

Modèles avec masses effectives pour les fils quantiques

Clément JOURDANA, Institut de Mathématiques de Toulouse, IMATI-CNR

Paola PIETRA, IMATI-CNR

Naoufel BEN ABDALLAH, Institut de Mathématiques de Toulouse

L'objectif de ce travail est la modélisation mathématique des fils quantiques. Un tel composant est constitué d'un empilement périodique d'ions dans la direction de transport supposée très grande comparée à la section du fil où un nombre fini d'ions est présent. Une approximation, dite approximation de la masse effective, consiste à prendre en compte de manière moyenne la périodicité du réseau cristallin. Pour cela, la période du cristal doit être très petite comparée à l'échelle de longueur caractéristique. Si ceci est vrai dans la direction longitudinale du fil, ce n'est pas le cas pour la direction transversale.

Dans ce cadre, un modèle mathématique a été dérivé et simulé permettant d'obtenir une description de la nature quantique du transport. En utilisant une décomposition en fonctions enveloppes, nous étendons [1] pour obtenir un modèle avec masses effectives longitudinales. Ce modèle consiste à résoudre, pour chaque bande, une équation de Schrödinger contenant des paramètres dépendant directement du dispositif étudié. Dans une première partie, nous résolvons un problème aux valeurs propres pour des fonctions de Bloch généralisées. Ainsi, nous obtenons un certain nombre de paramètres physiques (notamment les bandes d'énergies et les masses effectives) qui sont intrinsèques au dispositif choisi. Dans une deuxième partie, nous incorporons ces paramètres dans les équations de transport en 1D et nous couplons le tout avec une équation de Poisson en 3D décrivant le potentiel électrostatique.

Le transport est résolu pour un FET (Field Effect Transistor) contenant une zone active de 10nm encadrée par deux réservoirs à électrons fortement dopés (appelés "Source" et "Drain"). Dans ces régions fortement dopées, les collisions influencent fortement le transport des charges. Un modèle diffusif doit alors être envisagé. L'idée de base est d'adapter [2] au cas d'un nanofil. Ainsi, nous avons dérivé de manière formelle un modèle diffusif fluide-quantique de transport pour les nanofils. Nous avons également obtenu des résultats théoriques d'existence de solutions dans un cadre fonctionnel précis. Finalement, il est intéressant de coupler spatialement ce modèle fluide-quantique avec le modèle purement quantique, suivant [3]. Les régions du dispositif où les effets quantiques sont profondément localisés sont décrites par le modèle purement quantique tandis que les régions fortement dopées où le transport est collisionnel sont modélisées par le modèle diffusif. Des conditions de connection aux interfaces permettent le couplage.

Finalement, des simulations numériques sont réalisées afin de tester la capacité de ce modèle à décrire le transport des électrons dans une structure fortement confinée. Les paramètres physiques entrant en jeu étant complexes, nous avons décidé d'étudier un nanotube de carbone ultra simplifié (comportant 12 atomes dans la section transversale supposée carré).

Références

- [1] N. BEN ABDALLAH, L. BARLETTI, *Quantum transport in crystals : effective-mass theorem and k-p Hamiltonians*, Preprint.
- [2] N. BEN ABDALLAH, F. MÉHATS, N. VAUCHELET, *Diffusive transport of partially quantized particles: existence, uniqueness and long time behaviour*, Proc. Edinb. Math. Soc., 49:513-549, 2006.
- [3] M. BARO, N. BEN ABDALLAH, P. DEGOND, A. EL AYYADI, *A 1D coupled Schrödinger drift-diffusion model including collisions*, J. Comp. Physics, 203(1):129-153, 2005.

Clément JOURDANA, IMATI-CNR, Via Ferrata 1, 27100 Pavia, Italie

clement.jourdana@math.univ-toulouse.fr

Paola PIETRA, IMATI-CNR, Via Ferrata 1, 27100 Pavia, Italie

pietra@imati.cnr.it

Naoufel BEN ABDALLAH, Institut de Mathématiques de Toulouse, Université Paul Sabatier, 118 route de Narbonne, 31062 Toulouse Cedex 9