

Résumé de cours M2 Microélectronique

Module : Physique des composants semi-conducteurs 3

Prof. Abdelhamid BENHAYA

Directeur du Laboratoire d'Electronique Avancée
Responsable Salle Blanche

Département d'Electronique
Faculté de Technologie
Université Batna 2

Domaines d'intérêt:

Technologie des semi-conducteurs
(Matériaux et dispositifs photovoltaïques)

e-mail: a.benhaya@univ-batna2.dz
benhaya_abdelhamid@yahoo.fr

Tel: +213 (0)7 73 87 37 84



BIBLIOGRAPHIE

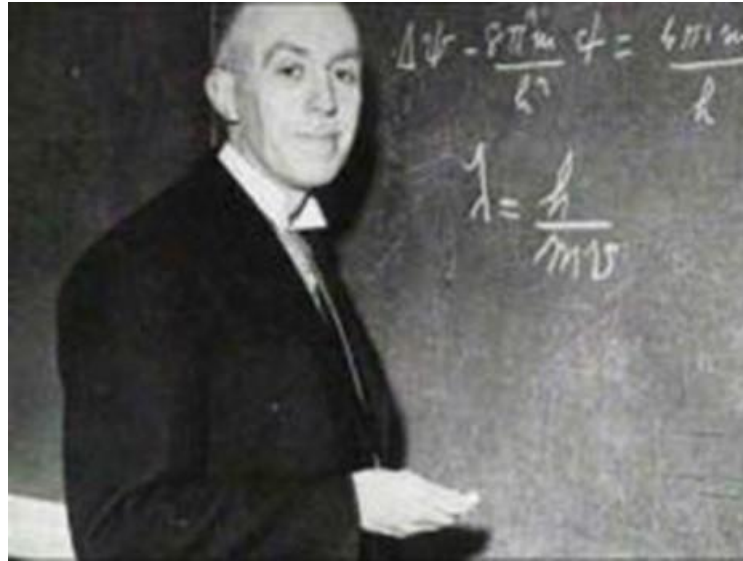
Langue Anglaise

1. Marius Grundmann, The Physics of Semiconductors (Chapter 13), Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006.
2. <https://nanohub.org/resources/5346>
3. <https://nanohub.org/courses/FON2>

Langue Française

1. H. MATHIEU, physique des semi-conducteurs et des composants électroniques (Chapitres 10 et 12) , Dunod, 2001.
2. <https://www.polytech-lille.fr/cours-atome-circuit-integre/>

<https://youtu.be/ig66LuzK8w4>



Partie 1

Effets quantiques dans les hétérojonctions et les structures MIS

PLAN DE L'EXPOSÉ

Partie 1.1: Généralités

- Entre les théories classique et quantique
- Evolution vers l'infiniment petit
- Conséquence de la miniaturisation
- Différentes échelles d'approche
- Longueurs caractéristiques et les Informations déduites
- Effets de la réduction des dimensions
- Différents régimes de transport électronique
- Où se manifestent les effets quantiques
- Exemples d'hétérostructures et effets apparentés

Partie 1.2: Structure de sous-bandes d'énergie

- But de l'étude
- Différentes composantes de l'énergie potentielle et approximations
- Solutions de l'équation de Schrödinger en présence et en l'absence de charges d'espace
- Courbe de dispersion d'énergie
- Approximation du potentiel triangulaire
- Valeurs propres et états propres dans l'approximation triangulaire



PARTIE 1.1: GÉNÉRALITÉS



EFFETS QUANTIQUES

Entre les théories classique et quantique

Les lois de la physique classique décrivent le mouvement des objets à l'échelle macroscopique comme la chute des corps, le mouvement des projectiles et les planètes, etc.

Les constituants de la matière, les atomes et les molécules, obéissent à des lois physiques différentes établies dans le cadre d'une physique plus générale appelée physique quantique.



EFFETS QUANTIQUES

Entre les théories classique et quantique (suite)

Question:

Est-ce que cela veut dire que **les lois fondamentales** de la physique **ne sont pas les mêmes** pour les objets **à l'échelle macroscopique** et pour les objets **à l'échelle microscopiques**?

Réponse:

Non, cela veut simplement dire que **certains effets** de ces lois physiques **peuvent apparaître prépondérants** à **une échelle** alors qu'ils ont **peu d'importance** à l'autre.

Exemple:

Le caractère **ondulatoire** est prépondérant **à l'échelle microscopique** alors qu'il **n'a aucune importance** à l'échelle **macroscopique**.



EFFETS QUANTIQUES

Entre les théories classique et quantique (suite)

Etude classique

L'étude classique d'un système est basée sur la connaissance de ses variables dynamiques: les positions et les vitesses de chacun de ses constituants en appliquant le principe fondamentale de la dynamique (2^{ème} lois de Newton) et connaissant les conditions initiales.

Remarque:

S'il y a présence de charges électriques, il faut aussi connaître le champ électrique et le champ magnétique en tout point de l'espace.



EFFETS QUANTIQUES

Entre les théories classique et quantique (suite)

Etude quantique

L'étude d'un système quantique est basée sur la notion de fonction d'onde en appliquant l'équation de Schrödinger.

Et en outre:

les grandeurs physiques ne sont plus représentées par des fonctions, comme dans l'étude classique, mais par des opérateurs mathématiques (à chaque grandeur physique, on a associé une opération mathématique appelée opérateur).



EFFETS QUANTIQUES

Evolution vers l'infiniment petit

Nombre de transistors par puce

- Microprocesseur d'Intel 4004: contient 2300 transistors
- Microprocesseur d'Intel 8086: contient 29000 transistors
- Microprocesseur d'Intel Pentium 4 D: contient 125 millions transistors
- Microprocesseurs d'Intel Core i3/i5/i7 contiennent 1 750 millions transistors,



EFFETS QUANTIQUES

Evolution vers l'infiniment petit

Précision de la gravure pour les différents μP

- Microprocesseur d'Intel 4004 : **10 μm**
- Microprocesseur d'Intel 8088 : **3 μm**
- Microprocesseur d'Intel Pentium 4 D : **180 à 65 nm**
- Microprocesseurs d'Intel Core i3/i5/i7 : **14 nm**

N.B.: Diamètre d'un cheveu: 50 μm



EFFETS QUANTIQUES

Conséquence de la miniaturisation

- Augmentation des vitesses de fonctionnement des processeurs, grâce à la réduction des distances entre les composants;
- Réduction des coûts, grâce au remplacement de plusieurs circuits par un seul;
- Augmentation de la fiabilité (en supprimant les connexions entre les composants du processeur, on supprime l'un des principaux vecteurs de panne) ;
- Création des ordinateurs bien plus petits;
- Réduction de la consommation énergétique.



EFFETS QUANTIQUES

Différentes échelles d'approche

1. Échelle macroscopique

C'est l'échelle accessible expérimentalement pour laquelle on peut faire des mesures directes : volume, température, pression.... **Dimension > 1 μm** ;

2. Échelle microscopique

C'est l'échelle des composants élémentaires de la matière (atomes, molécules). L'ordre de grandeur de la taille d'un atome est de **10^{-10} m** (soit de l'ordre de l'angström Å). C'est l'échelle où les effets quantiques sont dominants. **Dimension < 100 nm**

3. Échelle mésoscopique

C'est l'échelle intermédiaire entre l'échelle microscopique et l'échelle macroscopique (**Dimensions: 100 nm à 1000 nm**). C'est l'échelle où les effets quantiques commencent à apparaître.



EFFETS QUANTIQUES

Longueurs caractéristiques

Il y a essentiellement **trois longueurs caractéristiques** qui permettent de dire que **les phénomènes quantiques sont importants** dans le système considéré.

1. La longueur d'onde de De Broglie

Elle représente la largeur de la fonction d'onde.

2. Le libre parcours moyen

C'est la distance moyenne parcourue par un électron avant que son impulsion soit changée par une collision;

3. La longueur de déphasage

C'est la distance moyenne parcourue par un électron avant que sa phase initiale change.



EFFETS QUANTIQUES

Informations déduites des longueurs caractéristiques

1. La longueur d'onde de De Broglie

En-deçà de cette longueur caractéristique, les effets de confinement quantique deviennent importants (énergie discrète, niveaux ou bandes d'énergie) et cela se produit quand la longueur d'onde de De Broglie \approx dimension du système

2. Le libre parcours moyen

Lorsque le conducteur a des dimensions supérieures à cette longueur caractéristique, le transport sera considéré comme diffusif, i.e. l'électron fait plusieurs collisions en passant à travers le système. Inversement, lorsque la longueur du conducteur sera plus petite que le libre parcours moyen, le transport sera balistique (sans collision).

3. La longueur de déphasage

Cette longueur est principalement déterminée par les propriétés des impuretés du matériau étudié.



EFFETS QUANTIQUES

Effets de la réduction des dimensions sur les propriétés de transport des électrons

La réduction des dimensions d'un matériau se répercute considérablement sur les propriétés de transport des électrons.

Ainsi, la diffusion sur les défauts, comme les impuretés, produit des effets d'interférence qui modulent le transport d'électrons.

C'est la raison pour laquelle la conductance d'un spécimen oscille en fonction des paramètres expérimentaux pour les systèmes à faibles dimensions.



EFFETS QUANTIQUES

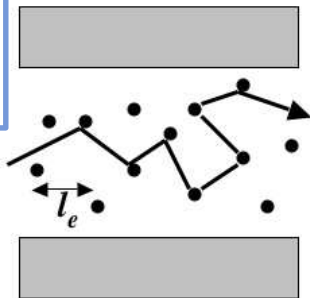
Différents régimes de transport électronique

- a) **Régime diffusif** : Pour ce régime, caractérisé par $L > l_e$, la majorité des collisions ont lieu avec les impuretés
- b) **Régime quasi-balistique**: Dans ce régime, le transport est diffusif selon la direction du fil et balistique suivant la largeur
- c) **Régime balistique** : Pour ce régime, caractérisé par $L < l_e$, les collisions se font avec les parois.

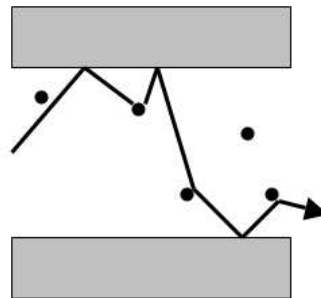
L: longueur du fil

l_e : libre parcours moyen

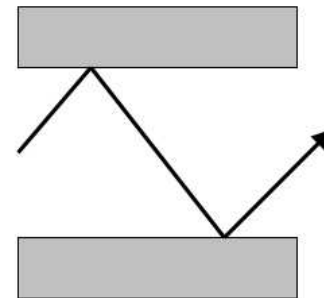
a) Les bords de l'échantillon n'interviennent plus



a) $L \gg l_e$



b) $L > l_e$



c) $L \leq l_e$

c) Les bords de l'échantillon interviennent



EFFETS QUANTIQUES

Où se manifestent les effets quantiques?

Les effets quantiques se manifestent dans des régions dont les **dimensions sont comparables** à la **longueur d'onde** de l'électron.

Pourquoi étudier ces effets?

La raison est que ces effets entraînent **des modifications** dans le comportement des **composants** semi-conducteurs **miniaturisés** et **doivent être pris en compte** dans l'étude de ces nouveaux composants.



EFFETS QUANTIQUES

Exemples d'étude

- le canal de conduction d'un transistor MOS en régime d'inversion;
- Le dispositif le plus simple formé par une série de trois semi-conducteurs (SC2-SC1-SC2), appelé puits quantique;
- Le dispositif formé par une série de couches alternées de deux semi-conducteurs de types différents, appelé superréseau.



HOMOSTRUCTURE ET HÉTÉROSTRUCTURE

Que signifie homo et hétérostructure?

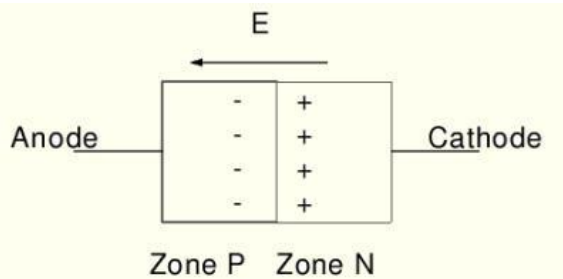
Un composant électronique est constitué par la juxtaposition de deux ou plusieurs couches de matériaux différents et/ou différemment dopés.

Si on a une structure avec deux couches de même nature chimique mais différemment dopées, on parle d'homostucture ou homojonction (ex: diode à jonction).

Si on a une structure constitué de couches de matériaux différents, on parle d'hétérostructure.



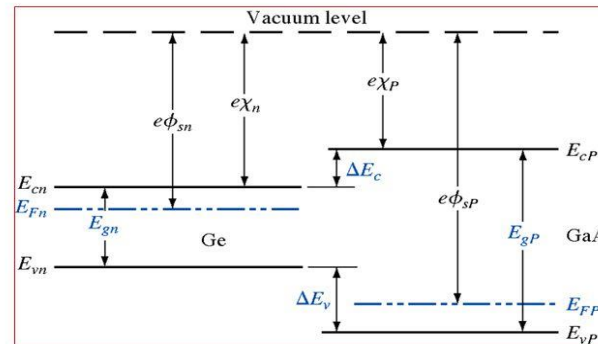
STRUCTURES DE BASE



Jonction pn Contact sc/sc
même nature chimique
Mais dopage différent
(homostructure)

hétérojonction

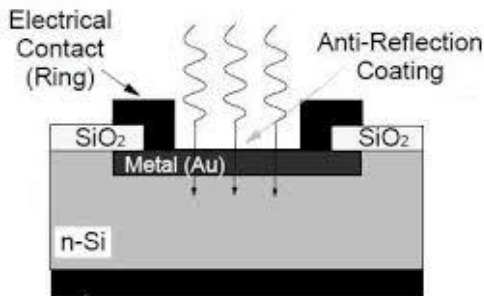
- Contact entre 2 matériaux semiconducteurs différents \leftrightarrow gaps différents \leftrightarrow discontinuité des bandes à la jonction.



$$\Delta E_C = e(\chi_n - \chi_p)$$

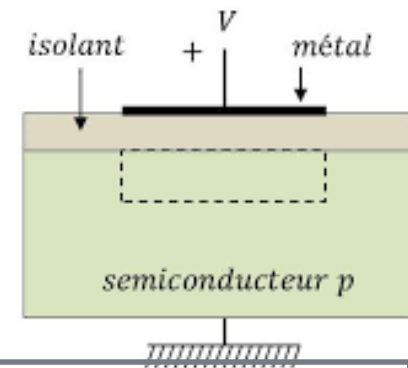
$$\Delta E_C + \Delta E_V = \Delta E_g$$

23



Electrical Contact Schottky Barrier Photodiode

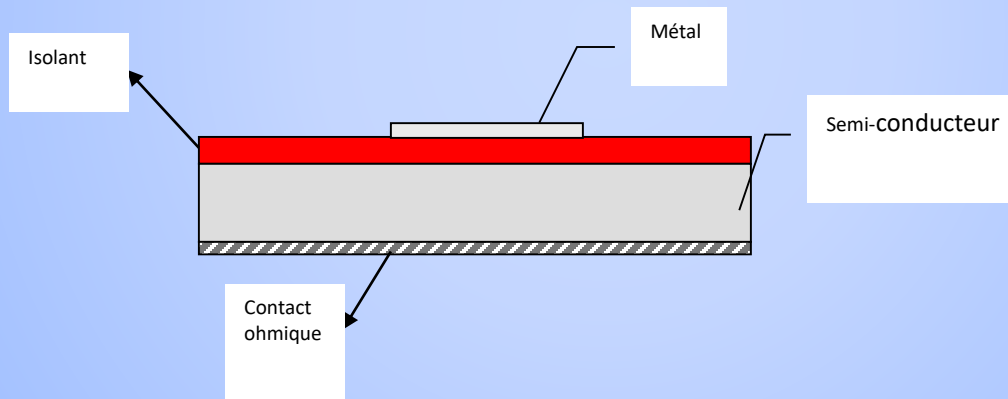
Structure Schottky
(hétérostructure)



Structure MIS Contact
Métal-Isolant-Sc

STRUCTURE MIS

- Une structure **MIS** est un empilement de trois couches : métal, isolant et semi-conducteur.
- Dans le cas où l'isolant est l'oxyde de silicium, la structure est appelée structure MOS.

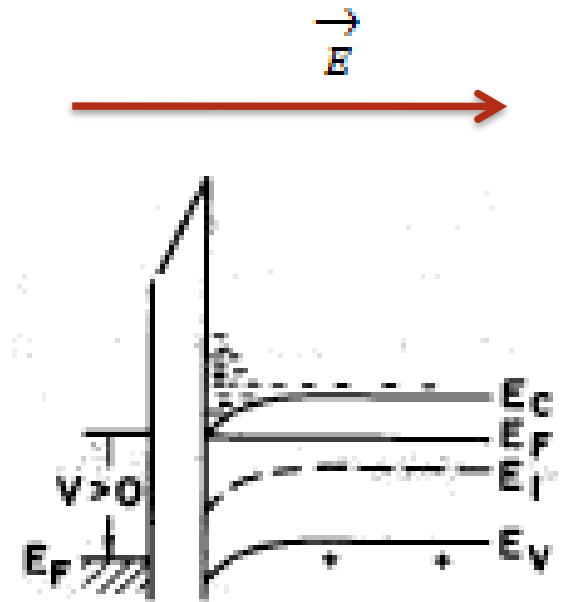


STRUCTURE MIS

Régime d'accumulation

Si la grille est polarisée positivement par rapport au semi-conducteur de type n, les électrons libres du semi-conducteur s'accumulent à l'interface isolant semi-conducteur, ainsi, une zone de charge d'espace négative apparaît au voisinage de cette interface.

$$Q_{sc} + Q_m = 0$$



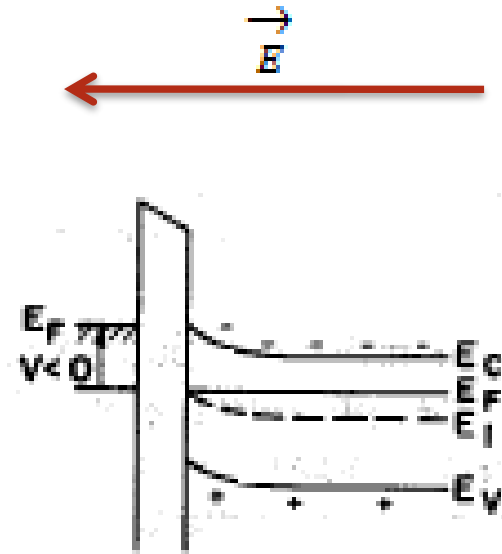
Al-SiO₂-Si(n)



STRUCTURE MIS

Régime de dépeuplement (désertion)

Si la grille est polarisée négativement par rapport au semi-conducteur de type n, les électrons libres du semi-conducteur sont chassés de l'interface, ce qui conduit à une zone déserte chargée positivement qui équilibre la charge négative de l'interface métal isolant



Al-SiO₂-Si(n)



STRUCTURE MIS

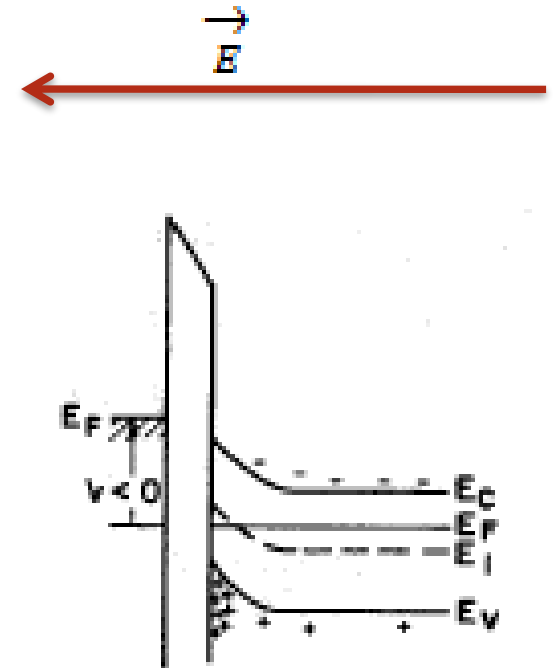
Régime d'inversion

Si on augmente la polarisation négative de la grille, la courbure des bandes du semi-conducteur croît davantage.

Il arrive, pour une certaine polarisation, d'avoir, à l'interface, le niveau E_V plus proche de E_F que le niveau E_C n'est proche de E_F dans le volume du semi-conducteur.

Dans cette situation, la concentration des trous minoritaires à l'interface isolant semi-conducteur devient supérieure à la concentration des électrons.

Il y a donc apparition d'une couche d'inversion séparée par une zone déserte des régions neutres du semi-conducteur ; c'est le régime d'inversion



Al-SiO₂-Si(n)



PHÉNOMÈNE À L'INTERFACE DANS LA STRUCTURE MIS

Que peut-on déduire des différents régimes?

On constate que la densité des porteur de charge à l'interface:

- Varie en fonction de la polarisation de la structure;
- Localisée au voisinage de l'interface, dans un puits de potentiel très étroit,
- Peut être très élevée (Régimes d'accumulation et d'inversion).



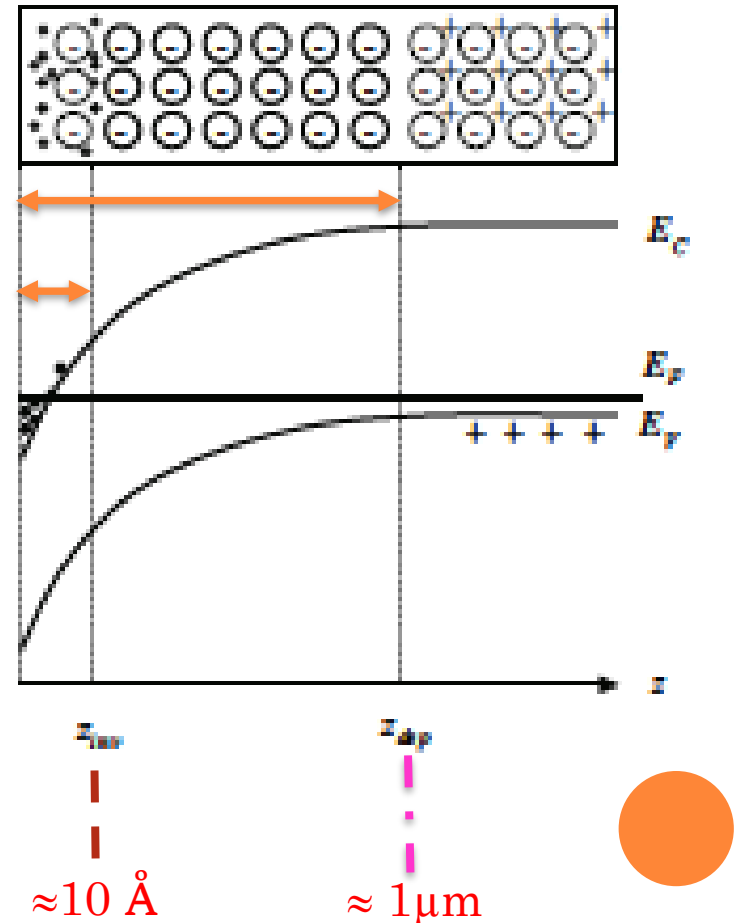
PHÉNOMÈNE À L'INTERFACE DANS LA STRUCTURE MIS

Ordre de grandeur

- $Z_{\text{dep}} \approx 1 \mu\text{m}$;
- $Z_{\text{inv}} \approx 10 \text{\AA}$;
- La densité surfacique de charge d'accumulation ou d'inversion $\approx 10^{-8}$ à $10^{-5} \text{ C.cm}^{-2}$;

Ce qui correspond à la densité surfacique (électrons ou trous selon le cas) de: 10^{10} à 10^{13} cm^{-2}

- La densité surfacique de charge de déplétion $\approx 10^{-8} \text{ C.cm}^{-2}$ ce qui correspond à une densité surfacique de l'ordre de: 10^{11} cm^{-2} .



PHÉNOMÈNE À L'INTERFACE DANS LA STRUCTURE MIS

Ordre de grandeur (suite)

$$\bullet Z_{\text{inv}} \approx 10 \text{ \AA}$$

Le libre parcours moyen d'un électron est donné par:

$$\ell = v_{\text{th}} \cdot \tau_c$$

v_{th} : vitesse thermique $\approx 10^5 \text{ m/s}$ à T ambiante

τ_c = temps de collision : 10^{-13} à 10^{-12} s

Ce qui donne un libre parcours moyen de l'ordre de **100 à 1000 Å**

On remarque que:

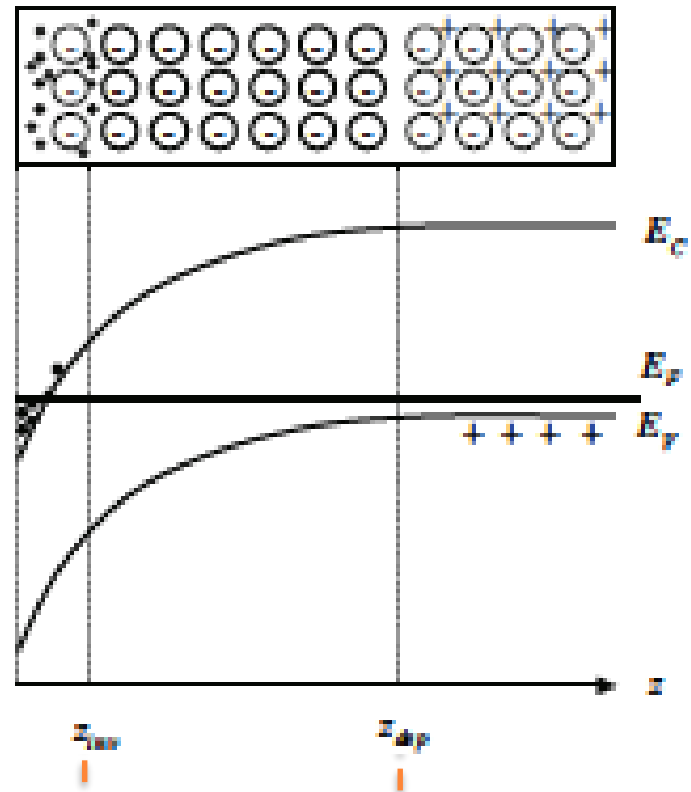
• La largeur du puits de potentiel (**10 Å**) est inférieure au libre parcours moyen des électrons (**100 à 1000 Å**).

• Ces électrons se comportent alors comme des **particules libres** dans un **puits de potentiel**.

• Leur mouvement est conditionné par les réflexions sur les faces du puits.

Conclusion

Leurs **états d'énergie** sont **quantifiés**.



$$\approx 10 \text{ \AA}$$

$$\approx 1 \mu\text{m}$$



ASPECT ONDULATOIRE DES ÉLECTRONS

Ordre de grandeur (suite)

Les électrons dans un matériau semi-conducteur occupent des états d'énergie donnés par l'expression:

$$E = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$$

Ces électrons ont un vecteur et une longueur d'onde liés par la relation:

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{\sqrt{2m_e(E - E_c)}}$$

Si on considère que $E_F - E_C \approx 100 \text{ meV}$, on déduit que:

$$\lambda_F \approx 40 \text{ \AA}$$



ASPECT ONDULATOIRE DES ÉLECTRONS

Que déduit-on de ce qui précède?

On constate que les électrons sont confinés dans un **puits de potentiel** dont la **largeur** est du **même ordre de grandeur** que leur **longueur d'onde** (la longueur de l'onde associée aux électrons est du même ordre de grandeur que la cavité dans laquelle est enfermée cette onde).

Conclusion

Il en résulte l'existence **d'ondes stationnaires**, données par :

$$2 Z_{inv} = n \lambda$$

(n : entier)



ASPECT ONDULATOIRE DES ÉLECTRONS

Que peut-on déduire encore de ce qui précède?

Etant donné que λ est du même ordre de grandeur que z_{inv} , on déduit que l'ordre d'interférence n est petit, et par suite la différence $\delta\lambda$ entre deux ondes stationnaires est grande, c'est-à-dire la différence d'énergie entre les états correspondants, est grande (énergie quantifiée).

Remarque:

Si Z_{inv} devient beaucoup plus grand que λ , alors $\delta\lambda$ devient petit c'est-à-dire la différence d'énergie entre les états correspondants, est petite et la quantification disparaît.



ASPECT ONDULATOIRE DES ÉLECTRONS

Le confinement et les relations d'incertitude

Selon la direction z, la relation d'Heisenberg s'écrit:

$$\Delta z \cdot \Delta p_z > \hbar / 2$$

$\hbar = h/2\pi$ où h la constante de Planck

Δz et Δp_z : sont respectivement les incertitudes de position et d'impulsion suivant z, définie par:

$$\Delta z = \left(\langle z^2 \rangle - \langle z \rangle^2 \right)^{1/2} \quad \Delta p_z = \left(\langle p_z^2 \rangle - \langle p_z \rangle^2 \right)^{1/2}$$



ASPECT ONDULATOIRE DES ÉLECTRONS

Le confinement et les relations d'incertitude

Dans le puits considéré de largeur Z_{inv} , l'incertitude de position Δz vérifie la relation:

$$\Delta z < Z_{\text{inv}}.$$

Il en résulte que l'incertitude d'impulsion Δp_z vérifie nécessairement la condition:

$$\Delta p_z > \hbar/2 Z_{\text{inv}}.$$

Soit:

$$\Delta p_z = \left(\langle p_z^2 \rangle - \langle p_z \rangle^2 \right)^{1/2} > \hbar/2 z_{\text{inv}}$$



ASPECT ONDULATOIRE DES ÉLECTRONS

Le confinement et les relations d'incertitude

D'autre part, l'électron étant confiné dans le puits, il ne peut se propager dans la direction z , son impulsion moyenne suivant z est par conséquent nulle:

$$\langle p_z \rangle = 0.$$

La relation précédente s'écrit donc:

$$\langle p_z^2 \rangle^{1/2} > \hbar / 2z_{inv} \rightarrow \langle p_z^2 \rangle > \hbar^2 / 4z_{inv}^2$$



ASPECT ONDULATOIRE DES ÉLECTRONS

Le confinement et les relations d'incertitude

L'énergie de l'électron dans son mouvement suivant z , qui est donnée par

$$E = \langle p_z^2 \rangle / 2m_e$$

obéit donc à la relation

$$E > \hbar^2 / 8m_e z_{inv}^2$$

Conséquences

- L'électron ne peut pas être au repos au fond du puits
- Son énergie est quantifiée avec une valeur minimum de confinement.



ASPECT ONDULATOIRE DES ÉLECTRONS

Le confinement et les relations d'incertitude

Conclusion:

On déduit de ce qui précède que:

- Les électrons (ou les trous) confinés dans une couche d'inversion ou d'accumulation, se comportent comme un gaz d'électrons (ou de trous) à deux dimensions.
- Leur mouvement est libre dans le plan de la structure (x,y dans ce cas) et est quantifié dans la direction perpendiculaire (z).
- Le calcul classique de la distribution de ces porteurs libres n'est qu'approché, et qu'une étude détaillée doit passer par un traitement quantique du problème.



STRUCTURE DE SOUS-BANDES D'ÉNERGIE



STRUCTURE DE SOUS-BANDES D'ÉNERGIE

But

Calculer les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde des électrons confinés dans une couche d'inversion, ou d'accumulation, au voisinage de la surface du semi-conducteur.

Moyen de calcul

Intégrer l'équation de Schrödinger

$$(T+V(\mathbf{r}))\psi(\mathbf{r})=E \psi(\mathbf{r})$$

- T: opérateur énergie cinétique des électrons;
- V(r) : opérateur énergie potentielle;
- $\psi(\mathbf{r})$: fonction d'onde;
- E: énergie associée à l'état propre.



STRUCTURE DE SOUS-BANDES D'ÉNERGIE

Complexité du problème

La résolution de l'équation de Schrödinger passe préalablement par le **calcul du terme d'énergie potentielle $V(r)$** .

Près de **l'interface isolant – semi-conducteur**, ce terme est relativement **complexe**, et résulte de plusieurs contributions.

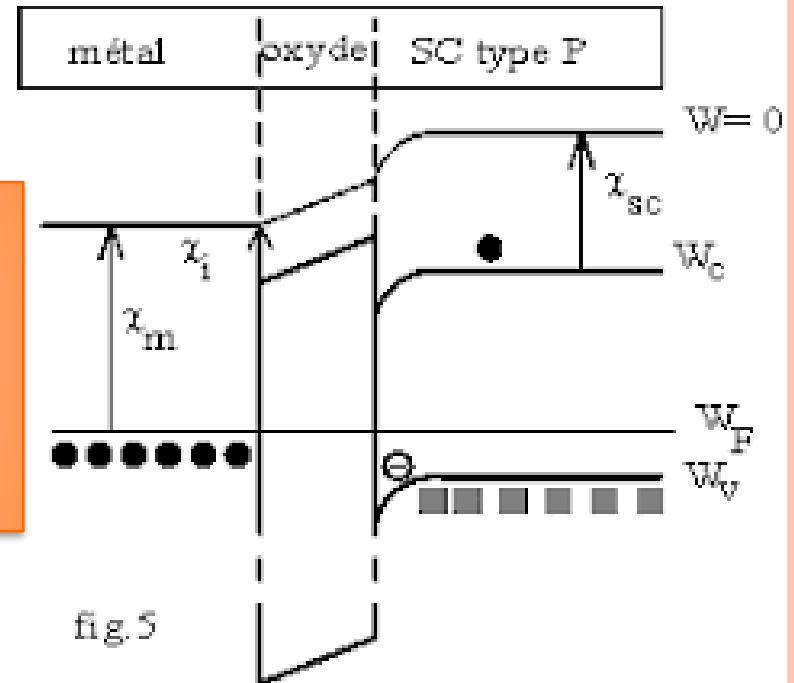
Composantes du terme d'énergie potentielle

- Potentiel périodique du semi-conducteur;
- Potentiel plus lentement variable résultant de la différence des travaux de sortie du métal et du semi-conducteur;
- Potentiel dû à de la présence de la charge d'espace;
- Polarisation éventuelle de la structure;
- Potentiel de l'isolant.



STRUCTURE DE SOUS-BANDES D'ÉNERGIE

- **Composantes du terme d'énergie potentielle**
- Potentiel périodique du semi-conducteur;
- Potentiel résultant de la différence des travaux de sortie du métal et du semi-conducteur;
- Potentiel dû à de la présence de la charge d'espace;
- Polarisation éventuelle de la structure;
- Potentiel de l'isolant



STRUCTURE DE SOUS-BANDES D'ÉNERGIE

Approximation de la hauteur de barrière côté isolant

Elle peut être approximée par la différence des affinités électronique entre l'isolant et le semi-conducteur, soit:

$$e\chi_s - e\chi_i = 4 - 0,85 = 3.15 \text{ eV.}$$

Hypothèse simplificatrice

Compte tenu de cette valeur, nous pouvons supposer que la hauteur de barrière est infinie du côté isolant, donc aucun électron ne passe du semi-conducteur dans l'isolant, c.à.d. la fonction d'onde des électrons s'annule à l'interface isolant-semi-conducteur.

N.B.: Cette hypothèse est justifiée pour une structure MIS, car $d_{\text{iso}} > 100 \text{ \AA}$, mais peu justifiée pour une hétérojonction, car $e\chi_s - e\chi_i$ est faible.



STRUCTURE DE SOUS-BANDES D'ÉNERGIE

Approximation du potentiel cristallin

Hypothèse simplificatrice

On adopte l'approximation de la masse effective utilisée avec succès dans l'étude de tous les composants.

Difficulté de l'approximation

L'approximation de la masse effective atteint dans le cas présent une limite de validité dans la mesure où les électrons sont confinés dans une épaisseur de l'ordre de quelques couches atomiques

Idée de l'approximation

L'approximation de la masse effective consiste à affecter à l'électron la masse effective de la bande de conduction correspondante supposée isotrope et parabolique c.à.d.:

$$m_0 \rightarrow m_e$$



STRUCTURE DE SOUS-BANDES D'ÉNERGIE

Opérateurs dans l'approximation de la masse effective

L'opérateur énergie cinétique:

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta$$

L'opérateur énergie potentielle

$$V(z) = -e \phi(z)$$

Ce potentiel est fonction de la densité de charge par l'équation de Poisson:

$$\frac{d^2 \phi(z)}{dz^2} = -\frac{\rho(z)}{\epsilon_s}$$

Ce potentiel satisfait en outre aux conditions aux limites suivantes:

$$\phi(z \rightarrow \infty) = 0$$

Conservation de la composante
Normale du déplacement



$$\epsilon_i \left(\frac{d\phi}{dz} \right)_{0^-} = \epsilon_s \left(\frac{d\phi}{dz} \right)_0$$



STRUCTURE DE SOUS-BANDES D'ÉNERGIE

Solution en l'absence d'une charge d'espace

En l'absence de charge d'espace la fonction d'onde de l'électron est une fonction propre du potentiel cristallin, c'est-à-dire une **fonction de Bloch**.

$$\psi(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

L'état propre de l'électron est un état de la bande de conduction d'énergie

$$E = E_c + \hbar^2 k^2 / 2m_e$$



STRUCTURE DE SOUS-BANDES D'ÉNERGIE

Solution en présence d'une charge d'espace

En présence d'une charge d'espace, qui est toujours lentement variable devant le potentiel cristallin, la fonction d'onde s'écrit sous la forme du produit d'une onde de Bloch par une fonction enveloppe $\xi_i(z)$ qui est une solution de l'équation de la masse effective.

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \xi_i(z) e^{i(k_x x + k_y y)} \varphi(x, y)$$

L'énergie de l'électron est la somme de son énergie dans la bande de conduction et de l'énergie de son mouvement associé à la présence de la charge d'espace

On déduit alors:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2 \xi_i(z)}{dz^2} + [E_i - V(z)] \xi_i(z) = 0$$

avec

$$\xi_i(z=0) = 0$$

$$\xi_i(z \rightarrow \infty) = 0$$

Il en résulte une structure de sous-bandes d'énergie avec une quantification discrète suivant k_z et une variation pseudo-continue suivant $k_{//}$.

$$E = E_c + E_i + \frac{\hbar^2 k_{//}^2}{2m_e}$$

$$\bar{k}_{//}^2 = k_x^2 + k_y^2$$



STRUCTURE DE SOUS-BANDES D'ÉNERGIE

Courbe de dispersion d'énergie

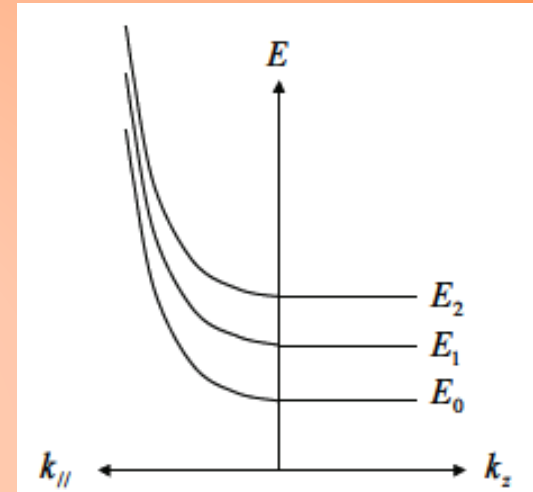
La relation de dispersion est donnée par:

$$E = E_c + E_i + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_e}$$

E_i sont les énergies des électrons dans leur mouvement selon la direction z .

Elles décrivent **la quantification** des états électroniques dans la direction perpendiculaire à l'interface et une variation **pseudo-continue** suivant k_{\parallel} .

Dans le plan de l'interface, le mouvement des électrons n'est pas modifié.



STRUCTURE DE SOUS-BANDES D'ÉNERGIE

Densité d'états (**Rappel**)

A chaque maille élémentaire de l'espace direct, correspond une maille élémentaire de l'espace réciproque.

Les volumes des deux mailles sont données par:

$$V_d = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}$$

$$V_r = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \times \mathbf{C}$$

Comme il y a un point \mathbf{k} (nœud) par maille élémentaire de l'espace réciproque, la densité d'états dans cet espace est donnée par:

$$\nu(\mathbf{k}) = 1/V_r$$

Par conséquent, la densité d'états dans l'espace réciproque par unité de volume du cristal est donnée par:

$$g(\mathbf{k}) = \frac{\nu(\mathbf{k})}{V_d} = \frac{1}{V_d V_r} = \frac{1}{(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c})(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \times \mathbf{C})}$$

Ce qui donne, en tenant compte de la double dégénérescence du spin, après avoir effectué les calculs des volumes:

$$g(\mathbf{k}) = \frac{2}{(2\pi)^3}$$

N.B.: Pour un système à n dimensions: $g(\mathbf{k}) = \frac{2}{(2\pi)^n}$

STRUCTURE DE SOUS-BANDES D'ÉNERGIE

Densité d'états pour la structure étudiée

Le mouvement des électrons, dans notre cas, est limité à deux dimensions. La **densité d'état** dans l'espace des k est donnée par:

$$g(k) = \frac{2}{(2\pi)^2}$$

Par conséquent, le **nombre d'états**, sur le disque de rayon $k_{||}$, est donné par:

$$N(k_{||}) = \frac{2}{(2\pi)^2} \pi k_{||}^2$$

Si on prend l'origine des énergies, dans chacune des sous-bandes, au bas de la sous-bande, l'expression de l'énergie s'écrit:

$$E = \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m_e}$$

$$E = \underbrace{E_c + E_j}_{=0} + \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m_e}$$

Ce qui donne:

$$k_{||}^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} E$$



STRUCTURE DE SOUS-BANDES D'ÉNERGIE

Densité d'états pour la structure étudiée (**suite**)

En remplaçant $k_{//}$ par son expression, on obtient:

$$N(E) = \frac{2}{(2\pi)^2} \pi \frac{2m_e}{\hbar^2} E$$

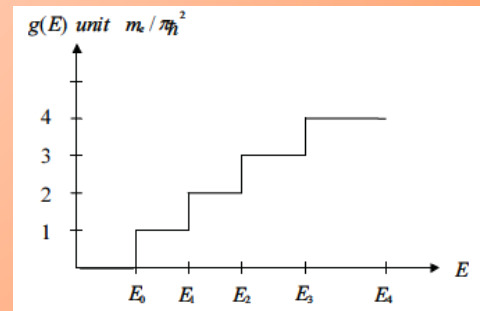
Par conséquent, la densité d'états dans l'espace des énergies, **pour une sous-bande**, est donnée par:

$$g_i(E) = \frac{dN(E)}{dE} = \frac{m_e}{\pi\hbar^2}$$

En tenant compte de **toutes les sous-bandes**, l'expression précédente devient:

$$g(E) = \frac{m_e}{\pi\hbar^2} \sum_i H(E - E_i)$$

Où $H(E - E_i)$ est la fonction de Heaviside.

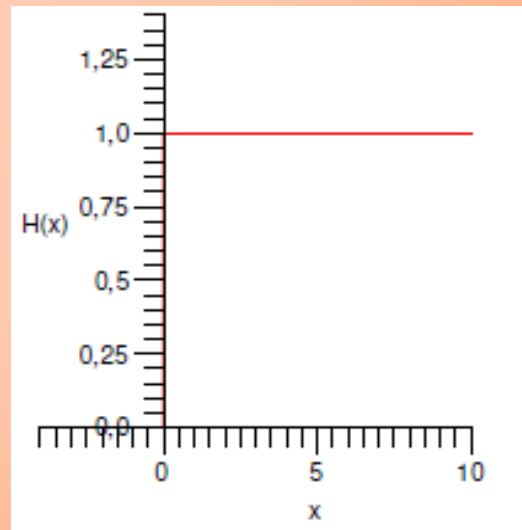


STRUCTURE DE SOUS-BANDES D'ÉNERGIE

Fonction de Heaviside (**Rappel**)

En mathématiques, la **fonction Heaviside**, appelée aussi **fonction échelon unité** ou **fonction marche d'escalier** (**unit step**), est la fonction prenant la valeur 1 pour tous les réels positifs et la valeur 0 pour les réels strictement négatifs.

$$\forall x \in \mathbb{R}, H(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ 1 & \text{si } x \geq 0. \end{cases}$$



STRUCTURE DE SOUS-BANDES D'ÉNERGIE

Densité totale d'électrons dans la couche d'inversion

La population de chaque sous-bande, à la température T, est donnée par:

$$n_i = \int_{E_i}^{\infty} g_i(E) f(E) dE$$
$$n_i = \frac{m_e}{\pi \hbar^2} \int_{E_i}^{\infty} \frac{dE}{1 + e^{(E-E_F)/kT}}$$

Etant donné que l'intégrale de Fermi est donnée par:

$$\int_{E_i}^{\infty} \frac{dE}{1 + e^{(E-E_F)/kT}} = kT \operatorname{Ln}(1 + e^{(E_F-E_i)/kT})$$

la population de la sous-bande i s'écrit:

$$n_i = \frac{m_e}{\pi \hbar^2} kT \operatorname{Ln}(1 + e^{(E_F-E_i)/kT})$$

La densité totale d'électrons dans la couche d'inversion est donnée par $n = \sum n_i$, ce qui donne:

$$n = \frac{m_e}{\pi \hbar^2} kT \sum_i \operatorname{Ln}(1 + e^{(E_F-E_i)/kT})$$



STRUCTURE DE SOUS-BANDES D'ÉNERGIE

Charge d'espace associée à la couche d'inversion

Le carré du module de la fonction enveloppe, $|\xi_i(z)|^2$, représente la probabilité de présence, au point d'abscisse z , d'un électron de la sous-bande i . La distribution spatiale de ces électrons est donnée par:

$$n_i(z) = n_i |\xi_i(z)|^2$$

La distribution spatiale de l'ensemble des électrons de la couche d'inversion s'écrit:

$$n(z) = \sum_i n_i |\xi_i(z)|^2$$

On déduit que la charge d'espace associée à la couche d'inversion est donnée par:

$$\rho_{inv}(z) = -e \sum_i n_i |\xi_i(z)|^2$$

Ce qui donne finalement:

$$\rho_{inv}(z) = -\frac{em_e}{\pi\hbar^2} kT \sum_i \text{Ln}(1 + e^{(E_F - E_i)/kT}) |\xi_i(z)|^2$$



STRUCTURE DE SOUS-BANDES D'ÉNERGIE

Constat

On constate que **la charge d'espace**, résultant de la **présence** de la **couche d'inversion**, est directement liée à la **fonction d'onde électronique** $\xi_i(z)$.

Mais $\xi_i(z)$ est une **solution de l'équation de Schrödinger**, donc fonction de $V(z)$, qui est lui-même **fonction de la densité de charge**.

$$\xi_i(z)=f(V(z)), \quad V(z)=g(\rho(z)) \quad \rho(z)=h(\xi_i(z))$$

Conclusion

Le calcul des états électroniques doit se faire de manière auto-cohérente (**self-consistent**).


$$\rho(z) \rightarrow V(z) \rightarrow \xi_i(z) \rightarrow \rho(z)$$

ENERGIE POTENTIELLE DES ÉLECTRONS

Energie potentielle des électrons

Dans l'approximation de la **masse effective**, les fonctions de base sont les **fonctions de Bloch** et le **potentiel cristallin disparaît**.

La résolution de l'équation:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2 \xi_i(z)}{dz^2} + [E_i - V(z)] \xi_i(z) = 0$$

nécessite la connaissance du terme **d'énergie potentielle $V(z)$** relié au **potentiel électrique $\varphi(z)$** par la relation:

$$V(z) = -e\varphi(z)$$

L'énergie potentielle $V(z)$ résulte donc de la contribution de trois termes à savoir:

$$V(z) = V_{dep}(z) + V_{inv}(z) + V_{im}(z)$$

V_{dep} : potentiel associé aux charges de déplétion;

V_{inv} : potentiel associé aux charge d'inversion;

V_{im} : potentiel image



ENERGIE POTENTIELLE DES ÉLECTRONS

Calcul des différents termes du potentiel de déplétion

1. Potentiel de déplétion

Hypothèses simplificatrices

- Le dopage du semi-conducteur (type p) est homogène;
- La zone de déplétion est vide de porteurs sur une profondeur z_d ;
- Toutes les impuretés sont ionisées.

L'équation de Poisson s'écrit:

$$\frac{d^2 \phi_{dep}(z)}{dz^2} = -\frac{\rho_{dep}(z)}{\epsilon_s} = -\frac{e N_a}{\epsilon_s}$$

Intégration de l'équation de Poisson

L'intégration de l'équation ci-dessus avec la condition $E(z=z_d)=0$ et $\phi(z=0)=0$, nous donne:

$$\frac{d\phi_{dep}(z)}{dz} = \frac{e N_a}{\epsilon_s} (z - z_d) \quad \phi_{dep}(z) = -\frac{e N_a}{\epsilon_s} z_d z \left(1 - \frac{z}{2z_d}\right)$$

ENERGIE POTENTIELLE DES ÉLECTRONS

Courbure globale du potentiel

La courbure globale du potentiel, c'est-à-dire la différence entre le potentiel de surface et le potentiel de volume du semi-conducteur.

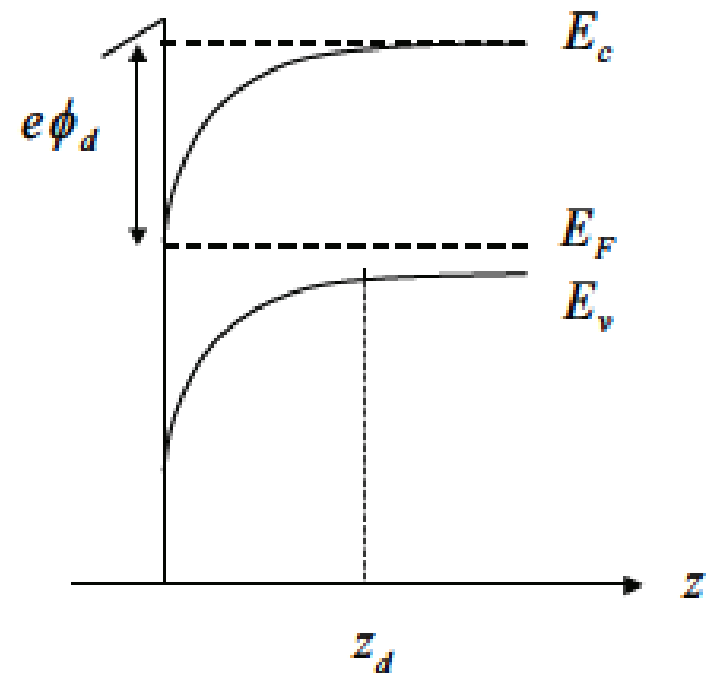
$$\phi_d = \phi_{dep}(z=0) - \phi_{dep}(z=z_d) \Rightarrow \phi_d = \frac{e N_a z_d^2}{2 \epsilon_s}$$

la profondeur de la zone de déplétion est donnée par:

$$z_d = \left(\frac{2 \epsilon_s \phi_d}{e N_a} \right)^{1/2}$$

Le **potentiel** et l'**énergie potentielle** s'écrivent:

$$\phi_{dep}(z) = \frac{e N_{dep}}{\epsilon_s} z \left(1 - \frac{z}{2 z_d} \right) \quad V_{dep}(z) = \frac{e^2 N_{dep}}{\epsilon_s} z \left(1 - \frac{z}{2 z_d} \right)$$



ENERGIE POTENTIELLE DES ÉLECTRONS

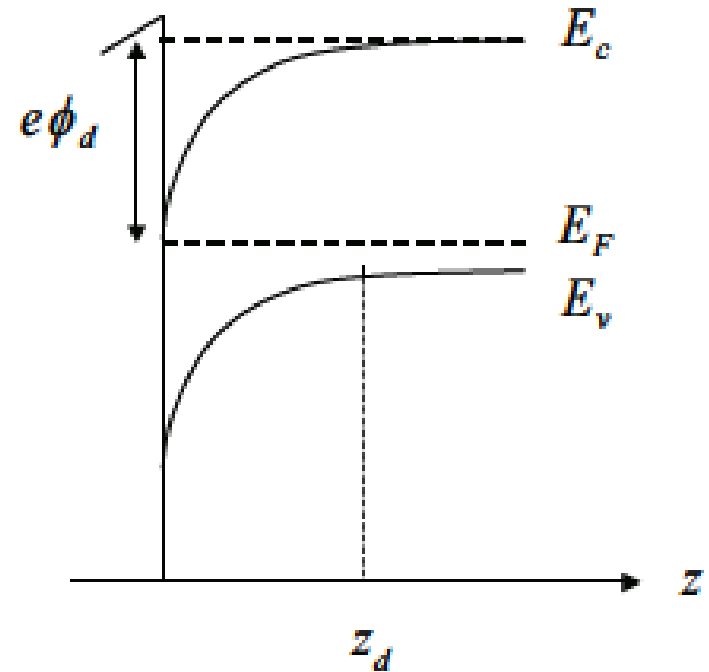
Effet de la tension de polarisation

En augmentant la polarisation de la structure, ϕ_d , z_d et N_{dep} augmentent jusqu'à ce que **le régime de forte inversion soit atteint**.

A partir de cet instant, **l'augmentation de la tension de polarisation** se traduit par une augmentation **exponentielle de la densité de charges d'inversion**, et les trois quantités précédentes **se saturent**.

Lorsque **le régime de forte inversion est atteint**, on peut écrire avec une bonne approximation:

$$\phi_d \approx \frac{E_c - E_v}{e} = \frac{E_g}{e}$$



ENERGIE POTENTIELLE DES ÉLECTRONS

2. Potentiel d'inversion

Approximation utilisée

Pour **simplifier** le problème, on utilise **l'approximation de Hartree**.

Si $\langle E_C \rangle_e > V_{e-e}$, on peut **représenter l'interaction électron-électron par un potentiel moyen $\phi_{inv}(z)$ appelé potentiel de Hartree**.

Condition de validité de l'approximation de Hartree

La condition de validité de l'approximation du potentiel moyen est donnée par:

$$r/a_0^* \ll 1$$

avec

$$a_0^* = \frac{\epsilon_s \hbar^2}{e^2 m_e}$$

et

$$r = \left(\frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3}$$

Où a_0^* est le rayon de Bohr de l'électron, r le rayon de la sphère contenant un électron et n la densité des électrons.

N.B.: La condition précédente est satisfaite pour les semi-conducteurs à **gap direct** et **petit**, car à un gap direct et petit sont associées une **masse effective faible** et une **constante diélectrique élevée**. Par contre, dans les semi-conducteurs à **gap indirect** (Si), les effets **d'échange et corrélation** électron-électron jouent un rôle important.

MÉTHODES DE CALCUL DANS L'APPROXIMATION DE HARTREE

Calcul du potentiel dans l'approximation de Hartree

Idée de base de l'approximation de Hartree

L'approximation de Hartree consiste à globaliser les interactions électro-électron pour ramener le problème à N électrons à un problème à 1 électron en déterminant un potentiel moyen résultant de la présence de l'ensemble des autres électrons.

La structure des états électroniques dans la couche d'inversion est alors obtenue par la résolution de l'équation de Schrödinger dans laquelle le potentiel $V(z)$ est celui donné par les calculs qu'on vient d'effectuer dans les paragraphes précédents.



ENERGIE POTENTIELLE DES ÉLECTRONS

2. Potentiel d'inversion (suite)

Le **potentiel moyen** $\phi_{inv}(z)$ qui représente l'interaction électron-électron est donné par l'intégration de l'équation de Poisson dans laquelle la densité de charge est donnée par:

$$\rho_{inv}(z) = -e \sum_i n_i |\xi_i(z)|^2 = -en(z)$$

Donc, l'équation de Poisson correspondante est:

$$\frac{d^2 \phi_{inv}(z)}{dz^2} = \frac{e}{\epsilon_s} n(z)$$

L'énergie potentielle associée à la charge d'inversion est donnée par:

$$V_{inv}(z) = \frac{e^2}{\epsilon_s} \sum_i n_i \left(z + \int_0^z (z'-z) |\xi_i(z')|^2 dz' \right)$$



ENERGIE POTENTIELLE DES ÉLECTRONS

3. Potentiel image

Source du potentiel image

Il résulte de la discontinuité de la constante diélectrique à l'interface isolant-semi-conducteur. Ce potentiel est le résultat de la polarisation de l'isolant sous l'effet des charges du semi-conducteur, car les dipôles créés dans l'isolant créent à leur tour un champ électrique et donc un potentiel électrique dans le semi-conducteur.

Il a un rôle important en régime d'inversion ou d'accumulation, car les charges, pour ces deux régimes, sont localisées au voisinage de l'interface isolant-semi-conducteur.



ENERGIE POTENTIELLE DES ÉLECTRONS

3. Potentiel image

Pour calculer le coefficient k , il suffit d'écrire que le potentiel et la composante normale du vecteur déplacement sont continus à l'interface isolant-semi-conducteur:

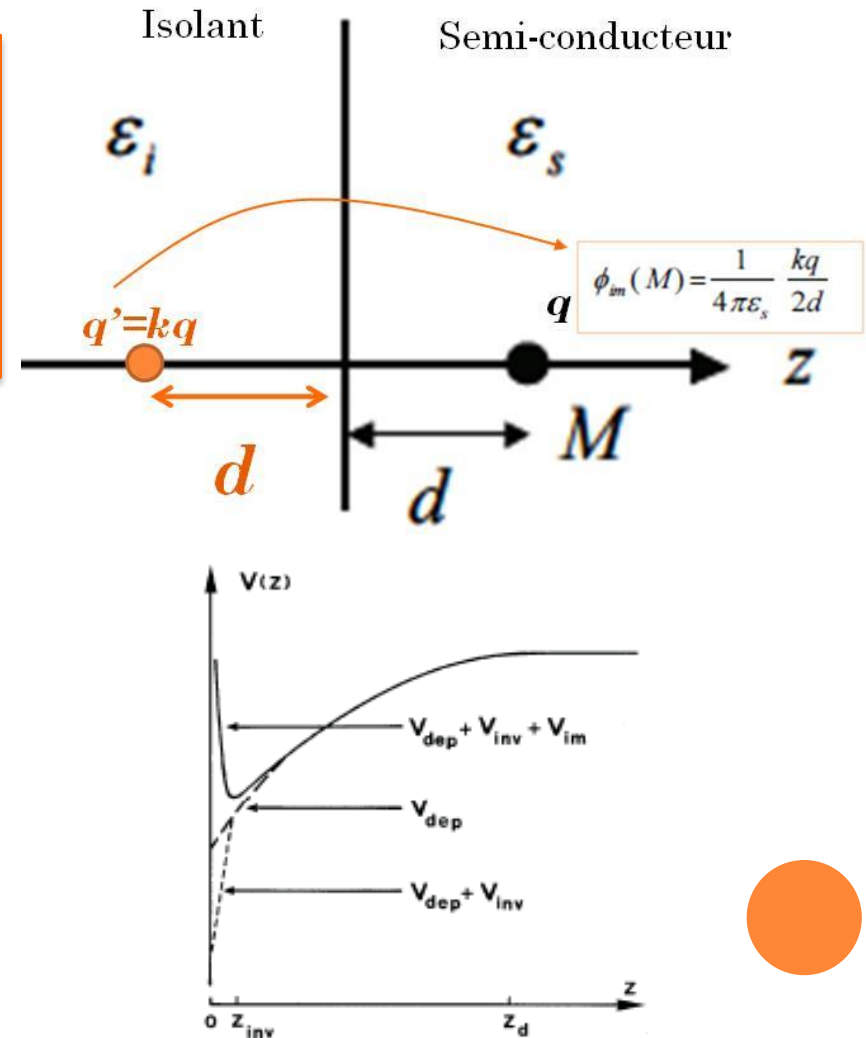
$$\phi_i(z \rightarrow 0) = \phi_{sc}(z \rightarrow 0)$$

$$\epsilon_i \left(\frac{d\phi_i}{dz} \right)_{z \rightarrow 0} = \epsilon_s \left(\frac{d\phi_{sc}}{dz} \right)_{z \rightarrow 0}$$

Ce qui donne le potentiel et l'énergie potentielle correspondante

$$\phi_{im}(z) = \frac{1}{4\pi\epsilon_s} \frac{\epsilon_s - \epsilon_i}{\epsilon_s + \epsilon_i} \frac{q}{2z} = - \frac{1}{4\pi\epsilon_s} \frac{\epsilon_s - \epsilon_i}{\epsilon_s + \epsilon_i} \frac{e}{2z}$$

$$V_{im}(z) = \frac{1}{4\pi\epsilon_s} \frac{\epsilon_s - \epsilon_i}{\epsilon_s + \epsilon_i} \frac{e^2}{2z}$$



ENERGIE POTENTIELLE DES ÉLECTRONS

Approximation du potentiel triangulaire

1. Charge d'inversion faible devant la charge de déplétion

Si on réduit l'énergie potentielle aux deux composantes, $V_{dep}(z) + V_{inv}(z)$, en négligeant le potentiel image, on constate que le potentiel varie linéairement au voisinage de l'interface ($z \rightarrow 0$).

De plus, si la charge d'inversion est faible devant la charge de déplétion, on peut négliger la contribution de $\phi_{inv}(z)$. Dans ce cas l'énergie potentielle des électrons s'écrit sous la forme:

$$V_{dep}(z) = \frac{e^2 N_{dep}}{\epsilon_s} z \left(1 - \frac{z}{2z_d}\right) \approx \frac{e^2 N_{dep}}{\epsilon_s} z = e E z$$

Où $E = e N_{dep} / \epsilon_s$ est le champ électrique dans le semi-conducteur qui est constant au voisinage de l'interface, car le potentiel varie linéairement.



ENERGIE POTENTIELLE DES ÉLECTRONS

Approximation du potentiel triangulaire (suite)

2. Charge d'inversion **non négligeable** devant la charge de déplétion

Dans ce cas, l'énergie potentielle s'écrit sous la forme:

$$V(z) = e E_{\text{eff}} z \quad \text{avec} \quad E_{\text{eff}} = \frac{e(N_{\text{dep}} + f n)}{\epsilon_s}$$

E_{eff} représente le **champ électrique effectif** et f est un **coefficient numérique** pondérant la contribution **moyenne des charges d'inversion** avec:

- $f=0$ correspond à la seule contribution des charges de déplétion;
- $f=1$ donne à E_{eff} la valeur du champ électrique à l'interface;
- $f=1/2$ donne à E_{eff} une valeur moyenne à l'intérieur de la zone d'inversion.

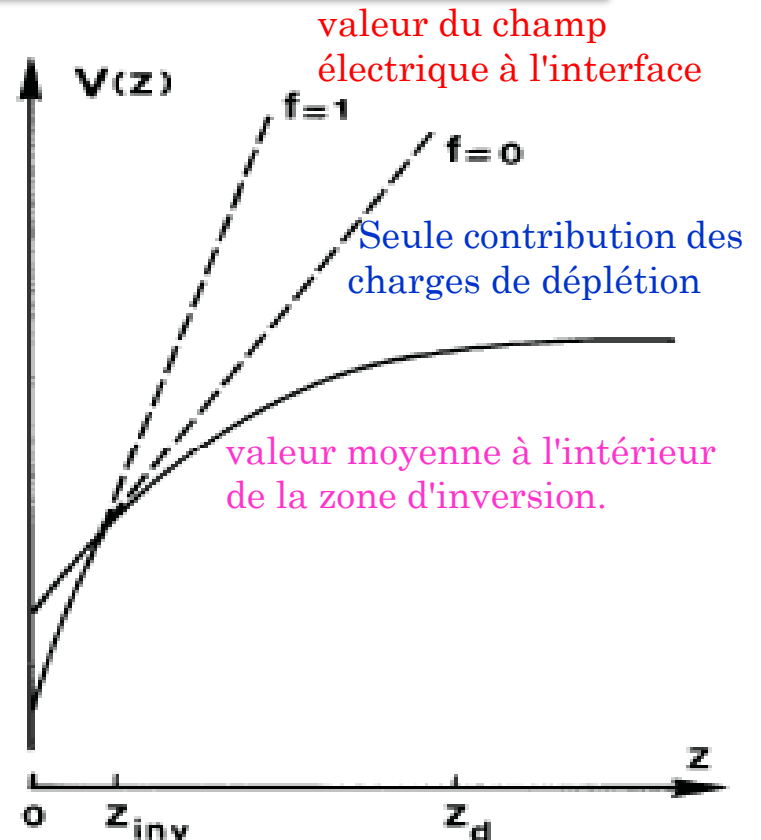


ENERGIE POTENTIELLE DES ÉLECTRONS

Validité de l'approximation triangulaire

□ Le semi-conducteur est peu dopé, ce qui entraîne z_d grand;

La masse effective des électrons est plus grande, ce qui entraîne une faible extension spatiale des fonctions d'onde électroniques et par suite une faible valeur de z_m (La position moyenne de la couche d'inversion)



ENERGIE POTENTIELLE DES ÉLECTRONS

Valeurs propres et états propres dans l'approximation triangulaire

On doit résoudre l'équation:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2 \xi_i(z)}{dz^2} + [E_i - V(z)] \xi_i(z) = 0$$

Avec les conditions aux limites:

$$\xi_i(z=0) = 0 \quad \xi_i(z \rightarrow \infty) = 0$$

L'équation précédente s'écrit :

$$\frac{d^2 \xi_i(z)}{dz^2} - \frac{2m_e}{\hbar^2} (ezE_{\text{eff}} - E_i) \xi_i(z) = 0$$

Effectuons le changement de variable suivant:

$$\frac{2m_e}{\hbar^2} (eE_{\text{eff}} z - E_i) = \left(\frac{2m_e e E_{\text{eff}}}{\hbar^2} \right)^{2/3} u$$



ENERGIE POTENTIELLE DES ÉLECTRONS

Valeurs propres et états propres dans l'approximation triangulaire (suite)

On obtient :

$$\frac{d}{dz} = \frac{d}{du} \frac{du}{dz} \quad \frac{d^2}{dz^2} = \frac{du}{dz} \frac{d}{du} \left(\frac{du}{dz} \frac{d}{du} \right) = \left(\frac{du}{dz} \right)^2 \frac{d^2}{du^2}$$

$$\frac{d^2}{dz^2} = \left(\frac{2m_e e E_{\text{eff}}}{\hbar^2} \right)^{2/3} \frac{d^2}{du^2}$$

L'équation à résoudre devient:

$$\frac{d^2 \xi_i(u)}{du^2} - u \xi_i(u) = 0$$



ENERGIE POTENTIELLE DES ÉLECTRONS

Valeurs propres et états propres dans l'approximation triangulaire (suite)

Les solutions de l'équation :

$$\frac{d^2 \xi_i(u)}{du^2} - u \xi_i(u) = 0$$

sont des fonctions d'Airy:

$$\xi_i(u) = Ai(u) \quad \text{avec} \quad u = \left(\frac{2m_e e E_{eff}}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(z - \frac{E_i}{e E_{eff}} \right)$$

Ce qui donne la fonction enveloppe

$$\xi_i(z) = Ai \left(\left(\frac{2m_e e E_{eff}}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(z - \frac{E_i}{e E_{eff}} \right) \right)$$



ENERGIE POTENTIELLE DES ÉLECTRONS

Valeurs propres et états propres dans l'approximation triangulaire (suite)

Les valeurs propres dans le cadre de l'approximation triangulaire sont de la forme:

$$E_i \approx \left(\frac{\hbar^2}{2m_e} \right)^{1/3} \left(\frac{3\pi e E_{eff}}{2} \left(i + \frac{3}{4} \right) \right)^{2/3}$$

Avec $i=0, 1, 2, \dots$

Application: $E_{eff}=10^5$ V/cm, on obtient:

$$E_i (meV) = 44 \left(\frac{m_o}{m_e} \right)^{1/3} \left(i + \frac{3}{4} \right)^{2/3}$$

Pour GaAs on a :

$$m_e = 0.067 m_0 \quad E_0 = 88 \text{ meV} \quad E_1 = 155 \text{ meV} \quad E_2 = 210 \text{ meV}$$



ENERGIE POTENTIELLE DES ÉLECTRONS

Remarque 1: Les résultats obtenus pour GaAs et InSb ont donné:

Pour GaAs on a :

$$m_e = 0.067 m_0 \quad E_0 = 88 \text{ meV} \quad E_1 = 155 \text{ meV} \quad E_2 = 210 \text{ meV}$$

Pour InSb on a :

$$m_e = 0,013 m_0 \quad E_0 = 154 \text{ meV} \quad E_1 = 272 \text{ meV} \quad E_2 = 367 \text{ meV}$$

On remarque que l'intervalle entre les différentes sous-bandes d'énergie varie beaucoup d'un semi-conducteur à l'autre en raison des différences importantes de masse effective.

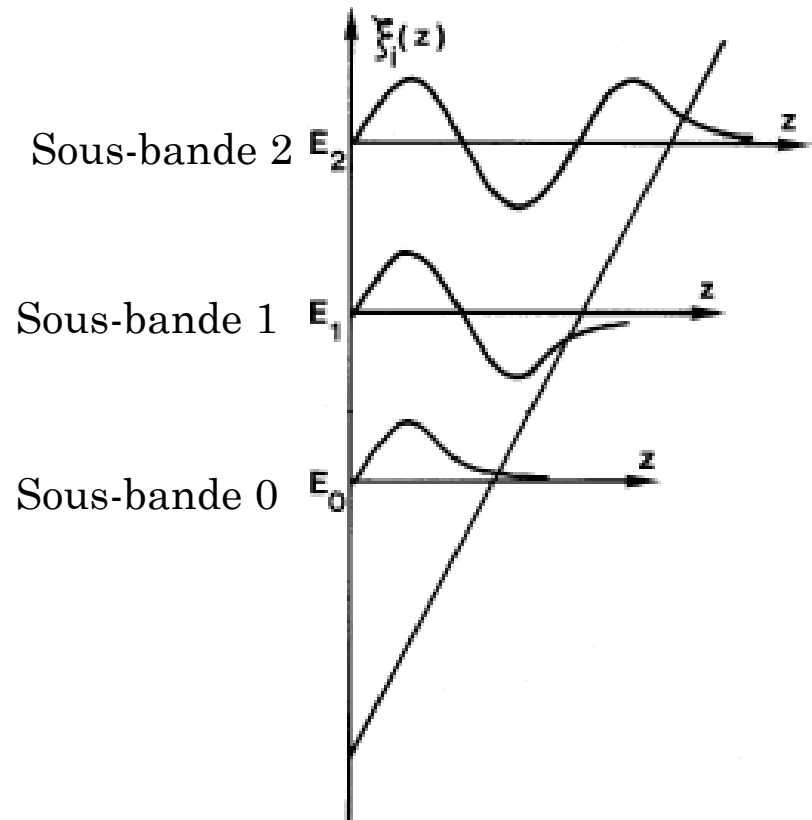


ENERGIE POTENTIELLE DES ÉLECTRONS

Remarque2:

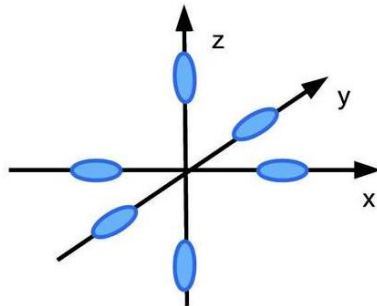
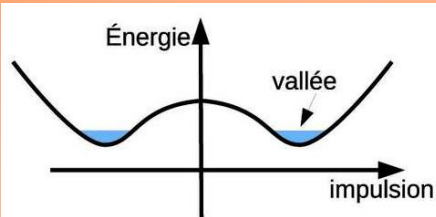
Les fonctions d'onde, qui sont des fonctions d'Airy, s'annulent à l'interface et sont évanescentes dans le semi-conducteur.

L'indice i correspond au nombre de nœuds de la fonction d'onde (les abscisses où de la fonction d'onde s'annule)



ENERGIE POTENTIELLE DES ÉLECTRONS

Si : Matériau multi-vallées



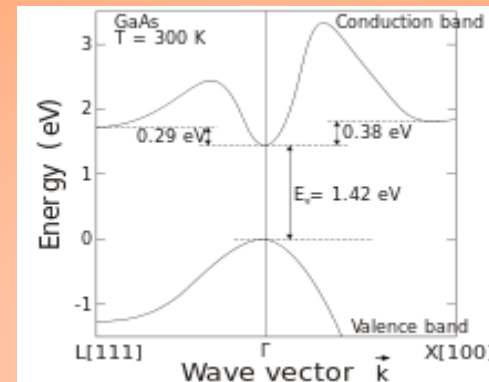
$$m_l = 0,916 m_0$$

$$m_t = 0,191 m_0$$

$$E = E_c + \frac{\hbar^2}{2m_l}(k_x^2 + k_y^2) + \frac{\hbar^2}{2m_t}(k_z - k_m)^2$$

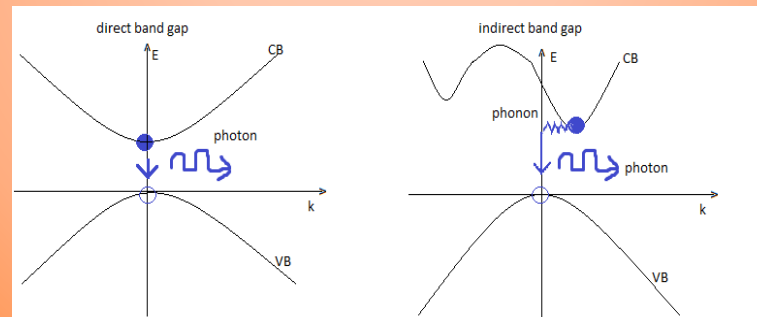
$$m_l = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k_x^2} \quad m_t = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k_x^2} = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k_y^2}$$

GaAs: Matériau uni-vallée



$$E = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \text{ avec } k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$$

$$m_e = 0.067 m_0$$



ENERGIE POTENTIELLE DES ÉLECTRONS

Remarque 3: Sous-bandes pour le silicium

Les valeurs très différentes des masses effectives m_t et m_l , vont entraîner l'existence de deux séries de sous-bandes d'énergie E_0, E_1, E_2, \dots et E'_0, E'_1, E'_2, \dots , données par:

$$E_i = \left(\frac{\hbar^2}{2m_t} \right)^{1/3} \left(\frac{3\pi e E_{eff}}{2} \left(i + \frac{3}{4} \right) \right)^{2/3}$$
$$E'_i = \left(\frac{\hbar^2}{2m_l} \right)^{1/3} \left(\frac{3\pi e E_{eff}}{2} \left(i + \frac{3}{4} \right) \right)^{2/3}$$

Pour $E_{eff} = 10^5$ V/cm, on obtient (E en meV):

$$E_0=38 \quad E_1=66 \quad E_2=89$$

$$E'_0=63 \quad E'_1=111 \quad E'_2=150$$



CALCUL AUTOCOHÉRENT

Difficulté mathématique

L'introduction de l'expression correcte de $V_{inv}(z)$ dans l'équation de Schrödinger, se traduit par une équation non linéaire qui n'admet pas de solution analytique.

Calcul itératif

Puisque l'équation n'admet pas de solution analytique, il faut alors aborder le problème numériquement en résolvant l'équation de manière auto-cohérente par un processus itératif.

Etapas du calcul itératif

- ✓ Choisir un potentiel d'essai;
- ✓ Déterminer les fonctions d'ondes électroniques;
- ✓ Modifier le potentiel d'essai à partir des fonctions d'ondes électroniques qu'on vient de déterminer;
- ✓ Recommencer le calcul jusqu'à avoir $V_{cal} \approx V_{ess}$.



CALCUL AUTOCOHÉRENT

Astuce du choix du potentiel d'essai

La méthode consiste à prendre comme potentiel d'essai pour résoudre la $(n+1)^{\text{ème}}$ itération, une combinaison linéaire du potentiel d'essai et du potentiel calculé de l'itération précédente selon l'expression suivante:

$$V_{ess}^{n+1}(z) = V_{ess}^n(z) + k(V_{cal}^n(z) - V_{ess}^n(z))$$

Choix du coefficient k

$k=1$: Pour ce choix, la méthode est rapide mais peut poser des problèmes de convergence.

$k \ll 1$: Dans ce cas, la méthode est plus sûre, mais entraîne un nombre d'itérations plus important et par suite un calcul beaucoup plus long.

