
PREMIÈRE PARTIE : QUESTIONS DE COURS

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

$$d\phi_n = \vec{j}_n \cdot d\vec{S} \quad (1)$$

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 :

$$\phi_n = \iint_{\mathcal{S}} \vec{j}_n \cdot d\vec{S} \quad (2)$$

La dimension du flux particulaire est $[\phi_n] = s^{-1}$.

3. La dimension du vecteur densité surfacique de courant particulaire est :

$$[\vec{j}_n] = [\phi_n][d\vec{S}]^{-2} = m^{-2} \cdot s^{-1} \quad (3)$$

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 :

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

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

$$\phi_n = \oiint_{\mathcal{S}} \vec{j}_n \cdot d\vec{S} = \iiint_{\mathcal{V}} (\vec{\nabla} \cdot \vec{j}_n) d\tau$$

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 :

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

soit :

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

¹Dimitri Vey, EISTI – Ecole Internationale des Sciences et Techniques de l'Information

²Durée 1h – Aucun document n'est autorisé.

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

$$\frac{\partial n}{\partial t}(\vec{r}, t) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}_n(\vec{r}, t) \quad (5)$$

5. La Loi de Fick s'écrit :

$$\vec{j}_n(\vec{r}, t) = -D\vec{\nabla}n(\vec{r}, t) \quad (6)$$

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 :

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

On obtient donc :

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

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 :

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

On utilise la Formule du binôme de Newton³ pour $n = 3$. Comme $(r + dr)^3 = r^3 + 3r^2 dr + 3r(dr)^2 + (dr)^3$, on trouve :

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

³La 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 donc $d\mathcal{V} = \mathcal{V}(r+dr) - \mathcal{V}(r) = \frac{4}{3}\pi [(r+dr)^3 - (r)^3] = 4\pi r^2 dr + 4\pi r (dr)^2 + \frac{4\pi}{3} (dr)^3$. Donc, au premier ordre, $d\mathcal{V} = 4\pi r^2 dr$. Ce résultat s'explique en prenant la différentielle de la fonction du volume d'une sphère en fonction de son rayon $d\mathcal{V}(r) = d(\frac{4}{3}\pi r^3)$. Ainsi :

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

2. Les expressions 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 :

$$\begin{cases} dN(t) &= n(r, t)d\mathcal{V} \\ dN(t+dt) &= n(r, t+dt)d\mathcal{V} \end{cases} \quad (8)$$

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

$$\begin{cases} dN(t) &= n(r, t)4\pi r^2 dr \\ dN(t+dt) &= n(r, t+dt)4\pi r^2 dr \end{cases} \quad (9)$$

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 :

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

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

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

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 $(\vec{e}_\theta, \vec{e}_\varphi)$,

$$\begin{cases} d\phi_e(r, t) &= \vec{j}_n(r, t) \cdot d\vec{\sigma}|_{\theta, \varphi} \\ d\phi_s(r+dr, t) &= \vec{j}_n(r+dr, t) \cdot d\vec{\sigma}|_{\theta, \varphi} \end{cases} \quad (11)$$

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

$$\phi_e(r, t) = \iint_{\mathcal{S}_r} \vec{j}_n(r, t) \cdot d\vec{\sigma}|_{\theta, \varphi} \quad (12)$$

On a $\vec{j}_n(r, t) = \bar{j}_n(r, t)\vec{e}_r$ ainsi que $d\vec{\sigma}|_{\theta, \varphi} = r^2 \sin \theta d\theta d\varphi \vec{e}_r$.

$$\begin{aligned} \phi_e(r, t) &= \iint_{\mathcal{S}_r} \bar{j}_n(r, t)r^2 \sin \theta d\theta d\varphi \\ &= \bar{j}_n(r, t)r^2 \iint_{\mathcal{S}_r} \sin \theta d\theta d\varphi \\ &= \bar{j}_n(r, t)r^2 \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \end{aligned}$$

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 :

$$\phi_e(r, t) = \bar{j}_n(r, t)4\pi r^2 = \bar{j}_n(r, t)\mathcal{S}_r \quad (13)$$

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

$$\phi_s(r + dr, t) = \iint_{\mathcal{S}_{r+dr}} \vec{j}_n(r + dr, t) \cdot d\vec{\sigma}|_{\theta, \varphi} \quad (14)$$

On a $\vec{j}_n(r + dr, t) = \bar{j}_n(r + dr, t)\vec{e}_r$ ainsi que $d\vec{\sigma}|_{\theta, \varphi} = (r + dr)^2 \sin \theta d\theta d\varphi \vec{e}_r$. Ainsi,

$$\begin{aligned} \phi_s(r + dr, t) &= \iint_{\mathcal{S}_{r+dr}} \bar{j}_n(r + dr, t)(r + dr)^2 \sin \theta d\theta d\varphi \\ &= \bar{j}_n(r + dr, t)(r + dr)^2 \iint_{\mathcal{S}_{r+dr}} \sin \theta d\theta d\varphi \\ &= \bar{j}_n(r + dr, t)(r + dr)^2 \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \end{aligned}$$

On obtient :

$$\phi_s(r + dr, t) = \bar{j}_n(r + dr, t)4\pi(r + dr)^2 = \bar{j}_n(r + dr, t)\mathcal{S}_{r+dr} \quad (15)$$

6. Pour le bilan spatial, on utilise :

$$\begin{cases} dN_e(r) = \phi_e(r, t)dt \\ dN_s(r + dr) = \phi_s(r + dr, t)dt \end{cases} \quad (16)$$

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

$$\begin{aligned} (\delta^2 N)_{\text{spatial}} &= dN_e(r) - dN_s(r + dr) \\ &= \phi_e(r, t)dt - \phi_s(r + dr, t)dt \\ &= \left[\iint_{\mathcal{S}_r} \vec{j}_n(r, t) \cdot d\vec{\sigma}|_{\theta, \varphi} - \iint_{\mathcal{S}_{r+dr}} \vec{j}_n(r + dr, t) \cdot d\vec{\sigma}|_{\theta, \varphi} \right] dt \end{aligned}$$

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 :

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

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,

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

Finalement :

$$(\delta^2 N)_{\text{spatial}} = -4\pi \left(\frac{\partial}{\partial r} (r^2 j_n(r, t)) \right) dr dt \quad (17)$$

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 :

$$4\pi \frac{\partial n}{\partial t}(r, t) r^2 dr dt = -4\pi \frac{\partial}{\partial r} (r^2 j_n(r, t)) dr dt$$

Soit :

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

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.

$$(\delta^2 N)_{\text{temporel}} = 4\pi \frac{\partial n}{\partial t}(r, t) r^2 dr dt \quad (19)$$

Pour le *bilan spatial* on obtient :

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

On a $dN_P = \sigma_P dV dt$ et $dN_D = \sigma_D dV dt$. On note $\sigma = \sigma_P - \sigma_D$ de sorte que $dN_P - dN_D = \sigma dV dt$. Finalement,

$$\begin{aligned} (\delta^2 N)_{\text{spatial}} &= \phi_e(r, t) dt - \phi_s(r + dr, t) dt + \sigma dV dt \\ &= \left[\oint_{\mathcal{S}_r} \vec{j}_n(r, t) \cdot d\vec{\sigma}|_{\theta, \varphi} - \oint_{\mathcal{S}_{r+dr}} \vec{j}_n(r + dr, t) \cdot d\vec{\sigma}|_{\theta, \varphi} \right] dt + \sigma dV dt \end{aligned}$$

Ainsi,

$$(\delta^2 N)_{\text{spatial}} = -4\pi \left(\frac{\partial}{\partial r} (r^2 j_n(r, t)) \right) dr dt + \sigma 4\pi r^2 dr dt \quad (20)$$

Finalement, l'équation de conservation de la matière :

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

Équation de diffusion

9. La définition intrinsèque de l'opérateur gradient $\vec{\nabla}$ d'une fonction scalaire est donnée par la formule $df = \vec{\nabla} f \cdot d\vec{OM}$.

10. La différentielle de la fonction $f = f(r, \theta, \varphi)$ est donnée par :

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

Dans un second temps on sait que $d\vec{OM} = dr\vec{e}_r + r d\theta\vec{e}_\theta + r \sin \theta d\varphi\vec{e}_\varphi$. 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

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

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

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

On en déduit :

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (24)$$

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 :

$$\vec{j}_n(r, t) = -D\vec{\nabla}n(r, t) \quad (25)$$

avec $\vec{j}_n(r, t) = \bar{j}_n(r, t)\vec{e}_r$ (ici $\bar{j}_n(r, t)$ 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,

$$\bar{j}_n(r, t) = -D\frac{\partial n}{\partial r}(r, t) \quad (26)$$

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

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

On obtient

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

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 :

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

14. On utilise l'Équation de la diffusion :

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

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 :

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

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

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

Dans le cas du régime permanent :

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

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_o est : $\tau = \ell^2/D$. En utilisant $D = D_o e^{-\frac{E}{k_B T}}$, on obtient

$$\tau = \frac{\ell^2}{D_o e^{-\frac{E}{k_B T}}} = \frac{\ell^2}{D_o} e^{\frac{E}{k_B T}} \quad (33)$$

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 :

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