Première Partie : Questions de Cours

1. Le flux élémentaire de particules $d\phi_n$ au travers un élément de surface $d\overrightarrow{S}$ est :

$$d\phi_n = \overrightarrow{j_n} \cdot d\overrightarrow{S} \tag{1}$$

La dimension du flux élémentaire de particule est $[d\phi_n] = s^{-1}$.
2. La définition du flux de particules ϕ_n à travers une surface $\mathcal{S}$ est :

$$\phi_n = \iint_{\mathcal{S}} \overrightarrow{j_n} \cdot d\overrightarrow{S} \tag{2}$$

La dimension du flux particulaire est $[\phi_n] = s^{-1}$.
3. La dimension du vecteur densité surfacique de courant particulaire est :

$$[\overrightarrow{j_n}] = [\phi_n][d\overrightarrow{S}]^{-2} = m^{-2} \cdot s^{-1} \tag{3}$$

4. Pour faire un bilan de matière, on considère un volume $\mathcal{V}$ fixe, délimité par une surface $\mathcal{S}$ qui contient dN particules et on exploite la relation :

$$\phi_n = -\frac{dN}{dt}(t) \tag{4}$$

où ϕ_n est le flux de particules sortantes (on oriente la normal sortante à la surface $d\overrightarrow{S}$ vers l'extérieur). On évalue le flux sortant à travers la surface $\mathcal{S}$

$$\phi_n \;=\; \oiint_{\mathcal{S}} \overrightarrow{j_n} \cdot d\overrightarrow{S} = \iiint_{\mathcal{V}} \left(\overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{j_n}\right) d\tau$$

où l'on a utilisé le théorème de Green-Ostrogradsky. D'un autre côté, on a :

$$\frac{dN(t)}{dt} = \frac{d}{dt}\left[\iiint_{\mathcal{V}} n(\vec{r},t)d\tau\right] = \iiint_{\mathcal{V}} \frac{\partial n}{\partial t}(\vec{r},t)d\tau$$

Ainsi, l'Équation (4) s'écrit :

$$\iiint_{\mathcal{V}} \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{j_n}(\vec{r},t)d\tau = -\iiint_{\mathcal{V}} \frac{\partial n}{\partial t}(\vec{r},t)d\tau$$

soit :

$$\iiint_{\mathcal{V}} \left[\overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{j_n}(\vec{r},t) + \frac{\partial n}{\partial t}(\vec{r},t)\right] d\tau = 0$$

[1]Dimitri Vey, EISTI – Ecole Internationale des Sciences et Techniques de l'Information
[2]Durée 1h – Aucun document n'est autorisé.

L'Équation précédente est indépendante du volume $\mathcal{V}$ et de l'élément de volume $d\tau$. Ainsi,

$$\frac{\partial n}{\partial t}(\vec{r},t) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j_n}(\vec{r},t) \tag{5}$$

5. La Loi de Fick s'écrit :

$$\vec{j_n}(\vec{r},t) = -D\vec{\nabla} n(\vec{r},t) \tag{6}$$

La dimension $[D]$ du coefficient de diffusion D est

$$[D] = \frac{[\vec{j_n}]}{[\vec{\nabla} n]} = \frac{m^{-2} \cdot s^{-1}}{m^{-4}} = m^2 \cdot s^{-1}$$

où on remarque que $[\vec{\nabla} n] = m^{-4}$.

6. Pour obtenir l'Équation de diffusion, on injecte la Loi de Fick – voir l'Équation (6) – dans l'Équation de conservation de la matière – voir Équation (5). On obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t}(\vec{r},t) &= -\vec{\nabla} \cdot \vec{j_n}(\vec{r},t) = -\vec{\nabla} \cdot \left(-D\vec{\nabla} n(\vec{r},t)\right) \\ &= D\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} n(\vec{r},t) = D\Delta n(\vec{r},t) \end{aligned}$$

On obtient donc :

$$\frac{\partial n}{\partial t}(\vec{r},t) = D\Delta n(\vec{r},t) \tag{7}$$

Seconde Partie : Problème à Symétrie Sphérique

Bilan de matière –

1. On note $d\mathcal{V}$ le volume de la coquille sphérique creuse de rayon r et d'épaisseur dr, délimitée par deux sphères $\mathcal{S}_r$ et $\mathcal{S}_{r+dr}$ de rayon r et $r+dr$, respectivement. La première méthode consiste à calculer le volume par intégration $d\mathcal{V} = \iiint_{\text{coquille}} d\tau$ avec $d\tau = r'^2 \sin\theta dr' d\theta d\varphi$

$$d\mathcal{V} = \iiint_{\text{coquille}} r'^2 \sin\theta dr' d\theta d\varphi = \int_r^{r+dr} r'^2 dr' \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

On trouve :

$$d\mathcal{V} = \left[\frac{r'^3}{3}\right]_r^{r+dr} [-\cos\theta]_0^{\pi} [\varphi]_0^{2\pi} = \frac{4\pi}{3}\left((r+dr)^3 - r^3\right)$$

On utilise la Formule du binôme de Newton[3] pour $n = 3$. Comme $(r+dr)^3 = r^3 + 3r^2 dr + 3r(dr)^2 + (dr)^3$, on trouve :

$$\begin{aligned} d\mathcal{V} &= \frac{4\pi}{3}\left(3r^2 dr + 3r(dr)^2 + (dr)^3\right) \\ &= 4\pi r^2 dr + 4\pi r (dr)^2 + \frac{4\pi}{3}(dr)^3 \\ &= 4\pi r^2 dr + o(dr) \end{aligned}$$

[3] La Formule du binôme de Newton : $(r+s)^n = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} r^{n-k} s^k$, avec $\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}$.

Au premier ordre en dr, on obtient $d\mathcal{V} = 4\pi r^2 dr$.
Autre méthode : on sait que le volume d'une sphère de rayon r s'écrit : $\mathcal{V}(r) = \frac{4}{3}\pi r^3$. On a dont $d\mathcal{V} = \mathcal{V}(r+dr) - \mathcal{V}(r) = \frac{4}{3}\pi\left[(r+dr)^3 - (r)^3\right] = 4\pi r^2 dr + 4\pi r(dr)^2 + \frac{4\pi}{3}(dr)^3$. Donc, au premier ordre, $d\mathcal{V} = 4\pi r^2 dr$. Ce résulat s'éxplique en prenant la différentielle de la fonction du volume d'une sphère en fonction de son rayon $d\mathcal{V}(r) = d\left(\frac{4}{3}\pi r^3\right)$. Ainsi :

$$d\mathcal{V}(r) = \frac{4}{3}\pi d\left(r^3\right) = \frac{4}{3}\pi\left(3r^2 dr\right) = 4\pi r^2 dr$$

2. Les expresions de $dN(t)$ et $dN(t+dt)$, le nombre de particules contenues dans le volume $d\mathcal{V}$ à l'instant t et à l'instant $t+dt$ sont :

$$\left\{\begin{array}{rcl} dN(t) & = & n(r,t)d\mathcal{V} \\ dN(t+dt) & = & n(r,t+dt)d\mathcal{V} \end{array}\right. \tag{8}$$

Soit, avec $d\mathcal{V} = 4\pi r^2 dr$, on obtient :

$$\left\{\begin{array}{rcl} dN(t) & = & n(r,t)4\pi r^2 dr \\ dN(t+dt) & = & n(r,t+dt)4\pi r^2 dr \end{array}\right. \tag{9}$$

3. La variation $(\delta^2 N)_{\text{temporel}}$ du nombre de particules dans la coquille sphérique $d\mathcal{V}$ entre les instants t et $t+dt$ est donc :

$$\begin{array}{rcl} (\delta^2 N)_{\text{temporel}} & = & dN(t+dt) - dN(t) \\ & = & n(r,t+dt)4\pi r^2 dr - n(r,t)4\pi r^2 dr \\ & = & \left(n(r,t+dt) - n(r,t)\right) 4\pi r^2 dr \end{array}$$

On utilise un dévelopement de Taylor au premier ordre : $n(r,t+dt) = n(r,t) + \frac{\partial n}{\partial t}(r,t)dt + o(dt)$. Ainsi,

$$\left(\delta^2 N\right)_{\text{temporel}} = 4\pi\frac{\partial n}{\partial t}(r,t)r^2 dr dt \tag{10}$$

4. Les flux élémentaires $d\phi_e(r,t)$ et $d\phi_s(r+dr,t)$ au travers un élément de surface $d\vec{\sigma}|_{\theta,\varphi}$ dans un plan parallèle au plan $(\overrightarrow{e_\theta}, \overrightarrow{e_\varphi})$,

$$\left\{\begin{array}{rcl} d\phi_e(r,t) & = & \overrightarrow{j_n}(r,t)\cdot d\vec{\sigma}|_{\theta,\varphi} \\ d\phi_s(r+dr,t) & = & \overrightarrow{j_n}(r+dr,t)\cdot d\vec{\sigma}|_{\theta,\varphi} \end{array}\right. \tag{11}$$

5. Le flux $\phi_e(r,t)$ à travers la surface d'entrée $\mathcal{S}_r$ est :

$$\phi_e(r,t) = \oiint_{\mathcal{S}_r} \overrightarrow{j_n}(r,t)\cdot d\vec{\sigma}|_{\theta,\varphi} \tag{12}$$

On a $\overrightarrow{j_n}(r,t) = \overline{j_n}(r,t)\overrightarrow{e_r}$ ainsi que $d\vec{\sigma}|_{\theta,\varphi} = r^2\sin\theta d\theta d\varphi\overrightarrow{e_r}$.

$$\begin{array}{rcl} \phi_e(r,t) & = & \oiint_{\mathcal{S}_r} \overline{j_n}(r,t)r^2\sin\theta d\theta d\varphi \\ & = & \overline{j_n}(r,t)r^2 \oiint_{\mathcal{S}_r} \sin\theta d\theta d\varphi \\ & = & \overline{j_n}(r,t)r^2 \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \end{array}$$

Comme $\int_0^\pi \sin\theta d\theta = [-\cos\theta]_0^\pi = 2$ et $\int_0^{2\pi} d\varphi = [\varphi]_0^{2\pi} = 2\pi$, on obtient :

$$\phi_e(r,t) = \overline{j_n}(r,t)4\pi r^2 = \overline{j_n}(r,t)\mathcal{S}_r \tag{13}$$

Le flux $\phi_s(r+dr,t)$ à travers la surface de sortie $\mathcal{S}_{r+dr}$ est :

$$\phi_s(r+dr,t) = \oiint_{\mathcal{S}_{r+dr}} \overrightarrow{j_n}(r+dr,t)\cdot d\vec{\sigma}|_{\theta,\varphi} \tag{14}$$

On a $\overrightarrow{j_n}(r+dr,t) = \overline{j_n}(r+dr,t)\overrightarrow{e_r}$ ainsi que $d\vec{\sigma}|_{\theta,\varphi} = (r+dr)^2\sin\theta d\theta d\varphi\overrightarrow{e_r}$. Ainsi,

$$\begin{array}{rcl}
\phi_s(r+dr,t) & = & \oiint_{\mathcal{S}_{r+dr}} \overline{j_n}(r+dr,t)(r+dr)^2\sin\theta d\theta d\varphi \\
 & = & \overline{j_n}(r+dr,t)(r+dr)^2 \oiint_{\mathcal{S}_{r+dr}} \sin\theta d\theta d\varphi \\
 & = & \overline{j_n}(r+dr,t)(r+dr)^2 \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi
\end{array}$$

On obtient :

$$\phi_s(r+dr,t) = \overline{j_n}(r+dr,t)4\pi(r+dr)^2 = \overline{j_n}(r+dr,t)\mathcal{S}_{r+dr} \tag{15}$$

6. Pour le bilan spatial, on utilise :

$$\left\{\begin{array}{rcl}
dN_e(r) & = & \phi_e(r,t)dt \\
dN_s(r+dr) & = & \phi_s(r+dr,t)dt
\end{array}\right. \tag{16}$$

L'expression de la variation de particules $(\delta^2 N)_{\textsf{spatial}}$ dans le volume $d\mathcal{V}$ s'écrit :

$$\begin{array}{rcl}
\left(\delta^2 N\right)_{\textsf{spatial}} & = & dN_e(r) - dN_s(r+dr) \\
 & = & \phi_e(r,t)dt - \phi_s(r+dr,t)dt \\
 & = & \left[\oiint_{\mathcal{S}_r} \overrightarrow{j_n}(r,t)\cdot d\vec{\sigma}|_{\theta,\varphi} - \oiint_{\mathcal{S}_{r+dr}} \overrightarrow{j_n}(r+dr,t)\cdot d\vec{\sigma}|_{\theta,\varphi}\right] dt
\end{array}$$

En utilisant le calcul de $\phi_e(r,t)$ et $\phi_s(r+dr,t)$ donnés par les Équations (13) et (15), respectivement, on trouve :

$$\begin{array}{rcl}
\left(\delta^2 N\right)_{\textsf{spatial}} & = & \left[j_n(r,t)4\pi r^2 - j_n(r+dr,t)4\pi(r+dr)^2\right] dt \\
 & = & \left[j_n(r,t)r^2 - j_n(r+dr,t)(r+dr)^2\right] 4\pi dt
\end{array}$$

On introduit la fonction $g(r,t) := j_n(r,t)r^2$. En particulier, $g(r+dr,t) = j_n(r+dr,t)(r+dr)^2$. Le developement de Taylor au premier order s'écrit $g(r+dr,t) = g(r,t) + \frac{\partial g}{\partial r}(r,t)dr + o(dr)$. Ainsi,

$$\left(\delta^2 N\right)_{\textsf{spatial}} = -4\pi\left(g(r,+dr,t) - g(r,t)\right)dt = -4\pi\frac{\partial g}{\partial r}(r,t)drdt$$

Finalement :

$$\left(\delta^2 N\right)_{\textsf{spatial}} = -4\pi\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 j_n(r,t)\right)\right)drdt \tag{17}$$

7. À partir du bilan temporel et du bilan spatial, on donne l'Équation de conservation de la matière. En identifiant l'Équation (10) et l'Équation (17), on obtient :

$$4\pi\frac{\partial n}{\partial t}(r,t)r^2drdt = -4\pi\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 j_n(r,t)\right)drdt$$

Soit :

$$\frac{\partial n}{\partial t}(r,t) = -\frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 j_n(r,t)\right)\right) \tag{18}$$

8. On introduit σ_P et σ_D le nombre de particules produites et détruites par unité de volume et de temps, i.e. $[\sigma_P] = m^{-3}\cdot s^{-1}$ et $[\sigma_D] = m^{-3}\cdot s^{-1}$, respectivement.
Le *bilan temporel* reste inchangé.

$$\left(\delta^2 N\right)_{\textsf{temporel}} = 4\pi\frac{\partial n}{\partial t}(r,t)r^2drdt \tag{19}$$

Pour le *bilan spatial* on obtient :

$$\left(\delta^2 N\right)_{\textsf{spatial}} = dN_e(r) - dN_s(r+dr) + dN_P - dN_D$$

On a $dN_P = \sigma_P d\tau dt$ et $dN_D = \sigma_D d\tau dt$. On note $\boldsymbol{\sigma} = \sigma_P - \sigma_D$ donc $dN_P - dN_D = \boldsymbol{\sigma} d\mathcal{V}dt$. Finalement,

$$\begin{aligned}\left(\delta^2 N\right)_{\textsf{spatial}} &= \phi_e(r,t)dt - \phi_s(r+dr,t)dt + \boldsymbol{\sigma} d\mathcal{V}dt \\ &= \left[\oiint_{\mathcal{S}_r}\overrightarrow{j_n}(r,t)\cdot d\vec{\sigma}|_{\theta,\varphi} - \oiint_{\mathcal{S}_{r+dr}}\overrightarrow{j_n}(r+dr,t)\cdot d\vec{\sigma}|_{\theta,\varphi}\right]dt + \boldsymbol{\sigma} d\mathcal{V}dt\end{aligned}$$

Ainsi,

$$\left(\delta^2 N\right)_{\textsf{spatial}} = -4\pi\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 j_n(r,t)\right)\right)drdt + \boldsymbol{\sigma}4\pi r^2 drdt \tag{20}$$

Finalement, l'équation de conservation de la matière :

$$\frac{\partial n}{\partial t}(r,t) = -\frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 j_n(r,t)\right)\right) + \boldsymbol{\sigma} \tag{21}$$

Équation de diffusion

9. La définition intrinsèque de l'opérateur gradient $\vec{\nabla}$ d'une fonction scalaire est donnée par la formule $df = \vec{\nabla} f\cdot d\overrightarrow{OM}$.
10. La différentielle de la fonction $f = f(r,\theta,\varphi)$ est donnée par :

$$df = \frac{\partial f}{\partial r}dr + \frac{\partial f}{\partial \theta}d\theta + \frac{\partial f}{\partial \varphi}d\varphi \tag{22}$$

Dans un second temps on sait que $d\overrightarrow{OM} = dr\vec{e_r} + rd\theta\vec{e_\theta} + r\sin\theta d\varphi\vec{e_\varphi}$. Le gradient se décompose dans la base $(\vec{e_r},\vec{e_\theta},\vec{e_\varphi})$ selon $\vec{\nabla} f := G_r\vec{e_r} + G_\theta\vec{e_\theta} + G_\varphi\vec{e_\varphi}$. Ainsi

$$\vec{\nabla} f\cdot d\overrightarrow{OM} = G_r dr + G_\theta r d\theta + G_\varphi r\sin\theta d\varphi \tag{23}$$

En identifiant l'Équation (22) avec l'Équation (23), on obtient :

$$G_r = \frac{\partial f}{\partial r} \qquad G_\theta = \frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial \theta} \qquad G_\varphi = \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial f}{\partial \varphi}$$

On en déduit :

$$\vec{\nabla} = \vec{e_r}\frac{\partial}{\partial r} + \vec{e_\theta}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e_\varphi}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi} \tag{24}$$

11. On utilise la Loi de Fick, $\vec{j_n}(\vec{r},t) = -D\vec{\nabla} n(\vec{r},t)$. Dans le cas où la densité particulaire $n(r,t)$ et le vecteur densité de courant particulaire $\vec{j_n}(r,t)$ ne dépendent pas des coordonnées θ et φ, la Loi de Fick s'écrit :

$$\vec{j_n}(r,t) = -D\vec{\nabla} n(r,t) \tag{25}$$

avec $\vec{j_n}(r,t) = \overline{j_n}(r,t)\vec{e_r}$ (ici $\overline{j_n}(r,t)$ dénote la valeur algébrique du vecteur densité de courant $\vec{j_n}(r,t)$). Le gradient s'écrit $\vec{\nabla} n(r,t) = \frac{\partial n}{\partial r}(r,t)\vec{e_r}$. Ainsi,

$$\overline{j_n}(r,t) = -D\frac{\partial n}{\partial r}(r,t) \tag{26}$$

12. On injecte la Loi de Fick (voir Équation (25)) déduire l'équation de diffusion. On note $\boldsymbol{\sigma} = \sigma_P - \sigma_D$

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t}(r,t) &= -\frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\overline{j_n}(r,t)\right)\right) + \boldsymbol{\sigma} \\ &= -\frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2(-D\frac{\partial n}{\partial r}(r,t))\right)\right] + \boldsymbol{\sigma} \end{aligned}$$

On obtient

$$\frac{\partial n}{\partial t}(r,t) = \frac{D}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial n}{\partial r}(r,t)\right)\right] + \boldsymbol{\sigma} \tag{27}$$

13. Dans le cas du régime permanent, on a $n(r,t) = n(r)$, soit $\frac{\partial n}{\partial t}(r,t) = 0$, et donc :

$$\frac{D}{r^2}\left[\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dn}{dr}(r)\right)\right] = -\boldsymbol{\sigma} \tag{28}$$

14. On utilise l'Équation de la diffusion :

$$\frac{\partial n}{\partial t}(\vec{r},t) = D\Delta n(\vec{r},t) + \boldsymbol{\sigma} \tag{29}$$

Dans le cas d'un problème à symétrie sphérique, $n(\vec{r},t) = n(r,t)$. Le Laplacien scalaire s'écrit :

$$\Delta n(r,t) = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial n}{\partial r}(r,t)\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial n}{\partial\theta}(r,t)\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial^2 n}{\partial\varphi^2}(r,t)$$

et comme $\frac{\partial n}{\partial \theta}(r,t) = \frac{\partial n}{\partial \varphi}(r,t) = 0$, on obtient :

$$\Delta n(r,t) = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial n}{\partial r}(r,t)\right) \tag{30}$$

Ainsi, en utilisant l'Équation (30), l'équation de la diffusion (29) s'écrit :

$$\frac{\partial n}{\partial t}(r,t) = \frac{D}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial n}{\partial r}(r,t)\right) + \boldsymbol{\sigma} \tag{31}$$

Dans le cas du régime permanent :

$$\frac{D}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dn}{dr}(r)\right) = -\boldsymbol{\sigma} \tag{32}$$

Troisième Partie : Durée de Vie

1. On a la relation dimensionnelle $[D] = [\ell^2][\tau]^{-1}$. Le temps caractéristique de diffusion τ, en fonction de la longueur caractéristique de la gravure en silicium ℓ, ainsi que de E, T et $D_\circ$ est : $\tau = \ell^2/D$. En utilisant $D = D_\circ e^{-\frac{E}{k_B T}}$, on obtient

$$\tau = \frac{\ell^2}{D_\circ e^{-\frac{E}{k_B T}}} = \frac{\ell^2}{D_\circ} e^{\frac{E}{k_B T}} \tag{33}$$

2. Le rapport $r = \tau_1/\tau_2$ des durées de vie de deux microprocesseurs (dont les dimensions de la gravure sont ℓ_1 et ℓ_2 et les températures internes sont T_1 et T_2, respectivement) est donné par :

$$r = \left(\frac{\ell_1^2}{D_\circ} e^{\frac{E}{k_B T_1}}\right)\left(\frac{\ell_2^2}{D_\circ} e^{\frac{E}{k_B T_2}}\right)^{-1} = \left(\frac{\ell_1}{\ell_2}\right)^2 e^{\frac{E}{k_B}\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)} \tag{34}$$