi_{xx} \frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial q_x}{\partial x} = Q_{inel}, \quad (46)$$

where

$$W = F_{3/2}/F_{1/2}nT \quad (47)$$

is the energy density.

4. Discussion

Let us now discuss the results obtained in this work. Two regimes are discussed: the local and the nonlocal regimes.

4.1. Local regime

First, we investigate the asymptotic behavior of the transport coefficients (A.39)–(A.47) in the strongly collisional limit $[(\omega, K v_t)/\nu] \ll 1$. For simplicity, in order to get explicit expressions of these transport coefficients, we neglect the electron–electron and the electron–optical phonon correlations. In this case, the continued fractions become

$$F_c^n \approx \frac{1}{v_{ac}y^{1/2}}, \quad (48)$$

where

$$v_{ac} = 4\pi\sqrt{2}\frac{S_{ac}m^{3/2}T_0^{1/2}}{\hbar^3}. \quad (49)$$

From equation (32), we can deduce that the isotropic distribution function is the perturbed Fermi–Dirac distribution function, $f_0(y) \approx f_{FD}(y, T_0)$. In the framework of this approximation, the most popular model of carrier transport in semiconductor devices is the drift-diffusion model. This model is valid for large devices and for small temperature gradients. It is based on the continuity equation (44) coupled with the current density that we calculate from equation (A.6) in the collisional limit. Converting the result back in real space we obtain the familiar drift-diffusion equation:

$$J_x = \frac{2}{3}\frac{en_0}{F_{1/2}mv_{ac}}\frac{F_0}{T_0}\left(\frac{\partial \tilde{\mu}}{\partial x}\right), \quad (50)$$

where

$$\frac{\partial \tilde{\mu}}{\partial x} = \frac{\partial \mu}{\partial x} + eE = \frac{2F_{1/2}}{F_{-1/2}}\frac{T_0}{n_0}\frac{\partial n}{\partial x} + eE. \quad (51)$$

A more elaborate model used in the literature is the hydrodynamic model, based on the hydrodynamic equations (44)–(46). It accounts for the temperature gradient and the collisional processes of electron momentum and energy transfer with the lattice. Following the Braginskii notations [31], we easily calculate the collisional closure relations

$$R_x = -\left(2\frac{F_1}{F_0} - \frac{5}{3}\frac{F_{3/2}}{F_{1/2}}\right)\left(n_0\frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{3F_{1/2}}{2F_0}\frac{mv_{ac}}{e}J_x, \quad (52)$$

$$q_x = \frac{n_0v_t^2}{v_{ac}}\left(\frac{2F_2}{F_{1/2}} - \frac{8(F_1)^2}{3F_{1/2}F_0}\right)\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right) + \left(\frac{2F_1}{F_0} - \frac{5F_{3/2}}{3F_{1/2}}\right)\frac{T_0}{e}J_x, \quad (53)$$

$$\Pi_{xx} = -\frac{32F_1}{45F_{1/2}}\frac{n_0T_0}{v_{ac}}\frac{dV}{dx} - \frac{16}{45}\left(\frac{2F_1}{F_{1/2}} - \frac{9F_{1/2}}{4F_0}\right)\frac{T_0}{ev_{ac}}\frac{dJ_x}{dx} \quad (54)$$

and Q_{inel} is given by the expression (A.35), converted back to the real space.

4.2. Nonlocal regime

Roughly the nonlocal effects become significant for $K\lambda_{ac} > 10^{-2}$, where $\lambda_{ac} = \pi\hbar^4\rho C_1^2/(m^2T_L E_{ac}^2)$ is the electron mean free-path deduced from equations (22) and (23) for the electron–acoustic phonon scattering. For typical silicon values [14], $E_{ac} = 9$ eV, $\rho = 2330$ kg m^{−3}, $m = 2.9 \times 10^{-31}$ kg, $T_L = 300$ K and $C_1 = 9040$ m s^{−1}, the electron mean free-path is about $\lambda_{ac} \approx 0.1$ μm. Thus, the corresponding scale lengths $L = 2\pi/K$ are smaller than

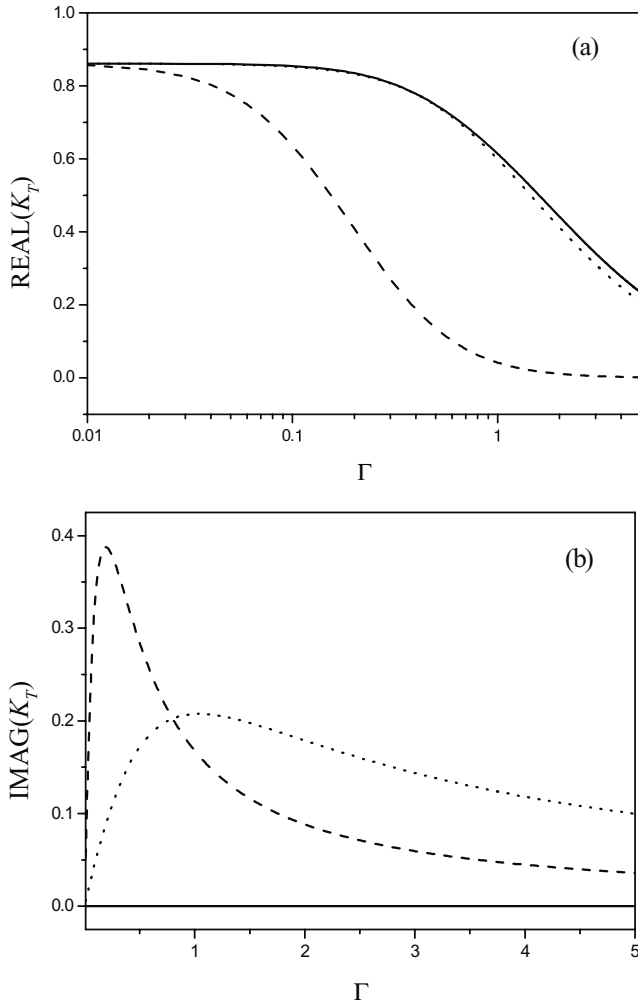


Figure 1. Real part (a) and imaginary part (b) of the thermal conductivity K_T as a function of the collisionality parameter $\Gamma = K v_t / v_{ac}$ for different values of $\xi = \frac{\omega}{\sqrt{2}|K|v_t}$, 10^{-3} (solid line), 10^{-1} (dotted line) and 10 (dashed line).

63 μm . In particular, for $K\lambda_{ac} = 1$, the transport is strongly nonlocal and the scale length becomes submicrometric ($L \approx 0.63 \mu\text{m}$).

In the nonlocal regime, we can see from equations (A.39)–(A.47) that the transport coefficients depend on the spatial and temporal scales. The nonlocal effects yield new transport coefficients, namely $\alpha_q(K, \omega)$, $\alpha_\Pi(K, \omega)$, $\gamma_\Pi(K, \omega)$ and $\gamma_R(K, \omega)$. These coefficients have no counterparts in the local relations (52)–(54) and they vanish in the collisional limit. The closure relations are calculated as functions of the collisionality parameter $\Gamma = K v_t / v_{ac}$ for different values of $\xi = \frac{\omega}{\sqrt{2}|K|v_t}$. We have used the physical parameters for silicon at room temperature [3]: $4\pi S_{ac}m^2/\hbar^3 \approx 10^7 \text{ s}^{-1}$, $4\pi S_{op}N_{ph}m^2/\hbar^3 \approx 1.7 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$, $v_{ee} = 10^6 \text{ s}^{-1}$, $T_L = 0.026 \text{ eV}$, $y_c = 2$ and $\mu_0/T_0 = -10$. The integrals (A.33) are computed numerically using the standard algorithm [32] of the continued fractions. These fractions are calculated very accurately with a precision of about $|(F_c^{n+1}) - (F_c^n)|/|F_c^n| < 10^{-9}$. For illustration we give in figures 1–8 the real and the imaginary parts of these coefficients.

We can see in figures 1 and 4 that the thermal conductivity K_T and the viscosity coefficient η_V are reduced by the

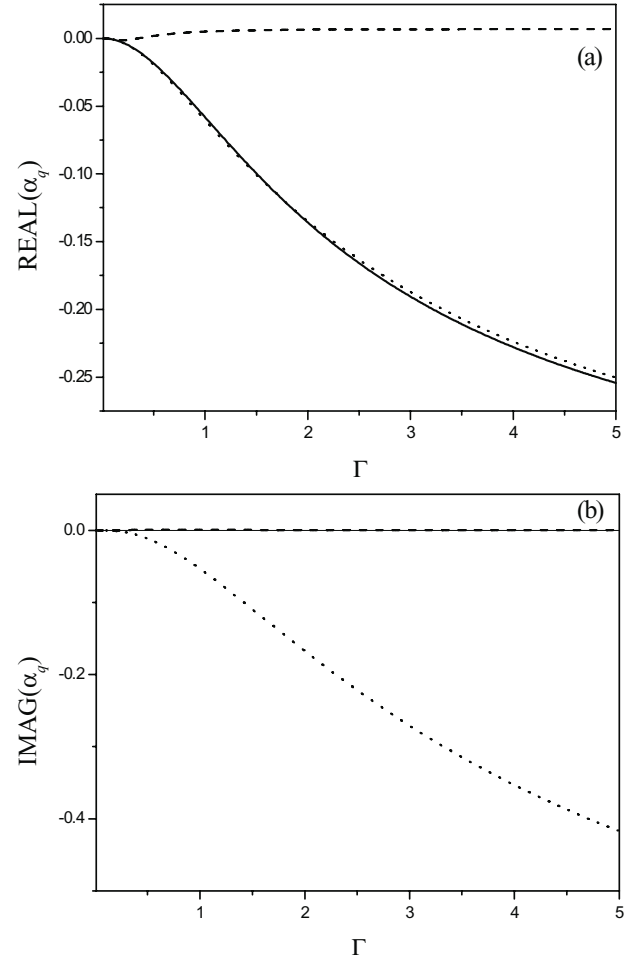


Figure 2. Real part (a) and imaginary part (b) of the V -convective coefficient α_q as a function of the collisionality parameter $\Gamma = K v_t / v_{ac}$ for different values of $\xi = \frac{\omega}{\sqrt{2}|K|v_t}$, 10^{-3} (solid line), 10^{-1} (dotted line) and 10 (dashed line).

nonlocal effects and in the collisional range ($\Gamma \ll 1$) for $\xi > 1$, the imaginary part of these coefficients is comparable to their real parts. On the other hand, for $\xi \ll 1$ (quasi-static transport) and $\Gamma > 1$ (collisionless range), due to purely nonlocal effects, the dissipative transport coefficients, K_T and η_V (figures 1 and 4), present an asymptotic behavior proportional to $1/|K|$. In general the coefficients decrease from the quasi-static regime to the transient regime apart from the coefficient v_J which presents a negligible dependence on ξ . We have found numerically that the Onsager symmetry for the perturbed fluid quantities, J_x and $\frac{\partial T}{\partial x}$, is verified, i.e. $\beta_q(\omega, K) = -\beta_R(\omega, K)/\Gamma$ for arbitrary values of the parameters Γ and ξ . In addition, in the quasi-static limit $\xi = 0$, the Onsager symmetry holds for all the off-diagonal coefficients, $\gamma_\Pi(0, K) = \gamma_R(0, K)/\Gamma$ and $\alpha_q(0, K) = -\alpha_\Pi(0, K)$. It is important to note that the Onsager symmetry obtained with our model partially confirms the reliability of our results. Sometimes in the literature this symmetry is imposed and not retrieved as it is the case in this work.

In real space, the nonlocal expressions of the closure relations $X_{nl}(x, t)$ can be expressed in terms of convolution products, involving a factor constituted by the local expressions of the closure relations $X_l(x, t)$, and kernels Φ

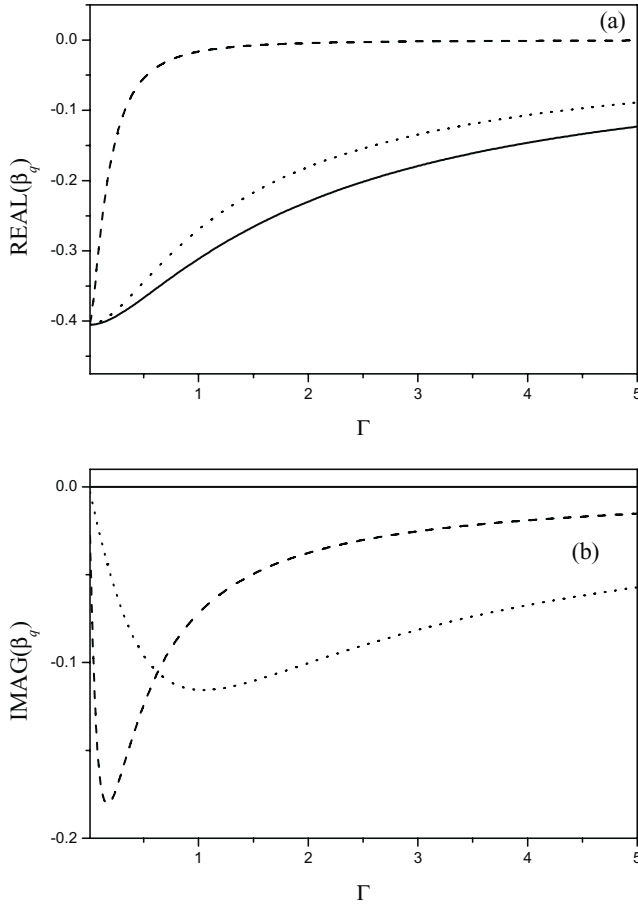


Figure 3. Real part (a) and imaginary part (b) of the J_x -Peltier coefficient β_q as a function of the collisionality parameter $\Gamma = K v_t / v_{ac}$ for different values of $\xi = \frac{\omega}{\sqrt{2}|K|v_t}$, 10^{-3} (solid line), 10^{-1} (dotted line) and 10 (dashed line). Due to the Onsager symmetry $\beta_q = -\beta_R / \Gamma$ where β_R is the electron-lattice thermal coefficient.

which contain the nonlocal effects, i.e.

$$X_{nl}(x, t) = \int \int \Phi(x - x', t - t') X_l(x', t') dx' dt'. \quad (55)$$

In the quasi-static regime ($\Gamma \ll 1$), we can compute the explicit expression of the kernel Φ in the diffusive approximation. This approximation means that we keep the lower order nonlocal terms with respect to the relevant parameter Γ^2 . The continued fractions become

$$\begin{aligned} F_c^n &\approx \frac{1}{v(y) + (2(n+1)^2 / (4(n+1)^2 - 1)) K^2 v_t^2 y / v(y)} \\ &\approx \frac{1}{v(y)} \left(1 - \frac{2(n+1)^2}{4(n+1)^2 - 1} (K v_t y / v(y))^2 \right) \end{aligned} \quad (56)$$

and in the Fourier space the closure relations behave as Lorentzian functions, $[X_{nl}(K) = X_l(K) / (1 + (K \lambda_d)^2)]$, where λ_d is a delocalization length. As a result, in real space, we obtain the kernel

$$\Phi(x, x') = \exp\left(-\frac{|x - x'|}{\lambda_d(x')}\right) / 2\lambda_d(x'). \quad (57)$$

We do not give here the explicit expressions of these weakly nonlocal transport coefficients; we just recall that this

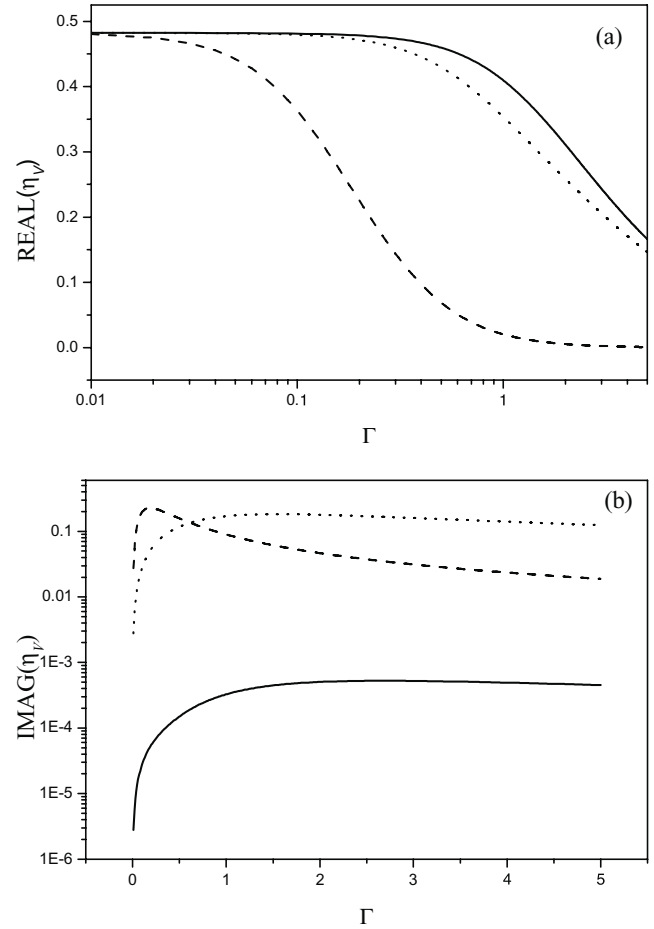


Figure 4. Real part (a) and imaginary part (b) of the V -viscosity coefficient η_v as a function of the collisionality parameter $\Gamma = K v_t / v_{ac}$ for different values of $\xi = \frac{\omega}{\sqrt{2}|K|v_t}$, 10^{-3} (solid line), 10^{-1} (dotted line) and 10 (dashed line).

technique has been widely used in hydrodynamic simulations of laser-created plasmas to describe the thermal transport in steep temperature gradients [33].

5. Comparison with the results of the literature

To our knowledge, there do not exist in the literature experimental data that describe the behavior of the transport coefficients with respect to the collisionality parameter, which constitutes the main result of this paper. Usually, the transport coefficients derived from the theoretical kinetic models and the Monte Carlo simulations are mainly compared to the experimental data in the collisional range, available in the literature. For example, we can cite the recent paper of Smirnov and Jungemann [34], which reported a theoretical work on the semiclassical hole transport in stationary ($\omega = 0$) and homogeneous ($K = 0$) approximations, taking into account the full band structure of a semiconductor with arbitrary oriented and uniform electric and magnetic fields.

Let us compare our results with those derived from theoretical models. We pay more attention to the asymptotic regimes, $K \lambda_{ac} \gg 1$ and $K \lambda_{ac} \rightarrow 0$.

For the ballistic regime, $K \lambda_{ac} \gg 1$, we compare the thermal conductivity in both the nondegenerate and strongly degenerate cases with the results established by

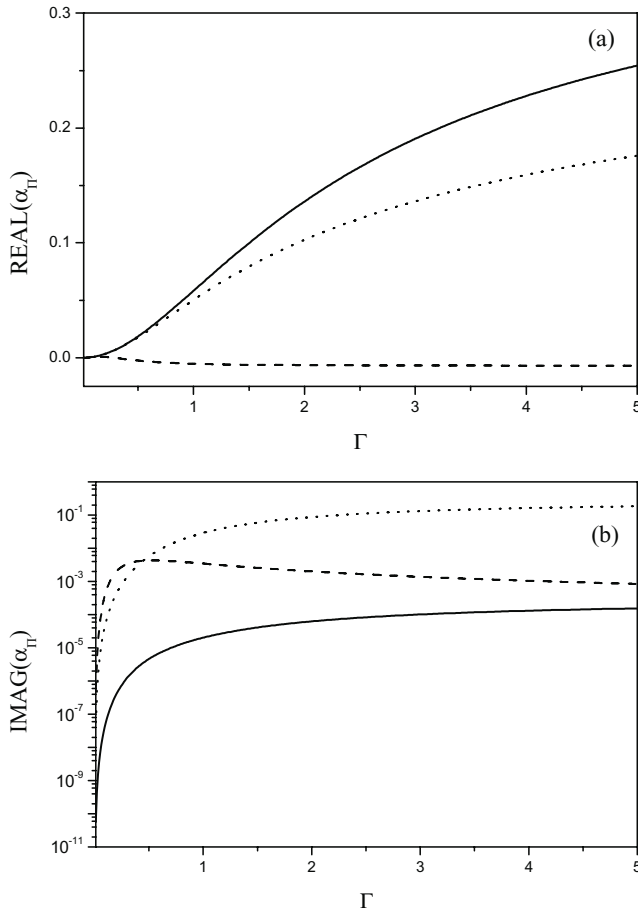


Figure 5. Real part (a) and imaginary part (b) of the anisotropy temperature coefficient α_Π as a function of the collisionality parameter $\Gamma = K v_t / v_{ac}$ for different values of $\xi = \frac{\omega}{\sqrt{2}|K|v_t}$, 10^{-3} (solid line), 10^{-1} (dotted line) and 10 (dashed line).

Greiner *et al* [35]. In this paper, the 1D thermal conductivity is calculated within the correlation function formalism. We can see in figure 9 that in the strongly degenerate case, good agreement is obtained. However, we observe that the curve of [35] exhibits fluctuations for large values of ξ associated with the shape of the correlation function. On the other hand, as shown in figure 10, we can note that qualitative agreement is obtained in the nondegenerate case. We believe that the departure with respect to our results is due to the 3D geometry used in our model. For completeness, we report also the explicit conductivity in the limit $\xi \rightarrow 0$. From equations (A.17), (A.18), (A.21) and (A.39), using the asymptotic expansion of a Sommerfeld integral to compute the integrals, $I_n^{ijk}(\omega, K)$, we obtain after some algebra,

$$K_T^{\text{ndg}}(\omega = 0) = \frac{9}{5} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{n_0 v_t}{|K|}, \quad (58)$$

$$K_T^{\text{dg}}(\omega = 0) = \left(\frac{64\pi^4}{3} \right)^{1/3} \frac{n_0^{2/3} T_0}{|K| h}, \quad (59)$$

for the nondegenerate and degenerate cases, respectively. We retrieve similar expressions (equations (17) and (18) in [35]) as Greiner *et al*, with differences due only to the dimensionality of the system. Note that the 1D nondegenerate

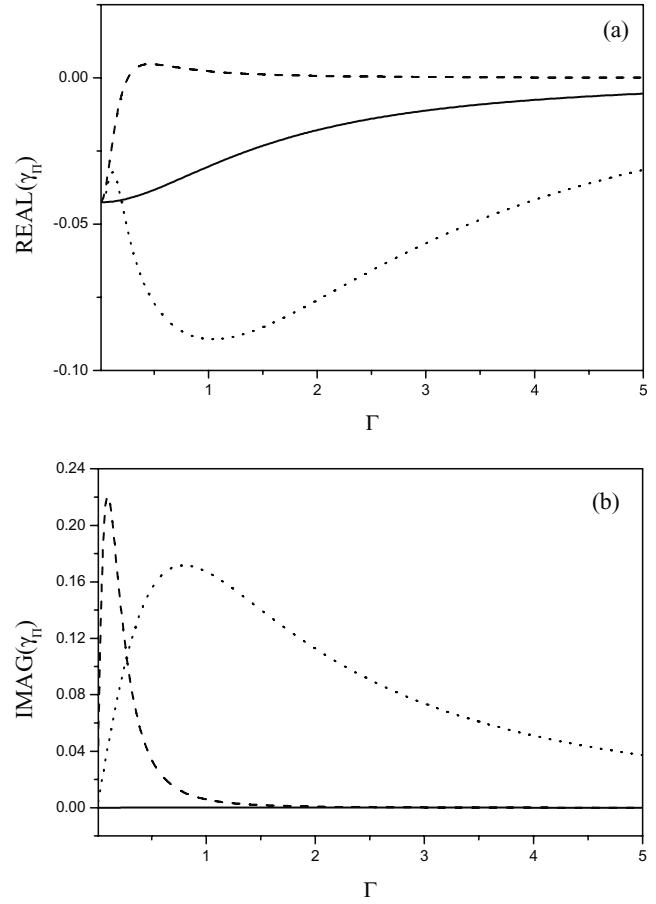


Figure 6. Real part (a) and imaginary part (b) of the J_x -viscosity coefficient γ_Π as a function of the collisionality parameter $\Gamma = K v_t / v_{ac}$ for different values of $\xi = \frac{\omega}{\sqrt{2}|K|v_t}$, 10^{-3} (solid line), 10^{-1} (dotted line) and 10 (dashed line).

thermal conductivity has already been computed from the Vlasov equation by Hammett and Perkins in [36],

$$K_T^{\text{HP}}(\omega = 0) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{n_0 v_t}{|K|}, \quad (60)$$

and this result corresponds to the one derived by Greiner *et al* [35], for $KL = 2$, where L is the active length of the semiconductor device.

Now we consider the other limit $K\lambda_{ac} \rightarrow 0$ and again we compare our results with the literature for the thermal conductivity. In [17], the thermal conductivity is calculated as a function of $\omega\tau_q$, where τ_q is a relaxation time for the heat flux with the use of the 13-moment method. The constitutive quantities are derived as relaxation terms by means of the Grad scheme. The results are given in figure 11 for both the real and the imaginary parts of the thermal conductivity. To carry out the comparison we must express the relation between the macroscopic relaxation time τ_q and the microscopic mean-free-time τ_{ac} . The relation obtained is approximately $\omega\tau_q = 1.322\omega\tau_{ac}$. We can observe good agreement for the real part and qualitative agreement for the imaginary part of the thermal conductivity. The discrepancies between the two results could be due to Grad's method, which accounts for only 13 moments, whereas in our approach we take into account all the anisotropies with the use of the infinite continued fractions.

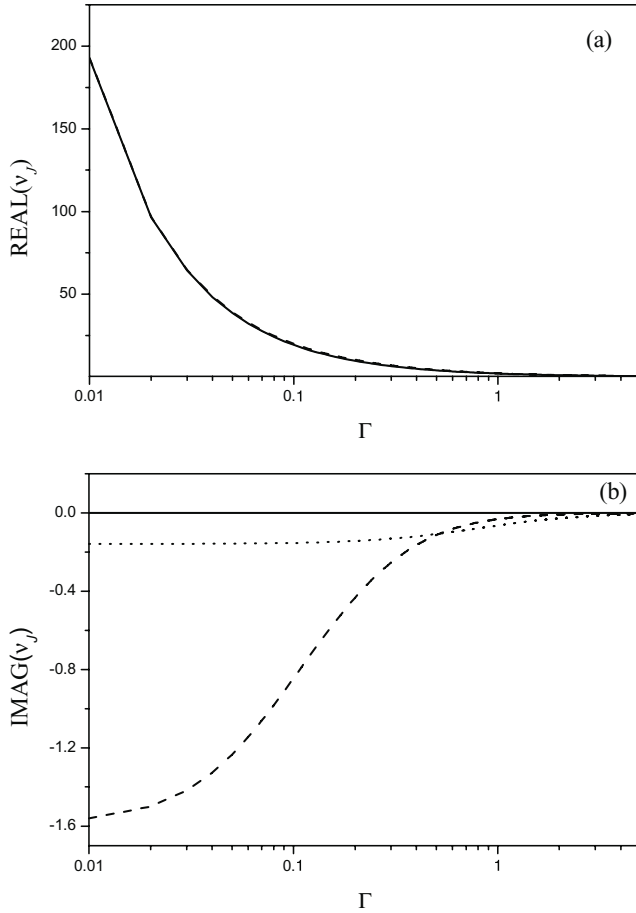


Figure 7. Real part (a) and imaginary part (b) of the J_x -electron-lattice friction coefficient ν_j as function of the collisionality parameter $\Gamma = K v_t / v_{ac}$ for different values of $\xi = \frac{\omega}{\sqrt{2}|K|v_t}$, 10^{-3} (solid line), 10^{-1} (dotted line) and 10 (dashed line).

6. Summary and conclusions

By means of the kinetic theory, we have developed a general formulation of the transport theory including the contribution of all anisotropies of the distribution function. In opposition to the standard Chapman-Enskog method based only on the expansion of the total distribution function in small parameters, $(\frac{\omega}{v}, \frac{|K|v_t}{v}) \ll 1$, the present transport coefficients are valid in the whole collisionality range. The closure relations of the hydrodynamic equations are computed self-consistently without any adjustable free parameters. Accordingly, the hydrodynamic equations are suitable for describing semiconductor devices very far from the equilibrium.

The method of solving the kinetic equation developed in this work consists of transforming the infinite system of anisotropic equations to a single equation with the use of the continued fractions. Some simplifications are introduced in the collision operators in order to solve analytically the BTE. However, the collisional invariance properties of these operators are not affected by these approximations. The total distribution function is computed in the Fourier space as a function of the integrals $I_n^{ijk}(\omega, K)$; we can calculate very accurately the numerical value with standard algorithms.

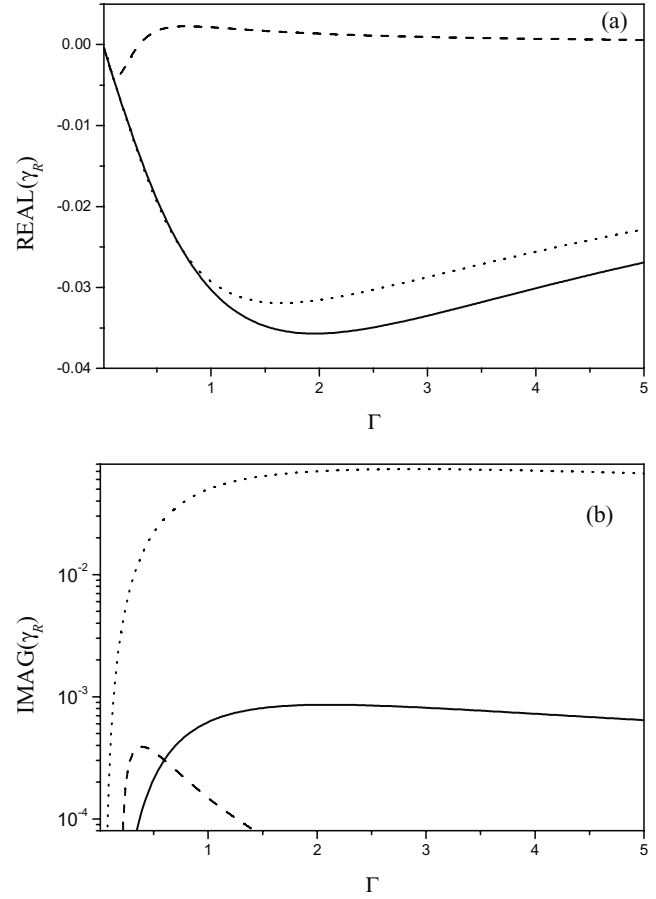


Figure 8. Real part (a) and imaginary part (b) of the V -electron-lattice friction coefficient γ_R as a function of the collisionality parameter $\Gamma = K v_t / v_{ac}$ for different values of $\xi = \frac{\omega}{\sqrt{2}|K|v_t}$, 10^{-3} (solid line), 10^{-1} (dotted line) and 10 (dashed line).

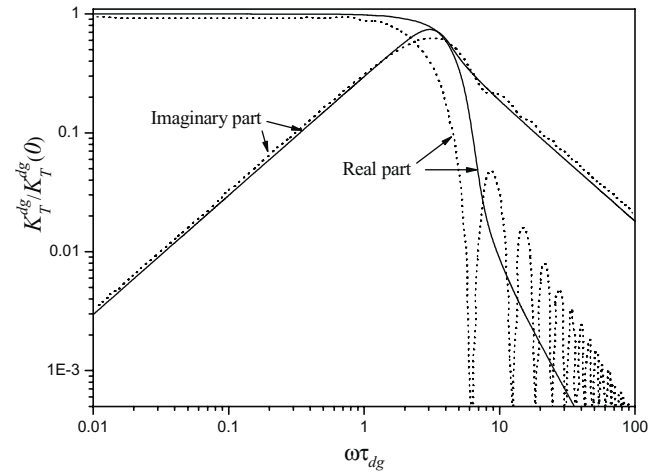


Figure 9. Real and imaginary parts of the ballistic thermal conductivity K_T^{dg} in the degenerate case, as a function of the parameter $\omega\tau_{dg} = \frac{2}{\sqrt{10}}\xi$. The dotted line corresponds to the results of [33]. The chemical potential used is $\frac{\mu_0}{T_0} = 10$.

In our approach, we used the kinetic equation which was linearized for small deviations from the equilibrium state. Thus the derived transport coefficients are strictly speaking valid only for the linear case. This is one of the most significant limitations of our theory. Nevertheless, our

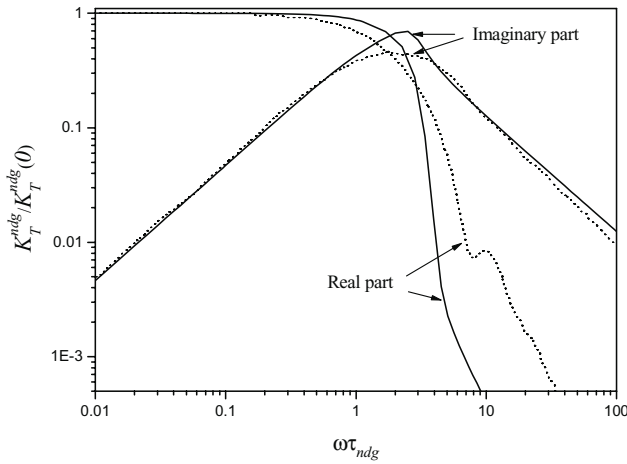


Figure 10. Real and imaginary parts of the ballistic thermal conductivity K_T^{ndg} in the nondegenerate case, as a function of the parameter $\omega\tau_{\text{ndg}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\xi$. The dotted line corresponds to the results of [33].

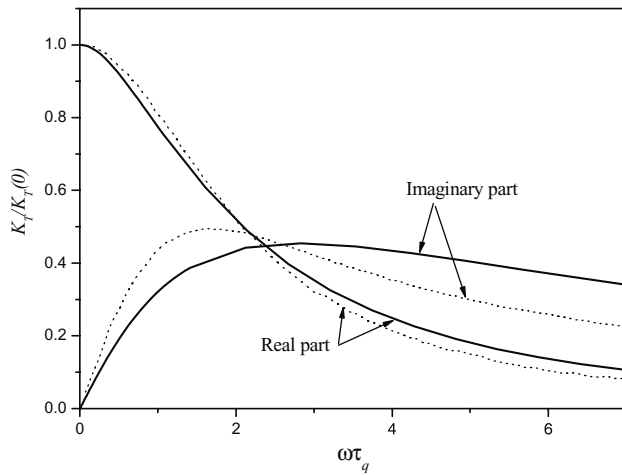


Figure 11. Real and imaginary parts of the thermal conductivity K_T in the limit $K\lambda_{\text{ac}} \rightarrow 0$, as a function of the parameter $\omega\tau_q = 1.322\omega\tau_{\text{ac}}$. The dotted lines correspond to the results of [17]. The chemical potential used is $\frac{\mu_0}{T_0} = 0.5$.

nonlocal results represent a significant improvement over the standard (local) transport coefficients, which are independent of the wavenumber and of the frequency. Furthermore, we believe that the semicollisional closure relations can be fruitfully applied in the nonlinear hydrodynamic equations to describe transport properties of semiconductors far from the local equilibrium.

One of the planned extensions of the present work will be to investigate the nonlinear regime of the transport in submicronic semiconductors with the use of a Boltzmann code, and to compare it with a hydrodynamic code incorporating the nonlocal corrections obtained in the present work.

Acknowledgments

The Agence Universitaire de la Francophonie, Bureau de l'Amérique du Nord (AUF) and project 02 MDU 548 of the Comité Mixte d'Evaluation et de Prospective Algéro-Français

(CMEP) are gratefully acknowledged for partial support. The work of JPM is supported by the National Science and Engineering Research Council of Canada and the Ministère de l'Éducation du Québec.

Appendix A

This appendix is devoted to the computation of the closure relations of the hydrodynamic equations (44)–(46). For this we compute from the BTE the average random velocity condition,

$$M_1^1 = 0, \quad (\text{A.1})$$

the heat flux

$$q_x = \frac{2}{\sqrt{6}F_{1/2}} n_0 T_0 v_t M_1^2, \quad (\text{A.2})$$

the x – x component of the stress tensor

$$\Pi_{xx} = \frac{4}{3\sqrt{5}F_{1/2}} n_0 T_0 M_2^{3/2}, \quad (\text{A.3})$$

the electron–lattice momentum transfer

$$R_x = \frac{4F_1}{3F_{1/2}} \frac{mv_{\text{ac}}}{e} J_x - \frac{\sqrt{2}}{F_{1/2}\sqrt{3}} n_0 m v_t \int_0^\infty y v(y) f_1(y) dy, \quad (\text{A.4})$$

and the electron–lattice energy transfer

$$Q_{\text{inel}} = \frac{n_0 T_0}{F_{1/2}} M_0^{3/2}. \quad (\text{A.5})$$

The moments (A.1)–(A.5) are constituted by linearly independent terms proportional to the thermodynamic potentials, $iK T$ and $iK \tilde{\mu} = iK \mu + eE$, and to the temperature T , the drift velocity V , the gradient of the drift velocity $iK V$ and the current density $J_x = -en_0 V$. Note that we have isolated the contribution due to the drift velocity V , generated by the free streaming operator from the contribution generated only by the collision terms proportional to the current density J_x . As we will see, this splitting allows us to verify the Onsager symmetry of the transport coefficients. Thus, in the more general case, they can be written as

$$M_1^1 = en_0 v_t L_{11} \frac{iK \tilde{\mu}}{|K|T_0} + en_0 v_t L_{12} \frac{iK T}{|K|T_0} + en_0 v_t L_{13} \frac{V}{v_t} - en_0 v_t L_{14} \frac{J_x}{en_0 v_t} = 0, \quad (\text{A.6})$$

$$q_x = -n_0 T_0 v_t L_{21} \frac{iK \tilde{\mu}}{|K|T_0} + n_0 T_0 v_t L_{22} \frac{iK T}{|K|T_0} - n_0 T_0 v_t L_{23} \frac{V}{v_t} - n_0 T_0 v_t L_{24} \frac{J_x}{en_0 v_t}, \quad (\text{A.7})$$

$$\Pi_{xx} = -n_0 T_0 L_{31} \frac{\tilde{\mu}}{T_0} - n_0 T_0 L_{32} \frac{T}{T_0} - n_0 T_0 L_{33} \frac{iK V}{|K|v_t} + n_0 T_0 L_{34} \frac{iK J_x}{|K|en_0 v_t}, \quad (\text{A.8})$$

$$R_x = -n_0 m v_t v_{ac} L_{41} \frac{iK \tilde{\mu}}{|K| T_0} + n_0 m v_t v_{ac} L_{42} \frac{iK T}{|K| T_0} - n_0 m v_t v_{ac} L_{43} \frac{V}{v_t} + L_{44} \frac{m v_{ac}}{e} J_x, \quad (A.9)$$

where L_{ij} are the linear transport coefficients. The expression of the electron-lattice energy transfer Q_{inel} will be computed later on. We can split the calculation of the distribution function into two parts. First, we drop the dependence with respect to J_x and we compute the contributions proportional to the perturbed parameters, T , $\tilde{\mu}$ and V . From equations (32) and (38), after some algebra we deduce the analytic expressions of the first anisotropic component,

$$f_1 = f_1\left(\frac{T}{T_0}\right) + f_1\left(\frac{\tilde{\mu}}{T_0}\right) + f_1\left(\frac{V}{v_t}\right) + f_1\left(\frac{J_x}{n_0 T_0 v_t}\right), \quad (A.10)$$

where

$$f_1\left(\frac{T}{T_0}\right) = -iK v_t \sqrt{\frac{2}{3}} G F_1 y^{1/2} \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \times \frac{\left[I_{5/2}^{1,0,0} ((3/2) F_{1/2} - (1/2) F_{-1/2} (\mu_0/T_0)) - I_{3/2}^{1,0,0} ((5/2) F_{3/2} - (3/2) F_{1/2} (\mu_0/T_0)) \right]}{\left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} \frac{T}{T_0} + iK v_t \sqrt{\frac{2}{3}} G F_1 y^{3/2} \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \times \frac{\left[I_{3/2}^{1,0,0} ((3/2) F_{1/2} - (1/2) F_{-1/2} (\mu_0/T_0)) - I_{1/2}^{1,0,0} ((5/2) F_{3/2} - (3/2) F_{1/2} (\mu_0/T_0)) \right]}{\left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} \frac{T}{T_0}, \quad (A.11)$$

$$f_1\left(\frac{\tilde{\mu}}{T_0}\right) = -\sqrt{\frac{2}{3}} G F_1 y^{1/2} \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \times \frac{\left[(1/2) F_{-1/2} I_{5/2}^{1,0,0} - (3/2) F_{1/2} I_{3/2}^{1,0,0} \right]}{\left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} \times iK v_t \frac{\tilde{\mu}}{T_0} + \sqrt{\frac{2}{3}} G F_1 y^{3/2} \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \times \frac{\left[(1/2) F_{-1/2} I_{3/2}^{1,0,0} - (3/2) F_{1/2} I_{1/2}^{1,0,0} \right]}{\left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} iK v_t \frac{\tilde{\mu}}{T_0}, \quad (A.12)$$

$$f_1\left(\frac{V}{v_t}\right) = \sqrt{\frac{2}{3}} G F_1 y^{1/2} \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \times \frac{\left[\left(\frac{1}{2}\right) F_{-1/2} I_{5/2}^{1,0,0} - \left(\frac{3}{2}\right) F_{1/2} I_{3/2}^{1,0,0} \right]}{\left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} i\omega \frac{V}{v_t}$$

$$- \sqrt{\frac{2}{3}} G F_1 y^{3/2} \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \frac{\left[\left(\frac{1}{2}\right) F_{-1/2} I_{3/2}^{1,0,0} - \left(\frac{3}{2}\right) F_{1/2} I_{1/2}^{1,0,0} \right]}{\left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} i\omega \frac{V}{v_t} - iK v_t \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{8}{15} \left[y^{3/2} F_1 F_2 - \frac{2}{3} K^2 v_t^2 y^{5/2} G (F_1)^2 F_2 \right] \times \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \left(iK v_t \frac{V}{v_t} \right) - iK v_t \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{16}{45} K^2 v_t^2 G F_1 y^{3/2} \times \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \frac{\left(I_{3/2}^{1,0,0} I_{5/2}^{1,1,1} - I_{1/2}^{1,0,0} I_{7/2}^{1,1,1} \right)}{\left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} \left(iK v_t \frac{V}{v_t} \right) \quad (A.13)$$

and $G = (-i\omega + v_0 + K^2 v_t^2 \frac{2}{3} y F_1)^{-1}$.

Now let us compute the dependence of the closure relations with respect to J_x . It is more convenient to work on the ion velocity frame (the laboratory frame) instead of the velocity electron frame as used previously. In this frame the elastic collision operator reads

$$C_{ac}(f) = -v_{ac} y^{1/2} \sum_{n=1}^{\infty} f_n(y) P_n(\theta) - \sqrt{\frac{2}{3}} v_{ac} y \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \frac{J_x}{en_0 v_t} P_1(\alpha) \quad (A.14)$$

and the corresponding distribution function is

$$f_1(J_x) = \sqrt{\frac{2}{3}} v_{ac} \left[y F_1 - \frac{2}{3} K^2 v_t^2 y^2 G (F_1)^2 \right] \times \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \frac{J_x}{(-en_0 v_t)} + K^2 v_t^2 \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2}{3}} v_{ac} G F_1 y^{1/2} \times \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \frac{\left(I_2^{1,1,0} I_{5/2}^{1,0,0} - I_3^{1,1,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}{\left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} \times \frac{J_x}{(-en_0 v_t)} + K^2 v_t^2 \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2}{3}} v_{ac} G F_1 y^{3/2} \times \frac{\partial F_{FD}}{\partial y} \frac{\left(I_3^{1,1,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_2^{1,1,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}{\left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} \frac{J_x}{(-en_0 v_t)}. \quad (A.15)$$

Similarly, the second anisotropic distribution function can be readily deduced from equations (16) and (35), obtaining

$$f_2(y) = -iK v_t \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{15}} y^{1/2} F_2 f_1(y) + iK V \frac{4}{3\sqrt{5}} y F_2 \frac{\partial F_{FD}}{\partial y}. \quad (A.16)$$

Now from equations (A.10)–(A.12) and (A.15), we calculate the expressions of the coefficients L_{ij}

(equations (A.5)–(A.8)),

$$L_{11} = \frac{\left[\begin{aligned} & \left(3F_{1/2} I_{3/2}^{1,0,0} - F_{-1/2} I_{5/2}^{1,0,0} \right) \\ & \left((1/2) F_{-1/2} + (-i\omega + v_0) I_{1/2}^{1,0,0} \right) \end{aligned} \right]}{2F_{1/2} K v_t \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} + \frac{\left[\begin{aligned} & \left(F_{-1/2} I_{3/2}^{1,0,0} - 3F_{1/2} I_{1/2}^{1,0,0} \right) \\ & \left((3/2) F_{1/2} + (-i\omega + v_0) I_{3/2}^{1,0,0} \right) \end{aligned} \right]}{2F_{1/2} K v_t \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}, \quad (\text{A.17})$$

$$L_{12} = \frac{\left(3F_{1/2} I_{3/2}^{1,0,0} - F_{-1/2} I_{5/2}^{1,0,0} \right) \left[\begin{aligned} & \left(\left(\frac{3}{2} \right) F_{1/2} - \left(\frac{1}{2} \right) F_{-1/2} \frac{\mu_0}{T_0} \right) \\ & + (-i\omega + v_0) \left(I_{3/2}^{1,0,0} - \left(\frac{\mu_0}{T_0} \right) I_{1/2}^{1,0,0} \right) \end{aligned} \right]}{2F_{1/2} K v_t \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} + \frac{\left(F_{-1/2} I_{3/2}^{1,0,0} - 3F_{1/2} I_{1/2}^{1,0,0} \right) \left[\begin{aligned} & \left(\left(\frac{5}{2} \right) F_{3/2} - \left(\frac{3}{2} \right) F_{1/2} \frac{\mu_0}{T_0} \right) \\ & + (-i\omega + v_0) \left(I_{5/2}^{1,0,0} - \left(\frac{\mu_0}{T_0} \right) I_{3/2}^{1,0,0} \right) \end{aligned} \right]}{2F_{1/2} K v_t \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}, \quad (\text{A.18})$$

$$L_{13} = \frac{\left(-3F_{1/2} I_{3/2}^{1,0,0} + F_{-1/2} I_{5/2}^{1,0,0} \right) \left[\left(\frac{16}{45} \right) k^2 v_t^2 I_{5/2}^{1,1,1} - i\omega \left(\frac{2}{3} \right) I_{3/2}^{1,1,0} \right]}{2F_{1/2} \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} + \frac{\left(-F_{-1/2} I_{3/2}^{1,0,0} + 3F_{1/2} I_{1/2}^{1,0,0} \right) \left[\left(\frac{16}{45} \right) k^2 v_t^2 I_{7/2}^{1,1,1} - i\omega \left(\frac{2}{3} \right) I_{5/2}^{1,1,0} \right]}{2F_{1/2} \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}, \quad (\text{A.19})$$

$$L_{14} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} v_{ac} I_2^{0,1,0} - \frac{2\sqrt{2}}{3\sqrt{3}} K^2 v_t^2 v_{ac} I_3^{1,2,0} + \frac{2\sqrt{2}}{3\sqrt{3}} K^2 v_t^2 v_{ac} I_{3/2}^{1,1,0} \frac{\left(I_2^{1,1,0} I_{5/2}^{1,0,0} - I_3^{1,1,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}{\left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} + \frac{2\sqrt{2}}{3\sqrt{3}} K^2 v_t^2 v_{ac} I_{5/2}^{1,1,0} \frac{\left(I_3^{1,1,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_2^{1,1,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}{\left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}, \quad (\text{A.20})$$

$$L_{21} = \frac{\left[\left(5F_{3/2} I_{3/2}^{1,0,0} - 3F_{1/2} I_{5/2}^{1,0,0} \right) \left((1/2) F_{-1/2} + (-i\omega + v_0) I_{1/2}^{1,0,0} \right) \right]}{\sqrt{2} F_{1/2} \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} + \frac{\left[\left(3F_{1/2} I_{3/2}^{1,0,0} - 5F_{3/2} I_{1/2}^{1,0,0} \right) \left((3/2) F_{1/2} + (-i\omega + v_0) I_{3/2}^{1,0,0} \right) \right]}{\sqrt{2} F_{1/2} \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}, \quad (\text{A.21})$$

$$L_{22} = \frac{\left(5F_{3/2} I_{3/2}^{1,0,0} - 3F_{1/2} I_{5/2}^{1,0,0} \right) \left[\begin{aligned} & \left(\left(\frac{3}{2} \right) F_{1/2} - \left(\frac{1}{2} \right) F_{-1/2} \left(\frac{\mu_0}{T_0} \right) \right) \\ & + (-i\omega + v_0) \left(I_{3/2}^{1,0,0} - \left(\frac{\mu_0}{T_0} \right) I_{1/2}^{1,0,0} \right) \end{aligned} \right]}{2F_{1/2} K v_t \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} + \frac{\left(3F_{1/2} I_{3/2}^{1,0,0} - 5F_{3/2} I_{1/2}^{1,0,0} \right) \left[\begin{aligned} & \left(\left(\frac{5}{2} \right) F_{3/2} - \left(\frac{3}{2} \right) F_{1/2} \left(\frac{\mu_0}{T_0} \right) \right) \\ & + (-i\omega + v_0) \left(I_{5/2}^{1,0,0} - \left(\frac{\mu_0}{T_0} \right) I_{3/2}^{1,0,0} \right) \end{aligned} \right]}{2F_{1/2} K v_t \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}, \quad (\text{A.22})$$

$$L_{23} = \frac{\left(-5F_{3/2} I_{3/2}^{1,0,0} + 3F_{1/2} I_{5/2}^{1,0,0} \right) \left[(16/45) k^2 v_t^2 I_{5/2}^{1,1,1} - i\omega (2/3) I_{3/2}^{1,1,0} \right]}{2F_{1/2} \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} + \frac{\left(-3F_{1/2} I_{3/2}^{1,0,0} + 5F_{3/2} I_{1/2}^{1,0,0} \right) \left[(16/45) k^2 v_t^2 I_{7/2}^{1,1,1} - i\omega (2/3) I_{5/2}^{1,1,0} \right]}{2F_{1/2} \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}, \quad (\text{A.23})$$

$$L_{24} = \frac{2}{3F_{1/2}} v_{ac} I_3^{0,1,0} - \frac{4}{9F_{1/2}} K^2 v_t^2 v_{ac} I_4^{1,2,0} + \frac{4}{9F_{1/2}} K^2 v_t^2 v_{ac} I_{5/2}^{1,1,0} \frac{\left(I_2^{1,1,0} I_{5/2}^{1,0,0} - I_3^{1,1,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}{\left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} + \frac{4}{9F_{1/2}} K^2 v_t^2 v_{ac} I_{7/2}^{1,1,0} \frac{\left(I_3^{1,1,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_2^{1,1,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}{\left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}, \quad (\text{A.24})$$

$$L_{31} = \frac{8K^2 v_t^2 I_{5/2}^{1,1,1} \left(F_{-1/2} I_{5/2}^{1,0,0} - 3F_{1/2} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}{45F_{1/2} \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} + \frac{8K^2 v_t^2 I_{7/2}^{1,1,1} \left(-F_{-1/2} I_{3/2}^{1,0,0} + 3F_{1/2} I_{1/2}^{1,0,0} \right)}{45F_{1/2} \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}, \quad (\text{A.25})$$

$$L_{32} = \frac{8K^2 v_t^2 I_{5/2}^{1,1,1} \left[\begin{aligned} & I_{5/2}^{1,0,0} \left(3F_{1/2} - F_{-1/2} (\mu_0/T_0) \right) \\ & - I_{3/2}^{1,0,0} \left(5F_{3/2} - 3F_{1/2} (\mu_0/T_0) \right) \end{aligned} \right]}{45F_{1/2} \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} + \frac{8K^2 v_t^2 I_{7/2}^{1,1,1} \left[\begin{aligned} & -I_{3/2}^{1,0,0} \left(3F_{1/2} - F_{-1/2} (\mu_0/T_0) \right) \\ & + I_{1/2}^{1,0,0} \left(5F_{3/2} - 3F_{1/2} (\mu_0/T_0) \right) \end{aligned} \right]}{45F_{1/2} \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}, \quad (\text{A.26})$$

$$L_{33} = \frac{8|K|v_t}{45F_{1/2}} \left\{ -I_{5/2}^{001} - (i\omega + v_0) \left[-i\omega I_{5/2}^{1,1,1} - \frac{8}{15} K^2 v_t^2 I_{7/2}^{1,1,2} \right] \right\}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{16K^3 v_t^{1,1,1} \left[\begin{aligned} & I_{5/2}^{1,0,0} \left(-i\omega(2/3) I_{3/2}^{1,1,0} + (16/45) K^2 v_t^2 I_{5/2}^{1,1,1} \right) \\ & - I_{3/2}^{1,0,0} \left(-i\omega(2/3) I_{5/2}^{1,1,0} + (16/45) K^2 v_t^2 I_{7/2}^{1,1,1} \right) \end{aligned} \right]}{45 F_{1/2} \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} \\
& + \frac{16K^3 v_t^3 I_{7/2}^{1,1,1} \left[\begin{aligned} & - I_{3/2}^{1,0,0} \left(-i\omega(2/3) I_{5/2}^{1,1,0} + (16/45) K^2 v_t^2 I_{5/2}^{1,1,1} \right) \\ & + I_{1/2}^{1,0,0} \left(-i\omega(2/3) I_{5/2}^{1,1,0} + (16/45) K^2 v_t^2 I_{7/2}^{1,1,1} \right) \end{aligned} \right]}{45 F_{1/2} \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}, \quad (A.27)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
L_{34} = & \frac{32K^2 v_t^2}{45\sqrt{2} F_{1/2}} \frac{v_{ac}}{\sqrt{2}|K| v_t} I_3^{0,1,1} - \frac{32\sqrt{2}}{135 F_{1/2}} \frac{v_{ac}}{\sqrt{2}|K| v_t} I_4^{1,2,1} \\
& + \frac{32\sqrt{2}}{135 F_{1/2}} \frac{v_{ac}}{\sqrt{2}|K| v_t} I_{7/2}^{1,1,1} \frac{\left(I_3^{1,1,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_2^{1,1,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}{\left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} \\
& + \frac{32\sqrt{2}}{135 F_{1/2}} \frac{v_{ac}}{\sqrt{2}|K| v_t} I_{5/2}^{1,1,1} \frac{\left(I_2^{1,1,0} I_{5/2}^{1,0,0} - I_3^{1,1,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}{\left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}, \quad (A.28)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
L_{41} = & \frac{2|K| v_t}{3 F_{1/2}} I_2^{0,1,0} + \frac{4K^3 v_t^3}{9 F_{1/2}} I_3^{1,2,0} \\
& + \frac{4K^3 v_t^3}{9 F_{1/2}} \frac{I_2^{1,2,0} \left(I_{3/2}^{100} I_{5/2}^{100} - I_{5/2}^{100} I_{3/2}^{100} \right)}{\left(I_{5/2}^{100} I_{1/2}^{100} - I_{3/2}^{100} I_{3/2}^{100} \right)} \\
& + \frac{4K^3 v_t^3}{9 F_{1/2}} \frac{I_3^{1,2,0} \left(I_{5/2}^{100} I_{1/2}^{100} - I_{3/2}^{100} I_{3/2}^{100} \right)}{\left(I_{5/2}^{100} I_{1/2}^{100} - I_{3/2}^{100} I_{3/2}^{100} \right)}, \quad (A.29)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
L_{42} = & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3} F_{1/2}} \\
& \times \left\{ \frac{\left(4F_1 I_{3/2}^{1,0,0} - 2F_0 I_{5/2}^{1,0,0} \right) \left[\begin{aligned} & (3/2) F_{1/2} - (1/2) F_{-1/2} (\mu_0 / T_0) \\ & + (-i\omega + v_0) \left(I_{3/2}^{1,0,0} - (\mu_0 / T_0) I_{1/2}^{1,0,0} \right) \end{aligned} \right]}{|K| v_t \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} \right\} \\
& + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3} F_{1/2}} \\
& \times \left\{ \frac{\left(2F_0 I_{3/2}^{1,0,0} - 4F_1 I_{1/2}^{1,0,0} \right) \left[\begin{aligned} & (5/2) F_{3/2} - (3/2) F_{1/2} (\mu_0 / T_0) \\ & + (-i\omega + v_0) \left(I_{5/2}^{1,0,0} - (\mu_0 / T_0) I_{3/2}^{1,0,0} \right) \end{aligned} \right]}{|K| v_t \left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} \right\} \quad (A.30)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
L_{43} = & \frac{1}{2 F_{1/2}} \left(4F_1 I_{3/2}^{1,0,0} - 2F_0 I_{5/2}^{1,0,0} \right) \\
& \times \left((16/45) K^2 v_t^2 I_{5/2}^{1,0,0} - \frac{2}{3} i\omega I_{3/2}^{1,1,0} \right) \\
& + \frac{1}{2 F_{1/2}} \left(2F_0 I_{3/2}^{100} - 4F_1 I_{1/2}^{100} \right) \\
& \times \left((16/45) K^2 v_t^2 I_{5/2}^{100} - \frac{2}{3} i\omega I_{5/2}^{1,1,0} \right), \quad (A.31)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
L_{44} = & \frac{4F_1}{3 F_{1/2}} + \frac{2}{3 F_{1/2}} v_{ac} I_{5/2}^{0,1,0} - \frac{4}{9 F_{1/2}} v_{ac} K^2 v_t^2 I_{7/2}^{1,2,0} \\
& + \frac{4}{9 F_{1/2}} v_{ac} K^2 v_t^2 I_2^{1,1,0} \frac{\left(I_2^{1,1,0} I_{5/2}^{1,0,0} - I_3^{1,1,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}{\left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)} \\
& + \frac{4}{9 F_{1/2}} v_{ac} K^2 v_t^2 I_3^{1,1,0} \frac{\left(I_3^{1,1,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_2^{1,1,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}{\left(I_{5/2}^{1,0,0} I_{1/2}^{1,0,0} - I_{3/2}^{1,0,0} I_{3/2}^{1,0,0} \right)}, \quad (A.32)
\end{aligned}$$

where

$$I_n^{i,j,k} (T_{0,L}) = \int_0^\infty y^n (G)^i (F_c^1)^j (F_c^2)^k \frac{\partial F_{FD} (T_{0,L})}{\partial y} dy. \quad (A.33)$$

For the energy transfer production term, the computation is more straightforward. It is defined by

$$Q_{inel} = v_{op0} n_0 T_0 \left(M_0^{3/2} - M_{FD}^{3/2} (T_L) \right). \quad (A.34)$$

More explicitly, it reads

$$\begin{aligned}
Q_{inel} = & v_{op0} n_0 T_0 \left\{ \left[\frac{3}{2} \frac{\mu_0}{T_0} (F_{1/2} (T_0) - \theta F_{1/2} (T_R)) \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{5}{2} (\theta F_{3/2} (T_R) - F_{3/2} (T_0)) \right] \frac{T}{T_0} \right\} + v_{op0} n_0 T_0 \\
& \times \left\{ \left[\frac{3}{2} (\theta F_{1/2} (T_R) - F_{1/2} (T_0)) \right] \frac{\mu}{T_0} \right\}. \quad (A.35)
\end{aligned}$$

We should note that the production term Q_{inel} is a local collisional term. This is due to the approximations used in the inelastic operator (27) defined with a constant frequency $v_{op0} (v_c)$. We can get a nonlocal expression if we keep the energy dependence of the collision frequency.

Finally, we express formally the closure relations of the hydrodynamic equations by eliminating the electrochemical potential in equations (A.7)–(A.9) with the use of the condition (A.6), obtaining

$$q_x = -K_T \sqrt{2} \frac{n_0 T_0 v_t^2}{v_{ac}} \frac{iK T}{T_0} + \alpha_q n_0 T_0 v_t \frac{V}{v_t} - \beta_q n_0 T_0 v_t \frac{J_x}{en_0 v_t}, \quad (A.36)$$

$$\begin{aligned}
\Pi_{xx} = & \alpha_\Pi n_0 T_0 \frac{T}{T_0} - \eta_V \sqrt{2} \frac{n_0 T_0 v_t}{v_{ac}} \frac{iK V}{v_t} \\
& + \gamma_\Pi \sqrt{2} \frac{n_0 T_0 v_t}{v_{ac}} iK \frac{J_x}{en_0 v_t}, \quad (A.37)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
R_x = & \beta_R \sqrt{2} n_0 m v_t^2 \frac{iK T}{T_0} + \gamma_R n_0 m v_t v_{ac} \frac{V}{v_t} \\
& - v_J n_0 m v_t v_{ac} \frac{J_x}{en_0 v_t}, \quad (A.38)
\end{aligned}$$

where the dimensionless semicollisional transport coefficients in the (ω, K) space are the thermal conductivity

$$K_T = -\frac{L_{21} L_{12}}{L_{11}} - L_{22}, \quad (A.39)$$

the V -viscosity coefficient

$$\eta_V = \frac{L_{13}L_{31}}{L_{11}} + L_{33}, \quad (\text{A.40})$$

the J_x -electron-lattice friction coefficient

$$\nu_J = \frac{L_{41}L_{14}}{L_{11}} - L_{41}, \quad (\text{A.41})$$

the V -convective coefficient

$$\alpha_q = \frac{L_{21}L_{13}}{L_{11}} - L_{23}, \quad (\text{A.42})$$

the anisotropy temperature coefficient

$$\alpha_\Pi = \frac{L_{12}L_{31}}{L_{11}} - L_{32}, \quad (\text{A.43})$$

the J_x -Peltier coefficient

$$\beta_q = \frac{L_{21}L_{14}}{L_{11}} + L_{24}, \quad (\text{A.44})$$

the electron-lattice thermal coefficient

$$\beta_R = \frac{L_{41}L_{12}}{L_{11}} + L_{42}, \quad (\text{A.45})$$

the J_x -viscosity coefficient

$$\gamma_\Pi = \frac{L_{31}L_{14}}{L_{11}} + L_{34}, \quad (\text{A.46})$$

and the V -electron-lattice friction coefficient

$$\gamma_R = \frac{L_{41}L_{13}}{L_{11}} - L_{43}. \quad (\text{A.47})$$

Due to the splitting of the transport terms proportional to the velocity into two contributions in equations (A.36)–(A.38), the Peltier coefficient, the viscosity coefficient and the electron-lattice friction coefficient are given respectively by $\beta = \beta_q + \alpha_q$, $\eta = \eta_V + \gamma_\Pi$ and $\nu = \nu_J + \gamma_R$.

The last closure relation is the inelastic term (A.34) that we have to express as functions of the perturbed fluid parameters, T and n , with the use of the definition of the perturbed density,

$$\frac{n}{n_0} = \left(\frac{3}{2} - \frac{\mu_0}{T_0} \frac{F_{-1/2}}{2F_{1/2}} \right) \frac{T}{T_0} + \frac{F_{-1/2}}{2F_{1/2}} \frac{\mu}{T_0}.$$

References

- [1] van Roosbroeck W V 1950 *Bell Syst. Tech. J.* **29** 560–607
Gummel H K 1964 *IEEE Trans. Electron Devices* **11** 455–65

- [2] Lundstrom M S 1990 *Fundamentals of Carrier Transport* (Reading, MA: Addison-Wesley)
Liboff R L 1969 *The Theory of Kinetic Equations* (New York: Wiley)
[3] Jacoboni C and Reggiani L 1983 *Rev. Mod. Phys.* **55** 645
[4] Ventura D, Gnudi A, Baccarani G and Odeh F 1992 *Appl. Math. Lett.* **5** 85–90
[5] Goldman N, Henrickson L and Frey J 1991 *Solid-State Electron.* **34** 389–96
[6] Chapman S and Cowling T G 1961 *Mathematical Theory of Non-Uniform Gases* (Cambridge: Cambridge University Press)
[7] Grad H 1963 *Phys. Fluids* **6** 147
[8] Trovato M and Reggiani L 2000 *Phys. Rev. B* **61** 16667
[9] Anile A M and Pennesi S 1992 *Phys. Rev. B* **46** 13186
[10] Anile A M and Muscato O 1995 *Phys. Rev. B* **51** 16728
[11] Anile A M and Trovato I M 1997 *Phys. Lett. A* **230** 388
[12] Trovato M and Falsaperla P 1998 *Phys. Rev. B* **57** 4456
[13] Trovato M and Reggiani L 1999 *J. Appl. Phys.* **85** 4050
[14] Liotta S F and Struchtrup H 2000 *Solid-State Electron.* **44** 95
[15] Struchtrup H 2000 *Physica A* **275** 229
[16] Ben Abdallah N, Desvillettes L and Génieys S 2000 *J. Stat. Phys.* **98** 835
[17] Rangel-Huerta A and Velasco R M 2002 *Physica A* **308** 161
[18] Vidal F, Matte J P, Casanova M and Larroche O 1995 *Phys. Plasmas* **2** 1412
[19] Alouani Bibi F and Matte J-P 2002 *Phys. Rev. E* **66** 066414
[20] Young P E, Baldis H A, Drake R P, Campbell E M and Estabrook K G 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 2336
[21] Young P E 1991 *Phys. Fluids B* **3** 2331
[22] Epperlein E M, Rickard G J and Bell A R 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 2453
[23] Epperlein E M and Short R W 1992 *Phys. Fluids B* **4** 2211
[24] Spitzer L and Härm R 1953 *Phys. Rev.* **89** 977
[25] Uehling E A and Uhlenbeck G E 1933 *Phys. Rev.* **43** 552
[26] Kaniadakis G 2001 *Phys. Scr. A* **296** 405
[27] Wingreen N S, Stanton C J and Wilkins J W 1986 *Phys. Rev. Lett.* **57** 1084
[28] Stubbe P and Sukhorukov A I 1995 *Phys. Plasmas* **2** 4059
[29] Bychenkov V Y, Myatt J, Rozmus W and Tikhonchuk V T 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 4405
Bendib A, Matthieussent G and Bouzid F 2002 *Phys. Plasmas* **9** 35
Brantov A V, Bychenkov V Y, Rozmus W and Capjack C E 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 125002
[30] Bendib A and Luciani J F 1987 *Phys. Fluids* **30** 1353
[31] Braginskii S I 1965 Transport processes in a plasma *Review of Plasma Physics* vol 1 ed M A Leontovich (New York: Consultants Bureau) p 205
[32] Abramowitz M and Stegun I A (eds) 1970 *Handbook of Mathematical Functions* (New York: Dover) p 19
[33] Luciani J F, Mora P and Pellat R 1985 *Phys. Fluids* **28** 835
Bendib A, Luciani J F and Matte J P 1988 *Phys. Fluids* **31** 711
Bendib A and Bendib K 1999 *Phys. Plasmas* **6** 1500
[34] Smirnov S and Jungemann C 2006 *J. Appl. Phys.* **99** 63707
[35] Greiner A, Reggiani L, Kuhn T and Varani L 1997 *Phys. Rev. Lett.* **6** 1114
[36] Hammett G W and Perkins F W 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 3019