UNIVERSITÉ DE NANTES
FACULTÉ DES SCIENCES ET DES TECHNIQUES

ANALYSE MATHÉMATIQUE D'ÉQUATIONS DE SEMI-CONDUCTEURS AVEC MOBILITÉS NON CONSTANTES ET IDENTIFICATION DES FRONTIÈRES LIBRES DANS LES JONCTIONS PN

THÈSE DE DOCTORAT

École doctorale de mathématiques de l'Ouest
Discipline : MATHÉMATIQUES

présentée
et soutenue publiquement par

Abdellatif ELLABIB

le 20 juin 2000, devant le jury ci-dessous

Abdeljalil NACHAOUI	Maître de conférence • Université de Nantes
Peter MARKOWICH	Professeur • Université de Vienne Autriche
Americo MARROCCO	Directeur de Recherche • INRIA Rocquencourt
Catherine BOLLEY	Professeur • Ecole Centrale de Nantes
François JAUBERTEAU	Professeur • Université de Nantes
Nabil NASSIF	Professeur • Université de Reims

Directeur de thèse : M. Abdeljalil NACHAOUI

Remerciements

Je tiens à exprimer ma reconnaissance et ma gratitude à A. Nachaoui qui a su me proposer un sujet très enrichissant et a assuré la direction de cette thèse. Sa compétence mathématique, les soutiens et encouragements qui m'a accordé.

Je remercie M. P. Markowich et M. A. Marrocco pour l'attention et l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail et pour m'avoir fait l'honneur de rapporter sur le manuscrit. Merci également à C. Bolley, F. Jauberteau et N. Nassif d'avoir accepté de participer au jury de cette thèse. Merci à A. Ziani de son aide pendant la rédaction de cette thèse.

Je remercie le laboratoire de Mathématiques de l'Université de Nantes qui m'a permis de terminer cette thèse dans les meilleures conditions. Mes remerciements vont aussi à l'école doctorale de l'Ouest qui a pu m'accorder de voyager et de participer à des congrès.

Enfin, je m'adresse mes sincères remerciements à tous ceux qui ont contribué à rendre l'environnement de cette thèse agréable. Merci à Brigitte, Colette et Martine pour leur bonne humeur.

Je ne saurais clore ces remerciements sans en adresser à ma mère, mon père, mes soeurs et mes frères qui m'ont rapporté tout leur amour et m'ont encouragé constamment dans les moments difficiles tout au long de ces années de thèse. Je n'oublierai pas ceux qui m'ont soutenue, et aidée de très près, je pense à Saïd et Malika.

Table des matières

Table des figures

Liste des tableaux

Introduction

Éléments sur l'analyse mathématique

Nous citons brièvement les principaux auteurs qui ont étudié la régularité, l'existence et l'unicité de solutions du modèle dérive-diffusin (DD).

La régularité (H^2 ou $H^{2+\varepsilon}$) supposée par certains auteurs, voir [84, 96], ne correspond pas aux dispositifs fréquents. En effet, certaines conditions aux limites mixtes (Dirichlet-Neumann) se font à angles plats. Dans ce cas, les solutions de ce modèle ne sont plus dans $H^2(\Omega)$ mais appartiennent à $W^{1,p}(\Omega)$ ($p < 4$), voir [57].

La preuve de l'existence de solutions est essentiellement basée sur le théorème du point fixe de Schauder [60, 61, 75, 77]. D'autres résultats utilisant la théorie du degré de Leray-Schauder sont présentés dans [57, 84]. Dans le cas où le terme d'avalanche est non nul, la difficulté réside du fait que l'on ne peut appliquer un principe du maximum sur les deux équations de continuité. Dans [78], Markowich a obtenu un résultat d'existence pour une diode mono-dimensionnelle en polarisation inverse. Plus récemment Freshe et Naumann [43] ont établit un résultat qui permet de prouver l'existence d'une solution en considérant le dopage dans $L^6(\Omega)$, le relèvement des données aux bords associées aux trous et électrons dans $W^{1,6}(\Omega)$ et celui de la donnée aux bords du potentiel est dans $W^{1,3}(\Omega)$.

Les résultats d'unicité sont fortement liés aux données du problème comme le dopage, mobilités et le terme de génération-recombinaison. Pour chacune de ces données, on peut exhiber différents cas ou modèles pour lesquels des solutions multiples ont été obtenues. Dans le cas mono-dimensionnel plusieurs exemples numériques de solutions multiples existent, voir [85, 99, 117]. Dans [99], Rubinstein obtient numériquement et en utilisant le théorème de Newton-Kantorovich des solutions multiples dans le cas d'un thyristor polarisé en direct. Dans [117], Steinruck élargit l'étude de Rubinstein au cas de termes de génération-recombinaison non nuls. Dans [5], Alabau obtient une méthode constructive au sens où elle donne un algorithme explicite pour construire des exemples de dopage pour lesquels il y a multiplicité de solutions. L'unicité est obtenue en général pour des cas spécifiques tels que les semi-conducteurs polarisés en sens inverse, pour des géométries particulières, voir [6, 73, 92], ou dans le cas des conditions de bord rapprochant le dispositif de l'état d'équilibre, voir [66, 75, 92]. Dans le cas où le semi-conducteur est dans un état voisin de l'équilibre certains résultats d'unicité sont connus, voir [77, 84, 92]. Dans [84], Mock a démontré l'unicité des solutions pour des différences de potentiel suffisamment petites dans le cas multidimensionnel avec un terme de génération-recombinason nul. Nachaoui et Nassif

[92] ont démontré ce résultat en tenant compte de la régularité $W^{1,p}(\Omega)$ avec $1 < p < 4$ des solutions. Markowich [77] a étendu le résultat de Mock en montrant l'unicité locale dans le cas d'un terme de génération-recombinaison non nul et le terme d'avalanche nul. Dans les résultats d'unicité au voisinage de l'équilibre, il n'y a aucune restriction sur le dopage alors que dans le cas général si l'on souhaite des résultats d'unicité en dehors de ce voisinage, il est nécessaire de faire des hypothèses sur le dopage, voir [12, 40, 46, 47, 92, 125].

Certains auteurs se sont intéressés à la structure de la solution par des méthodes de perturbations singulières (voir [18, 28, 104]). Ces méthodes ont permis la distinction entre deux régions, de forte et de faible variation de la solution en termes de paramètres physiques à travers le dispositif. Ce phénomène, bien connu du point de vue physique, voir [75] et sa bibliographie, est à l'origine de la mise en place d'inéquations variationnelles pour l'étude des semi-conducteurs unipolaires, voir [58, 59]. Il continue à suciter la curiosité des chercheurs dans ce domaine [1, 2, 38, 44].

En 1970, un modèle de transport, dit modèle hydrodynamique (HD), a été établi pour les dispositifs par Blotekaer [15]. Le modèle HD consiste en un système parabolique de lois de conservation pour la densité de charge, du moment et d'énergie et de l'équation de Poisson pour le potentiel électrique. Dans [32], Degond et Markowich démontrent, en utilisant le théorème du point fixe de Schauder, l'existence d'une solution pour les équations hydrodynamiques dans un semi-conducteur unipolaire.

Éléments sur la simulation numérique

La simulation numérique de dispositifs semi-conducteurs propose de nombreux défis dans le domaine du calcul scientifique.

Difficultés

Les difficultés associées à la résolution des équations des dispositifs semi-conducteurs sont discutées par plusieurs auteurs, voir par exemple [8, 9, 41, 50, 60]. Les sources primaires de difficultés sont

- Certains cœfficients apparaissant dans les équations varient de plusieurs ordres de grandeur. Ces variations ne peuvent pas être correctement représentées sur une maille de taille particulière pour les discrétisations classiques.
- Des problèmes de perturbation singulière avec de petites jonctions de frontière et d'intérieur.
- La discrétisation des problèmes conduit à des systèmes très mal conditionnés. Une instabilité des itérations non-linéaires peut en résulter [8].

Quelques outils numériques

Les techniques de simulation numérique des dispositifs semi-conducteurs ont commencé à être employées systématiquement dès le début des années soixante. Une percée a été faite en 1969 par Sharfetter et Gummel (SG) [103]. Ils ont proposé une discrétisation non standard basée sur une approche physique pour une diode de Silicium unidimensionnelle. Malgré son succès, le mécanisme n'était pas bien compris mathématiquement jusqu'à 1980 quand Doolan et al. [33] l'expliquèrent. La formulation mathématique de la discrétisation de SG était appelée exponential fitting. Elle a été depuis généralisée aux problèmes DD bi et tri-dimensionnels. Bank et al. [10] étendirent la méthode SG au problème bi-dimensionnel en utilisant la méthode contrôle de volume sur des mailles rectangulaires et en utilisant des éléments finis sur des mailles rectangulaires. Polak et al. [97] généralisèrent la méthode SG pour permettre l'utilisation des mailles quadrilatérales. Des types similaires des versions SG ont été analysés sur des tétraèdres par Smith et al. [113] et par Sever [110]. Toutefois, les extensions multi-dimensionnelles de SG n'étaient pas couronnées d'autant de succès que l'originale unidimensionnelle. Brezzi et al. [17] introduisirent l'idée de l'exponential fitting pour le modèle DD bi-dimensionnel utilisant des méthodes d'éléments finis mixtes et hybrides. Toutefois les espaces devaient satisfaire la condition de Babuska-Brezzi voir [19]. Différents placements de nœuds devaient être utilisés pour différentes composantes des solutions. Ces travaux ont inspiré beaucoup de chercheurs, ce qui a donné lieu à différentes formulations pour différents types de modèles [4, 25, 36, 37, 45, 81, 83, 93, 101].

Pour le problème évolutif un schéma de discrétisation implicite est recommandé. Basés sur cette idée, différents schémas évolutifs pour le modèle DD ont été évalués dans [42, 126, 127]. La connexion entre la méthode Streamline-Diffusion (SD) et la méthode SG est attribuée au travail de Sharma et Carey [112]. Ils ont montré que la forme originale de la méthode SG coincidait avec la méthode SD pour le modèle DD uni-dimensionnel. Ces résultats ont été généralisés par Jiang [63].

Pour le modèle HD, comme travaux récents pertinents sur la simulation numérique, on peut citer les études de Rudan et Odeh [100] et Souissi et al. [116].

Des études concernant les chocs provoqués par la nature hyperbolique du modèle HD ont été présentées pour le flux transonique dans le cas de la diode balistique uni-dimensionelle $n^+ - n - n^+$ par Gamba [48, 49], pour le cas isentropique par Ascher et al. [7] et pour les non-isentropique par Markowich et Pietra [74]. Une simulation dans le cas bi-dimensionnel est faite par Jiang [64] utilisant la méthode SD. D'autres résultats numériques peuvent être consultés dans [24, 25, 62], pour le MESFET (Metal Semiconductor Field Effect Transistor), dans [67] pour le PBT. Le lecteur peut consulter aussi les articles de Rahmat et al. [98] et Benvenuti et al. [14] pour le modèle bilan d'énergie (Energy-balance) qui est presque exclusivement utilisé dans les champs d'ingénierie à la place de modèle HD complet.

Présentation des travaux

Ce travail concerne la modélisation, l'étude d'un modèle simplifié (identification d'une frontière libre) et l'analyse mathématique des équations de base de semi-conducteurs.

Le manuscrit est divisé en trois parties. La première (chapitres 1 et 2) rappelle essentiellement les différents modèles décrivant le comportement électrique des semi-conducteurs et des résultats d'analyse qui nous seront utiles par la suite. La deuxième partie couvrant le chapitre 3 est consacrée à l'identification de la frontière libre issue de la polarisation de la jonction pn. La troisième partie (chapitres 4 et 5) est consacrée à l'étude de l'existence et l'unicité des équations du modèle dérive-diffusion (DD).

Chapitre 1 Modèle et Physique des semi-conducteurs

La première partie est consacrée à la description de la physique des semi-conducteurs, l'origine des courants, les paramètres physiques et les phénomènes de génération et de recombinaison apparaissant dans les équations des semi-conducteurs.
Nous expliciterons à la deuxième partie, les différents systèmes d'équations issus d'une modélisation physique des composants semi-conducteurs. À la dernière section de ce chapitre, nous décrirons en détail la mise en place d'un modèle prenant en compte l'apparition des régions neutres dans la jonction pn qui donnent lieu à un problème de frontière libre.

Chapitre 2 Éléments d'analyse et régularité

Nous commencerons par énoncer les principales définitions et propriétés des espaces de Sobolev sur un domaine borné de $\mathbb{R}^n$, les théorèmes d'injection et des résultats de la théorie d'optimisation, de l'analyse convexe et le théorème du point fixe de Schauder. Nous rappelerons aussi les résultats de régularité des solutions du système d'équations dans un semi-conducteur.

Chapitre 3 Identification d'une frontière libre

Nous nous intéresserons à un modèle simplifié décrivant le potentiel électrique dans une jonction pn. Nous montrerons que le problème admet au moins une solution en le formulant en un problème d'inéquation variationnelle. L'originalité de ce travail consiste en l'utilisation des nœuds sur la frontière libre comme inconnus, ce qui donne lieu à un système algébrique non-linéaire. Pour résoudre ce système, nous proposerons deux algorithmes.
Le premier algorithme est basé sur l'écriture du système algébrique sous la forme $F(U)$ =3D 0, où l'inconnue U est un vecteur formé des nœuds appartenant à la frontière libre et des valeurs du potentiel aux degrés de libertés. La fonction F est différentiable par rapport aux composantes de U. La matrice jacobienne peut être calculée explicitement et la méthode de Newton peut être utilisée pour trouver une approximation de U.
Le deuxième algorithme est basé sur le découplage de la partie du système contenant les valeurs du potentiel de la partie contenant les nœuds de la frontière libre. Ceci ramène le problème à la résolution d'une façon alternative d'un problème linéaire et d'un problème non-linéaire dont la dimension est très inférieure à celle du problème de départ. Ce découplage introduit une difficulté qui est la non disponibilité de la matrice jacobienne puisque le système ne s'écrit qu'implicitement en fonction des inconnues. La méthode de Newton ne peut être utilisée dans ce cas. Nous étudierons deux méthodes du type quasi-Newton, la première méthode est l'algorithme classique dû à Broyden [22]. La seconde méthode est une modification d'un algorithme plus récent proposé par Eirola et Nevanlinna [34].
Dans les expériences numériques que nous présenterons, l'étude comparative de ces différents algorithmes montre que la combinaison de la méthode de découplage et le deuxième algorithme de quasi-Newton donne une meilleure satisfaction au niveau de la rapidité, précision et simplicité d'implémentation.

Chapitre 4 Étude de l'existence de solutions du modèle DD

Nous étudierons le système d'équations de base de semi-conducteurs, en utilisant les variables de Slotboom et tout au long de ce chapitre nous considérerons que la loi de mobilité dépend du champ éléctrique. Nous donnerons des hypothèses sur les paramètres physiques et sur le terme de génération-recombinaison. Ce chapitre sera divisé en deux parties.
Dans la première partie, nous examinerons le problème de l'existence de solutions, dans le cas où le terme de génération-recombinaison est celui de Schokley-Read-Hall, par l'application d'une variante pratique du théorème de Schauder [29] sur un opérateur de sélection. Nous rechercherons des estimations a priori pour chaque équation, ces estimations permettront de construire le convexe du théorème de Schauder. Nous appliquerons la théorie de l'analyse convexe à des fonctionnelles construites à partir de chaque équation du système pour prouver que chaque équation admet au plus une solution. Ceci permet d'affirmer que l'opérateur de sélection est bien défini. Nous montrerons que cet opérateur est continu, qu'il laisse invariant le convexe et que l'image de ce dernier est précompacte.
Dans la deuxième partie, nous étudierons l'existence, dans le cas où le terme de génération-recombinaison est le terme de Schokley-Read-Hall augmenté du terme d'avalanche. Nous démontrerons des estimations a priori sur les solutions. À partir de ces estimations, nous construirons le convexe du théorème de Schauder. Nous vérifierons que l'opérateur construit satisfait les conditions du corollaire du théorème de Schauder. En effet, nous prouverons que l'opérateur est bien défini, continu grâce aux théorèmes des équations aux dérivées partielles semi-linéaire et qu'il est compact en utilisant le théorème d'injections compactes de Sobolev-Kondrachov.

Chapitre 5 Étude de l'unicité de solutions du modèle DD

Nous nous intéresserons à l'unicité des solutions sous certaines hypothèses que nous décrirons au début du chapitre. Nous montrerons des estimations sur chaque équation du système. Nous donnerons un théorème d'unicité sous certaines conditions qui seront, par la suite, vérifiées dans les cas du domaine assez petit et de la permittivité assez grande. Nous terminerons en présentant un résultat d'unicité locale basé sur le théorème des fonctions implicites. Ce résultat sera obtenu, en supposant que le terme de géneration-recombinaison s'écrit sous une forme générale et que les changements des conditions aux limites se font à angles droits.

Chapitre 1

Modèle et Physique des semi-conducteurs

1.1 Physiques des semi-conducteurs

1.1.1 Modèles des bandes d'énergie

À partir de la théorie quantique établie par Schrödinger (Heisenberg, Dirac), on peut déduire que les électrons liés à un atome ne peuvent avoir n'importe quelle valeur d'énergie, les niveaux énergétiques sont discrets (séparés les uns des autres) et dépendent entre autre de la nature de l'atome en question (voir Figure 1.1).
Il est une loi fondamentale de la nature que 2 électrons ne peuvent occuper le même état quantique, c'est le principe d'exclusion de Pauli (sinon les électrons iraient dans l'état de plus faible énergie, et les atomes complexes seraient indistinguables les uns des autres). En vertu de ce principe, si l'on rapproche deux atomes de même nature à une distance de l'ordre de leurs rayon atomique, chaque niveau d'énergie de l'atome isolé se dédouble pour permettre l'accueil d'un nombre double d'électrons. Dans le cas d'un cristal (assemblage d'un très grand nombre d'atomes de même nature en réseau), les niveaux d'énergie discrets de l'atome isolé se multiplient et se réarrangent de manière complexe pour donner naissance à des bandes d'énergie permises constituées d'une multitude de niveaux discrets tellement rapprochés les uns des autres que l'on parle de quasi-continuum. Ces bandes permises sont séparées par des bandes d'énergie interdites où il n'existe aucun état stable permis pour un électron du réseau (Figure 1.1).

Pour les cristaux semi-conducteurs, deux de ces bandes d'énergie jouent un rôle essentiel, il s'agit de la Bande de valence (E_v) qui contient les états électroniques des couches périphériques des atomes du cristal (électrons de valence) et la bande permise immédiatement supérieure en énergie où les électrons ont rompu leurs liens avec leurs atomes d'origine et sont devenus libres: c'est la bande de conduction. (En réalité les électrons sont quasi-libres car ils restent influencés par le potentiel périodique crée par les atomes du réseau, seuls sont réellement libres ceux qui sont dans le vide).

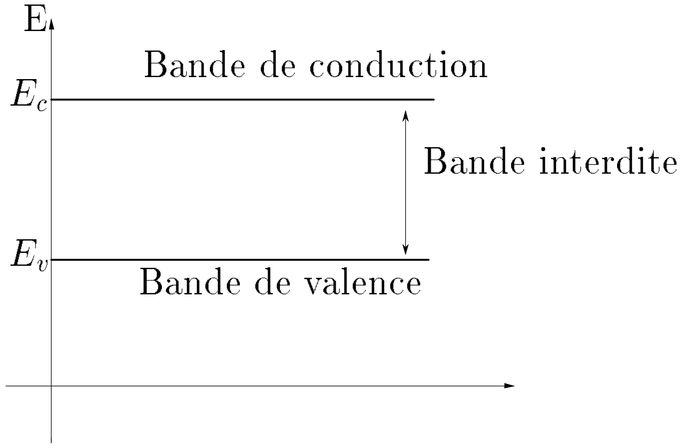

FIG. 1.1: Schéma de bandes d'un semi-conducteur

1.1.2 Isolants, conducteurs et semi-conducteurs

À température différente du zéro absolu, la bande de conduction contient toujours des places pleines et vides. Le conducteur reste un conducteur. Par contre, dans le cas d'un isolant, il peut se produire des changements significatifs. Tout dépend de la largeur de la bande interdite qui sépare les bandes de conduction et de valence, c'est à dire de l'écart $E_c - E_v$ (encore appelé g̈apd̈'énergie) entre l'énergie E_c du bas de la bande de conduction et l'énergie E_v du haut de la bande de valence. Plaçons-nous à la température ambiante: on trouve dans le tableau les valeurs du g̈app̈our un certain nombre de matériaux.

• $\mathbf{E_c - E_v > 5\,eV}$, l'écart d'énergie est de plusieurs eV, le matériau reste isolant.

• $\mathbf{E_c - E_v}$ est de l'ordre de $1\,eV$, il y a quelques places occupées dans la bande de conduction et quelques places vides dans la bande de valence. Sous l'effet de l'agitation thermique, certains électrons de la bande de valence ont gagné assez d'énergie, au moins $1\,eV$; ces électrons laissent dans la bande de valence des places qui correspondent à des trous.

Lorsque l'on applique un champ électrique, la conduction se produit dans les deux bandes puisqu'il y a, à la fois des places vides et des places occupées. Elle fait intervenir simultanément les électrons de la bande de conduction et les trous de la bande de valence. Cependant, chaque bande participe peu à la conduction. Dans la bande de conduction, il y a peu d'états occupés (donc peu d'électrons) et dans la bande de valence peu d'états vides (donc peu de trous). Le matériau est dit semi-conducteur.

• $\mathbf{E_c - E_v < 1\,eV}$, le plus souvent, il se produit un léger recouvrement des bandes de valence et de conduction ($E_c - E_v < 1eV$) de telle sorte qu'il n'existe pas de bande interdite et que les électrons passent de l'état de valence à celui de conduction.

1.1.3 Production des porteurs de charges libres

Il s'agit de décrire les processus selon lesquels sont créés les électrons et les trous susceptibles de donner lieu à un courant.

Matériau	gap(eV)
C	5.30
GaAs	1.43
Si	1.12
Ge	0.66
PbS	0.33
InSb	0.20
α Sn	0.08

TAB. 1.1: Largeurs de la bande interdite à temperature ambiante

1.1.3.1 Fonctionnement intrinsèque

Prenons l'exemple du silicium. Chaque atome est lié à ses quatre voisins par liaison covalente, de telle sorte que la couche externe apparaît comme saturée à huit électrons. Au zéro absolu, tous les électrons participent aux liaisons; le matériau se comporte comme un isolant. Lorsque la température n'est pas nulle, deux phénomènes apparaissent (voir figure 1.2)

• Certains électrons de valence sont excités thermiquement. Si l'énergie gagnée par un de ces électrons est supérieure à l'énergie d'ionisation, il quitte sa position de liaison et se trouve alors à l'état quasi-libre dans le cristal. Autrement dit, il peut se déplacer dans la totalité du cristal.

• En quittant sa liaison d'origine, l'électron laisse derrière lui un site vide qui correspond à un trou de charge positive. Ce trou peut à son tour attirer un électron de valence d'une liaison proche qui, en quittant son site, fait apparaître un trou et ainsi de suite : le trou est mobile.

Autrement dit, la rupture d'une liaison provoque la création de deux porteurs de charge libres de se déplacer, un électron et un trou. À l'inverse, lorsqu'un électron quasi-libre passe à proximité d'un trou, il est attiré par celui-ci et peut donc se recombiner avec lui. Ainsi, le processus qui s'instaure est une suite de créations et de recombinaisons de paires trou-électron.

La création d'une paire trou-électron se traduit par le passage d'un électron de la bande de valence dans la bande de conduction. L'électron quasi-libre se déplace dans cette bande et peut participer le cas échéant à un courant : c'est un électron de conduction. De même, le trou se déplace dans la bande de valence, par captures successives d'électrons de cette bande. Enfin, lorsqu'un électron de conduction vient combler un trou, c'est-à-dire lorsqu'il y a recombinaison d'une paire trou-électron, c'est que l'électron passe de la bande de conduction dans la bande de valence. Le processus met en jeu autant d'électrons que de trous. On désigne par

n : le nombre d'électrons par unité de volume dans la bande de conduction (encore appelé concentration en électrons);

p : le nombre de trous par unité de volume dans la bande de valence (encore appelé concentration en trous);

À une température donnée, n =3D p =3D n_i est la concentration intrinsèque.

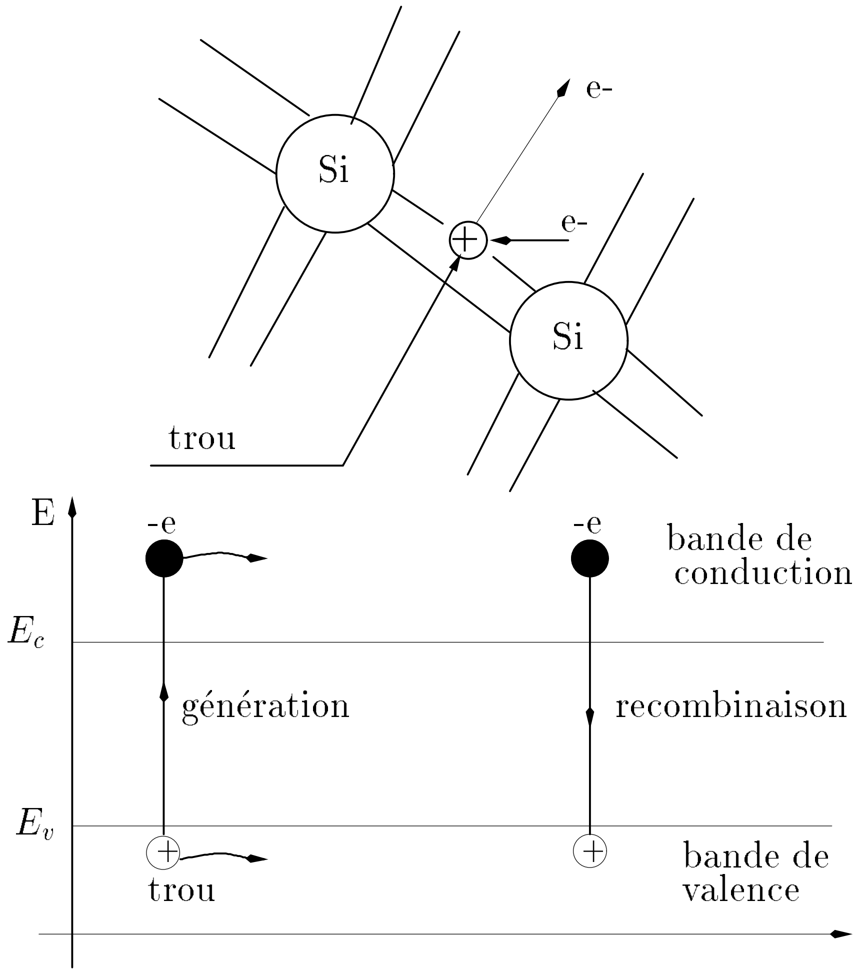

FIG. 1.2: Processus intrinsèque: génération et recombinaison de paires trou-électron.

1.1.3.2 Fonctionnement extrinsèque

Examinons les modifications dûes à l'introduction d'impuretés d'un seul type. Il y a deux modes de dopage qui permettent de favoriser la création d'électrons (semi-conducteur de type n) ou de trous (semi-conducteur de type p). Pour comprendre comment se passent les choses, il suffit de se référer au modèle unidimensionnel du schéma de bandes. Envisageons, pour commencer le dopage d'un élément simple comme le silicium.

1.1.3.3 Semi-conducteur de type n

Ajoutons au silicium des traces d'un élément pentavalent comme le phosphore(P), l'arsenic(As) ou l'antimoine (Sb). L'atome d'impureté se substitue à un atome de silicium, en un certain nombre de sites très espacés les uns des autres. Il peut se placer également en position interstitielle, mais c'est moins fréquent.
Quatre électrons de l'atome d'impureté forment des liaisons covalentes avec les électrons des

atomes de silicium proche voisins. Sur la couche externe de l'atome d'impureté, il reste un cinquième électron, dit célibataire puisque non apparié, qui est faiblement lié à l'atome. Celui-ci a tendance à s'en débarasser par exemple par agitation thermique, pour faire apparaître une couche externe saturée à huit électrons. L'énergie d'ionisation de l'atome d'impureté, c'est-à-dire l'énergie nécessaire à la libération de l'électron célibataire est très petite, de l'ordre de quelques meV. Elle dépend de l'inverse du carré de la constante diélectrique du milieu dans lequel est injectée l'impureté, ici le silicium.
L'atome d'impureté est dit donneur (sous-entendu d'électrons); débarrassé de son électron célibataire, il se comporte comme un ion positif.
Contrairement à ce qui se passe dans le processus intrinsèque, la libération des électrons célibataires du phosphore ne s'accompagne pas de l'apparition de trous en nombre égal. C'est que l'ion P^+ possède très exactement sur sa couche périphérique le nombre d'électrons nécessaires, soit quatre, pour se lier avec les quatre atomes de silicium voisins.
Lorsque un électron célibataire est libéré avec une énergie cinétique nulle, il possède l'énergie E_c du bas de la bande de conduction; il provient donc d'un niveau d'énergie E_d inférieure à E_c. L'intervalle énergétique $E_c - E_d$ qui représente l'énergie d'ionisation du phosphore dans le silicium a une faible valeur devant la largeur de la bande interdite. Autrement dit, E_d est dans la bande interdite et proche de E_c.
Plus précisément, la théorie des bandes montre que la présence de n_d atomes donneurs par unité de volume donne naissance dans la bande interdite à une bande d'énergie très étroite formée de n_d niveaux qu'on représente par un seul niveau d'énergie E_d appelé niveau donneur (voir figure 1.3).
Le mécanisme décrit à l'aide du schéma de bandes est le suivant. Au zéro absolu, tous les niveaux donneurs sont occupés par les électrons célibataires. Lorsque la température augmente, le nombre d'électrons qui passent dans la bande de conduction croît. À une température suffisante (c'est le cas de la température ambiante), tous les électrons célibataires sont dans la bande de conduction et tous les atomes donneurs sont ionisés. Les processus de création intrinsèque et extrinsèque coexistent. Au total, il y a davantage d'électrons que de trous et même, comme nous le constaterons, $n \gg p$, le semi-conducteur est de type n, les électrons sont les porteurs majoritaires, les trous sont les porteurs minoritaires.
Par ce procédé, on crée un nombre d'électrons supplémentaires pratiquement égal au nombre d'atomes d'impureté. La bande de conduction est d'autant plus peuplée que le dopage est plus fort.
La représentation par un niveau d'énergie unique de la bande d'énergie des atomes donneurs n'est valable que tant que n_d est très faible devant la concentration en atomes de silicium. Un semi-conducteur dans lequel les impuretés sont introduites à l'état de traces est dit non dégénéré.
Dans le cas contraire, lorsque n_d augmente, le nombre de niveaux nécessaires pour accueillir les électrons célibataires des atomes d'impureté doit être plus élevé, le niveau donneur s'élargit jusqu'à chevaucher la bande de conduction. Le niveau de Fermi atteint, voire dépasse le bas de la bande de conduction. Le cristal a un comportement métallique, c'est la dégénérescence.

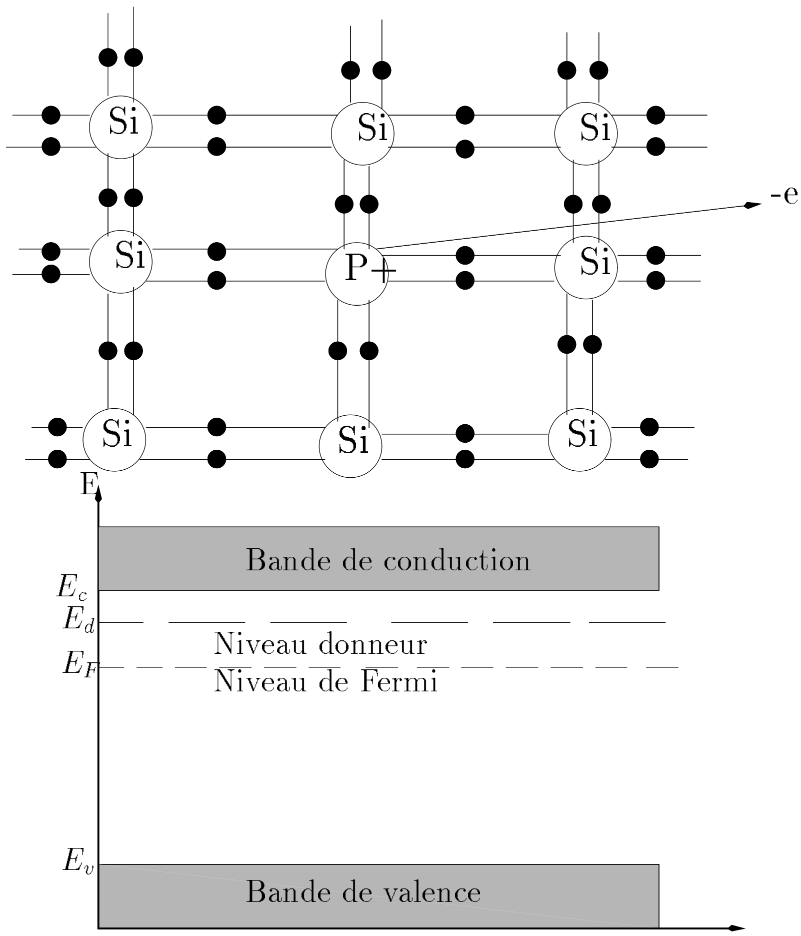

FIG. 1.3: Processus extrinsèque de type n.

1.1.3.4 Semi-conducteur de type p

Le dopage est assuré cette fois-ci à l'aide d'atomes trivalents tels que le bore (B), le gallium (Ga) ou l'aluminium (Al). Chaque atome d'impureté ne peut établir de liaison de valence qu'avec trois des quatre atomes de silicium proche voisins. Une valence est donc incomplète (figure 1.4). Un électron d'un atome voisin de silicium, libéré par agitation thermique, a tendance à être capturé par l'atome d'impureté qui complète ainsi sa couche externe; cet électron laisse derrière lui un trou. Il y a ainsi formation

- d'un ion négatif d'impureté. L'atome d'impureté est dit accepteur (sous-entendu d'électrons);
- d'un trou. Comme en fonctionnement intrinsèque, le trou peut capturer un électron d'une liaison de valence voisine du silicium, et ainsi de suite, le trou apparaît comme mobile.

Ainsi, le piégeage de l'électron initial par l'atome d'impureté déclenche un processus de création de trous, en nombre pratiquement égal à celui des atomes d'impuretés. Lorsque la teneur en atomes accepteurs croît, les états de basse énergie se peuplent et le niveau de Fermi a tendance à se rapprocher de la bande de valence.

Le schéma de bandes comporte une bande d'énergie très étroite, d'énergie E_a, constituée de n_a niveaux où n_a est la concentration en atomes accepteurs. On assimile la bande à un niveau d'énergie E_a, appelé niveau accepteur, situé juste au-dessus de la bande de valence (voir figure 1.4). L'écart $E_a - E_v$ représente l'énergie qu'il faut fournir à un électron d'un atome de silicium pour ioniser l'atome d'impureté; cet écart est faible de l'ordre de la dizaine de meV. Au zéro absolu, tous les niveaux accepteurs sont vides. Il suffit d'une très faible augmentation de température pour que les électrons périphériques du silicium commencent à peupler ces niveaux. A la température ambiante, tous les niveaux accepteurs sont pleins et tous les atomes accepteurs ionisés. Le processus de création intrinsèque subsiste. Au total, il y a davantage de trous que d'électrons. En fait, $p \gg n$, le semi-conducteur est de type p, les trous sont les porteurs majoritaires, les électrons sont les porteurs minoritaires.

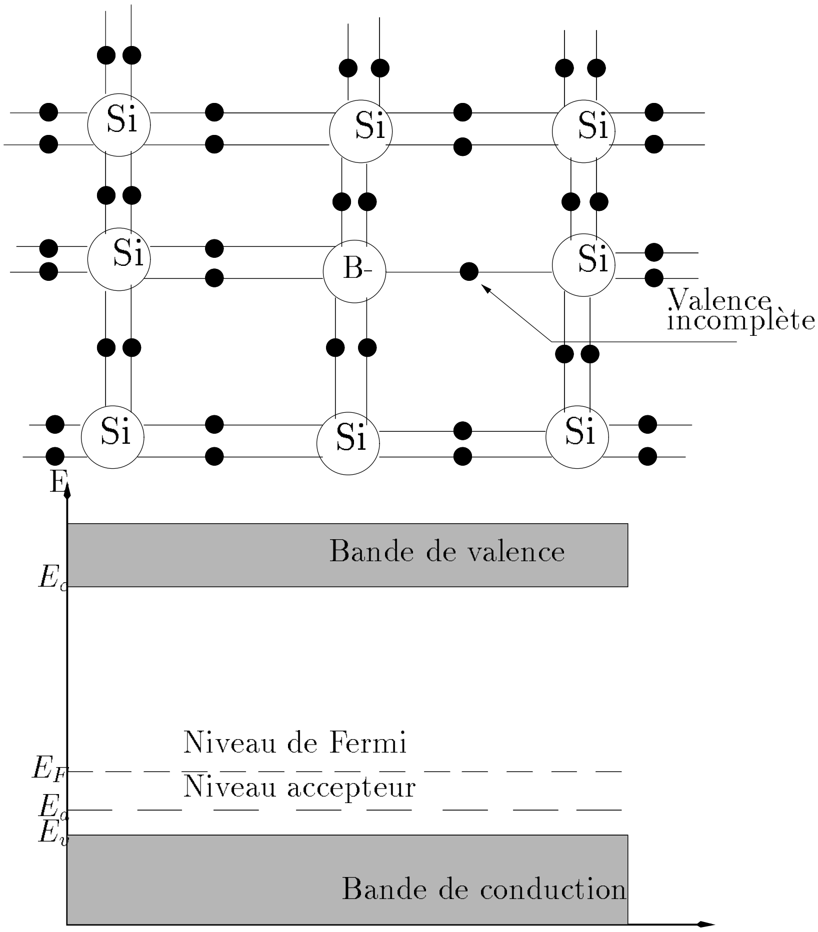

FIG. 1.4: Processus extrinsèque de type p.

1.1.3.5 Description de la jonction *pn*

Une jonction *pn* est constituée par la juxtaposition de deux régions de type différent d'un même monocristal de semi-conducteur. La différence des densités de donneurs et d'accepteurs, $N_d - N_a$, passe d'une valeur négative dans la région de type p à une valeur positive dans la région de type n. La loi de variation de cette grandeur dépend essentiellement de la technique de fabrication. Différents modèles peuvent être utilisés pour étudier théoriquement les propriétés de la jonction, jonction abrupte, linéaire,etc, le modèle de la jonction abrupte donne des résultats en très bon accord avec le comportement de la jonction.

Dans le modèle de la jonction abrupte la différence $N_d - N_a$ passe brutalement d'une valeur négative dans la région de type p à une valeur positive dans la région de type n. Les trous majoritaires dans la région de type p, diffusent vers la région de type n où ils se recombinent avec les électrons. Il en est de même pour les électrons, dans l'autre sens. La recombinaison des porteurs libres de part et d'autre de la jonction fait apparaître une charge d'espace résultant de la présence des donneurs et accepteurs ionisés, dont les charges ne sont plus intégralement compensées par celles des porteurs libres. Il s'établit alors, au voisinage de la jonction, un champ électrique qui s'oppose à la diffusion des porteurs majoritaires. L'équilibre thermodynamique est établi lorsque la force électrique résultant de l'apparition du champ équilibre la force de diffusion associée aux gradients de concentration de porteurs libres.

1.1.4 Phénomènes de génération et de recombinaison

À une température différente de zéro absolu, la bande de conduction contient une quantité d'électrons et un nombre de trous est dans la bande de valence. Un électron libre peut perdre de l'énergie (il cesse alors d'être un électron libre de circuler dans le cristal) et venir occuper une place vacante (occupée par un trou) dans la bande de valence. Il s'agit alors d'un phénomène de recombinaison.
Aussi, un électron peut se détacher d'un atome (si une énergie suffisante lui est fournie) et passer de la bande de valence à la bande de conduction, où il devient un électron libre, ce qui donne naissance à un trou libre dans la bande de valence. Ce phénomène est appelé phénomène de génération (d'une paire électron-trou).
Les phénomènes physiques qui se produisent d'un événement de recombinaison peuvent être très différents.

La recombinaison radiative (l'énergie libérée par la recombinaison est émise sous la forme d'un photon).

La recombinaison Auger (l'énergie libérée par la recombinaison sert à exciter un autre électron (ou un trou) libre vers une énergie supérieure). On définit le taux de génération-recombinaison d'Auger par

$$R_{AU} =3D(C_n^{AU} + C_p^{AU})(np - n_i^2)$$

où C_n^{AU}, C_p^{AU} sont des coefficients évalués par expérimentation et n_i la concentration intrinsèque du semi-conducteur [109].

L'énergie libérée par la recombinaison est émise sous la forme d'un photon (échauffement du cristal).

Parallèlement aux phénomènes de recombinaison directe (bande à bande), un électron libre peut se recombiner avec un trou libre par l'intermédiaire du centre de recombinaison se trouvant dans la bande interdite. Ces centres agissent comme une sorte de catalyseur en favorisant la mise en présence d'électrons et de trous. Ce type de recombinaison est beaucoup plus probable que la recombinaison directe dans les semi-conducteurs à bande interdite indirecte (Si, Ge, ...). Le calcul du taux de recombinaison associé à ces centres fait l'objet de la théorie de Shockley-Read-Hall

$$R_{SRH} =3D \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n + n_i) + \tau_n(p + p_i)}$$

où τ_n et τ_p sont respectivement les durées de vie des électrons et des trous.

<u>**Génération par champ électrique intense**</u>

Dans un matériau semi-conducteur soumis à un champ électrique supérieur à environ $10^5 V cm^{-1}$, les porteurs libres sont tellement accélérés qu'ils peuvent se comporter comme des radiations ionisantes et créer des paires électrons-trous.
Les porteurs créés sont à leur tour accélérés et vont engendrer d'autres paires, c'est le phénomène d'avalanche. L'efficacité de cette création se caractérise par un coefficient d'ionisation $\alpha(cm^{-1})$

$$R_I =3D \alpha_n \frac{|J_n|}{q} - \alpha_p \frac{|J_p|}{q}$$

Une expression pour α_n, α_p est de la forme, voir [109]

$$\alpha(\xi) =3D \begin{cases} a\, e^{-b/\alpha D|\xi|} & \text{si } \xi \in \mathbb{R}^n,\ \xi \neq 3D\ 0, \\ 0 & \text{si } \xi =3D\ 0. \end{cases}$$

où a et b sont des constantes positives.

Finalement $R =3D R_{SRH} + R_{AU} - R_I$ est le taux de génération-recombinaison.

1.1.5 Courants dans les semi-conducteurs

Les courants dans le semi-conducteur résultent du déplacement des porteurs de charge, électrons et trous, sous l'action d'une force. L'origine de la force peut être un champ électrique ou un gradient de concentration. Dans le premier cas, le courant est dit de dérive, dans le second cas il est dit de diffusion.

1.1.5.1 Courant de dérive

Le temps entre deux collisions est appelé temps de collision τ_c, il est fonction de la pureté du matériau et est de l'ordre de 10^{-13} à $10^{-12} s$. En présence d'un champ électrique E appliqué à l'instant $t =3D\ 0$, un porteur de charge q est soumis à une force $F =3D\ qE$. La composante de vitesse instantanée $v_i(t)$ du porteur, dans la direction du champ, est donnée par $v_i(t) =3D\ qEt/\alpha$ Cette composante de vitesse augmente donc linéairement entre deux chocs, mais dans la mesure où ces dernières sont isotropes elle s'annule statistiquement à chaque choc. La variation de $v_i(t)$ est périodique. Si on appelle τ_c la valeur moyenne du temps de collision, la valeur moyenne de la vitesse est donnée par

$$v = \frac{1}{\tau_c}\frac{qE}{m^*}\frac{\tau_c^2}{2}. \tag{1.1}$$

En posant $\tau = \tau_c/2$, l'expression (1.1) s'écrit $v = \pm\mu E$ avec $\mu = q\tau/m^*$, μ est appelé mobilité des porteurs et τ temps de relaxation. La vitesse v est appelée vitesse de dérive ou vitesse d'entraînement ou vitesse drift. La mobilité est par définition une grandeur positive, elle mesure l'aptitude des porteurs à se déplacer dans le réseau cristallin et s'exprime en $cm^2V^{-1}s^{-1}$. Les vitesses des électrons et des trous s'écrivent respectivement $v_n = -\mu_n E$ et $v_p = +\mu_p E$.
Au déplacement des charges correspond un courant dont la densité est définie comme la quantité de charge qui traverse l'unité de surface pendant l'unité de temps, soit pour chaque type de porteurs

$$J_{cn} = -nqv = nq\mu_n E, \tag{1.2}$$

$$J_{cp} = +pqv = pq\mu_p E, \tag{1.3}$$

J_{cn}, J_{cp} sont appelés densité de courant de dérive respectivement des électrons dans la bande de conduction et des trous dans la bande de valence.

1.1.5.2 Courant de diffusion

Lorsque les porteurs libres ne sont pas distribués uniformément dans le semi-conducteur, ils sont soumis au processus général de diffusion. Leur mouvement s'effectue dans un sens qui tend à uniformiser leur distribution spatiale. Les flux de porteurs s'écrivent $n^d = -D_n\nabla n$ et $p^d = -D_p\nabla p$, les cœfficients D_n et D_p sont appelés cœfficients de diffusion des électrons et de trous respectivement, le signe $-$ traduit le fait que les porteurs diffusent dans la direction de plus faible concentration. Aux déplacements des porteurs de charge correspondent des densités de courants appelés densités de courants de diffusion des électrons et des trous

$$J_{dn} = qD_n\nabla n, \tag{1.4}$$

$$J_{dp} = -qD_p\nabla p. \tag{1.5}$$

Compte tenu des expressions (1.2), (1.3), (1.4) et (1.5) les courants résultant d'électrons et de trous s'écrivent

$$J_n = nq\mu_n E + qD_n\nabla n, \tag{1.6}$$

$$J_p = pq\mu_p E - qD_p\nabla p, \tag{1.7}$$

la densité du courant totale circulant dans le semi-conducteur est donnée par

$$J = J_n + J_p. \tag{1.8}$$

Nous avons aussi l'équation liant l'évolution du potentiel électrostatique (et donc de la tension $u(t)$ aux bornes du composant) au champ électrique local

$$E =3D -\nabla u. \tag{1.9}$$

1.1.6 Équation de Poisson

L'équation de Poisson, issue du théorème de Gauss, exprime la variation spatiale du champ électrique due à une densité locale de charge :

$$\nabla \cdot (\varepsilon E) =3D \rho \tag{1.10}$$

où ρ est la densité de charge donnée par $\rho =3D q(N + p - n)$.

La fonction de dopage N exprime la densité volumique de charges fixes. Cette valeur peut être variable dans l'espace, mais est invariante dans le temps. C'est une donnée technologique, qui définit le type de composant.

La différence $(p - n)$ représente la densité volumique de charges mobiles, encore appelée concentration de porteurs libres. Cette grandeur est essentiellement dépendante des conditions de fonctionnement et peut, par conséquent, varier dans l'espace et dans le temps.

On peut schématiquement différencier deux principaux modes de fonctionnement :

- dans le cas où la densité de porteurs libres est négligeable devant la densité de charges fixes, le profil spatial du champ électrique est essentiellement déterminé par le profil de dopage, et est donc peu dépendant du temps (cas d'une zone dite désertée, comme dans une diode ATT fonctionnant à faible densité de courant par exemple).
- dans le cas contraire où la concentration de porteurs libres est importante vis-à-vis de la concentration en impuretés, la configuration spatiale du champ électrique est fortement affectée par la concentration locale de porteurs libres et est le plus souvent fortement dépendante du temps (cas dit d'une forte réaction de charge d'espace, comme dans une diode ATT fonctionnant à forte densité de courant, ou bien encore dans une diode à transfert électronique).

1.2 Le modèle dérive-diffusion de Van-Roosbroeck

Dans ce type de modèle la vitesse totale moyenne de transit des porteurs est donc classiquement écrite comme étant la somme d'un terme de dérive et d'un terme de diffusion

$$v_n =3D \mu_n E - \frac{\mu_n}{n}\nabla\left[\frac{nk_BT_n}{q}\right], \tag{1.11}$$

$$v_p =3D \mu_p E - \frac{\mu_p}{p}\nabla\left[\frac{pk_BT_p}{q}\right] \tag{1.12}$$

où μ_n et μ_p sont les mobilités des électrons et des trous. Le premier terme représente la vitesse de dérive des porteurs sous l'influence du champ électrique. Le second terme représente la vitesse de diffusion des porteurs liée au gradient spatial.

Supposons que la température électronique T_n et la température des trous T_p sont fixées à la valeur T du milieu ambiant ($T_n =3D T_p =3D T$).

Les expressions des vitesses deviennent

$$
\begin{aligned}
v_n &=3D -\mu_n E - \frac{\mu_n\, k_B\, T}{q\, n} \nabla n, \\
v_p &=3D \mu_p E - \frac{\mu_p\, k_B\, T}{q\, p} \nabla p.
\end{aligned}
$$

En utilisant l'expression (1.9) donnant le champs électrique en fonction du potentiel électrique et la relation d'Einstein qui relie les cœfficients de diffusion et de mobilité :

$$
\frac{D_n}{\mu_n} =3D \frac{D_p}{\mu_p} =3D \frac{k_B T}{q}, \tag{1.13}
$$

on obtient

$$
\begin{aligned}
v_n &=3D \mu_n \nabla u - \frac{D_n}{n} \nabla n, \\
v_p &=3D -\mu_p \nabla u - \frac{D_p}{p} \nabla p.
\end{aligned}
$$

L'introduction de ces dernières équations dans les expressions du courant électronique ($J_n =3D -n\, v_n$) et du courant de trous ($J_p =3D p\, v_p$) donne les équations suivantes où ces courants sont exprimés uniquement en fonction des densités de charge n, p et du potentiel électrique u

$$
J_n =3D q\,(D_n \nabla n - \mu_n\, n\, \nabla u)\,, \tag{1.14}
$$

$$
J_p =3D -q\,(D_p \nabla p + \mu_p\, p\, \nabla u)\,. \tag{1.15}
$$

Remarque 1.1

La relation d'Einstein permet de décrire certains comportements de la diffusion des charges. Le comportement décrit par cette relation est valable notamment pour les semi-conducteurs non dégénérés : *c'est le cas de la plupart des matériaux semi-conducteurs ayant un faible dopage. La relation d'Einstein résulte dans ce cas de l'approximation de la statistique de Fermi par la statistique de Boltzmann.*

1.2.1 Modèle DD instationnaire

Nous considérons le modèle dérive-diffusion, proposé par Van Roosebroeck [122] :

$$
\left\{
\begin{aligned}
-\nabla \cdot (\varepsilon\, \nabla u) &=3D -q(n - p - N), \\
\frac{\partial n}{\partial t} - \frac{1}{q} \nabla \cdot J_n &=3D R, \\
\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{q} \nabla \cdot J_p &=3D R.
\end{aligned}
\right. \tag{1.16}
$$

où le courant électronique J_n et le courant de trous J_p sont donnés par les équations (1.14) et (1.15).

Les variables naturelles de ce problème sont n, p, u, mais le système (1.16) peut s'écrire sous d'autres formes en faisant intervenir d'autres variables qui sont utiles pour l'analyse mathématique (voir plus loin).

Le système (1.16), (1.14) et (1.15) est à compléter par

- des conditions initiales que vérifient les densités de porteurs à t =3D 0 :

$$n(x,0) =3D\ n^I,\ p(x,0) =3D\ p^I\ \forall x \in \Omega, \tag{1.17}$$

  où Ω représente le domaine du dispostif semi-conducteur et n^I et p^I sont des fonctions données.

- des conditions aux limites
  - **Dirichlet :** n, p, u donnés sur une partie du bord $\partial\Omega$ de Ω,
  - **Neumann :** sur des parties isolantes du bord du semi-conducteur, qui ne sont traversés par aucun courant et où il est donc naturel de prendre des conditions de Neumann homogènes sur ces frontières,

$$\nabla u \cdot \nu =3D\ J_n \nu =3D\ J_p \nu =3D\ 0,$$

    et par conséquent

$$\nabla u \cdot \nu =3D\ \nabla n \cdot \nu =3D\ \nabla p \cdot \nu =3D\ 0$$

1.2.2 Remarque sur l'obtention des conditions aux limites

Nous décrivons l'ensemble des conditions aux limites, pour une structure élémentaire, que nous utilisons. Un simple transistor à effet de champ de type jonction (MESFET) est relié à son environnement électrique par trois électrodes ayant des polarisations distinctes, la grille, la source et le drain. Un petit voltage appliqué au drain (respectivement à la source) fait bouger les électrons de la source vers le drain. Ce courant est contrôlé par application d'un voltage négatif à la grille.

La grille peut être constituée par un contact Schottky, alors que la source et le drain sont tous des contacts ohmiques. Un contact Schottky est assuré par une couche purement métallique mise en contact avec le semi-conducteur du dispositif; celle-ci est usuellement constituée d'or (AU) ou bien d'aluminium (AI). Ce contact est alors caractérisé par une barrière de potentiel (ou potentiel de diffusion V_s) qui restreint le passage des électrons. Un contact ohmique est quand à lui réalisé par l'association d'une couche *métallique* sur une couche semi-conductrice fortement dopée. La couche semi-conductrice fortement dopée joue le rôle de réservoir à électrons qui compense l'effet de la barrière de potentiel dû à la partie métallique. La partie réellement en contact avec le semi-conducteur du dispositif est la couche semi-conductrice fortement dopée. Typiquement, un contact ohmique est souvent constitué de l'association or-germanium (AU-Ge). Nous définissons alors le bord de Dirichlet Γ_D comme la réunion du lieu des contacts, et le bord de Neumann Γ_N comme le complémentaire de Γ_D.

1. **Contacts ohmiques**

   Sur les contacts ohmiques du semi-conducteur, les densités de porteurs vérifient les relations suivantes

- $np =3D n_i^2$, où n_i est la densité intrinsèque du semi-conducteur. C'est la situation d'équilibre thermique.
- $n - p - N =3D 0$; ceci correspond à la neutralité des charges.

Par conséquent, pour toute tension appliquée, on aboutit aux relations suivantes

$$n =3D \frac{1}{2}\left(N + \sqrt{N^2 + 4n_i^2}\right) \quad \text{et} \quad p =3D \frac{1}{2}\left(-N + \sqrt{N^2 + 4n_i^2}\right). \tag{1.18}$$

Le potentiel u sur un contact noté co est : $u_{co} =3D V_{co} + V_d$ où V_{co} est le potentiel appliqué et V_d est le potentiel propre dû au dopage dans l'environnement de ce contact. Ce dernier est choisi de telle sorte qu'en l'absence de tension appliquée ($V_{co} =3D 0$), la structure soit en équilibre thermodynamique et par conséquent aucun courant ne traverse le dispositif. On a alors : $np =3D n_i^2$ et $J_n =3D J_p =3D 0$. En utilisant la relation (1.13) et en notant $U_T =3D k_B T/\alpha q$, à l'équilibre on a

$$J_n =3D q\,\mu_n U_T\, \nabla n - q\, \mu_n\, n\, \nabla u =3D q\,\mu_n U_T e^{u/\alpha U_T} \nabla \left(n\, e^{-u/\alpha U_T}\right) =3D 0.$$

En introduisant l'écriture $n =3D e^{u/\alpha U_T}\eta$, de même $p =3D e^{-u/\alpha U_T}\rho$, on trouve que ρ et η sont constants. L'équation $np =3D n_i^2$ donne $\rho\eta =3D n_i^2$. Ainsi, on obtient

$$V_d =3D U_T ln\left(\frac{n}{\eta}\right) =3D -U_T ln\left(\frac{p}{\rho}\right).$$

Dans une situation d'équilibre ($R =3D 0$), seul le champ électrique apparaît dans les équations des courants. On ne modifie donc pas le comportement électrique en rajoutant une constante au potentiel et pour $\rho =3D \eta =3D n_i$ on a

$$u_{co} =3D V_{co} + U_T ln\left(\frac{N + \sqrt{N + 4n_i^2}}{2n_i}\right). \tag{1.19}$$

Sur un contact ohmique n, p, u sont donnés par (1.18) et (1.19).

2. **Contacts Schottky**

   Sur les contacts Schottky le potentiel est donné par

$$u_{co} =3D V_{co} - V_s + U_T ln\left(\frac{N + \sqrt{N + 4n_i^2}}{2n_i}\right). \tag{1.20}$$

Pour les densités de porteurs il est plus difficile de donner des conditions aux limites qui sont physiquement raisonnables et simples pour la modélisation. Ils dépendent en général de la densité du courant passant à travers le contact voir [119]. Dans le cas d'un contact Schottky sur un matériau dopé négativement, on peut utiliser la formule suivante

$$n =3D N e^{(V_{co} - V_s)/\alpha U_T} \tag{1.21}$$

où $\overline{N}$ est le maximum de la fonction de dopage N.

Sur ce type de contact n, p, u sont donnés par (1.21) et (1.20).

Lorsque la polarisation négative V_{co} devient grande (en valeur absolue) sur un contact de Schottky, on peut choisir de remplacer la condition de Dirichlet pour la densité n par une condition de bord isolant $J_n \cdot \nu$ =3D 0.

On prend alors sur ce type de contact le troisième type de conditions aux limites, Dirichlet pour le potentiel u donné par (1.21) et Neumann homogène pour les densités de charge.

1.2.3 Modèle DD stationnaire

Ce régime est obtenu en supposant qu'il n'y a pas de variations des densités de porteurs au cours du temps . On a alors

$$\frac{\partial n}{\partial t} \text{=3D} \frac{\partial p}{\partial t} \text{=3D } 0.$$

Le modèle DD est décrit dans ce cas par le système suivant

$$\left\{\begin{array}{lll} \nabla \cdot (\varepsilon \nabla u) & \text{=3D} & q(n-p-N), \\ -\frac{1}{q}\nabla \cdot J_n & \text{=3D} & R, \\ \frac{1}{q}\nabla \cdot J_p & \text{=3D} & R, \end{array}\right. \tag{1.22}$$

où le courant électronique J_n et le courant de trous J_p sont donnés par les équations (1.14) et (1.15).

1.3 Autre formulation du modèle DD

1.3.1 Variables (u, w_n, w_p)

On définit les **quasi potentiels de Fermi** des électrons et des trous w_n et w_p par les relations suivantes

$$\begin{array}{ll} n & \text{=3D } N_c\, e^{(u-w_n)/\alpha_U}, \\ p & \text{=3D } N_v\, e^{(w_p-u)/\alpha_U}. \end{array}$$

On peut réécrire alors le système sous la forme:

$$\begin{array}{l} \nabla \cdot (\varepsilon \nabla u) \text{=3D} q\left(N_c\, e^{(u-w_n)/\alpha_U} - N_v\, e^{(w_p-u)/\alpha_U} - N\right), \\ \frac{\partial}{\partial t}\left(N_c\, e^{(u-w_n)/\alpha_U}\right) - \frac{1}{q}\nabla \cdot \left(q\, \mu_n\, N_c\, e^{(u-w_n)/\alpha_U} \nabla w_n\right) \text{=3D } R, \\ \frac{\partial}{\partial t}\left(N_v\, e^{(w_p-u)/\alpha_U}\right) + \frac{1}{q}\nabla \cdot \left(q\, \mu_p\, N_v\, e^{(w_p-u)/\alpha_U} \nabla w_p\right) \text{=3D } R. \end{array}$$

Les conditions aux limites aux contacts ohmiques deviennent

$$w_n \text{=3D} w_{nd}, \quad w_p \text{=3D} w_{pd}.$$

et restent inchangées pour u. Les conditions aux limites aux bords isolants deviennent

$$\frac{\partial w_n}{\partial \nu} =3D \frac{\partial w_p}{\partial \nu} =3D 0.$$

L'avantage de cette formulation est que les variables w_n, w_p sont aussi des potentiels et sont quantitativement du même ordre que u. De plus, le terme de convection est absorbé.

La principale difficulté est que les trois équations sont fortement **non-linéaires**.

1.3.2 Variables de Slotboom (u, η, ρ)

On définit les variables de **Slotboom** (uniquement dans le semi-conducteur) η et ρ par les relations suivantes

$$\begin{aligned} \eta &=3D e^{-w_n/\alpha P U}, \\ \rho &=3D e^{w_p/\alpha P U}. \end{aligned}$$

Le système devient alors

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\varepsilon \nabla u) &=3D q\Big(N_c\, e^{u/\alpha P U} \eta - N_v\, e^{-u/\alpha P U} \rho - N \Big), \\ \frac{\partial}{\partial t}\left(N_c\, e^{u/\alpha P U} \eta \right) + \frac{1}{q} \nabla \cdot \left(q\, \mu_n\, N_c\, U_T\, e^{u/\alpha P U} \nabla \eta \right) &=3D R, \\ \frac{\partial}{\partial t}\left(N_v\, e^{-u/\alpha P U} \rho \right) + \frac{1}{q} \nabla \cdot \left(q\, \mu_n\, N_v\, U_T\, e^{-u/\alpha P U} \nabla \rho \right) &=3D R. \end{aligned}$$

Les conditions aux contacts ohmiques deviennent

$$\begin{aligned} \eta &=3D e^{-w_{nd}/\alpha P U} \\ \rho &=3D e^{w_{pd}/\alpha P U}. \end{aligned}$$

Les conditions aux limites aux bords isolants s'écrivent

$$\frac{\partial \eta}{\partial \nu} =3D \frac{\partial \rho}{\partial \nu} =3D 0.$$

Les variables de **Slotboom** sont des grandeurs qui prennent des valeurs **très élevées**. Pour cette raison, l'approche numérique du système sous cette forme a toujours été évitée. Elles sont, par contre, très adaptées à l'analyse mathématique. En effet, chaque équation de continuité est auto-adjointe (plus de convection) et linéaire dans le terme divergentiel lorsqu'on utilise un algorithme découplé.

1.4 Normalisation et Jonction $P - N$

Les variables dépendantes dans les équations de base des semi-conducteurs ont des ordres de grandeur considérablement différents et montrent un comportement fortement différent dans les régions de charge d'espace. La première étape vers une analyse structurale des équations de base est une normalisation appropriée. Les avantages d'une normalisation sont de faire intervenir

quantité	symbole	valeur
x	L	$\sqrt{\dfrac{\varepsilon kT}{q^2 n_i}}$
u	u_0	$\dfrac{kT}{q}$
$n,\ p,\ N$	$\tilde{N}$	n_i
D_n, D_p	$\tilde{D}$	$1cm^2s^{-1}$
μ_n, μ_p		$\dfrac{\tilde{D}}{u_0}$
R		$\dfrac{\tilde{D}\tilde{N}}{L^2}$
t		$\dfrac{L^2}{\tilde{D}}$

TAB. 1.2: Normalisation de DeMari

- des variables du même ordre de grandeur,
- des variables adimensionnalisées.

Plusieurs normalisations pour les équations de base des semi-conducteurs ont été introduites. Nous rappelons trois normalisations étudiées dans [21, 30, 31, 80, 123, 124].

Une normalisation standard a été donnée par DeMari dans [30, 31] dont les paramètres sont récapitulés dans le Tableau 1.2.

Les équations de bases normalisées s'écrivent alors

$$\Delta u - (n - p - N) =3D\ 0 \tag{1.23}$$

$$\nabla \cdot (D_n \nabla n - \mu_n n \nabla u) - R(u, n, p) =3D \frac{\partial n}{\partial t} \tag{1.24}$$

$$\nabla \cdot (D_p \nabla p + \mu_p p \nabla u) - R(u, n, p) =3D \frac{\partial p}{\partial t} \tag{1.25}$$

$$J_n =3D D_n \nabla n - \mu_n n \nabla u \tag{1.26}$$

$$J_p =3D D_p \nabla p + \mu_p p \nabla u. \tag{1.27}$$

Toutes les quantités de (1.23)-(1.27) sont normalisées. les opérateurs différentiels sont pris dans l'espace des variables adimensionnalisées. Pour ne pas alourdir les notations, les quantités normalisées ont été notées par les mêmes symboles que précédemment. Notons que les équations (1.23)-(1.27) ont été multipliées par une combinaison des facteurs de normalisation, *i.e.* l'équation (1.23) par $L^2/\alpha_0 D$, les équations (1.24), (1.25) par $L^2/(\alpha\tilde{D}\tilde{N})$ et les équations (1.26), (1.27) par $-L/(\alpha\tilde{D}q\tilde{N})$.

quantité	symbole	valeur
x	L	$max\|x-y\|x,y \in \Omega$
u	u_0	$\frac{kT}{q}$
$n,\ p,\ N$	$\tilde{N}$	$max\|N(x)\|x \in \Omega$
$D_n,\ D_p$	$\tilde{D}$	$max(D_n(x), D_p(x))x \in \Omega$
$\mu_n,\ \mu_p$		$\frac{\tilde{D}}{u_0}$
R		$\frac{\tilde{D}\tilde{N}}{L^2}$
t		$\frac{L^2}{\tilde{N}}$

TAB. 1.3: Best scaling

Une deuxième normalisation a été présentée dans [123, 124] et développée dans [80]. Ses paramètres sont récapitulés dans le Tableau 1.3.

Les équations de base s'écrivent alors

$$\lambda^2 \Delta u - (n - p - N) =3D\ 0 \tag{1.28}$$

$$\nabla \cdot (D_n \nabla n - \mu_n\, n \nabla u) - R(u,n,p) =3D \frac{\partial n}{\partial t} \tag{1.29}$$

$$\nabla \cdot (D_p \nabla p + \mu_p\, p \nabla u) - R(u,n,p) =3D \frac{\partial p}{\partial t} \tag{1.30}$$

où $\lambda^2 =3D\, \varepsilon_0/\alpha \tilde{D}^3(q\tilde{N})$, les relations du courant après normalisation apparaîssent formellement identiques à (1.26),(1.27). Aussi les équations de continuité (1.29),(1.30) sont identiques à (1.24),(1.25). Néanmoins le paramètre de normalisation diffère de l'ordre de grandeur. Les équations (1.28)-(1.30) et les équations de courant ont été aussi multipliées par une combinaison des facteurs de normalisation, *i.e.* l'équation (1.23) a été multipliée par $\varepsilon/\alpha \tilde{D}\tilde{N}q$, les équations (1.24), (1.25) par $L^2/\alpha\tilde{N}\tilde{D}(\tilde{D})$ et les équations (1.26), (1.27) par $-L/\alpha\tilde{D}\tilde{N}(q\tilde{D})$.

Une troisième normalisation a été donnée par Brezzi, voir [21], les grandeurs de référence pour la normalisation et les quantités adimensionnalisées sont récapitulées dans le tableau 1.4.

$$u =3D \frac{q\, L^2\, \tilde{N}}{\varepsilon} u_s,\ n =3D \tilde{N}\, n_s,\ p =3D \tilde{N}\, p_s$$

$$J_n =3D \frac{q\,\tilde{\mu}\, U_T\, \tilde{N}}{L} J_{n_s},\ J_p =3D \frac{q\,\tilde{\mu}\, U_T\, \tilde{N}}{L} J_{p_s}\ \lambda =3D \sqrt{\frac{U_T\, \varepsilon}{q\, L^2\, \tilde{N}}}.$$

quantité	symbole	valeur
x	L	$max\|x-y\|x, y \in \Omega$
n, p, N	$\tilde{N}$	$max\|N(x)\|x \in \Omega$
u	u_0	$\dfrac{qL^2\tilde{N}}{\varepsilon}$
D_n, D_p	$\tilde{D}$	$max(D_n(x), D_p(x))x \in \Omega$
μ_n, μ_p		$\dfrac{\tilde{D}}{u_T}$
R		$\dfrac{\tilde{D}\tilde{N}}{L^2}$
t		$\dfrac{L^2}{\tilde{D}}$

TAB. 1.4: Normalisation de Brezzi

Le problème devient

$$\Delta u_s =3D n_s - p_s - N_s,$$
$$\nabla \cdot J_{n_s} =3D R_s, \lambda^2 J_{n_s} =3D \mu_n(\lambda^2 \nabla n_s - n_s \nabla u_s),$$
$$\nabla \cdot J_{p_s} =3D -R_s, \lambda^2 J_{p_s} =3D \mu_p(-\lambda^2 \nabla p_s - p_s \nabla u_s),$$
$$u_s =3D U_s + V_{bi_s},\ n_s =3D n_{D_s},\ p_s =3D p_{D_s} \text{sur } \Gamma_D$$

Dans cette normalisation, la région d'épuisement, c'est à dire la région où $\Delta u =3D -N$ est vérifiée, n'est pas nécessairement petite. L'analyse des équations de dérive-diffusion dans la normalisation de Brezzi mène à la résolution de problèmes à frontière libre. Nous supposons que le dispositif occupe encore une région $D \subset \mathbb{R}^2$ avec la frontière $\partial D =3D \Gamma_D \cup \Gamma_N$ voir Figure 1.5 et les conditions aux limites sont

$$u =3D u_d, n =3D n_d, p =3D p_d \text{ sur } \Gamma_D$$
$$\nabla u \cdot \nu =3D J_n \cdot \nu =3D J_p \cdot \nu =3D 0 \text{ sur } \Gamma_N$$

En faisant tendre $\lambda \to 0$ dans les équations, le problème s'écrit alors

$$\Delta u =3D n - p - N, \quad (1.31)$$
$$n \nabla u =3D p \nabla u =3D 0, \quad (1.32)$$
$$\nabla \cdot J_n =3D R,\ \nabla \cdot J_p =3D -R. \quad (1.33)$$

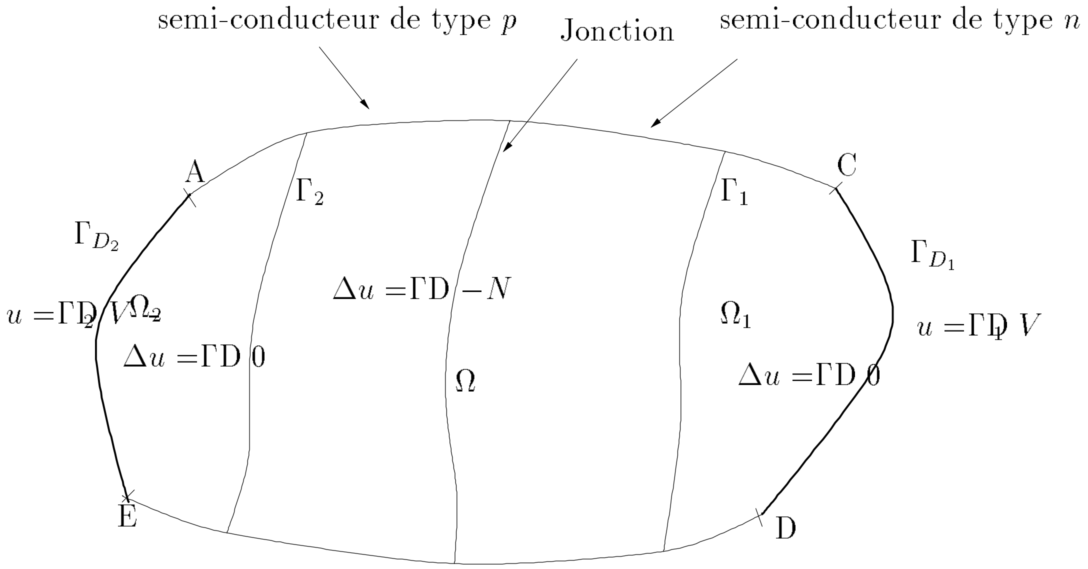

FIG. 1.5: Jonction pn

Ces dernières équations suggèrent que le domaine D se découpe en région où $\nabla u =3D\ 0$ et en région où $n =3D\ p =3D\ 0$ dite zone de dépletion. La solution est donnée par

$$n =3D\ p =3D\ 0,\ \Delta u =3D -N \tag{1.34}$$

et ailleurs la solution vérifie

$$\nabla u =3D\ 0. \tag{1.35}$$

Nous supposerons que les u_d sont constantes par morceaux sur Γ_D, $u_d =3D_1 V$ sur Γ_{D_1} et $u_d =3D_2 V$ sur Γ_{D_2},

$$\begin{cases} \Delta u =3D -N & \text{dans} \quad \Omega \\ u =3D_1 V & \text{sur} \quad \Gamma_{D_1} \\ u =3D_2 V & \text{sur} \quad \Gamma_{D_2} \\ \dfrac{\partial u}{\partial \nu} =3D\ 0 & \text{sur} \quad {}_N\Gamma \\ u =3D_1 V, \Delta u =3D\ 0 & \text{dans} \quad {}_1\Omega \\ u =3D_2 V, \Delta u =3D\ 0 & \text{dans} \quad {}_2\Omega \end{cases} \tag{1.36}$$

En considérant que $u, \nabla u$ sont continus à travers Γ_1 et Γ_2, des frontières de la zone de déplétion. Alors le problème (1.36) s'écrit

$$\begin{cases} \Delta u \ {=}3\mathrm{D}\ -N & \text{dans} \quad \Omega \\ u \ {=}3\mathrm{D}_1\ V & \text{sur} \quad \Gamma_1 \\ u \ {=}3\mathrm{D}_2\ V & \text{sur} \quad \Gamma_2 \\ \dfrac{\partial u}{\partial \nu} \ {=}3\mathrm{D}\ 0 & \text{sur} \quad \partial\Omega \end{cases} \tag{1.37}$$

Nous nous intéressons dans le chapitre 3 à l'étude de ce problème.

Chapitre 2

Éléments d'analyse et Régularité

Dans ce chapitre, nous commençons par donner les principales définitions et propriétés des espaces de Sobolev sur un domaine borné de $\mathbb{R}^n$, les théorèmes d'injection et des résultats de la théorie d'optimisation. Nous rappelons aussi les résultats de régularité des solutions du système d'équations dans un semi-conducteur.

2.1 Espaces de Sobolev

Les espaces de Sobolev peuvent être définis de différentes manières lorsque l'ouvert Ω considéré est à frontière régulière. Les définitions correspondantes peuvent conduire à des espaces différents lorsque la frontière de Ω est peu régulière. Pour cette raison, nous allons tout d'abord rappeler la définition utilisée.

Soit Ω un ouvert de $\mathbb{R}^n$ de frontière Γ. Soit $L^p(\Omega)$ l'espace des fonctions à valeurs réelles dont l'intégrale $\|f\|_p =3D \left(\int_\Omega |f(x)|^p dx\right)^{1/\alpha Dp}$ est finie pour la mesure de Lebesgue dx dans Ω pour $1 \leq p < \infty$ et $\|f\|_\infty =3D \sup \cdot ess_{x \in \Omega} |f(x)|$.

Les espaces de Sobolev $W^{m,p}(\Omega)$ pour tout entier $m \geq 0$ et pour tout nombre p satisfaisant $1 \leq p \leq \infty$, sont définis par

$$W^{m,p}(\Omega) =3D \{v \in L^p(\Omega);\ \forall \alpha \in \mathbb{N}^n,\ |\alpha| \leq m \ \ \partial^\alpha v \in L^p(\Omega)\}.$$

où $\alpha =3D (\alpha_1, \ldots, \alpha_n)$ et $|\alpha| =3D \sum_{i=3D1}^n \alpha_i$.

Théorème 2.1
Muni de la norme

$$\|v\|_{m,p} =3D \left(\sum_{|\alpha| \leq m} \int_\Omega |\partial^\alpha v|^p(x)\, dx\right)^{1/\alpha Dp} \quad \text{si } 1 \leq p < \infty,$$

$$\|v\|_{m,\infty} =3D \sup_{|\alpha| \leq m} \{ess. \sup_{x \in \Omega} |\partial^\alpha v(x)|\} \text{ si } p =3D \infty$$

l'espace $W^{m,p}(\Omega)$ est un espace de Banach.

Nous utilisons également les semi-normes suivantes associées aux normes

$$|v|_{m,p} =3D \left(\sum_{|\alpha|=3\Gamma m} \int_\Omega |\partial^\alpha v(x)|^p \, dx \right)^{1/\alpha D p} \quad \text{si } 1 \leq p < \infty,$$

$$|v|_{m,\infty} =3D \sup_{|\alpha|=3\Gamma m} \{ ess. \sup_{x \in \Omega} |\partial^\alpha v(x)| \} \text{ si } p =3D \infty,$$

nous notons $W_0^{m,p}(\Omega)$ la fermeture de l'espace $\mathcal{D}(\Omega)$ dans l'espace $W^{m,p}(\Omega)$. Dans le cas particulier $p =3D\ 2$, nous adoptons les notations usuelles $W^{m,2}(\Omega) =3D H^m(\Omega)$, $W_0^{m,2}(\Omega) =3D H_0^m(\Omega)$.

2.2 Théorèmes d'injection

2.2.1 Injections de Sobolev

Étant donnés deux espaces normés $(X, \|\cdot\|_X)$ et $(Y, \|\cdot\|_Y)$, nous noterons $X \subset\to Y$ pour exprimer que $X \subset Y$ avec injection continue, il existe $c \geq 0$ tel que $\|x\|_Y \leq c\|x\|_X$ pour tout $x \in X$. Soit Ω un ouvert de $\mathbb{R}^n$ et $j \in \mathbb{N}$, nous désignons par $C_b^j(\Omega)$ l'ensemble des fonctions u telles que $D^\alpha u$ est continue bornée sur Ω pour tout multi-indice $\alpha \in \mathbb{N}^n$ avec $|\alpha| \leq j$. Muni de la norme $\|u\|_{C_b^j(\Omega)} =3D \sum_{|\alpha| \leq j} \|D^\alpha u\|_\infty$, $C_b^j(\Omega)$ est un espace de Banach.

Théorème 2.2 (Théorème d'injection de Sobolev)
Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ un ouvert borné à frontière lipschitzienne. Soit $p \in [1, \infty[, j \in \mathbb{N}, m \in \mathbb{N}^*$, alors

1.) Si $mp < n$

$$W^{j+m,p}(\Omega) \subset\to W^{j,r}(\Omega) \text{ pour tout } p \leq r \leq \frac{np}{n-mp},$$

en particulier pour $j =3D\ 0$

$$W^{m,p}(\Omega) \subset\to L^r(\Omega) \text{ pour tout } p \leq r \leq \frac{np}{n-mp}.$$

2.) Si $mp =3D\ n$

$$W^{j+m,p}(\Omega) \subset\to W^{j,r}(\Omega) \text{ pour tout } p \leq r < \infty,$$

en particulier pour $j =3D\ 0$

$$W^{m,p}(\Omega) \subset\to L^r(\Omega) \text{ pour tout } p \leq r < \infty.$$

2.2.2 Théorème d'injection compacte

Étant donnés deux espaces normés $(X, \|\cdot\|_X)$ et $(Y, \|\cdot\|_Y)$, l'injection de X dans Y est compacte si la boule unité de X est relativement compacte dans Y, toute suite bornée dans X possède alors une sous suite qui converge dans Y. Nous allons voir que dans le cas où l'ouvert Ω est borné, la plupart des injections établies dans le théorème précédent sont compactes. La démonstration de ce résultat se trouve dans [3].

Théorème 2.3 (Théorème de Rellich-Kondrachov)
Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ *un ouvert borné à frontière lipschitzienne. Soit* $p \in [1, \infty[, j \in \mathbb{N}, m \in \mathbb{N}^*$.

1. *Si* $mp \leq n$*, les injections suivantes sont compactes*

$$W^{j+m,p}(\Omega) \subset W^{j,r}(\Omega) \text{ pour tout } p \leq r \leq \frac{np}{n-mp},$$

en particulier pour $j =$3D 0 *l'injection*

$$W^{m,p}(\Omega) \subset L^r(\Omega) \text{ pour tout } p \leq r \leq \frac{np}{n-mp}$$

est compacte.

2. *si* $mp > n$*, les injections suivantes sont compactes*

$$W^{j+m,p}(\Omega) \subset \mathcal{C}_b^j(\Omega)$$

$$\text{et } W^{j+m,p}(\Omega) \subset W^{j,r}(\Omega) \text{ pour tout } 1 \leq r \leq \infty,$$

en particulier pour $j =$3D 0 *l'injection*

$$W^{m,p}(\Omega) \subset L^r(\Omega) \text{ pour tout } p \leq r \leq \infty$$

est compacte.

2.3 Inégalités de Poincaré et Friedrichs

Théorème 2.4
Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ *un ouvert borné et soit* $1 \leq p < \infty$*. Alors, il existe une constante* $c > 0$ *telle que* $\|v\|_p \leq c|v|_{1,p}$ *pour tout* $v \in W_0^{1,p}(\Omega)$.

Théorème 2.5
Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ *un ouvert connexe borné ayant la propriété du cône (en particulier un ouvert connexe, borné, lipschitzien) et soit* $V \subset H^1(\Omega)$ *un sous-espace vectoriel fermé tel que la seule fonction constante appartenant à* V *soit la fonction nulle. Alors, il existe une constante* $c > 0$ *telle que* $\|v\|_{L^2(\Omega)} \leq c|v|_1$ *pour tout* $v \in V$.

Corollaire 2.1
Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ *un ouvert connexe borné et lipschitzien, et soit* $\Gamma_0 \subset \Gamma$ *un sous-ensemble de mesure strictement positive. On pose* $V =$3D $\{u \in^1\!(\Omega) : \gamma_0 u =$3D 0 sur $\Gamma\}$ *où* γ_0 *désigne la trace sur* Γ *des fonctions de* $H^1(\Omega)$*. Alors, il existe une constante* $c > 0$ *telle que* $\|v\|_{L^2(\Omega)} \leq c|v|_1$ *pour tout* $v \in V$.

Pour la démonstration des résultats de cette section, le lecteur peut consulter les ouvrages [3, 53].

2.4 Définitions et théorèmes en optimisation

Dans sette section, nous rappelons quelques résultats sur l'existence, l'unicité des minima. Nous ne les démontrons pas, pour plus de détails, nous renvoyons le lecteur aux références bibliographiques [35, 65].

Soit un problème d'optimisation dans un cadre général

$$J(u) =3D \inf_{v \in V} J(v), \quad u \in V \tag{2.1}$$

où V est un convexe fermé non vide d'un espace de Hilbert H sur $\mathbb{R}$ et J est une fonctionnelle définie sur V à valeurs dans $\overline{\mathbb{R}}$.

Proposition 2.1
Si la fonctionnelle J est convexe, alors tout minimum local est un minimum global. Si de plus, J est strictement convexe, le minimum, quand il existe, est unique.

Définition 2.1
La dérivée de la fonctionnelle J au point v dans la direction w est donnée par

$$J'(v; w) =3D \lim_{t \to 0} \frac{J(v + tw) - J(w)}{t} \tag{2.2}$$

Définition 2.2
On dit que J est Gâteaux-différentiable si $w \mapsto J'(v; w)$ est linéaire continue. Dans ce cas, la Gâteaux-dérivée de J est définie par

$$(J'(v); w) =3D D(J; w) \tag{2.3}$$

Définition 2.3
Si

$$J(v + w) =3D J(v) +'(J), w) + o(w) \text{ où } \lim_{\|w\| \to 0} \frac{o(w)}{\|w\|} =3D 0 \tag{2.4}$$

alors J est dite fréchet différentiable et la dérivée de Fréchet au point v est $J'(v)$.

La différentiabilité au sens de Fréchet et la Gâteaux-différentiabilité sont liées par

Proposition 2.2
La Fréchet-différentiabilité entraîne la Gâteaux-différentiabilité. La réciproque est vraie si la Gâteaux-dérivée $J'(v)$ est continue en v.

Remarque 2.1
La réciproque est en général fausse.

Définition 2.4
On dit que J est semi-continue inférieurement si l'une des propriétés équivalentes suivantes est vérifiée.

1. *$[J \leq \lambda]$ est fermé pour tout $\lambda \in \mathbb{R}$ avec $[J \leq \lambda]$ =3D $\{v \in V : J(v) \leq \lambda\}$,*
2. *pour tout $v \in V$, pour tout λ réel tel que $\lambda < J(v)$, il existe un voisinage U de v tel que $J(v) < \lambda$ pour tout $v \in U$,*
3. *pour tout $v \in V$, on a $J(v) \leq \liminf_{w \to v} f(w)$.*

PROPOSITION 2.3
Soit U un convexe de V. La fonctionnelle J sera convexe si et seulement si sa J' est une application monotone de V dans V^*, c'est-à-dire si :

$$\forall v, w \in V \quad (J'(v) - J'(w); v - w) \geq 0.$$

DÉFINITION 2.5
On dit que J est cœrcive si et seulement si

$$J(u) \to +\infty \text{ quand } \|u\| \to +\infty$$

Le théorème suivant donne un résultat général sur l'existence de minima voir [35].

THÉORÈME 2.6
Si la fonctionnelle J est convexe, propre, semi-continue inférieurement et coercive alors J admet un minimum.

Nous citons un deuxième théorème important en optimisation convexe.

THÉORÈME 2.7
Soit H un espace de Hilbert et V un convexe fermé non vide de H. Si $J : V \to \mathbb{R}$ une fonctionelle convexe et Gâteaux-différentiable. Alors un élément u de V est un minimum si et seulement si

$$\begin{cases} J'(u; v-u) \geq 0 \quad \forall v \in V \quad \text{(cas avec contraintes: Inéquation d'Euler)} \\ ou \\ J'(u) =3D\ 0 \quad V =3D\ H \quad \text{(cas sans contraintes: Équation d'Euler)} \end{cases} \tag{2.5}$$

2.5 Théorème du point fixe de Schauder

THÉORÈME 2.8
Soit C un ensemble non vide compact convexe d'un espace de Banach E. Soit T une application continue qui envoie C dans C. Alors, T possède un point fixe.

Le corollaire qui suit est une extension du théorème précédent. En pratique, il est plus souvent utilisé que le Théorème (2.8). En particulier, il est utilisé pour établir les résultats d'existence pour un problème elliptique semi-linéaire.

COROLLAIRE 2.2
Soit C un ensemble convexe fermé borné non vide d'un espace de Banach E. Soit T une application continue qui envoie C dans C telle que $T(C)$ est précompact (son adhérence est compacte). Alors T possède un point fixe.

Nous rappelons aussi le théorème du à Aubin donnant l'intégrabilité de e^{φ} pour φ appartenant à $H^1(\Omega)$ lorsque $\Omega \subset \mathbb{R}^2$.

Théorème 2.9
Si $\varphi \in H^1(\Omega)$ alors e^{φ} est intégrable. De plus, il existe $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ (constantes positives) telles que pour tout $\varphi \in H^1(\Omega)$, on ait

$$\int_\Omega e^{\varphi(x)} dx \le \alpha_1 e^{\alpha_2 \|\varphi\|_2^2 + \alpha_3 \|\nabla\varphi\|_2^2}. \tag{2.6}$$

Remarque 2.2
Le résultat du théorème ci-dessus n'est pas valable en dimension 3.

Proposition 2.4
Soit $v \in W^{1,p}(\Omega)$. Alors, pour tout réel k, la fonction $(v-k)_\pm \in W^{1,p}(\Omega)$. Si on suppose de plus que la trace de v sur $\partial\Omega$ est bornée et $sup.ess_{x\in\partial\Omega}|v(x)| \le k_0$ alors pour tout $k \ge k_0$, $(v-k)_\pm \in W_0^{1,p}(\Omega)$.

2.6 Régularité des problèmes elliptiques à cœfficients constants

Dans cette section, nous rappelons les résultats de régularité, voir [53], concernant le problème elliptique

$$\Delta u =3D\ f \quad \text{dans } \Omega \tag{2.7}$$

où le bord Γ est polygônal, c'est-à-dire qu'il est l'union d'un nombre fini de segments $\Gamma_j, 1 \le j \le J$. La mesure de l'angle intérieur au point σ_j où Γ_j rejoint Γ_{j+1} est notée ω_j. Sur chaque segment Γ_j on impose une condition de Dirichlet ou de Neumann. Soit une partition de $\{j\ /\alpha D\, 1 \le j \le J\}$ formée de deux sous-ensembles D et N tels que:

$$u_{|\Gamma_j} =3D\, g_j, j \in D, \tag{2.8}$$
$$\nu_j.\nabla u_{|\Gamma_j} =3D\, g_j, j \in N \tag{2.9}$$

et $g_j(\sigma_j) =3D\, g_{j+1}(\sigma_j)$ pour $j, j+1 \in D$. Soit S le sous-ensemble de $\{j\ /\alpha D\, 1 \le j \le J\}$ pour lequel les conditions aux limites sont les mêmes sur Γ_j et Γ_{j+1}; et soit M le sous-ensemble pour lequel les conditions aux limites changent de types de Γ_j à Γ_{j+1}. Le problème est de savoir si pour $f \in L^p(\Omega), (1 < p < \infty)$ on a $u \in W^{2,p}(\Omega)$. On se restreint au cas où les conditions aux limites sont homogènes. Soit r_j la distance de x à σ_j et θ_j l'angle entre le vecteur $\sigma_j x$ et Γ_{j+1} ($\theta_j > 0$ quand $x \in \Omega$ dans un voisinage de σ_j). Nous définissons à présent les fonctions singulières $u_{j,k}$ pour

$$\begin{cases} 1 \le k < \dfrac{\omega_j}{\pi}\dfrac{2}{p'} \ \text{ si } j \in S, \\ 1 \le k < \dfrac{\omega_j}{\pi}\dfrac{2}{p'} + \dfrac{1}{2} \ \text{ si } j \in M \ \text{ et } \omega_j \ne 3D\, \dfrac{\pi}{2}, \dfrac{3\pi}{2}, \\ \ \text{aucun } k, \text{ si } j \in M \text{ et } \omega_j =3D\, \dfrac{\pi}{2}, \\ 1 \le k < \dfrac{3}{p'} + \dfrac{1}{2} \ne 3D\ 2, \ \text{ pour } j \in M \ \text{ et } \omega_j =3D\, \dfrac{3\pi}{2}, \end{cases} \tag{2.10}$$

où $1/\alpha Dp + 1/\alpha Dp =3D 1$.

$$u_{j,k}(x) =3D \begin{cases} r_j^{k\pi/\alpha D\omega} \sin(k\pi \frac{\theta_j}{\omega_j}), \text{ si } j \text{ et } j+1 \in D, \\ r_j^{k\pi/\alpha D\omega} \cos(k\pi \frac{\theta_j}{\omega_j}), \text{ si } j \text{ et } j+1 \in N, \\ r_j^{(k-1/\alpha D2)\pi_j/\alpha D\omega} \sin((k-\frac{1}{2})\frac{\pi}{\omega_j}\theta_j), \text{ si } j \in D \text{ et } j+1 \in N, \\ r_j^{(k-1/\alpha D2)\pi_j/\alpha D\omega} \sin((k-\frac{1}{2})\frac{\pi}{\omega_j}(\omega_j - \theta_j)), \text{ si } j \in N \text{ et } j+1 \in D. \end{cases} \tag{2.11}$$

dans un voisinage de σ_j.

Pour chaque voisinage $\mathcal{V}$ de σ_j, $u_{j,k} \in W^{2,p}(\Omega \setminus \mathcal{V})$ et vérifie les conditions aux limites (2.8) et (2.9) avec $g_j =3D\ 0$.

THÉORÈME 2.10
Supposons que $\omega_j\, \pi/\alpha D(2/p)$ (pour $j \in S$) et $\omega_j\, \pi/\alpha D(2/p+1/\alpha D2$ (pour $j \in M$) ne sont pas des entiers. Soit u une solution de (2.7)-(2.9) avec $f \in L^p(\Omega)$ $(1 < p < \infty)$ et $g_j =3D\ 0, 1 \leq j \leq J$. Alors il existe des constantes $c_{i,j}$ tels que $u - \sum c_{i,j} u_{i,j} \in W^{2,p}(\Omega)$, où on somme sur tous les j tels que $1 \leq j \leq J$ et tous les k vérifiant la condition (2.10).

2.6.1 Cas où Γ_D et Γ_N se joignent à angles droits

LEMME 2.1
on considère le problème elliptique sur le domaine rectangulaire Ω, formé par des segments de Dirichlet et de Neumann qui se joignent à angles droits et f une fonction de $L^2(\Omega)$. Soit u la solution du problème suivant

$$\Delta u =3D\ f \ dans\ \Omega,$$
$$u =3D\ 0\ sur\ \Gamma_D$$
$$\nu \cdot \nabla u =3D\ 0\ sur\ \Gamma_N$$

Dans ce cas $w_j =3D\ \pi/\alpha D2$ pour $1 \leq j \leq 4$, $S =3D\ \emptyset$. La solution u du problème ne présente pas de singularités aux points de changements de conditions aux limites et $u \in H^2(\Omega)$.

2.6.2 Cas où Γ_D et Γ_N se joignent à angles plats

Soit Ω un domaine rectangulaire formé par de segments de Dirichlet et de Neumann qui se joignent à angles droits et à angles plats.

LEMME 2.2
Soient Ω le domaine rectangulaire représenté par la Figure 2.1 et $f \in L^2(\Omega)$. La solution u du problème suivant

$$\Delta u =3D\ f \ dans\ \Omega, \tag{2.12}$$
$$u =3D\ 0\ sur\ \Gamma_D \tag{2.13}$$
$$\nu \cdot \nabla u =3D\ 0\ sur\ \Gamma_N \tag{2.14}$$

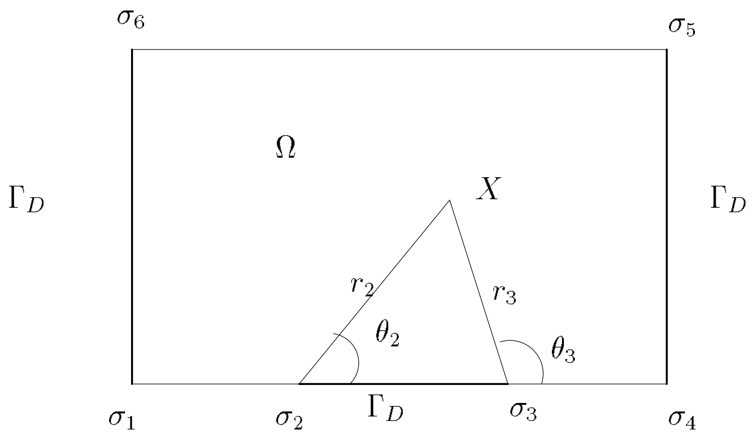

FIG. 2.1: Exemple de changement de conditions aux limites

présente des singularités aux points σ_2 et σ_3,

$$u =3\text{D}\ \phi + c_2\phi_2 + c_3\phi_3,$$

$$\text{où } \phi_2 =3\text{D}\ r_2^{1/\alpha D2} \cos\frac{\theta_2}{2},\ \phi_3 =3\text{D}\ r_3^{1/\alpha D2}\cos\frac{\theta_3}{2},\ c_j \in \mathbb{R} \text{ pour } j =3\text{D}\ 2,3 \text{ et } \phi \in H^2(\Omega).$$

De plus on a

$$\|\phi\|_{2,2} \leq C\|f\|_{L^2(\Omega)} \text{ et } |c_j| \leq C\|f\|_{L^2(\Omega)}\ (j =3\text{D}\ 2,3).$$

REMARQUE 2.3
Notons que la solution de (2.12)-(2.14), n'appartient pas à $H^2(\Omega)$. En fait pour tout $0 < \delta \ll 1$, u est dans $W^{1,4-\delta}(\Omega)$, puisque ϕ_2 et ϕ_3 appartiennent à $W^{1,4-\delta}(\Omega)$, mais n'appartiennent pas à $W^{1,4}(\Omega)$.

LEMME 2.3
La solution u de (2.12)-(2.14) appartient à $\mathcal{W}^{2,2}(\Omega) =3\text{D}\ W^{2,2}(\Omega) \oplus \mathcal{M}$, où $\mathcal{M}$ est le sous espace engendré par les fonctions ϕ_2 et ϕ_3. De plus, elle vérifie l'estimation suivante

$$\|u\|_{\mathcal{W}^{2,2}(\Omega)} \leq C\|f\|_2.$$

Démonstration. D'après le théorème de Sobolev, on a $W^{2,2}(\Omega) \subset C^{0,\lambda}(\Omega)$ pour $0 < \lambda < 1$, et par suite $\phi \in C^{0,\lambda}(\Omega)$. Par contre ϕ_2 et ϕ_3 sont dans $C^{0,1/\alpha D2}(\Omega)$. Nous pouvons donc considérer la solution comme étant entièrement définie à partir du triplet (ϕ, ϕ_2, ϕ_3). Soit donc $\mathcal{M}$ le sous espace engendré par ϕ_2 et ϕ_3. L'ensemble des solutions du problème (2.12)-(2.14) se trouve dans $\mathcal{W}^{2,2}(\Omega) =3\text{D}\ H^2(\Omega) \oplus \mathcal{M}$. Pour $u \in \mathcal{W}^{2,2}(\Omega)$, introduisons la norme suivante

$$\|u\|_{\mathcal{W}^{2,2}(\Omega)} =3\text{D} \left(\|\phi\|_{2,2}^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2\right)^{1/\alpha D2}.$$

Il est clair que $\mathcal{W}^{2,2}(\Omega)$ est un espace de Banach pour cette norme et que la solution u du problème (2.12)-(2.14) vérifie

$$\|u\|_{\mathcal{W}^{2,2}(\Omega)} \leq C\|f\|_2,$$

puisque

$$\|\phi\|_{2,2} \leq C\|f\|_2 \text{ et } |c_j| \leq C\|f\|_2 \text{ pour } j =3D\ 2 \text{ ou } j =3D\ 3.$$

□

PROPOSITION 2.5
Soient Ω le domaine représenté par la figure 2.1, $f \in L^p(\Omega)$ et $u_0 \in W^{2-1/\alpha D p,p}(\Gamma_D)$ avec $1 < p < 4$. On considère le problème non homogène suivant

$$\Delta u =3D\ f \text{ dans } \Omega, \tag{2.15}$$
$$u =3D\ u_0 \text{ sur } \Gamma_D, \tag{2.16}$$
$$\nu \cdot \nabla u =3D\ 0 \text{ sur } \Gamma_N \tag{2.17}$$

Alors
si $1 < p < 4/\alpha D3$, $u \in W^{2,p}(\Omega)$ de plus elle satisfait l'estimation suivante

$$\|u\|_{2,p} \leq C\left[\|f\|_p + \|u_0\|_{2-\frac{1}{p},p}\right].$$

si $4/\alpha D3 \leq p < 4$, alors u est de la forme $u =3D\ \phi + c_2\phi_2 + c_3\phi_3$, où $\phi \in W^{2,p}(\Omega)$ et ϕ_2, ϕ_3 sont dans $W^{1,4-\delta}(\Omega)$ mais n'appartiennent pas à $W^{1,4}(\Omega)$. De plus u satisfait

$$\|u\|_{\mathcal{W}^{2,p}(\Omega)} \leq C\left[\|f\|_p + \|u_0\|_{2-\frac{1}{p},p}\right],$$

où $\mathcal{W}^{2,p}(\Omega)$ =3D $W^{2,p}(\Omega) \oplus \mathcal{M}$, $\mathcal{M}$ étant le sous-espace engendré par les fonctions singulières ϕ_2, ϕ_3.

2.7 Régularité pour des problèmes elliptiques à cœfficients variables

Soit Ω un rectangle tels que Γ_D et Γ_N forment une partition de sa frontière. Les points de jonction entre Γ_D et Γ_N sont à l'intérieur des côtés de Ω, les angles associés sont donc π.

On suppose qu'il existe deux réels a_0, a_1 telles que $0 < a_0 \leq a(x) \leq a_1$ pour tout $x \in \Omega$ et que $f \in L^p(\Omega)$ avec $1 < p < \infty$. Soit le problème suivant

$$\nabla \cdot (a\nabla u) =3D\ f \text{ dans } \Omega, \tag{2.18}$$
$$u =3D\ u_0 \text{ sur } \Gamma_D, \tag{2.19}$$
$$\nu \cdot \nabla u =3D\ 0 \text{ sur } \Gamma_N \tag{2.20}$$

Pour espérer avoir u dans $W^{m,p}(\Omega)$, il faut supposer que $u_0 \in W^{m-\frac{1}{p},p}(\Gamma_D)$. On va donc chercher une condition suffisante sur a pour avoir la même régularité que le problème (2.15)-(2.17).

THÉORÈME 2.11
Si $a \in W^{1,p+\delta}(\Omega), 0 < \delta \ll 1$ et $f \in L^p(\Omega)$ $(p > 1)$, alors la solution du problème (2.18)-(2.20) est dans $W^{1,4-\delta}(\Omega)$. De plus on a

$$u \in \mathcal{W}^{2,q}(\Omega) \text{ où } q =3D\ \frac{(p+\delta)(4-\delta)}{p+4}.$$

Remarque 2.4
Soit u la solution du problème (2.18)-(2.20)

1. *Pour* $a \in W^{1,4+\delta}(\Omega)$ *et* p =3D 2, *la solution* u *est dans* $H^2(\Omega) \oplus \mathcal{M}$.
2. *Pour* $a \in W^{1,\infty}(\Omega)$, *la solution* u *est dans* $W^{2,q_0}(\Omega) \oplus \mathcal{M}$ *où* q_0 =3D $min(p, 4-\delta)$.
3. *On peut donc supposer comme régularité du problème considéré:*

$$u = 3D\ u_R + u_S$$

$$\text{où } u_R \in W^{2,p}(\Omega),\ \text{si } p = 3D\ 2 \text{ ou bien si } p \neq 3D\ 2 \text{ avec } 2 - 2/\alpha Dp$$
$$\text{et } 5/\alpha D2 - 2/\alpha Dp \text{ qui ne sont pas des entiers,}$$
$$\text{et } u_S \in \mathcal{M} \text{ (l'espace engendré par les fonctions}$$
$$\text{exprimant les singularités aux angles plats).}$$

2.8 Régularité des équations de base des semi-conducteurs

Il s'agit de rappeler les résultats donnés par Nachaoui [57, 94]. Pour $t \in [0, 1]$, on considère l'application $F_t : (n, p) \mapsto (n', p')$ définie dans un espace de Banach comme suit:

$$\left\{\begin{array}{l}
\nabla \cdot (\varepsilon \nabla u) = 3D\ t\, q\, (n - p - N) \quad \text{dans} \quad \Omega, \\[2ex]
\nabla \cdot \big(D_n \nabla n' - \mu_n\, n' \nabla u\big) = 3D\ t\, R(n, p, u) \quad \text{dans} \quad \Omega, \\[2ex]
\nabla \cdot \big(D_p \nabla p' + \mu_p\, p' \nabla u\big) = 3D\ t\, R(n, p, u) \quad \text{dans} \quad \Omega, \\[2ex]
u = 3D\ u_0,\ n' = 3D\ n_0,\ p' = 3D\ p_0 \ \text{sur} \quad \Gamma_D, \\[2ex]
\dfrac{\partial u}{\partial \nu} = 3D\ \dfrac{\partial n'}{\partial \nu} = 3D\ \dfrac{\partial p'}{\partial \nu} = 3D\ 0 \quad \text{sur } \Gamma_N
\end{array}\right. \tag{2.21}$$

Notons que l'on ne peut pas utiliser directement le dernier point de la Remarque 2.4 parce que dans la deuxième et troisième équation de (2.21), il y a les termes $\mu_n n' \nabla u$ et $\mu_p p' \nabla u$ où n' et p' sont des inconnues du problème, cela nous conduit à énoncer la propriété de régularité suivante.

Proposition 2.6
Pour un couple (n, p) *de* $L^q(\Omega) \times L^q(\Omega)$ *fixé, avec* $2 \leq q < \infty$, *tel que* $R(u, n, p) \in L^2(\Omega)$ *alors* $(n', p') \in W^{1,4-\delta}(\Omega) \times W^{1,4-\delta}(\Omega)$, *où* δ *est arbitrairement petit* $0 < \delta \ll 1$.

Chapitre 3

Identification d'une frontière libre

L'objectif de ce chapitre est l'étude du problème suivant

$$\left\{\begin{array}{l} -\Delta u =3D\, N \quad \text{dans } \Omega, \\ \Delta u =3D\, 0 \quad \text{dans}_1\, \Omega \\ \Delta u =3D\, 0 \quad \text{dans}_2\, \Omega \\ u =3D_1\, V \quad \text{dans } \Omega_1, \\ u =3D_2\, V \quad \text{dans } \Omega_2, \\ u =3D_1\, V \quad \text{sur } \Gamma_{D_1}, \\ u =3D_2\, V \quad \text{sur } \Gamma_{D_2}, \\ \dfrac{\partial u}{\partial \nu} =3D\, 0 \quad \text{sur}_N\, \Gamma \end{array}\right. \tag{3.1}$$

dont les inconnues sont u et les deux frontières bilatérales Γ_1, Γ_2 délimitant le domaine Ω, voir Figure 3.1. Nous allons montrer que ce problème admet une solution en le formulant en un problème d'inéquation variationnelle. Puis nous donnons son approximation en inéquation variationnelle. Nous considérons le problème suivant, équivalent au problème (3.1),

$$\left\{\begin{array}{l} -\Delta u =3D\, N \quad \text{dans } \Omega, \\ u =3D_1\, V \quad \text{sur } \Gamma_1, \\ u =3D_2\, V \quad \text{sur } \Gamma_2, \\ \dfrac{\partial u}{\partial \nu} =3D\, 0 \quad \text{sur } \partial\Omega \end{array}\right. \tag{3.2}$$

3.1 Formulation en inéquation variationnelle

Dans cette section, Nous allons écrire le problème (3.1) sous forme d'une inéquation variationnelle. Nous avons, voir chapitre 1, $N =3D\, -q_D N\!\!\!/\alpha D\varepsilon$ dans$_1$ Ω et $N =3D\, q_A N\!\!\!/\alpha D\varepsilon$ dans$_2$ Ω alors

$$-\Delta u =3D\, 0 \geq N \text{ dans}_1\, \Omega \text{ et } -\Delta u =3D\, 0 \leq N \text{ dans}_2\, \Omega$$

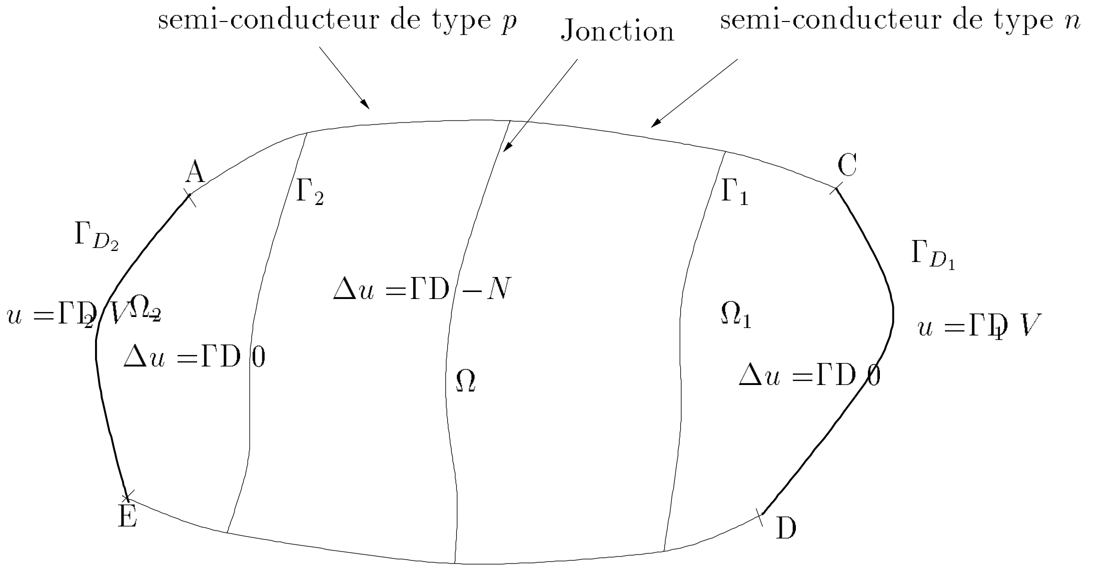

FIG. 3.1: Jonction pn

Alors u satisfait les relations suivantes

$$\begin{aligned} -\Delta u \geq N, \quad u \geq V_2, \quad (u - V_2)(\Delta u + N) =3D\ 0 \quad \text{dans } D \cap \{u < V_1\}, \\ -\Delta u \leq N, \quad u \leq V_1, \quad (u - V_1)(\Delta u + N) =3D\ 0 \quad \text{dans } D \cap \{u > V_2\} \end{aligned} \tag{3.3}$$

où $D =3D\ \Omega_1 \cup \Omega \cup \Omega_2$.

Ces deux relations montrent que u est solution d'un problème à double obstacle V_1 et V_2.

Soit

$$U =3D \left\{ v \in H^1(D), \ \ v =3D\ V_1 \text{ sur } \Gamma_{D_1} \text{ et } v =3D\ V_2 \text{ sur } \Gamma_{D_2} \right\},$$

et considérons le convexe K défini par

$$K =3D\ \{v \in U, V_2 \leq v \leq V_1\}.$$

Considérons la forme bilinéaire $a(\cdot,\cdot)$ définie par

$$a(\varphi, \psi) =3D \int_D \nabla\varphi \cdot \nabla\psi \, dx.$$

D'après (3.3), le problème (3.1) devient voir [1, 44]

trouver $u \in K$ telle que

$$a(u, v - u) \geq \int_D N(v - u)\, dx \ \ \forall v \in K. \tag{3.4}$$

Dans cette formulation les frontières libres n'apparaîssent plus comme inconnues, elles sont obtenues implicitement par la comparaison de la solution à V_1 et V_2.

Afin de donner une approximation par éléments finis du problème (3.4), nous allons rappeler les techniques de discrétisation par éléments finis.

Nous supposons que D est un ouvert polygonal de $\mathbb{R}^2$. Soit $\mathcal{T}_h$ une triangulation de D telle que

$$D = \bigcup_{T \in \mathcal{T}_h} T$$

où les triangles T sont supposés non dégénérés (c'est à dire d'intérieur non vide). $\mathcal{T}^h$ vérifie les propriétés suivantes.

Pour $T, T' \in \mathcal{T}_h$ deux triangles distincts, nous avons

- ou bien T et T' ont une intersection vide,
- ou bien T et T' ont en commun un sommet, (3.5)
- ou bien T et T' ont en commun une arrête.

Nous supposons que la famille de triangulation $\mathcal{T}_h$ est régulière, celà veut dire que

$$\exists\, \alpha > 0, \quad \frac{h_k}{r_k} \leq \alpha, \quad \forall\, T \in \mathcal{T}_h$$

où h_k est le diamètre de T et r_k est le diamètre de la plus grande boule inscrite dans T. Soit T un triangle de $\mathcal{T}_h$, nous désignons par $P_1(T)$ l'ensemble des polynômes de degré inférieur ou égal à 1 sur T. Nous associons à $\mathcal{T}_h$ l'espace usuel d'éléments finis.

$$X_h = \left\{ v_h \in C^0(\overline{D}), \quad v_h|_T \in P_1(T), \quad \forall\, T \in \mathcal{T}_h \right\}.$$

Considérons maintenant le problème d'approximation de l'inéquation (3.4) par la méthode des éléments finis. Définissons U_h par $U_h = X_h \cap U$ et le convexe K_h par

$$K_h = \left\{ v_h \in U_h, \quad V_2 \leq v_h \leq V_1 \right\}.$$

Alors, l'approximation élément fini du problème (3.4) est donnée par

Trouver $u_h \in K_h$ telle que

$$a(u_h, v_h - u_h) \geq \int_D N(v_h - u_h)\, dx\ , \quad \forall v_h \in K_h. \tag{3.6}$$

La forme bilinéaire $a(\cdot,\cdot)$ est symétrique donc la solution de l'inéquation variationnelle (3.6) est celle du problème de minimisation suivant voir [52].

trouver $u_h \in K_h$ telle que

$$J(u_h) \leq J(v_h) \;\; \forall v_h \in K_h \tag{3.7}$$

où $J(v) = \frac{1}{2} a(v,v) - \displaystyle\int_D N\, v\, dx$.

Le problème (3.7) se ramène à un problème de programmation quadratique dans $\mathbb{R}^{n_h}$ [52], où n_h est le nombre d'inconnues du problème (3.7).

Soit $(w_i)_{i=1,\dots,n_h}$ une base d'éléments finis, alors

$$J(v_h) = \frac{1}{2}\overline{V_h}^T \cdot A_h \overline{V_h} - \overline{V_h}^T \cdot \overline{f_h},$$

où A_h est la matrice de rigidité liée à la forme bilinéaire $a(\cdot,\cdot)$, $\overline{V_h} \in \mathbb{R}^{n_h}$ tel que $\overline{V_h} = \{v_{hj}\}_{1\leq j\leq n_h}$ et $\overline{f_h} = \left(\int_D N\, w_j\, dx\right)_{1\leq j\leq n_h}$ où $v_{hj} = v_h(p_j)$ valeur de v au nœud p_j pour $1 \leq j \leq n_h$.

Pour résoudre le problème (3.7), nous pouvons utiliser l'algorithme de sur-relaxation défini comme suit [52].

Étant donné U_0 dans K_h, nous déterminons $\overline{U}_{n+1}$ à partir de $\overline{U}_n$ comme suit

1. Soit $u_i^{n+1/2}$ la solution du problème

$$\frac{\partial J_h}{\partial v_i}(u_1^{n+1}, \dots, u_{i-1}^{n+1}, u_i^{n+1/2}, u_{i+1}^{n}, \dots, u_{N(h)}^{n}) = 0,$$

2. Puis on détermine u_i^{n+1} par

$$u_c = \min(\psi_1, (1-\omega)u_i^n + \omega u_i^{n+1/2}),$$
$$u_i^{n+1} = \max(\psi_2, u_c).$$

L'avantage des inéquations variationnelles est de travailler sur un domaine fixe et donc un maillage fixe ce qui nécessite un seul stockage de la matrice A_h. Un inconvénient majeur de l'utilisation des inéquations variationnelles est que la frontière libre n'est pas déterminée directement, nous ne pouvons pas la déterminer d'une façon très précise. Le moyen le plus simple pour la déterminer ici est la comparaison avec les obstacles. Comme la zone de déplétion est petite par rapport au domaine fixe, un maillage très fin est nécessaire pour identifier les frontières libres, ceci est un autre inconvénient. Pour éviter ce problème, nous proposons dans ce qui suit des méthodes qui permettent d'identifier directement la frontière libre même avec des maillages grossiers. Nous nous intéressons désormais à l'identification des frontières libres Γ_1 et Γ_2 du problème (3.2).

3.2 Paramétrisation et formulation du problème

Nous commençons par donner une paramétrisation du domaine Ω par des fonctions α et β de classes $C^{0,1}(\Omega)$.

Nous considérons la paramétrisation suivante du domaine Ω

$$\Omega(\alpha,\beta) = \left\{(x,y) \in \mathbb{R}^2 : \quad 0 < y < 1,\ \alpha(y) < x < \beta(y) \qquad \text{pour tout} \quad y \in [0,1]\right\}.$$

Notons $\Gamma(\alpha,\beta)$ la frontière du domaine $\Omega(\alpha,\beta)$ et

$$\Gamma_1(\alpha) = \left\{(x,y) \in \mathbb{R}^2 : \quad x = \alpha(y),\ 0 \leq y \leq 1\right\} \subset \Gamma(\alpha,\beta),$$

$$\Gamma_2(\beta) =3D \left\{ (x,y) \in \mathbb{R}^2 : \quad x =3D \beta(y),\ 0 \leq y \leq 1 \right\} \subset \Gamma(\alpha,\beta)$$

où les fonctions paramétrisantes α et β sont des éléments de l'ensemble des fonctions admissibles noté $\mathcal{U}_{ad}$ défini de la façon suivante

$$\mathcal{U}_{ad} =3D \Big\{ (\alpha,\beta) \in \left(C^{0,1}[0,1]\right)^2, \quad a_1 \leq \alpha(y) \leq a_2 < a_3 \leq \beta(y) \leq a_4 \quad \forall\, y \in [0,1],$$

$$\int_{\Omega(\alpha,\beta)} N(x,y)\,dxdy =3D 0,\ |\alpha(y) - \alpha(\bar{y})| \leq a_5|y - \bar{y}|,$$

$$|\beta(y) - \beta(\bar{y})| \leq a_6|y - \bar{y}| \quad \forall\, y,\bar{y} \in [0,1] \Big\}$$

où $a_1, \ldots, a_6$ sont des constantes données.

Alors le problème (3.2) s'écrit

$$\left\{ \begin{array}{l} -\Delta u =3D N \quad \text{dans } \Omega(\alpha,\beta), \\ \\ u =3D V_1 \quad \text{sur } \Gamma_1(\alpha), \\ \\ u =3D V_2 \quad \text{sur } \Gamma_2(\beta), \\ \\ \dfrac{\partial u}{\partial \nu} =3D 0 \quad \text{sur } \Gamma(\alpha,\beta). \end{array} \right. \tag{3.8}$$

Notons que les inconnues de ce problème sont le potentiel u et les deux frontières $\Gamma_1(\alpha)$ et $\Gamma_2(\beta)$. Ce problème est formé d'une équation de Poisson dans $\Omega(\alpha,\beta)$, une condition de Neumann sur tout le bord $\Gamma(\alpha,\beta)$ de $\Omega(\alpha,\beta)$ et deux conditions de Dirichlet sur $\Gamma_1(\alpha)$ et $\Gamma_2(\beta)$. Nous allons donner une formulation variationnelle du problème de Neumann extrait du problème (3.8). Pour ceci, nous considérons le problème d'inconnue u suivant.

$$\left\{ \begin{array}{l} -\Delta u =3D N \quad \text{dans } \Omega(\alpha,\beta), \\ \\ \dfrac{\partial u}{\partial \nu} =3D 0 \quad \text{sur } \Gamma(\alpha,\beta). \end{array} \right.$$

Soit $v \in H^1(\Omega(\alpha,\beta))$, multiplions $-\Delta u$ par v et une intégration par partie nous donne

$$\int_{\Omega(\alpha,\beta)} \nabla u \cdot \nabla v\, dx =3D \int_{\Omega(\alpha,\beta)} N\, v\, dx.$$

Alors une formulation faible du problème (3.8) s'écrit

$$\left\{ \begin{array}{l} \displaystyle\int_{\Omega(\alpha,\beta)} \nabla u \cdot \nabla v\, dx =3D \int_{\Omega(\alpha,\beta)} N\, v\, dx \ \ \forall\, v \in H^1(\Omega(\alpha,\beta)), \\ \\ \qquad u =3D V_1 \text{ sur } \Gamma_1(\alpha), \\ \\ \qquad u =3D V_2 \text{ sur } \Gamma_2(\beta). \end{array} \right. \tag{3.9}$$

Nous nous intéressons dans la section suivante à écrire le problème approché associé au problème (3.9).

3.3 Approximation par éléments finis

Nous présentons une discrétisation du problème (3.9) à l'aide de la méthode des éléments finis et nous donnons le sytème algébrique qui résulte de cette approximation. Soit $h > 0$ un paramètre de discrétisation et considérons $0 =3D y_0 < y_1 < ... < y_{m(h)} =3D 1$ une subdivision de $[0,1]$ telle que $\max_{1\leq j\leq m(h)} |y_j - y_{j-1}| \leq h$.

Soit $\mathcal{U}_{ad}^h$ l'ensemble des fonctions admissibles approché, défini par

$$\mathcal{U}_{ad}^h =3D \Big\{ (\alpha_h, \beta_h) : \alpha_h, \beta_h \in C^0(0,1), \alpha_h, \beta_h \text{ polynômiales par morceaux de degré 1,}$$

$$a_1 \leq \alpha_h(y) \leq a_2 < a_3 \leq \beta_h(y) \leq a_4 \quad \forall y \in [0,1], \int_{\Omega(\alpha_h,\beta_h)} N\, dxdy =3D 0,$$

$$|\alpha_h(y_j) - \alpha_h(y_{j-1})| \leq a_5 |y_j - y_{j-1}|, \quad |\beta_h(y_j) - \beta_h(y_{j-1})| \leq a_6 |y_j - y_{j-1}| \; j =3D 1, ..., m(h) \Big\}$$

où $a_1 - a_6$ sont des constantes. Soient $\Gamma_1(\alpha_h)$ et $\Gamma_2(\beta_h)$ les parties linéaires par morceaux approchant respectivement $\Gamma_1(\alpha)$ et $\Gamma_2(\beta)$. Nous notons par

$$\Omega(\alpha_h, \beta_h) =3D \Big\{ (x,y) \in \mathbb{R}^2 : \quad 0 < y < 1 \;\; \alpha_h(y) < x < \beta_h(y) \Big\}$$

le domaine polygonal défini par les fonctions α_h et β_h.

Considérons $\mathcal{T}^h(\alpha_h, \beta_h)$ une triangulation de $\Omega(\alpha_h, \beta_h)$ telle que

$$\Omega(\alpha_h, \beta_h) =3D \bigcup_{T \in \mathcal{T}^h(\alpha_h,\beta_h)} T$$

où les triangles T sont supposés non dégénérés. $\mathcal{T}^h(\alpha_h, \beta_h)$ vérifie les propriétés (3.5).

Nous supposons que la famille de triangulation $\mathcal{T}^h(\alpha_h, \beta_h)$ est régulière et qu'elle vérifie les conditions de régularité (voir [115]) suivantes

- Pour chaque $h > 0$ fixé, $\mathcal{T}^h(\alpha_h, \beta_h)$ dépend continûment de $(\alpha_h, \beta_h) \in \mathcal{U}_{ad}^h$.

- Pour chaque $h > 0$ fixé, $\mathcal{T}^h(\alpha_h, \beta_h)$ sont topologiquement équivalentes pour $(\alpha_h, \beta_h) \in \mathcal{U}_{ad}^h$, *i.e.* le nombre de nœuds de $\mathcal{T}^h(\alpha_h, \beta_h)$ est le même pour tout $(\alpha_h, \beta_h) \in \mathcal{U}_{ad}^h$ et les nœuds ont le même voisinage.

- La famille $\{\mathcal{T}^h(\alpha_h, \beta_h)\}$ est uniformément régulière par rapport à h et $(\alpha_h, \beta_h) \in \mathcal{U}_{ad}^h$ *i.e.* il existe une constante $\nu_0 > 0$ telle que

$$\nu(h, \alpha_h, \beta_h) \geq \nu_0 \quad \forall\, h > 0, \;\; \forall\, (\alpha_h, \beta_h) \in \mathcal{U}_{ad}^h$$

où $\nu(h, \alpha_h, \beta_h)$ est le plus petit angle intérieur de tous les triangles $\mathcal{T}^h(\alpha_h, \beta_h)$.

Nous associons à $\mathcal{T}^h(\alpha_h, \beta_h)$ l'espace des éléments finis usuel suivant

$$X^h(\Omega(\alpha_h, \beta_h)) =3D \Big\{ v_h \in C^0(\overline{\Omega(\alpha_h, \beta_h)}), \quad v_h|_T \in P_1(T), \quad \forall\, T \in \mathcal{T}^h(\alpha_h, \beta_h) \Big\}.$$

Alors le problème approché associé au problème (3.9) est

$$\left\{\begin{array}{l} \displaystyle\int_{\Omega(\alpha_h,\beta_h)} \nabla u_h \cdot \nabla v_h \, dx =3D \int_{\Omega(\alpha_h,\beta_h)} N\, v_h \, dx, \quad \forall\, v_h \in X^h(\Omega(\alpha_h,\beta_h)), \\ \qquad u_h =3D V_1 \text{ sur } \Gamma_1(\alpha_h), \\ \qquad u_h =3D V_2 \text{ sur } \Gamma_2(\beta_h). \end{array}\right. \tag{3.10}$$

Nous nous intéressons maintenant à la discrétisation du problème (3.10). Posons $\alpha_j =3D \alpha_h(y_j)$ et $\beta_j =3D \beta_h(y_j)$, $j =3D\ 0, 1, ..., m(h)$, alors $\mathcal{U}^h_{ad}$ s'identifie à

$$\begin{array}{rl} \mathcal{U}_h =3D & \Big\{ (\alpha,\beta): \quad \alpha =3D (\alpha_0, ..., \alpha_{m(h)})^T \in \mathbb{R}^{m(h)+1}, \beta =3D (\beta_0, ..., \beta_{m(h)})^T \in \mathbb{R}^{m(h)+1}, \\ & a_1 \le \alpha_j \le a_2 < a_3 \le \beta_j \le a_4 \ \ \forall\, j =3D\ 0, ..., m(h), \displaystyle\int_{\Omega_h(\alpha_h,\beta_h)} N(x,y)\, dxdy =3D\ 0 \\ & |\alpha_j - \alpha_{j-1}| \le a_5 |y_j - y_{j-1}|, \quad |\beta_j - \beta_{j-1}| \le a_6 |y_j - y_{j-1}| \quad j =3D\ 1, ..., m(h) \Big\} \end{array}$$

Supposons que le maillage de $\Omega(\alpha_h,\beta_h)$ soit uniforme dans la direction (Oy), avec un pas de discrétisation $h_y =3D\ 1/\alpha Dm$ tandis que dans la direction (Ox), à chaque niveau de y, nous définissons un pas de discrétisation $h_{x,j} =3D (\beta_j - \alpha_j)/\alpha Dn$ au niveau y_j $yj =3D\ 1, m+1$ alors $n(h) =3D\ (n+1)(m+1)$. Désignons par ϕ_i, $1 \le i \le n(h)$, les fonctions de $X^h(\Omega(\alpha_h,\beta_h))$ vérifiant

$$\phi_i(b_j) =3D \delta_{ij} \ 1 \le i, j \le n(h)$$

où δ_{ij} est le symbole de Kronecker et b_j, $1 \le j \le n(h)$, sont les nœuds de la triangulation $\mathcal{T}^h(\alpha_h,\beta_h)$ tels que $b_j \in \overline{\Omega(\alpha_h,\beta_h)}$.

Alors $(\phi_1, ..., \phi_{n(h)})$ est une base de $X^h(\Omega(\alpha_h,\beta_h))$. D'où tout élément $v_h \in X^h(\Omega(\alpha_h,\beta_h))$ s'écrit

$$v_h =3D \sum_{j=3\Gamma 1}^{n(h)} v_h(b_j)\phi_j =3D \sum_{j=3\Gamma 1}^{n(h)} v_j \phi_j$$

où $v_j =3D v_h(b_j)$ et v_h est un vecteur de $\mathbb{R}^{n(h)}$.

Le problème discrétisé s'écrit

trouver $\alpha =3D (\alpha_1, ..., \alpha_{m+1})^T$, $\beta =3D (\beta_1, ..., \beta_{m+1})^T \in \mathbb{R}^{m+1}$ et $u =3D (u_1, ..., u_{n(h)})^T \in \mathbb{R}^{n(h)}$ tels que

$$\left\{\begin{array}{lll} \sum_{j=3\Gamma 1}^{n(h)} u_j \displaystyle\int_{\Omega_h(\alpha,\beta)} \nabla\phi_j \cdot \nabla\phi_l \, dxdy =3D \int_{\Omega_h(\alpha_h,\beta_h)} N \phi_l \, dxdy & l =3D\ 1, ..., n(h), & (3.11\ i) \\ \displaystyle\sum_{j=3\Gamma 1}^{n(h)} u_j \phi_j(\alpha_l) =3D V_1 & l =3D\ 1, \dots, m+1, & (3.11\ ii) \\ \displaystyle\sum_{j=3\Gamma 1}^{n(h)} u_j \phi_j(\beta_l) =3D V_2 & l =3D\ 1, \dots, m+1. & (3.11\ iii) \end{array}\right. \tag{3.11}$$

Comme les vecteurs α et β sont aussi inconnus, le système algébrique (3.11) est non-linéaire. Dans la section suivante, nous donnons des algorithmes permettant de résoudre le problème (3.11).

3.4 Description des méthodes de résolution

Nous exposons deux méthodes de résolution du problème (3.11). Une première méthode consiste à écrire (3.11) sous la forme $F(U)$ =3D 0 où U =3D (u^T, α, β). En se donnant un vecteur initial U^0 =3D$(u^0, \alpha^0, \beta^0)^T$, nous pouvons calculer une approximation U^k en utilisant des méthodes de type Quasi-Newton. Le test d'arrêt le plus naturel est

$$|U^{k+1} - U^k|_\infty < \delta,$$

où $|U|_\infty$ =3D $\max_{1\leq j\leq m+1} |U_j|$ et δ est la précision désirée. Comme notre but principal est de calculer α et β, nous adoptons le test d'arrêt suivant

$$|\alpha^{k+1} - \alpha^k|_\infty + |\beta^{k+1} - \beta^k|_\infty < \delta, \tag{3.12}$$

où $|\alpha|_\infty$ =3D $\max_{1\leq j\leq M+1} |\alpha_j|$. Nous montrons numériquement que ce test est suffisant. La première méthode est donnée dans l'algorithme suivant

ALGORITHME 3.1

1. *u^0, α^0, β^0 données, k =3D 0*
2. *Trouver (u^k, α^k, β^k) solution de (3.11 i)-(3.11 iii)*
3. *Si le test (3.12) est satisfait aller à 5*
4. *k =3D $k+1$ aller à 2*
5. *Trouver u^k solution de (3.11 i) dans $\Omega(\alpha^k, \beta^k)$.*

Nous utilisons la méthode de Broyden [22]. Cette méthode évite le calcul de la matrice jacobienne à chaque itération. Elle remplace l'évaluation de l'inverse de la matrice jacobienne par une mise à jour de la précédente approximation. Nous comparons le résultat de cet algorithme avec une variante de l'algorithme proposé par Eirola et Nevanlinna [34]. Les deux algorithmes de Quasi-Newton utilisés sont les suivants.

ALGORITHME 3.2
Méthode de Broyden (MB)
Initialisation: u_0, H_0 arbitraires,

Pour k =3D 0,1,2,...:

$$
\begin{aligned}
p_k &=\text{3D}\ -H_k F(u_k),\\
u_{k+1} &=\text{3D}\ u_k + p_k,\\
q_k &=\text{3D}\ F(u_{k+1}) - F(u_k),\\
f_k &=\text{3D}\ H_k^T p_k,\\
H_{k+1} &=\text{3D}\ H_k + \frac{(p_k - H_k q_k) f_k^T}{f_k^T q_k},
\end{aligned}
$$

fin.

ALGORITHME 3.3
Méthode EN (MEN)
Initialisation: u_0, H_0 *arbitraires,*
Pour k =3D 0,1,2,...:

$$
\begin{aligned}
p_k &=\text{3D}\ -H_k F(u_k),\\
q_k &=\text{3D}\ F(u_k + p_k) - F(u_k),\\
f_k &=\text{3D}\ H_k^T p_k,\\
H_{k+1} &=\text{3D}\ H_k + \frac{(p_k - H_k q_k) f_k^T}{f_k^T q_k},\\
\tilde{p}_k &=\text{3D}\ -H_{k+1} F(u_k),\\
u_{k+1} &=\text{3D}\ u_k + \tilde{p}_k,
\end{aligned}
$$

fin.

Notons que la nouvelle approximation H_{k+1} de l'inverse de la matrice jacobienne est utilisée dans l'Algorithme 3.3 pour évaluer le vecteur direction $\tilde{p}_k$. Dans l'Algorithme 3.2, H_k évalue le vecteur direction p_k.

La deuxième méthode est basée sur le découplage de la partie du système algébrique (3.11) contenant les valeurs du potentiel (3.11 *i*) de la partie contenant les nœuds de la frontière libre (3.11 *ii*) et (3.11 *iii*) qui peut s'écrire sous la forme $G(\alpha, \beta)$ =3D 0. Ceci ramène le problème à la résolution d'une façon alternative d'un problème linéaire et d'un problème non-linéaire dont la dimension est très inférieure à celle du problème de départ. Ce découplage introduit une difficulté, la matrice jacobienne n'est pas disponible puisque le système ne s'écrit qu'implicitement en fonction des inconnues. L'algorithme correspondant à cette méthode est le suivant.

ALGORITHME 3.4

1. α^0, β^0 *données,* k =3D 0
2. *Trouver* u^k *solution de (3.11 i) dans* $\Omega(\alpha^k, \beta^k)$

3. Trouver $(\alpha^{k+1}, \beta^{k+1})$ solution de (3.11 ii)-(3.11 iii)

4. Si le test (3.12) est satisfait fin

5. k =3D $k+1$ aller à 2

Remarque 3.1
Pour la première méthode $F(U)$ =3D 0, la méthode de Newton peut être utilisée car la matrice jacobienne peut se calculer tandis que dans la seconde méthode, nous ne pouvons pas calculer cette matrice puisque $G(\alpha, \beta)$ est déterminée implicitement par la résolution d'un système linéaire.

L'utilisation de l'Algorithme 3.4 revient à l'approximation de l'équation de Poisson assujetie à l'une des conditions aux limites sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2$ (condition de Neumann dans l'Algorithme 3.4), et la condition de Neumann sur le reste du bord suivi par la résolution d'un problème non-linéaire écrit en fonction de l'autre condition aux limites sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2$ où les inconnues sont les nœuds des frontières libres. La résolution du système non-linéaire nécessite uniquement la valeur de u ou de sa dérivée normale sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2$ et non les valeurs de u à l'intérieur de Ω. Nous pouvons obtenir ces valeurs en utilisant une formulation en équations intégrales et une approximation par éléments frontières. Nous allons développer cette idée dans la section suivante.

3.5 Équations intégrales, éléments frontières

L'Algorithme 3.4 est une forme d'approximation du problème (3.8) qui fait apparaître le découplage de la condition aux limites. Une écriture de ce problème est

$$\begin{cases} -\Delta u \text{ =3D } N & \text{dans } \Omega(\alpha,\beta), \\ \dfrac{\partial u}{\partial \nu} \text{ =3D } 0 & \text{sur } \partial\Omega \setminus (\Gamma_1(\alpha) \cup \Gamma_2(\beta)), \\ u \text{ =3D } V_1 & \text{sur } \Gamma_1(\alpha), \\ u \text{ =3D } V_2 & \text{sur } \Gamma_2(\beta), \\ \dfrac{\partial u}{\partial \nu} \text{ =3D } 0 & \text{sur } \Gamma_1(\alpha), \\ \dfrac{\partial u}{\partial \nu} \text{ =3D } 0 & \text{sur } \Gamma_2(\beta). \end{cases} \tag{3.13}$$

Cette écriture suggère un autre algorithme où l'étape 2 de l'Algorithme 3.4 est remplacée par une approximation de

$$\begin{cases} -\Delta u =3D\ N & \text{dans } \Omega(\alpha,\beta), \\ \dfrac{\partial u}{\partial \nu} =3D\ 0 & \text{sur } \partial\Omega \setminus (\Gamma_1(\alpha) \cup \Gamma_2(\beta)), \\ u =3D\ V_1 & \text{sur } \Gamma_1(\alpha), \\ u =3D\ V_2 & \text{sur } \Gamma_2(\beta). \end{cases} \tag{3.14}$$

L'étape 3 est remplacée par la résolution du problème

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial \nu} =3D\ 0 & \text{sur } \Gamma_1(\alpha), \\ \dfrac{\partial u}{\partial \nu} =3D\ 0 & \text{sur } \Gamma_2(\beta). \end{cases} \tag{3.15}$$

Notons que dans les deux cas, les valeurs de u ou $\dfrac{\partial u}{\partial \nu}$ sur les frontières sont obtenues implicitement à partir de la résolution d'un problème aux limites du type

$$\begin{cases} -\Delta v =3D\ f & \text{dans } \Omega, \\ \dfrac{\partial v}{\partial \nu} =3D\ 0 & \text{sur } \partial\Omega_N, \\ v =3D\ v_d & \text{sur } \partial\Omega_D. \end{cases} \tag{3.16}$$

Nous exposons dans ce qui suit la formulation par équations intégrales qui permet d'obtenir v et $\dfrac{\partial v}{\partial \nu}$ sur le bord sans faire de discrétisation du domaine. Considérons le problème dans une forme générale, avec condition de Neumann non homogène, alors le problème est

trouver w tel que

$$\begin{cases} -\Delta w =3D\ f & \text{dans } \Omega, \\ w =3D\ w_D & \text{sur } \partial\Omega_D, \\ \dfrac{\partial w}{\partial \nu} =3D\ w_N & \text{sur } \partial\Omega_N \end{cases} \tag{3.17}$$

où le bord de Ω est $\partial\Omega =3D\ \partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N$.

Nous commençons par décrire la méthode des équations intégrales. Le principe de cette méthode est basé sur la recherche d'une solution élémentaire, ou fonction de Green, de l'opérateur Laplace. En dimension 2, nous avons

$$\int_\Omega \Delta_y \log|x-y|\, w(y)\, dy =3D \begin{cases} 2\pi w(x) & \text{si } x \in \Omega, \\ \theta(x) w(x) & \text{si } x \in \partial\Omega, \\ 0 & \text{si } x \in \mathbb{R}^2 \setminus \overline{\Omega}, \end{cases} \tag{3.18}$$

où $x = (x_1, x_2)$, $y = (y_1, y_2)$ et $|x-y| = \left((x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2\right)^{1/2}$ et $\theta(x)$ est l'angle solide.

Afin de donner une représentation intégrale du problème (3.17). Rappelons d'abord que pour un champ W assez régulier, nous avons

$$\int_{\partial\Omega} W(y) \cdot \nu_y \, ds_y = \int_{\Omega} \nabla \cdot W(y) dy, \tag{3.19}$$

où ν_y est le vecteur unitaire normal à $\partial\Omega$ en y.

Soit $x \in \mathbb{R}^2$, posons dans (3.19) $W = w \nabla \log |x - \cdot|$, alors de (3.19) découle

$$\int_{\partial\Omega} w(y) \, \nabla_y \log |x-y| \cdot \nu_y \, ds_y = \int_{\Omega} \nabla_y \cdot (w(y) \, \nabla \log |x-y|) \, dy.$$

D'où

$$\int_{\partial\Omega} w(y) \frac{\partial \log |x-y|}{\partial \nu_y} \, ds_y = \int_{\Omega} \nabla_y w(y) \cdot \nabla_y \log |x-y| \, dy + \int_{\Omega} w(y) \Delta_y \log |x-y| \, dy. \tag{3.20}$$

En appliquant (3.19) cette fois-ci au champs $W = \log |x - \cdot| \nabla w$, nous obtenons

$$\int_{\partial\Omega} \log |x-y| \frac{\partial w(y)}{\partial \nu_y} \, ds_y = \int_{\Omega} \nabla_y w(y) \cdot \nabla_y \log |x-y| \, dy + \int_{\Omega} \log |x-y| \Delta_y w(y) \, dy. \tag{3.21}$$

En soustrayant (3.20) de (3.21), il vient

$$\int_{\partial\Omega} \left(w(y) \frac{\partial \log |x-y|}{\partial \nu_y} - \log |x-y| \frac{\partial w(y)}{\partial \nu_y} \right) ds_y = \int_{\Omega} w(y) \Delta_y \log |x-y| \, dy - \int_{\Omega} f(y) \, \log |x-y| \, dy.$$

D'après l'égalité (3.18), cette dernière égalité devient

$$\int_{\partial\Omega} \left(w(y) \frac{\partial \log |x-y|}{\partial \nu_y} - \log |x-y| \frac{\partial w(y)}{\partial \nu_y} \right) ds_y + \int_{\Omega} f(y) \, \log |x-y| \, dy$$
$$= \begin{cases} 2\pi w(x) & \text{si } x \in \Omega, \\ \theta(x) w(x) & \text{si } x \in \partial\Omega, \\ 0 & \text{si } x \in \mathbb{R}^2 \setminus \overline{\Omega}. \end{cases} \tag{3.22}$$

Considérons $x \in \partial\Omega$, alors (3.22) s'écrit

$$\theta(x) \, w(x) = \int_{\partial\Omega} \left(w(y) \frac{\partial \log |x-y|}{\partial \nu_y} - \log |x-y| \frac{\partial w(y)}{\partial \nu_y} \right) ds_y + \int_{\Omega} f(y) \, \log |x-y| \, dy. \tag{3.23}$$

Cette équation est appelée représentation ou équation intégrale de w sur $\partial\Omega$ et nous nous intéressons maintenant à sa discrétisation. La discrétisation par éléments de frontière consiste à subdiviser la frontière du domaine Ω en un nombre fini d'éléments. Nous allons donner une approximation de (3.23). Nous supposons que les nœuds sont les milieux de chaque élément et que les valeurs de w et de $\dfrac{\partial w}{\partial \nu}$ sont constantes sur chaque élément. La frontière est subdivisée en n éléments c'est à dire $\partial\Omega = \bigcup_{j=1}^{n} \Gamma_j$. Sur chaque élément Γ_j les valeurs de w et de $\dfrac{\partial w}{\partial \nu}$ sont constantes. Alors (3.23) s'écrit

$$\theta(x) \, w(i) = \sum_{j=1}^{n} w(j) \int_{\Gamma_j} \frac{\partial \log |x(i) - y|}{\partial \nu_y} \, ds_y - \sum_{j=1}^{n} q_j \int_{\Gamma_j} \log |x(i) - y| \, ds_y + d(i) \tag{3.24}$$

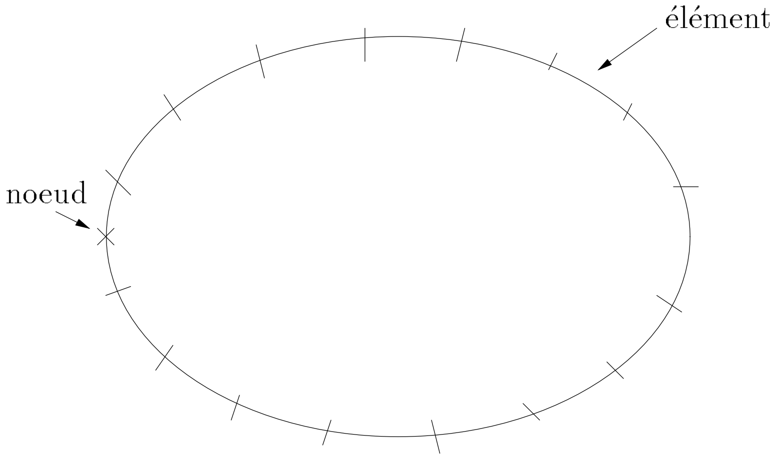

FIG. 3.2: Élément constant

où $q_j =3D\left(\frac{\partial w}{\partial \nu_y}\right)(j)$ et $d(i) =3D\int_\Omega f(y]\log|x(i)-y|\,dy$.

Dans le cas d'éléments constants, la valeur de w et celle de $\frac{\partial w}{\partial \nu}$ sont supposées constantes sur chaque élément et égales à la valeur au point milieu de l'élément. Les points extrêmes sont utilisés simplement pour détérminer la géométrie du domaine.
Notons par u_j la valeur de u associée à l'élément j,

$$q^* =3D\frac{\partial \log|x-y|}{\partial \nu_y} \quad \text{et} \quad u^* =3D \log|x-y|.$$

alors (3.24) devient

$$\theta_i\, w_i + \sum_{j=3\Gamma 1}^{j=3\Gamma n} w_j \int_{\Gamma_j} q^*\, ds =3D\sum_{j=3\Gamma 1}^{j=3\Gamma n} q_j \int_{\Gamma_j} u^*\, ds + d(i). \tag{3.25}$$

Remarquons que nous avons deux intégrales à calculer sur chaque élément *i.e.* $\int_{\Gamma_j} q^\star d\Gamma$ et $\int_{\Gamma_j} u^\star\, d\Gamma$.

Ces intégrales sont reliées au nœud $x(i)$ où la solution fondamentale est appliquée à chaque nœuds $y(j)$. Pour ceci, nous posons

$$\overline{H}_{ij} =3D\int_{\Gamma_j} q^\star\, ds \quad \text{et} \quad G_{ij} =3D\int_{\Gamma_j} u^*\, ds.$$

Alors (3.25) s'écrit

$$\theta_i\, w_i + \sum_{j=3\Gamma 1}^{j=3\Gamma n} \overline{H}_{ij} w_j =3D\sum_{j=3\Gamma 1}^{j=3\Gamma n} G_{ij} q_j + d(i). \tag{3.26}$$

En posant $H_{ij} =3\overline{\mathrm{D}}_{ij}H\!\!\!+ \theta_i\,\delta_{ij}$ où δ denote le symbole de Kronecker, (3.26) devient alors

$$\sum_{j=3\Gamma 1}^{j=3\Gamma n} H_{ij} w_j =3\mathrm{D}\sum_{j=3\Gamma 1}^{j=3\Gamma n} G_{ij} q_j + d(i). \tag{3.27}$$

Nous obtenons alors un système d'équations résultant de l'application de (3.27) à chaque élément de la frontière, que nous écrivons sous la forme matricielle

$$Hw =3\mathrm{D}\; Gq + d, \tag{3.28}$$

où H et G sont deux matrices carrées d'ordre n et u et q sont deux vecteurs de $\mathbb{R}^n$. Notons que n_1 valeurs de u et n_2 valeurs de q sont connues sur Γ_1 et Γ_2 respectivement ($n_1 + n_2 =3\mathrm{D}\; n$), alors il y a n inconnues dans le système d'équations (3.28).

Afin d'introduire les conditions aux limites du problème (3.17), nous pouvons réarranger le système en déplaçant les colonnes de H et G d'un membre à l'autre de l'égalité (3.28) et en regroupant toutes les inconnues dans le premier membre, alors nous obtenons le système

$$AX =3\mathrm{D}\; Y, \tag{3.29}$$

où X est le vecteur contenant les valeurs inconnues de w et q sur la frontière, et Y est calculé en multilpliant les colonnes correspondantes de H et G par les valeurs connues de w et q. L'équation (3.29) peut maintenant être résolue et toutes les valeurs sur le bord domaine seront connues. Ceci nous permet de calculer la solution à l'intérieur du domaine Ω ou ses dérivées. La valeur de w est calculée en chaque point interne en utilisant la formule (3.22). Après avoir discrétisé cette formule, nous obtenons que

$$w_i =3\mathrm{D}\sum_{j=3\Gamma 1}^{j=3\Gamma n} G_{ij}\, q_j - \sum_{j=3\Gamma 1}^{j=3\Gamma n} \overline{H}_{ij}\, w_j + d(i).$$

Les cœfficients G_{ij} et $\overline{H}_{ij}$ sont recalculés à nouveau pour chaque différents points internes. La valeur du flux interne est donnée par

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i =3\mathrm{D}\oint_\Gamma q\,\frac{\partial u^\star}{\partial x}\,d\Gamma - \int_\Gamma u\,\frac{\partial q^\star}{\partial x}\,d\Gamma,$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_i =3\mathrm{D}\oint_\Gamma q\,\frac{\partial u^\star}{\partial y}\,d\Gamma - \int_\Gamma u\,\frac{\partial q^\star}{\partial y}\,d\Gamma.$$

Évaluation des intégrales

Les cœfficients G_{ij} et $\overline{H}_{ij}$ qui apparaîssent dans les expressions précédentes peuvent être calculés en utilisant une formule d'intégration numérique (par exemple quadrature de Gauss) pour le cas $i \neq 3\mathrm{D}\; j$. Dans le cas où i et j sont sur le même élément (*i.e.* $i =3\mathrm{D}\; j$) la singularité de la solution fondamentale nécessite un traitement spécifique. Pour le cas d'éléments constants, les cœfficients G_{ii} et $\overline{H}_{ii}$ se calculent analytiquement, le terme $\overline{H}_{ii}$ est identiquement nul, puisque ν le vecteur normal est perpendiculaire au vecteur $\vec{r}$,voir Figure 3.3

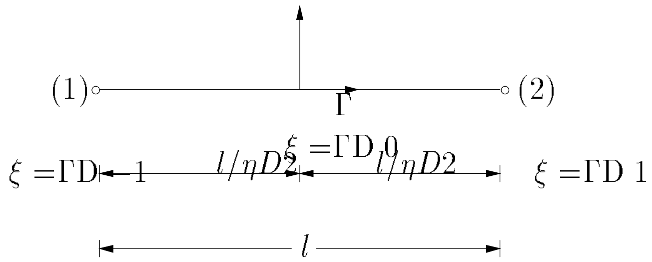

FIG. 3.3: Coordonnées d'élément

$$i.e\ \overline{H}_{ii} =3D \int_{\Gamma_i} q^* \, d\Gamma =3D \int_{\Gamma_i} \frac{\partial u^*}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial \nu} \, d\Gamma =3D 0$$

$$G_{ii} =3D \int_{\Gamma_i} u^* \, d\Gamma =3D \int_{\Gamma_i} ln(\frac{1}{r}) \, d\Gamma.$$

Pour intégrer cette expression, nous utilisons le changement de variable suivant

$$r =3D \frac{l}{2}\xi, \quad d\Gamma =3D dr =3D \frac{l}{2} d\xi$$

où l est la longueur de l'élément. Alors

$$G_{ii} =3D \int_{(1)}^{(2)} ln\left(\frac{1}{r}\right) \, d\Gamma =3D 2\int_{noeud\ i}^{(2)} ln\left(\frac{1}{r}\right) \, dr$$

$$=3D l\int_0^1 ln\left(\frac{2}{l\,\xi}\right) \, d\xi =3D l\left\{ln\left(\frac{2}{l}\right) + \int_0^1 ln\left(\frac{1}{\xi}\right) \, d\xi\right\}.$$

La dernière intégrale vaut 1, par suite

$$G_{ii} =3D l\left\{ln\left(\frac{2}{l}\right) + 1\right\}.$$

Nous exposons, dans la section suivante, des résultats numériques en utilisant les formulations décrites auparavant.

3.6 Résultats numériques

3.6.1 Cas $1-D$

Trouver (α, β) et u telles que

$$\begin{cases} -u'' =3D N \quad \text{dans } (\alpha,\beta) \\ u(\alpha) =3D V_1 \\ u(\beta) =3D V_2 \\ u'(\alpha) =3D u'(\beta) =3D 0 \end{cases} \tag{3.30}$$

Le système algébrique (3.11) associé au problème (3.30) d'inconnue
$U =3D (u_1, ..., u_{n+1}, \alpha, \beta)^T \in \mathbb{R}^{n+3}$ s'écrit

$$\begin{cases} \displaystyle\sum_{j=3\Gamma 1}^{n+1} u_j \int_\alpha^\beta \frac{d\phi_j}{dx}\frac{d\phi_k}{dx} =3D \int_\alpha^\beta N(x)\phi_k(x)\,dx & k =3D 1, ..., n+1 \\ \displaystyle\sum_{j=3\Gamma 1}^{n+1} u_j\phi_j(\alpha) =3D V_1 \\ \displaystyle\sum_{j=3\Gamma 1}^{n+1} u_j\phi_j(\beta) =3D V_2 \end{cases} \tag{3.31}$$

Notons que le pas de discrétisation h et les nœuds $x_1, ..., x_{n+1}$ dépendent de $[\alpha, \beta]$, $h =3D h(\alpha, \beta) =3D (\beta - \alpha)/\alpha D n$ et les fonctions ϕ_j $(j =3D 1, ..., n+1)$ sont données par

$$\phi_j(x) =3D \begin{cases} \dfrac{x - x_{j-1}}{h} & \text{si } x_{j-1} \le x \le x_j, \\ \dfrac{x_{j+1} - x}{h} & \text{si } x_j \le x \le x_{j+1}. \end{cases}$$

Alors le système algébrique (3.31) devient

$$\begin{cases} u_1 =3D V_1, \\ \dfrac{1}{h}(u_1 - u_2) =3D \dfrac{h}{2} N\left(\dfrac{x_1 + x_2}{2}\right), \\ \dfrac{1}{h}(-u_{j-1} + 2u_j - u_{j+1}) =3D \dfrac{h}{2}\left\{N\left(\dfrac{x_{j-1} + x_j}{2}\right) + N\left(\dfrac{x_j + x_{j+1}}{2}\right)\right\} \qquad j =3D 2, \ldots, n, \\ \dfrac{1}{h}(-u_n + u_{n+1}) =3D \dfrac{h}{2} N\left(\dfrac{x_n + x_{n+1}}{2}\right), \\ u_{n+1} =3D V_2. \end{cases} \tag{3.32}$$

Nous allons résoudre ce problème dans le cas d'une jonction linéaire et dans le cas d'une jonction abrupte.

3.6.1.1 Jonction linéaire

Nous présentons, dans cette section, des résultats numériques dans le cas d'une jonction linéaire en équilibre thermique avec $V_1 =3D -V_2$ et $N(x) =3D a\,x$. Les résultats sont obtenus pour $V_2 =3D 2$ et $a =3D 6$, ce qui correspond à un potentiel $u(x) =3D x(3 - x^2)$ et $\beta =3D -\alpha =3D 1$.

N	$-\alpha^0$ et β^0	Tol	B-iter	CPU	$-\alpha$	β
16	1.5	10^{-5}	65	7.90	1.001217	1.001600
16	1.5	10^{-6}	199	33.51	1.001363	1.001295
16	1.5	10^{-8}	876	36.91	1.001363	1.001295
32	1.5	10^{-5}	112	137.24	1.000828	0.999844
32	1.5	10^{-6}	226	389.94	1.000070	1.000460
32	1.5	10^{-8}	2272	411.43	1.000070	1.000460

TAB. 3.1: Méthode de Broyden pour l'Algorithme 3.1

L'Algorithme 3.1 nécessite une donnée initiale u^0, nous prenons alors u^0 une fonction linéaire vérifiant $u^0(\beta^0)$ =3D V_2 et $u^0(\alpha^0)$ =3D V_1. Nous présentons le nombre d'itérations pour chaque algorithme, le temps CPU et les valeurs calculées de α et β pour différentes valeurs de α^0 et β^0.

Dans les Tableaux 3.1-3.8, nous présentons le nombre de noeuds, l'estimé initial α^0 et β^0, le nombre d'itérations, le temps CPU et les valeurs calculées de α et β pour chaque algorithmes. Dans les Tableaux 3.1, 3.2, 3.4 et 3.6, nous posons α^0 =3D -1.5 et β^0 =3D 1.5. Nous nous intéressons à l'effet de la précision Tol dans le test d'arrêt (3.12). Ces derniers tableaux montrent que le nombre d'itérations et le temps CPU augmentent quand on diminue la valeur de Tol, et que les valeurs calculées de α et β avec Tol =3D 10^{-5} ne diffèrent guère de celles calculées pour les autres valeurs de Tol. Dorenavant, nous posons Tol =3D 10^{-5}. Regardons l'effet de l'estimé initial α^0 et de β^0 sur la convergence. Les Tableaux 3.3, 3.4, 3.7 et 3.8 montrent que si on est loin de la solution la convergence est lente pour les choix de α^0 et de β^0 suivants

$$
\begin{aligned}
&(CH_1) \quad -\alpha^0 = \beta^0 = 2 \\
&(CH_2) \quad -\alpha^0 = \beta^0 = 1.5 \\
&(CH_3) \quad -\alpha^0 = \beta^0 = 0.5.
\end{aligned}
$$

En effet, dans le choix (CH_1) les valeurs calculées de α et β traversent, à une itération précise, les valeurs du choix (CH_2). Dans (CH_2) et (CH_3), la distance séparant α^0 et β^0 de α et β est la même et le domaine de (CH_2) contient $(-1,1)$ et celui de (CH_3) est contenu dans $(-1,1)$.
Les Tableaux 3.3 et 3.4 illustrent la rapidité de la méthode EN par rapport à la méthode de Broyden en utilisant l'algorithme 3.1. Les résultats correspondants de l'algorithme 3.4 sont rassemblés dans les Tableaux 3.7 et 3.8. Nous constatons aussi que la méthode EN est plus rapide que la méthode de Broyden en utilisant l'algorithme 3.4. La figure 3.4 met en évidence cette rapidité de convergence puisque la courbe du résiduel en fonction du nombre d'itérations de l'algorithme 3.4 avec la méthode de Broyden est au dessus de celle de cet algorithme avec la méthode EN pour Tol =3D 10^{-5} et $-\alpha^0$ =3D β^0 =3D 2. Pour ceci, les résultats numérique, que nous allons donner dans la suite, utilisent l'Algorithme 3.4 et la méthode EN.

3.6.1.2 Jonction abrupte

Dans cette section, nous testons deux exemples dans le cas où le dopage N présente une discontinuité à la jonction. Nous utilisons l'algorithme 3.4 avec la méthode EN pour V_1 =3D 0 et

N	$-\alpha^0$ et β^0	Tol	EN-iter	CPU	$-\alpha$	β
16	1.5	10^{-5}	44	0.24	1.001304	1.001306
16	1.5	10^{-6}	47	0.26	1.001305	1.001305
16	1.5	10^{-8}	51	0.28	1.001305	1.001305
32	1.5	10^{-5}	92	1.66	1.000338	1.000310
32	1.5	10^{-6}	95	1.71	1.000325	1.000325
32	1.5	10^{-8}	101	1.82	1.000325	1.000325

Tab. 3.2: Méthode EN pour l'Algorithme 3.1

N	$-\alpha^0$ et β^0	B-iter	CPU	$-\alpha$	β
16	0.5	75	8.92	1.001727	1.001306
16	1.5	65	7.90	1.001217	1.001600
16	2	168	33.29	1.001364	1.001295
32	0.5	128	195.87	1.0011598	0.999867
32	1.5	112	137.24	1.000828	0.999844
32	2	222	380.36	1.000070	1.000460

Tab. 3.3: Méthode de Broyden pour l'Algorithme 3.1 avec Tol =3D10^{-5}

N	$-\alpha^0$ et β^0	EN-iter	CPU	$-\alpha$	β
16	0.5	40	0.22	1.001300	1.001301
16	1.5	44	0.24	1.001304	1.001306
16	2	46	0.25	1.001298	1.001303
32	0.5	84	1.52	1.000325	1.000325
32	1.5	92	1.66	1.000338	1.000310
32	2	98	1.77	1.000329	1.000322

Tab. 3.4: Méthode EN pour l'Algorithme 3.1 avec Tol =3D10^{-5}

N	$-\alpha^0$ et β^0	Tol	B-iter	CPU	$-\alpha$	β
16	1.5	10^{-5}	22	0.0228	0.997418	0.997418
16	1.5	10^{-6}	27	0.0251	0.997410	0.997410
16	1.5	10^{-8}	36	0.0288	0.997409	0.997409
32	1.5	10^{-5}	24	0.0326	0.999362	0.999361
32	1.5	10^{-6}	29	0.0447	0.999350	0.999350
32	1.5	10^{-8}	39	0.0449	0.999350	0.999349

Tab. 3.5: Méthode de Broyden pour l'Algorithme 3.4

N	$-\alpha^0$ et β^0	Tol	EN-iter	CPU	$-\alpha$	β
16	1.5	10^{-5}	14	0.0208	0.997416	0.997416
16	1.5	10^{-6}	17	0.0230	0.997409	0.997409
16	1.5	10^{-8}	22	0.0269	0.997409	0.997409
32	1.5	10^{-5}	15	0.0394	0.999358	0.999357
32	1.5	10^{-6}	18	0.0329	0.999350	0.999350
32	1.5	10^{-8}	24	0.0403	0.999340	0.999349

TAB. 3.6: Méthode EN pour l'Algorithme 3.4

N	$-\alpha^0$ et β^0	B-iter	CPU	$-\alpha$	β
16	0.5	24	0.0236	0.997418	0.997418
16	1.5	22	0.0228	0.997418	0.997418
16	2	28	0.0247	0.997410	0.997411
32	0.5	23	0.0315	0.999359	0.999358
32	1.5	24	0.0326	0.999362	0.999361
32	2	23	0.0326	0.999361	0.999361

TAB. 3.7: Méthode de Broyden pour l'Algorithme 3.4 avec $Tol =$3D10^{-5}

N	$-\alpha^0$ et β^0	EN-iter	CPU	$-\alpha$	β
16	0.5	15	0.0226	0.997414	0.997414
16	1.5	14	0.0208	0.997416	0.997416
16	2	16	0.0245	1.006193	1.003675
32	0.5	14	0.0280	0.999357	0.999356
32	1.5	15	0.0294	0.999358	0.999357
32	2	15	0.0286	0.999356	0.999355

TAB. 3.8: Méthode EN pour l'Algorithme 3.4 avec $Tol =$3D10^{-5}