REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOGRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE EL-HADJ LAKHDAR BATNA FACULTE DES SCIENCES DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



MEMOIRE PRESENTE POUR L'OBTENTION DU DIPLOME DE MAGISTER EN PHYSIQUE

Option

Microstructure et propriétés mécanique des matériaux

Par

Mr. Yacine BENDAKMOUSSE

Thème

Etude théorique des effets dimensionnels dans les fils fins métalliques dans le cadre des modèles de conductions statistiques

Soutenue 28 / 04 / 2011

Devant le jury :

BELBACHA EL-DJEMAI	Pr	U. Batna	Président
HADRIA MEDOUER	M.C	U. Batna	Rapporteur
MESSAADI SACI	Pr	U. Batna	Examinateur
AYADI KAMEL EDDINE	M.C	U. Ouargla	Examinateur

Remerciements

Je remercie en premier lieu Dieu de m'avoir donné le courage et la volonté pour réaliser ce modeste travail.

Ce travail a été réalisé au laboratoire d'études physico-chimiques des matériaux `L.E.P.C.M ' de l'université de Batna, sous la direction de Mme **HADRIA MEDOUER** Maitre de conférence à l'université de Batna, qu'il soit permis de lui exprimer ma profonde gratitude pour l'aide, les conseil et les encouragements qu'elle ne cessa de me prodiguer au cours de cette étude.

Je tiens à exprimer mes remerciements à Mr. **BELBACHA EL-DJEMAI** professeur à l'université de Batna, pour l'honneur qu'il me fait en acceptant de présider le jury de ce mémoire

Je tiens aussi à remercier Mr. **MESSAADI SACI** professeur à l'université de Batna, et Mr. **AYADI KAMEL EDDINE** Maitre de conférences à l'université de Ouargla qui ont accepté d'être les examinateurs de mon travail.

Je ne saurais oublier de remercier **Mr. REBAI CHOUCHANE** *et toutes les personnes qui ont contribué à la réalisation de ce mémoire.*

A tout ma famille et mes amis, je dis merci pour la sympathie et le soutient qu'ils m'ont témoignés.

sommaire

Introduction	1	Ĺ
--------------	---	---

Chapitre I phénomène de conduction dans les métaux massifs

I.1-Modèle de Drude	. 4
I.1.1- Représentation du modèle	5
I.2-Modèle de Sommerfeld	.11
I.2.1-Dénombrement des niveaux d'énergie électroniques	5
I.2.2-Remplissage des niveaux d'énergie électroniques	.16
I.2.3-sphère de Fermi	.19
I.3- Modèle de l'électron presque libre	20
I.4-Equation de Boltzmann	.23
I.4.1-Généralités	23
I.4.2-Solution générale	.25
I.5-Conductivité électrique	.30
I.5.1-Conductivité électrique dans l'approximation de l'électron libre	30
I.5.2-Conductivités électriques des électrons dits presque libre	.31
I.6-Résistivité électrique dans les métaux	.33
Conclusion	34

Chapitre II Les différents modèles de la conductivité électrique des couches minces métalliques

II.1.Modèle de Fuchs-Sondhimer	
II .1.1-Représentation mathématique	
II .1.2-Cas des réflexions totalement diffuses	
II .2.3-Cas des réflexions diffuse et spéculaire simultanément	42
II.2- Modèle de Cottey.	44
II.3- Modèle de Mayadas-Shatzkes	47
conclusion	51

Chapitre III Les modèles statistiques

III.1. Modèle statistique unidimensionnel	
III.1.1-Effet des joints de grains	
III.2. Modèle statistique tridimensionnel	
III.2.1-Analyse théorique	
III.3-Conductivité électrique	60
III.3.1-Expression du libre parcours moyen total	61
III.3.2-Expression générale de la conductivité totale	
Conclusion	64

Chapitre IV

IV.1-Modélisation numérique.	67
IV.1.1-Modèle de Fuchs-Sondheimer	67
IV.1.1.a- Formules des équations asymptotiques déduites	67
IV.1.1.b- Influence du coefficient de réflexion p sur la résistivité électrique	68
IV.1.2-Modèle de Mayadas-Shatzkes.	69
IV.1.2.a - Formules des équations asymptotiques déduites	69
IV.1.2.b- La variation du paramètre α en fonction du coefficient de réflexion I	R70
IV.1.2.c-influence du coefficient de réflexion R sur la résistivité électrique	71
IV.3-Modèle statistique	73
IV.3.1-Expression de la conductivité électrique par usage de nouveaux j	paramètres
dimensionnels	73
IV.1.4-Etude de la conductivité électrique à partir des modèles statistiques	76
IV.1.4.1-Variation du paramètre dimensionnel µ en fonction du coefficient de	e réflexion
spéculaire p	76
IV.1.4.2-Variation du paramètre dimensionnel v en fonction du coefficient T	77
IV.1.4.3-Variation de la résistivité électrique réduite en fonction du	paramètre
dimensionnel µ	78
IV.1.4.4-Variation de la résistivité électrique réduite en fonction du paramètre du g	grain v79
IV.2-Etude de la conductivité électrique des couches minces métalliques pure	80
IV.2.1-Couches de Cuivre	81
IV.2.2-Couches d'argent	83
IV.2.3Couches de platine	
IV.3.1'effet de recuit sur la résistivité électrique des couches minces métallique	s95
IV.3.1- Forme générale du coefficient de réflexion spéculaire effectif	95
IV.3.2 -Expressions asymptotiques linearisées de la résistivité électrique	
IV.3.3-Interprétation des résultats expérimentaux	
IV.1.4-Etude de la conductivité électrique des alliages	104
Résultats et discussion	113
Conclusion	114

Introduction générale

Introduction :

Le transport des électrons dans les solides a intéressé les chercheurs pendant plus d'un siècle le début en 1900 par Drude où il a élaboré la première théorie des solides, après la découverte de l'électron par J.J. Thomson en 1897qui consiste à décrire un métal comme un gaz parfait d'électrons en utilisant le concept de l'électron libre et le temps de relaxation. Ce modèle conduit à une interprétation intéressante des lois fondamentales telle que la loi d'Ohm qui permet de décrire la conductivité électrique et la chaleur dans les métaux. Mais malgré l'amélioration de Lorentz, en 1905, sa théorie a échouée sous le problème de chaleur spécifique. Après le développement de la mécanique quantique Sommerfeld en 1928 a reformulé la théorie de Drude-Lorentz en incluant la statistique de Fermi-Dirac.

Une couche mince d'un matériau donné est un élément de ce matériau dont l'une des dimensions, qu'on appelle l'épaisseur, a été fortement réduite, de telle sorte qu'elle s'exprimera en nanomètres. Cette très faible distance entre les deux surfaces a limités une perturbation de la majorité des propriétés physique. Il ya beaucoup de Techniques d'élaboration des couches minces qui peuvent être distinguées en deux grandes parties : les méthodes physiques et les méthodes chimiques et électrochimiques.

Plusieurs mécanismes contribuant au calcul de la résistivité des couches minces ont été élaborés pour comprendre l'influence des paramètres physiques inclus en modelant ces mécanismes. Ce sont les collisions internes et les diffusions sur les surfaces externes et sur les joints de grains.

En 1938, l'apparition d'une autre étude s'intéresse à l'effet de taille sur la conductivité électrique comme couches minces métalliques a été proposé par Fuchs. En 1952 Fuchs-Sondheimer a proposé un autre modèle qui tient en compte l'effet de surface externe celui-ci a permis des interprétations de quelques phénomènes physiques .

En suivant l'idée émise initialement par Fuchs-Sondheimer. En 1967 Cottey a proposé un autre modèle tel que la couche mince d'épaisseur soit remplacée d par une superposition infinie de couches d'épaisseur d, ce modèle est appelé «modèle multicouches».

En 1970 Mayadas-Shatzkes publiait un modèle qui prend en compte les effets des joints de grains, et Tosser a proposé un nouveau modèle en 1977 s'appelle «modèle statistique» les travaux de modélisation relatifs aux phénomènes de transport dans les couches minces métalliques sont réexaminés en utilisant le concept de libre parcours moyen (modèle statistique), ce modèle tient en compte des effets simultanés dus aux surfaces externes et aux joints de grains.

Le travail présenté dans le cadre de ce mémoire est réparti en quatre chapitres et se présente comme suit :

- Le premier chapitre contient les phénomènes de conduction dans les métaux massifs.
- Le deuxième chapitre est consacré à la présentation de quelque modèles de la conductivité électrique des couches minces métalliques .
- Dans le troisième chapitre nous introduisons les notions de base décrivant les modèles de conduction statistiques.
- Le quatrième chapitre est consacré a l'étude de :
 - La modélisation numérique, en utilisant les trois modèles de conduction (Modèle de Fuchs-Sondheimer, Modèle de Mayadas-Shedzkes, Modèle statistique).
 - La comparaison des résultats obtenus à partir des modèles de conduction statistiques, dans le cas des couches minces métalliques pures de cuivre, de l'argent et de platine.

- l'influence du recuit sur la variation du coefficient de réflexion spéculaire ; nous utilisons certaines expressions linéarisées obtenues dans le cadre des modèles statistiques . Cette étude est effectuée sur des résultats expérimentaux relatifs aux couches de Zinc, d'Aluminium et de Molybdenum .
- la conductivité électrique des alliages : nous examinons les données expérimentales de deux alliages, le premier alliage est composé de Nikel et de fer, et le deuxième est composé de Cobalt et de fer, à partir des modèles statistiques.

Chapitre I

phénomène de conduction dans les métaux massifs

Depuis la découverte de l'électron par J.J.Thomson (1897) et les travaux de H.A.Lorentz, on sait que le courant électrique est véhiculé par des électrons ayant la propriété de se mouvoir au sein de la matière. En considérant un gaz d'électrons libres auquel est appliqué la théorie cinétique des gaz de Boltzmann, Drude et Lorentz qui ont montré entre 1900 et 1905 que la conductivité électrique σ définie par la loi d'Ohm $J = \sigma$. *E*,s'exprimait de la façon suivant : $\sigma = (n. e^2/m. \tau)$; où n est la densité volumique d'électrons libres, e est la charge de l'électrons, τ est le temps moyen entre deux collisions et m est la masse de l'électron.

Le développement de la mécanique quantique permit à Sommerfeld, en (1928), de reformuler la théorie de Drude-Lorentz en incluant la statistique de Fermi-Dirac et la notion de puits de potentiel, puis Bloch en (1929), prit en compte la périodicité du potentiel cristallin et il montra ainsi l'existence de bandes d'énergie. Ce modèle rend alors correctement compte de la capacité calorifique, de la conductibilité thermique, et de la conductivité électrique des métaux. Il permet également d'explique la distinction entre métaux, semi-conducteurs et isolent.

En effet, dans un cristal constitué d'un ensemble d'atomes, les électrons n'occupent plus des niveaux d'énergie discrets comme dans le cas de l'atome isolé mais ils sont localisés dans des bandes d'énergie séparées par de larges domaines d'énergies interdites. La formation de ces bandes d'énergie résulte du recouvrement des orbitales électroniques des couches externes qui se produit lorsque les atomes sont proches les uns des autres. Les électrons des couches externes ne restent pas liés à un atome particulier, et deviennent plus ou moins libres de se propager d'un atome à l'autre. On les appelle électrons de conduction. La répartition des électrons dans les différents états énergétiques obéit au principe d'exclusion de Pauli et suit la statistique de Fermi-Dirac. A 0^0 K, le niveau de plus haute énergie occupé par des électrons est appelé le niveau de Fermi et l'énergie qui lui correspond est appelée l'énergie de Fermi(E_F).

La conductibilité électrique est l'aptitude que possède un matériau à conduire l'électricité. Il est de constatation courante que d'un corps solide à l'autre, on observe de très large variation de la conductibilité électrique. C'est ainsi qu'à la température ambiante, le rapport entre la résistivité du meilleur isolant et celle du meilleur conducteur, atteint 10²⁵. Les processus responsables de la conductibilité sont d'ailleurs très variés, tels que les particules qui mettent en cause les électrons libres pour les métaux, porteurs de charge (électrons et trous) issus du dopage d'un semi-conducteur, ions mobiles. Notre approche vis-à-vis des mécanismes physique de la conduction de l'électricité sera progressive. Nous étudierons :

- Le modèle de Drude .

- Le modèle de Sommerfeld.

I.1- Modèle de Drude :

Seulement trois ans après la découverte de l'électron par J. J. Thomson en 1897, P. Drude a développe un modèle permettant décrire la conduction d'électricité et de chaleur dans les métaux. Le modèle se base sur quatre hypothèses fondamentales:

Electrons indépendants et libres: Cela veut dire que les électrons n'interagissent pas entre eux et que leur mouvement, entre deux collisions successives avec les noyaux atomiques qui composent le solide. Il est décrit par les lois de Newton pour une particule libre. La première hypothèse nous est imposée par la difficulté de décrire la cinétique d'un système à N corps interagissants. Aujourd'hui on sait qu'elle est particulièrement efficace pour décrire un gaz d'électrons libres.

Collisions instantanées: Drude introduit l'interaction entre électrons et ions sous forme de collisions ayant une durée infinitésimale, qui changent la vitesse d'un électron au cours de son mouvement. Dans l'idée originale les électrons sont sujets de collisions mécaniques avec les ions du solide.

Temps de relaxation: un électron subit une collision avec une probabilité par unité de temps $1/\tau$. Cette probabilité ne dépend pas de la position et de la vitesse de l'électron. Le temps τ est appelé *temps de relaxation*. Cela implique qu'un électron se propage en moyenne pendant un temps τ avant sa prochaine collision et s'est propagé en moyenne un temps τ depuis sa dernière collision.

Chaos moléculaire: La direction et la vitesse qui caractérisent un électron après une collision ne sont pas corrélées aux quantités respectives avant la collision. En particulier, la direction après une collision est supposée aléatoire. La vitesse après une collision est aussi aléatoire, mais sa distribution de probabilité est celle dictée par la température à la position où la collision a eu lieu. Cette dernière hypothèse est nécessaire pour dériver le coefficient de transport de chaleur.

I.1.1- Représentation du modèle :

Considérons [2] le cas des électrons de conduction dans les métaux. Ces électrons interagissent par collision avec des ions fixes ou d'autres électrons. Etudions le mouvement d'un électron entre deux chocs.

En l'absence d'un champ électrique externe (E), le mouvement des électrons libres est aléatoire à l'intérieur du solide .Les électrons libres se déplacent alors à une vitesse moyenne v_{therm} , laquelle est une conséquence à l'agitation thermique du solide. cette vitesse varie avec la température du solide et indépendante du champ électrique externe appliqué.

L'électron libre se déplace sous l'influence de l'agitation thermique mais son mouvement est limité par les collisions avec les autres atomes du solide .A' chaque collision, l'électron libre perd son énergie cinétique, laquelle est transformée en radiation thermique par l'émission d'un photon. On définit λ comme étant la distance moyenne parcourue par l'électron libre entre chaque collision ou (longueur parcourue par un électron entre deux collisions).

Le libre temps moyen τ des collisions pour un électron libre sera définie par :

$$\lambda = V_{THERMI} . \tau \tag{I-1}$$

VTHERMI est la vitesse moyenne associée à l'agitation thermique La figure suivante illustre le mouvement aléatoire de l'électron dans le solide.



figure(I-1) : mouvement aléatoire de l'électron dans le solide.

En présence d'un champ électrique , on observera un déplacement moyen ΔX des électrons libres sur une période de temps Δt . En plus de son mouvement thermique habituel, chaque électron libre dérivera d'une distance moyenne l_d dans la direction parallèle à l'orientation du champ électrique E entre chacune des collisions.

Chaque électron libre sera soumis à une force électrique (-eE) dans la direction du champ électrique appliqué d'origine extérieur, laquelle engendrera une accélération γ

Avec la mécanique Newtonienne, on a $\Sigma F = m.\gamma$. Appliqué à la situation, cela donne :

$$m.\gamma = -eE \tag{I-2}$$

où: *m: est la masse de électron*.

e : est la charge de électron.

E: est le champ électrique imposé par un source externe.

La vitesse moyenne de déplacement des électrons dans la direction du champ électrique est la vitesse de dérive:

$$v_d = \frac{l_d}{\tau} \tag{I-3}$$

La vitesse de dérive v_d sera en général beaucoup plus faible que la vitesse v_{therm} résultant de l'agitation thermique. Il est donc raisonnable d'affirmer que la vitesse de dérive des électrons n'affecte en rien la fréquence des collisions à l'intérieure du solide et que seule la température affecte la fréquence de ces collisions.

On exprime l'accélération γ en fonction de la vitesse de dérive et l'accélération γ . selon la mécanique classique :

$$\gamma = \frac{\Delta v_d}{\Delta t} \tag{I-4}$$

Et la vitesse moyenne de dérive sur le parcours de l'électron libre entre deux collision est donnée par:

$$m \cdot \frac{\Delta v_d}{\Delta t} = -eE \tag{I-5}$$

Donc :

$$v_d = -\frac{eE \tau}{m} \tag{I-6}$$

On retiendra donc que la vitesse de dérive d'un électron soumis à un champ électrique E, sera :

$$v_d = -\frac{eE \tau}{m}$$

La densité de courant est j, elle peut être définit comme étant la charge par unité de temps qui traverse une unité de surface orthogonale à la direction de j. On a donc :

$$J = -n. e. v_d \tag{I-7}$$

On remplace v_d dans j

$$j = -n. e. \frac{eE \tau}{m}$$
(I-8)

$$j = \frac{ne^2\tau}{m}E\tag{I-9}$$

La conductivité σ se déduit immédiatement de la comparaison de (I-10) avec la loi d'Ohm sous la forme :

$$J = \sigma. E \tag{I-10}$$

On aura donc:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \tag{I-11}$$

On remarque que la conductivité électrique dans le modèle de Drude est donc exprimée en fonction du paramètre τ , le temps de relaxation, et elle contient le produit volumique des électrons par leur mobilité, mais plusieurs faits expérimentaux ne sont pas en accord avec le modèle de Drude, dans lesquels les électrons libres sont considérés comme un gaz régi par les lois de la théorie cinétique des gaz. En particulier le modèle de Drude prédit une chaleur spécifique du gaz électronique environ cent fois plus grande que la valeur observée expérimentalement.

Pour [5] amélioré conséquence de modèle Drude, en 1905 Lorenz développée ce modèle a adopté la distribution classique de Maxwell-Boltzmann pour les vitesses thermiques, puisque Drude présuppose la même vitesse thermique pour tous les électrons.

Mais la conséquence de Lorentz ascidie avec la conséquence de Drude. Une part importante des défauts de la théorie peut être corrigée si l'on tient compte de la nature quantique du gaz électronique, en particulier en reconnaissant que les électrons sont des fermions, qui obéissent au principe d'exclusion de Pauli. Ceci impose de remplacer la distribution de Maxwell-Boltzmann, utilisée en théorie cinétique des gaz et dans le modèle de Drude, par la distribution de Fermi-Dirac.

I.2-Modèle de Sommerfeld :

Le modèle de Sommerfeld fait appel à la mécanique quantique, et use d'une approximation : l'énergie potentielle à l'intérieur du matériau reste constante. Ce modèle donne des résultats intéressants qui viennent compléter le modèle de Drude.

On appelle électrons libres des électrons supposés sans interactions les uns avec les autres et sans interactions avec les charges positives autres que celles qu'imposent les surfaces (bord du puit de potentiel) du métal. Cette définition implique les restrictions suivantes[2] :

• L'interaction coulombienne répulsive des électrons est dans une première approche négligée.

• L'interaction de chacun des électrons de valence avec les ions est schématisée de la manière suivante :

- La présence des ions positifs crée, dans la région d'espace occupée par le solide un potentiel attractif pour les électrons.
- Un électron tendant à s'échapper du métal subit de la part de ce dernier un potentiel attractif dû à l'excés ainsi crée d'une charge positive.

Les électrons sont donc piégés dans un puit de potentiel dont la forme épouse celle du solide. A part cette région globale des ions, leur action locale sur les électrons est négligée. Autrement dit, on admet que les électrons de valence éprouvent dans le métal un potentiel constant, On va représenter cela graphiquement.





Puits de potentiel

Figure (I-3) : énergie potentielle à l'intérieur du réseau

Bien que ces hypothèses paraissent très restrictives et peu réalistes à première vue, elles permettent de rendre compte, au moins qualitativement, des propriétés les plus caractéristiques de l'état métallique.

Pour une particule libre, l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$H\Psi = -\frac{h}{8\pi^2 m} \Delta\Psi = E\Psi \tag{I-12}$$

Avec :

h :constante de Planck, m : la masse de l'électron, Ψ : fonction d'onde représentant la particule, E : valeur propre de l'Hamiltonien H.

Avec les conditions aux limites imposées au modèle, les solutions peuvent être mises sous la forme :

$$\Psi(X,Y,Z) = \sqrt{\frac{8}{\nu}} \sin\left(\frac{n_1 \pi X}{L}\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi Y}{L}\right) \sin\left(\frac{n_3 \pi Z}{L}\right)$$
(I-13)

Un état est caractérisé par trois nombres quantiques n_1 , n_2 , n_3 qui ne peuvent être que des entiers strictement positifs. L'énergie E est donnée par :

$$E(n_1, n_2, n_3) = \frac{h^2}{8mL^2}(n_1^2, n_2^2, n_3^2)$$
(I-14)

Les fonctions d'ondes (I-14), décrivent les états électroniques dans le modèle de Sommerfeld qui représentent des ondes stationnaires. Mais elles ne sont pas adaptées au problème de la conductivité. Il convient par exemple, de disposer de fonctions d'ondes décrivant le mouvement de l'électron dans une direction définie.

En mécanique classique, une particule libre est caractérisée par un vecteur quantité de mouvement \vec{p} ; en mécanique quantique, l'onde représentant cette particule sera une fonction propre de l'opérateur p :

$$\vec{p} = -i\frac{h}{2\pi}\vec{\nabla} \tag{I-15}$$

 $\vec{\nabla}$: est l'opérateur de composantes $\partial/\partial X$, $\partial/\partial Y$, $\partial/\partial Z$

Les fonctions propres sont de type :

$$\Psi_{K}(\vec{r}) = Aexp(i\vec{K}\vec{r}) \tag{I-16}$$

Où : \vec{K} est le vecteur d'onde.

Et qu'il leur correspond la valeur propre :

$$\vec{p} = \frac{h}{2\pi}\vec{K} \tag{I-17}$$

Ces fonctions d'ondes décrivent la particule libre, dans un milieu étendu à l'infini et ne sont pas compatibles directement avec le solide de dimensions finies. Born proposa alors de considérer le solide comme un milieu infini, construit par translations élémentaires de longueur L, et pour tenir compte de la périodicité, on impose aux fonctions d'onde de vérifier :

$$\Psi(X, Y, Z) = \Psi(X + L, Y, Z) = \Psi(X, Y + L, Z) = \Psi(X, Y, Z + L)$$
(I-18)

Les fonctions d'ondes peuvent être normées sur le volume \dot{v} d'un solide et deviennent :

$$\Psi_{K}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{1}{\dot{v}}} \exp(i\vec{K}\vec{r})$$
(I-19)

avec :

$$K_X = \frac{2\pi}{L} n_1 , K_Y = \frac{2\pi}{L} n_2 , K_Z = \frac{2\pi}{L} n_3$$
 (I-20)

L'énergie s'écrit enfin :

$$E_{K} = \left(\frac{h^{2}}{8\pi^{2}m}\right)K^{2} = \left(\frac{h^{2}}{8\pi^{2}m}\right)(K_{X}^{2} + K_{Y}^{2} + K_{Z}^{2})$$
(I-21)

Les états électroniques se représentent généralement par le vecteur d'onde \vec{K} dans l'espace des coordonnées (K_X, K_Y, K_Z).Dans cet espace, les surfaces isoénergétiques sont des sphères centrées à l'origine [4].

I.2.1-Dénombrement des niveaux d'énergie électronique:

On a vu précédemment [4], que dans l'espace des k, une surface isoénérgétique (W = constante) est une sphère, on constate qu'un « bon vecteur k » a à sa disposition un volume $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$, ce qui donne une coquille sphérique d'épaisseur dk. Il y a $\frac{4\pi k^2}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3}$ « bonnes valeurs » de k.

La densité d'état sera donc représentée par la relation :

$$N(k).\,dk = 2\frac{4\pi k^2 dk}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{L^3}{\pi^2} k^2.\,dk \tag{I-22}$$

$$N(k). dk = \frac{L^3}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar}\right)^{2/3}. (W + W_0) dW = N(W). dW$$
(I-23)

D'où l'expression de la densité d'états, ou nombre d'états d'énergie disponible par unité de volume :

$$N(k). dk = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar}\right)^{2/3}. (W + W_0)^{1/2} dW$$
(I-24)

Il est aussi possible d'écrire la densité d'états en fonction de l'énergie cinétique électronique :

$$N(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) (E)^{1/2}$$
(I-25)

La courbe associée sera alors :



Figure (I-4) : Représentions graphiques de la densité d'état N(E) en fonction de l'énergie W

I.2.2-Remplissage des niveaux d'énergie électronique:

En vertu [6] du principe d'exclusion de Pauli, et comme l'énergie du système dans son état fondamental est minimale, chaque niveau d'énergie autorisé sera occupé par un seul électron, en commençant par le plus bas niveau. En effectuant la sommation sur une unité de volume, tous les niveaux seront remplis jusqu'à une valeur limite de l'énergie.

il faut tenir compte de la statistique d'occupation des niveaux d'énergies par les électrons : c'est la statistique de Fermi-Dirac.

La probabilité d'occupation du niveau d'énergie W à la température T est donnée par la fonction de distribution de Fermi-Dirac :

$$F_{Fermi-Dirac}(W,T) = \frac{1}{e^{\frac{W-W_F}{k_B T}} + 1}$$
(I-26)

 W_F : Energie de Fermi

Au zéro absolu, la distribution de Fermi-Dirac donne :

$$F_{Fermi-Dirac}(W,0)$$



Figure(I-5) :distribution de Fermi-Dirac

Dans le cas général, il y a un étalement de la fonction au voisinage de l'énergie de Fermi :



Figure(I-6) :la probabilité qu'un électron possède l'énergie W Le calcul du remplissage des niveaux d'énergie doit donc s'effectuer en écrivant :

$$N = \int_{-W_0}^{+\infty} f_{Fermi-Dirac}(W,T).n(W).dW$$
(I-27)

Ainsi la notion de remplissage jusqu'à une énergie limite n'est-elle valide en toute rigueur que pour le zéro absolu : on dit alors que le gaz d'électron est totalement dégénéré (il y a dégénérescence de spin pour tous les états) :



Figure(I-7) : Distribution en énergie des électrons à zéro absolu

Lorsque l'on se place à une température différente du zéro absolu, les états électroniques ne sont pas tous dégénérés : il y a un « étalement » des états occupés au voisinage de l'énergie de Fermi, effet d'autant plus accentué que la température est élevée :



Figure(I-8) : La probabilité d'occupation du niveau d'énergie W à la température T> $0^{\circ}k$

I.2.3-Sphère de Fermi:

Faisant abstraction de la dépendance en température, on peut définir le nombre d'onde de Fermi kFERMI, par :

$$E_{FERMI} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{I-28}$$

La surface isoénérgétique (iso = même) qui correspond à EFERMI dans l'espace de k est appelée surface de Fermi. Dans le cas du modèle de Sommerfeld, la surface de Fermi est une sphère de rayon kFERMI, ou sphère de Fermi. Cette sphère est complètement remplie à 0°K.

A la surface de la sphère de Fermi, on peut définir la vitesse des électrons (ou vitesse de Fermi), soit au sens de Sommerfeld :

$$V_{\text{SURFACE-FERMI}}^2 = \frac{2E_{\text{FERMI}}}{m} \tag{I-29}$$

On peut aussi définir la température de Fermi électronique par :

$$T_{\text{FERMI}} = \frac{E_{\text{FERMI}}}{k_B} \tag{I-30}$$

Avec :

 k_B : constant de Boltzman.

I.3-Modèle de l'électron presque libre:

Le modèle de l'électron libre a été construit essentiellement et uniquement pour les métaux, dont il permet l'interprétation d'un certain nombre de propriétés, cependant, du point de vue de solide, il ne résout pas le problème fondamental, à savoir la différence entre un isolant, un semi-conducteur, ou un métal. Cette distinction ne peut être obtenue qu'en réintroduisant la structure triplement périodique du réseau. L'objet de ce qui suit porte sur les conséquences de cette périodicité.

Chaque ion positif i exerce un potentiel attractif sur les électrons Vi(r).

Le potentiel vu par les électrons est :

$$V(r) = \sum_{i} V_i(r) \tag{I-31}$$

L'équation de Schrödinger prend la forme :

$$\left[-\frac{h}{8\pi^2 m}\Delta + V(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$
(I-32)

où V(r) est une fonction périodique, les solutions de l'équation (1-32) appelées fonctions de Bloch sont données par :

$$\Psi_{K}(\vec{r}) = U_{K}(\vec{r})exp(i\vec{K}\vec{r})$$
(I-33)

Elles représentent des ondes planes modulées par les fonctions U_K (notées souvent) telle que U(r) est de même périodicité que V(r), on écrit :

$$U(r) = \sum_{I} U_{I} exp(i\vec{K}\vec{r})$$
(I-34)

$$U_I = -\frac{8\pi^2}{h^2} \frac{U_0}{2\vec{K}\vec{I}}$$
(I-35)

Les vecteurs \vec{I} sont les vecteurs du réseau réciproque. Ceci détermine complètement les fonctions de Bloch par les coefficients de Fourrier U_I . Ceux ci sont proportionnels aux V_i , ils sont d'autant plus petits que les V_I sont petits.

Les valeurs de \vec{k} qui annulent le dénominateur de l'équation (I-35) pour un vecteur \vec{l} donné ont leur extrémité dans le plan médiateur de \vec{l} .

Parmi les conséquences de cette étude structurale, il faut noter:

• L'apparition d'une série de discontinuité dans la courbe de l'énergie des électrons appelée bandes interdites. Un élément est conducteur si sa structure électronique présente au moins une bande permise partiellement occupée, et par conséquent il existe des états vides au voisinage du niveau de Fermi et infiniment proches des états occupés. Un champ électrique aussi faible peut-il ainsi exciter les électrons. Par contre à cause du principe d'exclusion de Pauli, ce mécanisme est impossible dans une bande pleine. Toute excitation suppose une transition interbande avec franchissement d'une bande interdite.

• La vitesse d'un électron n'est plus colinéaire à k comme pour les électrons libres. Elle est dans ce cas (voir cours de mécanique quantique) :

$$\mathbf{v} = \frac{2\pi}{h} \vec{\nabla}_K E \tag{I-36}$$

I.4-Equation de Boltzmann:

I.4.1-Généralités:

Une perturbation de la fonction de distribution $F(\vec{k}, \vec{r}, t)$ des électrons de conduction d'un métal peut être induite par différents effets qui sont supposés être superposables; on écrit donc [6] :

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} \Big|_{coll} + \frac{\partial F}{\partial t} \Big|_{diff} + \frac{\partial F}{\partial t} \Big|_{ch}$$
(I-37)

Où:

 $\frac{\partial F}{\partial t}\Big|_{coll}$: représente l'effet des collisions sur les phonons ou les électrons.

 $\frac{\partial F}{\partial t}\Big|_{diff}$: rend compte des effets de diffusion.

 $\frac{\partial F}{\partial t}|_{ch}$: représente l'effet des forces extérieures (champ E ou B).

En calculant les différentielles totales exactes à \vec{k} = constante (\vec{k} est le vecteur d'onde) ou à \vec{r} = constante (\vec{r} la position géométrique), on écrit:

$$\frac{\partial F}{\partial t}\Big|_{diff} = -\frac{d\vec{r}}{dt}\nabla_r F \tag{I-38}$$

$$\frac{\partial F}{\partial t}\Big|_{ch} = -\frac{d\vec{K}}{dt}\nabla_K F \tag{I-39}$$

Comme la résultante \vec{F} des forces extérieures vaut :

$$\vec{F} = \hbar \frac{\partial K}{\partial t} \tag{I-40}$$

On obtient :

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} \Big|_{coll} - \vec{V} \nabla_r F - \frac{\vec{f}}{\hbar} \nabla_K$$
(I-41)

Avec :

$$\vec{V} = \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} \tag{I-42}$$

En régime stationnaire :

$$\frac{dF}{dt} = 0 \tag{I-43}$$

Et l'équation de Boltzmann s'écrit:

$$\frac{\partial F}{\partial t}\Big|_{coll} = \vec{V}\nabla_r F + \frac{\vec{f}}{\hbar}\nabla_K F \tag{I-44}$$

Dans l'hypothèse du temps de relaxation, on écrit:

$$\frac{\partial F}{\partial t}\Big|_{coll} = \frac{F(\vec{k},\vec{r},t) - F_0(\vec{k})}{\tau}$$
(I-45)

Où F_0 est la fonction de distribution non perturbée, ou encore:

$$\frac{\partial F}{\partial t}\Big|_{coll} = \frac{F_1(\vec{k}, \vec{r}, t)}{\tau} = \frac{\emptyset}{\tau} \frac{\partial F_0(\xi)}{\partial \xi}$$
(I-46)

Où F_1 est l'écart par rapport à l'équilibre et ξ l'énergie de l'électron.

I.4.2-Solution générale

On suppose que:

$$\nabla_r F \approx \nabla_r F_0 \tag{I-47}$$

S'il existe un gradient de température ΔT dans le système, nous avons:

$$\nabla_r F_0 = \frac{\partial F_0}{\partial T} \nabla_r T \tag{I-48}$$

L'équation (I-47) est justifiée si la déviation par rapport à l'équilibre est faible. Calculons

maintenant $\frac{\partial F_0}{\partial T}$

$$\frac{\partial F_0}{\partial T} = \frac{\partial F_0}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial Q} \frac{\partial Q}{\partial T}$$
(I-49)

Tel que :

$$Q = \frac{\xi - \xi_F}{k_B T} \tag{I-50}$$

Où k_B est la constante de Boltzmann.

$$\frac{\partial F_0}{\partial T} = \frac{\partial F_0}{\partial \xi} k_B \left[-\frac{1}{k_B T} \frac{\partial \xi_F}{\partial T} - \frac{\xi - \xi_F}{k_B T} \right] = -\frac{\partial F_0}{\partial \xi} \left[\frac{\partial \xi_F}{\partial T} + \frac{\xi - \xi_F}{k_B T} \right]$$
(I-51)

L'équation (I-47) devient alors:

$$\nabla_r F \approx -\frac{\partial F_0}{\partial \xi} \left[\nabla_r \xi_F + \frac{\xi - \xi_F}{T} \nabla_r T \right]$$
(I-52)

La fonction de distribution f étant donnée par l'expression:

$$F = F_0 + F_1 \tag{I-53}$$

 $\nabla_K F$ s'écrit :

$$\nabla_K F = \nabla_K F_0 + \nabla_K F_1 \tag{I-54}$$

$$\nabla_{K}F_{0} = \frac{\partial F_{0}}{\partial \xi}\frac{\partial \xi}{\partial K} = \frac{\partial F_{0}}{\partial \xi}\nabla_{K}\xi$$
(I-55)

Donc :

$$\nabla_{K}F = \frac{\partial F_{0}}{\partial \xi} \nabla_{K}\xi + \nabla_{K}F_{1}$$
(I-56)

Dans l'équation (I-56), le terme $\nabla_K F_1$ peut être négligé à condition que le terme $\frac{\partial F_0}{\partial \xi} \nabla_K \xi$ n'entraîne pas une contribution identiquement nulle dans l'expression où il se trouve. Un électron, de masse m, possède une énergie:

$$\xi = \frac{P^2}{2m} \tag{I-57}$$

Où p est sa quantité de mouvement.

Or
$$P = \hbar K$$
 (I-58)

$$O\dot{u} \qquad P = mV \tag{I-59}$$

D'après les équations (I-57) et (I-58), on tire :

$$\nabla_K \xi = \frac{\hbar^2 K}{m} \tag{I-60}$$

équation que l'on peut encore écrire, à l'aide de (I-59) :

$$\nabla_K \xi = \hbar V \tag{I-61}$$

et l'équation (I-56) devient:

$$\nabla_K F = \hbar V \frac{\partial F_0}{\partial \xi} \tag{I-62}$$

En introduisant les équations (I-46), (I-52) et (I-62) dans l'équation (I-44), nous obtenons:

$$\frac{\phi}{\tau}\frac{\partial F_0}{\partial \xi} = -\vec{V}\frac{\partial F_0}{\partial \xi} \left[\frac{\xi - \xi_F}{T}\nabla_{\mathbf{r}}\mathbf{T} + \nabla_{\mathbf{r}}\xi_F\right] + \vec{f}\vec{V}\frac{\partial F_0}{\partial \xi} + \frac{\vec{f}}{\hbar}\nabla_K F_1 \tag{I-63}$$

En présence d'un champ électrique \vec{E} et d'un champ magnétique \vec{B} , la résultante des forces f s'écrit:

$$f = e\left(\vec{E} + \vec{V} \wedge \vec{B}\right) \tag{I-64}$$

Le produit $\vec{f} \cdot \vec{V}$ se réduit à:

$$\vec{f}.\vec{V} = e\vec{E}.\vec{V} \tag{I-65}$$

Puisque :

$$\left(\vec{V}\wedge\vec{B}\right).\vec{V}=0\tag{I-66}$$

De plus :

$$\vec{f}\nabla_{K}F_{1} = e\left(\vec{E} + \vec{V} \wedge \vec{B}\right)\nabla_{K}F_{1} = e\vec{E}\nabla_{K}F_{1} + e\left(\vec{V} \wedge \vec{B}\right)\nabla_{K}F_{1}$$
(I-67)

 $\vec{E} \nabla_K F_1$ est un terme correspondant à la déviation à partir de la loi d'Ohm donc il n'a aucun sans intérêt dans notre calcul.

$$\left(\vec{V}\wedge\vec{B}\right)\nabla_{K}F_{1} = -\vec{B}\left[\frac{1}{\hbar}\nabla_{K}\xi\wedge\nabla_{K}F_{1}\right]$$
(I-68)

A partir de l'équation (I-46), nous avons:

$$\nabla_K F_1 = -\nabla_K \phi \frac{\partial F_0}{\partial \xi} \tag{I-69}$$

Et L'équation (I-67) s'écrit:

$$\vec{f} \nabla_K F_1 = -\frac{e\vec{B}}{\hbar} \left[\nabla_K \xi \wedge \nabla_K \phi \right] \frac{\partial F_0}{\partial \xi}$$
(I-70)

L'équation (I-63) devient alors:

$$\frac{\phi}{\tau} = -\vec{V}[eE + (\xi - \xi_F)\nabla_{\rm r} \text{LogT}] + \frac{eB}{\hbar^2} [\nabla_K \xi \wedge \nabla_K \phi]$$
(I-71)

Où

$$\nabla_{\rm r} \mathrm{Log} \mathrm{T} = \frac{1}{\mathrm{T}} \nabla_{\rm r} \mathrm{T} \tag{I-72}$$

D'où la solution pour la fonction Ø:

$$\emptyset = \vec{V}\tau \left[e\vec{E} - (\xi - \xi_F)\nabla_r \text{LogT} \right] + \frac{e\vec{B}\tau}{\hbar^2} \left[\nabla_K \xi \wedge \nabla_K \phi \right]$$
(I-73)

Puisque :

$$V = \frac{\hbar K}{m}$$
 et $\nabla_K \xi = \hbar V$

nous pouvons écrire Ø sous la forme:

$$\emptyset = \frac{\hbar K}{m} \tau \left[e\vec{E} - (\xi - \xi_F) \nabla_r \text{LogT} \right] + \frac{e\vec{K}\tau}{\hbar^2} \left[\vec{B} \wedge \nabla_K \phi \right]$$
(I-74)

En posant:

$$\phi = \vec{K} \vec{\phi_1} \tag{I-75}$$

Où $\overrightarrow{\emptyset_1}$ ne dépend pas de *K* , c'est-à-dire:

$$\overrightarrow{\phi_1} = \phi_1 \left(\vec{E}, \vec{B}, \nabla T, \xi \right) \tag{I-76}$$

Nous obtenons une équation en $Ø_1$:

$$\phi_1 = \frac{\hbar\tau}{m} \left[e\vec{E} - (\xi - \xi_F) \nabla_r \text{LogT} \right] - \frac{e\tau}{\hbar^2} \left[\vec{B} \wedge \vec{\phi}_1 \right]$$
(I-77)

Si nous posons:

$$\vec{E}_1 = \vec{E} - \left(\frac{\xi - \xi_F}{e}\right) \nabla_r \text{LogT}$$
(I-78)

L'équation (I-77) s'écrira:

$$\phi_1 = \frac{\tau e}{m} \left[\hbar \vec{E}_1 - \vec{B} \wedge \vec{\phi}_1 \right] \tag{I-79}$$

La solution de cette équation est:

$$\phi_{1} = \frac{\hbar\tau e}{m} \frac{\vec{E}_{1} - \left(\frac{\tau e}{m}\right)^{2} \vec{B}(\vec{B}.\vec{E}_{1}) - \frac{\tau e}{m} \vec{B} \wedge \vec{E}_{1}}{1 + \left(\frac{\tau e}{m}\right)^{2} B^{2}}$$
(I-80)

En remplaçant \vec{E}_1 par sa valeur, nous obtenons:

Dans le cas particulier où le champ magnétique *B* de la même direction que le champ électrique *E* et le gradient de température ΔT , l'équation (I-81) s'écrit :

$$\vec{\phi}_1 = \frac{\hbar\tau e}{m} \left[\vec{E} - \left(\frac{\xi - \xi_F}{e}\right) \nabla_r \text{LogT} \right]$$
(I-82)

Donc :

$$\phi = K\vec{\phi}_1 = \frac{\hbar\tau e}{m} K \left[\vec{E} - \left(\frac{\xi - \xi_F}{e}\right) \nabla_r \text{LogT} \right]$$
(I-83)

Si le matériau ne contient pas un gradient de température, Ø s'écrit :

$$\phi = \frac{\hbar\tau e}{m} K \vec{E}$$
(I-84)

L'écart par rapport à l'équilibre F_1 s'écrit sous la forme suivante [6]:

$$F_1 = -\frac{e \hbar k \tau}{m} E \frac{\partial F_0}{\partial \xi}$$
(I-85)

A partir de cette équation, nous pouvons calculer la densité du courant électrique, donc la conductivité électrique.

I.5-Conductivité électrique:

I.5.1-Conductivité électrique dans l'approximation de l'électron libre:

Il convient en général pour le calcul de la conductivité électrique d'utiliser la fonction de distribution F qui mesure le nombre N d'électrons dans l'état k à dk pris dans un volume élémentaire.

$$dN_K = \left(\frac{1}{4\pi^3}\right) F_K(\vec{r}) dK dr \tag{I-49}$$

En l'absence d'un perturbation extérieure F_K est donnée par :

$$F_0(K) = \left(\frac{1}{4\pi^3}\right) \frac{1}{exp\left(\frac{E-\mu}{K_B T}\right) + 1} \tag{I-50}$$

 μ est le potentiel chimique du gaz d'électrons libres .

Quand le métal est soumis à un champ électrique *E*, en l'absence d'un champ magnétique l'équation de Boltzmann pour un solide homogène se ramène à :

$$-\frac{e\vec{E}}{\hbar}\nabla_K F = \frac{F - F_0}{\tau} \tag{I-51}$$

 τ : est le temps de relaxation. Il est lié au libre parcours moyen par la relation :

$$\lambda = V.\tau \tag{I-52}$$

Où V est la vitesse de l'électron.
En l'absence du champ la distribution F_0 ne donne lieu à aucun courant. En revanche, à la distribution F correspond la densité de courant :

$$J = -e \int \vec{V} F d^3 \vec{K} \tag{I-53}$$

D'une façon générale, le calcul de la densité de courant J et donc de la conductivité électrique ($\vec{J} = \sigma \vec{E}$) implique celui de la distribution *F* en passant par l'équation de Boltzmann. Dans le cas présent ce calcul est simple, en effet on peut remplacer au premier ordre *F* par *F*₀ dans le membre gauche de l'équation (I-51), d'où :

$$F = F_0 + -\frac{\tau e\vec{E}}{\hbar} \nabla_K F_0 \tag{I-54}$$

En se rappelant que l'on a :

$$V = \frac{\hbar}{m}K$$
 et $E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$

On aboutit finalement après le calcul à la relation :

$$\sigma = \frac{ne^2 \tau_F}{m} \tag{I-55}$$

où *n* est le nombre d'électrons de conduction par unité de volume, τ_F le temps de relaxation à la surface de Fermi, c'est à dire la durée moyenne d'un parcours entre deux chocs.

I.5.2-Conductivité électrique des électrons dits presque libres:

En procédant de la même façon que pour les électrons libres, mais en utilisant la relation :

$$\vec{V} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_K E \tag{I-56}$$

On aboutit à l'expression de la conductivité électrique des électrons dits presque

libres. Elle est donnée sous forme tensorielle par la relation :

$$\sigma_{ij} = \frac{ne^2 \tau_F}{m_{ij}} \tag{I-57}$$

Où :

$$\frac{1}{m_{ij}} = \frac{1}{4\pi^3 n} \left(\frac{1}{\hbar^2}\right) \int \frac{\partial^2 E}{\partial K_i \partial K_j} d^3 \vec{K}$$
(I-58)

L'équation (1.49) n'est autre que la valeur moyenne, à l'intérieur de la surface de Fermi, de l'inverse des m_{ij} éléments du tenseur de masse effective.

La masse effective se réduit à un scalaire dans le cas d'une symétrie cubique et à fortiori pour le simple modèle de l'électron libre.

Il semble donc d'après les équations (I -12), (I -55) et (I-57) que la conductivité électrique des métaux est proportionnelle au temps de relaxation et donc au libre parcours moyen effectué par les électrons dans le métal. Généralement ce dernier est la superposition de plusieurs libres parcours moyens qui sont dûs aussi à plusieurs mécanismes d'interactions, (interaction électrons-phonons, électrons-impureté, interaction électrons-surfaces externes, ...).

Dans le travail de modélisation qui suit, il sera tenu en compte la limitation géométrique imposée par les surfaces externes du métal. On peut prévoir que l'effet des surfaces extérieures est éminent lorsque l'épaisseur de l'échantillon est inférieure ou du même ordre de grandeur que le libre parcours moyen des électrons.

I.7-Résistivité électrique dans les métaux:

Dans le métal massif la résistivité électrique ρ trouve son origine [5] dans l'interaction des électrons avec les oscillations du réseau (phonons), les imperfections (lacunes, dislocations...) et les impuretés éventuellement présentes.

La résistivité totale ρ peut être décrite comme étant la somme des résistivités dues à chaque type de processus de diffusions. La résistivité totale est de la forme :

 $\rho = \rho_{latt} + \rho_i$ (I-59) Avec : $\rho_{latt} : résistivité dûe aux phonons$ $\rho_i : résistivité dûe aux imperfections et impuretés.$

Si la concentration des imperfections et des impuretés est très petite, ρ_i devient indépendant de température (règle de Mathiessen). la résistivité du métal à $0^0 K$ appelée résistivité résiduelle ρ_i . Mais les expériences ont démontré que ρ_{latt} proportionnelle avec T aux hautes températures, et proportionnelle avec T^5 aux basses températures

Donc :

A hautes températures $\rho_{latt} \propto T$ A basses températures $\rho_{latt} \propto T^5$ Ce résultat est représenté dans la figure suivante [5] :



Figure (I-9) : variation de la résistivité électrique en fonction de la température

Conclusion :

On peut dire, malgré les résultats qui réalisé par les modèles de Drude et Sommerfeld, traiter la conduction dans le cas du métal massif : les dimensions des échantillons sont grand, comparées au libre parcoure moyen, mais ces modèles restent insuffisants pour déterminer la conductivité électrique avec précision, quand l'une des dimensions de l'échantillon métallique devient de même ordre ou inférieure au libre parcoure moyen, comme dans le cas des couches minces, dans le chapitre qui suit, nous présenterons quelque modèles qui permettent d'établir des formules théoriques relatives aux phénomènes de transport électronique.

Chapitre II

Les différents modèles de la conductivité électrique des couches minces métalliques

Quand l'une des dimensions de l'échantillon métallique devient de même ordre ou inférieure au libre parcoure moyen (l. p. m.), comme le cas des couches minces, l'interaction électrons-surface va jouer un rôle considérable dans la conductivité électrique

De nombreux modèles théoriques présentés dans la littérature permettent d'expliquer et d'interpréter les données expérimentales de la conductivité électrique, ces modèles sont basés sur la résolution de l'équation de transport de Boltzmann, dans laquelle les effets de surfaces sont incorporés par l'intermédiaire des conditions aux limites sur la fonction de distribution perturbée.

Dans ce chapitre nous présenterons les modèles décrivant la conductivité électrique dans les couches minces métalliques, à cet effet, nous commençons d'abord par un rappel sur la conductivité électrique dans le cas des métaux massifs puis, nous abordons avec suffisamment de détails la modélisation de la conductivité électrique dans les couches minces métalliques. Les premiers modèles ayant décrit les phénomènes de conduction électrique dans les couches minces métalliques métalliques ont été proposés par :

- Fuchs-Sondheimer (1938-1952),
- Cottey (1967),
- Mayadas-Shatzkes (1970),

La théorie la plus ancienne est celle de Fuchs-Sondheimer qui fournit dans certains cas des résultats satisfaisants. D'autres modèles plus perfectionnés ont été développés ultérieurement apportant divers raffinements, nous citerons ultérieurement avec détails les plus récents.

II .1-Modèle de Fuchs-Sondheimer :

Dans le cas du métal massif les dimensions des échantillons sont grandes, comparées à la distance moyenne parcourue par un électrons entre deux chocs consécutifs, la conductivité électrique s'exprime par $\sigma = (n. e^2 l_m/m. v)$, où n est le nombre d'électrons par unité de volume, l_m leur(l,p,m). v leur vitesse moyenne au voisinage de la surface de Fermi, et la conductivité des électrons à la surface du conducteur revêt une importance secondaire.

Plusieurs mécanismes contribuant au calcul de la résistivité électrique des couches minces. Ce sont les collisions internes et les diffusions sur les surfaces externes et sur les joints de grains. L'un des plus anciens modèles analytique, a été développé par Fuchs en 1936 et Sondheimer en 1952[7,8,11].

Le formalisme mathématique proposé dans le modèle de Fuchs-Sondheimer est abordé avec plus de détails, car il constitue le premier modèle pour la conductivité électrique dans le quel les effets des surfaces externes sont tenues en compte. Aucun autre modèle auparavant n'avait décrit les phénomènes de transport (résistivité électrique, pouvoir thermoélectrique effet Hal,....), dans le cadre des couches de faibles épaisseurs.

La variation de la résistivité des couches minces métallique a été traitée par le modèle de fuchs-sondheimer, en introduisant les effets de surfaces externes. Ce modèle est basé sur la fonction de distribution de Boltzmann et certaines hypothèse simplificatrice :

• Les couches minces sont homogènes avec des surfaces parallèles et lisses.

•la probabilité qu'un électron d'être réfléchi spéculairement par l'une des surfaces lors de sa collision est p, alors que la fraction restante (1-p) est diffusée dans l'espace.

Etant donné l'importance de cette théorie et comme elle constitue l'une des théories de base décrivant les phénomènes de transport dans les couches minces métalliques, nous

avons jugé utile de la présenter ici avec plus de détails et les autres modèles seront présentés de manière succincte[7].

II .1.1-Représentation mathématique :

Considérons un film mince soumis à un champ électrique E dans le sens de sa longueur (selon l'axe des x). On admet que le film est d'épaisseur uniforme (d) et de structure équivalente au matériau massif et que sa température est constante.



Figure (II -1) : Géométrie de modèle du Fuchs-sondheimer

Donc le problème est unidimensionnel et la fonction de distribution des électrons est décrite par l'équation de Boltzmann qui s'exprime sous la forme :

$$\frac{(f-f_0)}{t} = -\left(\frac{eE}{m}\frac{df}{dv_x}\right) - V_z \frac{df}{dz}$$
(II-1)

 f_0 :est la fonction de Fermi-Dirac á l'équilibre(en absence du champ extérieur). le premier terme du deuxième membre correspond á l'action du champ ,le seconde fait intervenir le mouvement des électron situés á une certaine altitude comprise entre z = 0 (substrat)et z = d (surface supérieure).

La fonction de distribution f étant donnée par l'expression :

$$f = f_0(V_x, V_y, V_z) + f_1(z, V_x, V_y, V_z)$$
(II-2)

Il en résulte :

$$\frac{df}{dV_x} = \frac{df_0}{dV_x} + \frac{df_1}{dV_x} \tag{II-3}$$

En première approximation le terme $\frac{df_1}{dV_x}$ peut être négligé puisque le champ est selon x (et donc V_x).

De même $\frac{df}{dz} = \frac{df_0}{dz} + \frac{df_1}{dz}$ on peut négliger le terme $\frac{df_0}{dz}$ puisque f_0 ne dépend pas de z.

Donc l'équation (II-1) devient comme suive :

$$\frac{df_1}{dz} + \frac{f_1}{tz} = -\frac{eE}{m^* V_z} \cdot \frac{df_0}{dz} \tag{II-4}$$

La solution générale est du type :

$$f_{1} = -\left(\frac{eE}{m^{*}V_{x}}\right)\frac{df_{0}}{dV_{x}}\left[1 + f\left(V_{x}, V_{y}, V_{z}\right)exp^{-z/V_{z}}\right]$$
(II-5)

Où la fonction arbitraire f(v) sera déterminée par les conditions de réflexion des électrons sur les surfaces de la couche mince.

En premier temps, Fuchs et Sondheimer ont supposé que tous les électrons subissent une réflexion totalement diffuse (p = 0). Mais après, ils ont mis au point une nouvelle théorie plus générale tenant en compte la réflexion spéculaire des électrons [7].

II .1.2-Cas des réflexions totalement diffuse:

Si un électron est réfléchi de façon diffuse à la surface limite z=0 cela revient à dire que sa direction après le choc est indépendante de son angle d'incidence, donc la fonction de distribution des électrons est indépendante de la direction. L'équation (II-5) montre que ce ci peut seulement être satisfait si nous choisissons f(v) de sorte que $f_1(v,0)$ pour tous les électrons s'éloignant de la surface doit être nulle pour z=0.

Ce qui donne :

 $f_1(V,0) = 0$ pour tout $V_z > 0$.

Ainsi pour la surface limite z=d

 $f_1(V, d) = 0$ pour tout $V_z < 0$

Si on revient à l'expression (II-5) de f_1 cela conduit à :

$$f(V) = -1 \qquad \text{pour } V_z > 0$$

$$f(V) = -e^{d/V_z} \quad \text{pour } V_z < 0 \qquad (\text{II-6})$$

Les fonctions de distribution perturbées des électrons sont respectivement f_1^+ pour ceux

qui s'éloignent de la surface z=0 et f_1^- pour ceux qui quittent la surface z=d [7]:

$$f_{1}^{+} = -\left(\frac{e.t.E}{m^{*}V_{z}}\right) \left(\frac{df_{0}}{dV_{x}}\right) \left[1 - e^{d/V_{z}}\right] \qquad \text{pour } V_{z} > 0$$

$$f_{1}^{-} = -\left(\frac{e.t.E}{m^{*}V_{z}}\right) \left(\frac{df_{0}}{dV_{x}}\right) \left[1 - e^{(d-V_{z})/V_{z}}\right] \qquad \text{pour } V_{z} < 0$$

$$(\text{II-7})$$

Connaissant la fonction de distribution en fonction de z, ce qui permet de calculer la densité de courant .la simplification de f_1 permet d'aboutir à l'expressions générale de la densité de courant . en utilisant le changement de coordonnées classique on peut écrire ces expressions en coordonnées polaires, f_1^+ devient :

$$f_1^+ = -\left(\frac{e.t.E}{m^* V_z}\right) \left(\frac{df_0}{dV}\right) \left[1 - e^{z/V \cos\theta}\right] \sin\theta \cos\psi$$
(II-8)

On peut calculer la densité de courant pour traduire l'effet des surface externes d'une couche mince, cela se fait en utilisant la formule obtenue par Sondheimer [7] présentée par :

$$J(d) = -2e\left(\frac{m}{h}\right)^3 \iiint V_x f_1 \, dV_x. \, dV_y. \, dV_z \tag{II-9}$$

On peut écrire cette intégrale en considérant les coordonnées polaires (r, θ, ψ) ce qui donne l'équation suivante :

$$J(d) = -\frac{2e^2m^2E}{h^3} \int_0^\infty dV \int_0^{2\pi} \frac{\partial f_0}{\partial V} \tau_0 V^3 \cos^2 \varphi d\varphi. \left[\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin^3 \theta \left\{ exp \left(1 - \frac{z}{\tau_0 V \cos \theta} \right) \right\} d\theta + \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \sin^2 \theta \left\{ 1 - exp \left(\frac{d-z}{\tau_0 V \cos \theta} \right) \right\} \right]$$
(II-10)

Dans les matériaux massifs ou les couches minces on avait écrite $J=\sigma$. E , la conductivité totale doit être effectuée pour toutes les valeur z (de z=0 à z=d).

Donc l'expression général de la conductivité est :

$$\sigma_f = -\frac{1}{dE_x} \int_0^d J(d) dz = \sigma_0 \left[1 - \frac{3\lambda_0}{2d} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin^3 \theta \cos \theta \left(1 - \exp\left(\frac{-d}{\lambda_0 \cos \theta}\right) \right) d\theta \right]$$
(II-11)

 $\tau_0 = \frac{\lambda_0}{\overline{v}}$ et σ_0 est la conductivité du métal massif. On peut écrire (II-11) par une formule simple :

$$\frac{\sigma_0}{\sigma_f} = \frac{\beta(K)}{K} \tag{II-12}$$

Où K représente l'épaisseur réduite donnée par :

$$K=\frac{d}{\lambda_0}$$

Avec :

$$\frac{1}{\beta(K)} = \frac{1}{K} - \frac{3}{8K} + \frac{3}{2K^2} \int_1^\infty \left(\frac{1}{t^3} - \frac{1}{t^5}\right) e^{-Kt} dt$$
(II-13)

Donc la conductivité du film est donnée par :

$$\frac{\sigma_0}{\sigma_f} = 1 - \frac{3}{8K} + \frac{3}{2K} \int_1^\infty \left(\frac{1}{t^3} - \frac{1}{t^5}\right) e^{-Kt} dt$$
(II-14)

Où t est la variable d'intégration qui est égale à $[\cos \theta]^{-1}$.

Il ya deux cas limites pour dernier équation si les films sont très minces ou épais

• cas des films très minces ($K \ll 1$) :

$$\frac{\sigma_0}{\sigma_f} = \frac{\rho_f}{\rho_0} = \frac{4}{_{3KLn}\left(\frac{1}{K}\right)} \tag{II-15}$$

• cas des films épais (K >> 1) :

$$\frac{\sigma_0}{\sigma_f} = \frac{\rho_f}{\rho_0} = 1 + \frac{3}{8K}$$
(II-16)

Où ρ_f et ρ_0 sont respectivement la résistivité de la couche mince et celle du métal massif.

II .2.3-Cas des réflexions diffuse et spéculaire simultanément :

On retient l'hypothèse simplificatrice déjà énonce, à savoir qu'une proportion p subit une réflexion spéculaire(se disperse élastiquement)avec une vitesse inverse de V_z tandis que (1-p)subit une réflexion totalement diffuse avec une perte total de leur vitesse dérive. Il faut noter que Fuchs-Sondheimer proposait que le paramètre p soit indépendant de la direction des électrons arrivés aux surfaces.

La fonction de distribution des électrons quittant la surface est la somme des fonction de distribution des électrons qui subissaient une réflexion spéculaire et une réflexion diffuse . Donc pour z=0, on a :

$$f_0 + f_1^+(V_z, z = 0) = p[f_1 + f_1^-(-V_z, z = 0)] + (1 - p)f_0$$
(II-17)

De la même façon pour z=d :

$$f_0 + f_1^-(V_z, z = d) = p[f_1 + f_1^+(-V_z, z = d)] + (1 - p)f_0$$
(II-18)

Ces équations sont suffisantes pour déterminer la fonction arbitraire f(v) et les fonctions de distributions résultantes sont :

$$f_1^+(V_z, z) = \frac{e\tau_0 E}{m} \frac{\partial f_0}{\partial V_x} \left\{ 1 - \frac{1-p}{1-p.exp\left(\frac{-d}{\tau_0 V_z}\right)} exp\left(-\frac{z}{\tau_0 V_z}\right) \right\} \quad V_z > 0$$
(II-19)

$$f_1^-(V_z, z) = \frac{e\tau_0 E}{m} \frac{\partial f_0}{\partial V_x} \left\{ 1 - \frac{1-p}{1-p.exp\left(\frac{-d}{\tau_0 V_z}\right)} exp\left(\frac{d-z}{\tau_0 V_z}\right) \right\} \qquad V_z < 0$$
(II-20)

La densité du courant J(d) se détermine de façon similaire au calcul fait dans le cas de la réflexions totalement diffuse, et l'intégration sur z donne finalement[8,11] :

$$\frac{\sigma_0}{\sigma_f} = \frac{\rho_f}{\rho_0} = \left[1 - \frac{3}{2K}(1-p)\int_1^\infty \left(\frac{1}{t^3} - \frac{1}{t^5}\right)\frac{1 - exp(-Kt)}{1 - pexp(-Kt)}dt\right]^{-1}$$
(II-21)

 $K = (d / \lambda_0)$: représente l'épaisseur réduite

Même si cette fonction est numériquement intégrable, il est pratique de considérer certains cas limites :

• cas des films très minces ($K \ll 1$) :

$$\frac{\sigma_0}{\sigma_f} = \frac{4}{3KLn\left(\frac{1}{K}\right)} \tag{II-22}$$

• cas des films épais (K >> 1) :

$$\frac{\sigma_0}{\sigma_f} = 1 + \frac{3}{8K} (1 - p)$$
(II-23)

Pour expliquer les phénomènes de transport électrique dans les couches minces métalliques F-S déduites ces formules théoriques de la conductivité et de la résistivités électriques emploient les paramètres K et P.

Dans le quatrième chapitre de ce mémoire nous allons vérifier la validité de ces équations à partir des applications expérimentales sur des couches de cuivre, d'argent et de platine.

II .2-Modèle de COTTEY:

La méthode proposée par COTTEY[9], pour décrire les phénomènes de diffusion par les surfaces externes consiste à remplacer la couche mince d'épaisseur d par une superposition infinie de couches d'épaisseur d ,où les interfaces entre couches sont représentées par des plans partiellement réfléchissants parallèles entre eux(FIGURE II-2(a) et (b)).

En suivant l'idée émise initialement par Fuchs-Sondheimer, la proportion d'électron traversant chaque interface sans changement du vecteur de vitesse qui est égale á p, Des lors la probabilité p pour qu'un électron, arrivant l'interface sous l'angle d' incidence ∞ , parcourt une distance L sans avoir été diffusé est [12] :

$$p = p^{\left(\frac{L[\cos\theta]}{d}\right)} = exp\left\{\frac{[\cos\theta]ln(p)}{d}L\right\}$$
(II-24)





FIGURE(II-2):représentation géométrique du modèle de Cottey.

En introduisant le libre parcours moyen λ_s , correspondant à la diffusion par les surfaces, il est défini par la relation :

$$p = \frac{1}{\lambda_0} exp\left\{-\frac{L}{\lambda_0}\right\}$$
(II-25)

On obtient :

$$\lambda_s(\theta) = \frac{d}{|\cos\theta| \ln(1/p)} \tag{II-26}$$

Le libre parcours moyen totale s'écrit :

$$\frac{1}{\lambda_t} = \frac{1}{\lambda_s(\theta)} + \frac{1}{\lambda_0} = \frac{1}{\lambda} \left(1 + \frac{\lambda_0}{d} \left| \cos \theta \right| \ln \frac{1}{p} \right)$$
(II-27)

 λ_0 :est le libre parcours moyen dans le métal massif.

L'expression de la conductivité électrique réduite obtenue par application d'un champ

électrique est de la forme :

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_0} = \frac{3}{4} \int_0^\pi \frac{\sin\theta^3}{1 + \frac{\lambda_0}{d} |\cos\theta| \ln\frac{1}{p}} d\theta \tag{II-28}$$

Où σ_0 est la conductivité électrique dans le métal massif.

En intégrant en θ , l'équation (II-28) donne :

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_0} = c(\mu^*) = \frac{3}{2}\mu^* \left[\mu^* - \frac{1}{2} + (1 - \mu^{*2})ln\left(1 + \frac{1}{\mu^*}\right) \right]$$
(II-29)

 μ^* :est appelé paramètre dimensionnel du modèle de Cottey[9] il est défini par :

$$\mu^* = \frac{k}{\ln\left(\frac{1}{p}\right)} \tag{II-30}$$

K : représente l'épaisseur réduite donnée par: $k = \frac{d}{\lambda_0}$

Chapitre II

II .3-Modèle de MAYADAS SHATZKES :

Le modèle proposé par Mayadas et Shatzkes[10] en 1970, il est étendue pour le modèle F-S qui prend en compte la diffusion par les joints de grains . Souvent important dans les couches minces polycristallines[13] . Ce modèle basé sur l'écart F_1 de la fonction de distribution des électrons par rapport à l'équilibre est supposé dû aux effets superposés des collisions sur le réseau représentées par l'équation :

$$F_1(\vec{k}, \vec{r}) = e. \vec{E}. \vec{V}. \tau \frac{\partial F_0}{\partial \xi}$$
(II-31)

Et des collisions sur les joints de grains qui sont décrites sous la forme intégrale :

$$\int P(k,k') \cdot [F_1(k) - F_1(k')] dk$$
(II-32)

Où P(k, k') est la probabilité pour qu'un état électronique k soit transformé en un état électronique k' sous l'effet de la collision sur les joints de grains . Les joints de grains sont représentés par N plans parallèles orienté perpendiculairement à la direction du champ électrique \vec{E} avec un espacement régulier D_g comme le montre figure suivant :



Figure (II-3) : La géométrie du modèle de Mayadas - Shatzkes.

L'espacement régulier Dg est évalué de manière statistique. Il est considéré comme étant l'écart statique entre les plans réflecteurs.

Dans le cas d'une couche infiniment épaisse, l'équation de Boltzmann pour le transport des charges s' écrite sous la forme :

$$e.E_X.V_X\frac{\partial F_0(k)}{\partial \xi} = \int P(k,k').[F_1(k) - F_1(k')]dk + \frac{1}{\tau_0}F_1(k)$$
(II-33)

La probabilité P(k, k') est calculée par Mayadas et Shatzkes [10] à partir de l'Hamiltonie de l'électron libre avec certaines hypothèses simplificatrices, ainsi ils ont supposé que seuls les joints de grains perpendiculaires au champ électrique donnent lieu à des collisions, de plus, on représente l'ensemble des joints de grains perpendiculaires est représenté par une distributions Gaussienne du plan réflecteur, enfin chaque plan réflecteur est représenté électriquement par un potentiel de Dirac V(x):

$$V(x) = S\delta(X - X_n) \tag{II-34}$$

 X_n :est la position du plan réflecteur n^0 le long de l'axe Ox parallèle au champ électrique.

V(x) :est considéré comme une perturbation de l'Hamiltonien et la probabilité P(k, k') est identifiée à la valeur du carré de l'élément de matrice : $|\langle k|V(x)|k'\rangle|^2$ moyenné sur l'ensemble de la distribution Gaussienne.

Pour des raisons de commodité, le carré de paramètre S qui apparait dans le carré de l'élément de matrice est écrit sous la forme :

$$S^2 = \frac{\hbar^3}{2m} \sim k \frac{R}{1-R} \tag{II-35}$$

Où R est appelé le coefficient de réflexion .

La solution de l'équation de Boltzmann est alors :

$$F_1(k) = \tau^* \cdot e \cdot E_X \cdot V_X \frac{\partial F_0(k)}{\partial \xi}$$
(II-36)

Où τ^* est le temps de relaxation associé aux collisions sur le réseau et sur les joints de grains , sont expression est :

$$\frac{1}{\tau^*} = \frac{1}{\tau_0} + 2F_1(|k_1|) \tag{II-37}$$

Avec :

$$F_1(|k_1|) = \frac{\alpha}{2\tau_0} \frac{k}{|k_x|} \frac{1 - exp(-4k_x^2 S^2)}{1 + exp(-4k_x^2 S^2) - 2exp(-k_x^2 S^2) \cos 2k_x D_g}$$
(II-38)

Et :

$$\alpha = \frac{V}{V_F} \lambda_0 D_g^{-1} \frac{R}{1-R}$$
(II-39)

Où λ_0 est le libre parcours moyen de l'électron dans le métal massif.

 D_g : le diamètre de grain moyen qu'on identifie à l'écart statistique entre les plans réflecteur .l'écart type S est obtenu en admettant que : $k^2S^2 \gg 1$ L'expression de F_1 se simplifie à :

$$F_1(|k_1|) = \frac{\alpha}{2\tau_0} \frac{k_F}{|k_x|}$$
(II-40)

Et l'expression générale de la densité de courant est donnée par la relation suivante :

$$J_x = -2e^2 \left(\frac{m}{\hbar}\right)^3 \int \tau^* V_x^2 \frac{\partial F_0}{\partial \xi} E_x d^3 V$$
(II-41)

Elle devient :

$$J_x = -\frac{4\pi e^2}{m} \left(\frac{m}{\hbar}\right)^3 \left(\frac{2}{m}\right)^{3/2} E_x \int_0^\infty \tau_0 \,\xi^{3/2} \,\frac{\partial F_0}{\partial \xi} d\xi \int_0^\pi \frac{\cos^2\theta \sin\theta}{1+\alpha|\cos\theta|^{-1}} d\theta \tag{II-42}$$

En tenant compte du théorème d'expansion :

$$\int_{0}^{\infty} f(\xi) \frac{\partial F_{0}}{\partial \xi} d\xi = f(\xi_{F}) + \frac{1}{6} \left(\frac{\pi BT}{\xi_{F}} \right) \frac{\partial^{2} f(\xi)}{\partial \xi^{2}} \Big|_{\xi_{F}} + \frac{7}{360} \left(\frac{\pi BT}{\xi_{F}} \right)^{4} \frac{\partial^{4} f(\xi)}{\partial \xi^{4}} \Big|_{\xi_{F}}$$
(II-43)

Où :B est la constante de Boltzmann .

Une expression générale simplifiée de J_x est :

$$J_x = \sigma_0. E_x \tag{II-44}$$

Avec :

$$\frac{\pi BT}{\xi_F} \ll 1$$

Et

$$\sigma_g = \sigma_0. f(\alpha) \tag{II-45}$$

$$f(\alpha) = 1 - \frac{3}{2}\alpha + 3\alpha^2 - 3\alpha^3 \log\left(1 + \frac{1}{\alpha}\right)$$
(II-46)

Pour calculer la conductivité électrique lorsque la couche est mince, Madyadas et shatzkes reprennent la méthode de calcul de Fuchs en remplaçant le temps de relaxation τ_0 par τ^* qui ,dans les condition de validité de l'inéquation $\frac{\pi BT}{\xi_F} \ll 1$, s'écrit :

$$\frac{1}{\tau^*} = \frac{1}{\tau_0} \left(1 + \alpha \, \frac{k_F}{|k_{F_X}|} \right) \tag{II-47}$$

L'expression de conductivité de la couche est ensuite déduite des équations obtenues dans le modèle Fuchs-Sondheimer :

$$\sigma_F = \sigma_g - \sigma_0 A(k, p, \alpha) \tag{II-48}$$

Où :

$$A(k,p,\alpha) = \frac{6(1-p)}{\pi k} \int_0^{\pi/2} d\Phi \int_1^\infty \frac{\cos^2 \Phi}{H^2(t,\Phi)} \left(\frac{1}{t^3} - \frac{1}{t^2}\right) \times \frac{1 - \exp[-kH(k,\Phi)]}{1 - \exp[-kH(k,\Phi)]} dt$$

Avec :

$$H(k, \Phi) = 1 + \alpha + \cos \Phi^{-1} \left(1 - \frac{1}{t^2} \right)^{-1/2}$$
(II-50)

P : est le coefficient usuel de réflexion électronique spéculaire et k est l'épaisseur réduit , c'est-à-dire $k = \frac{d}{\lambda_0}$ Où : d : est l'épaisseur de la couche.

Conclusion :

En effet les théories les plus utilisées pour décrire la résistivité électrique dans les couches minces métallique sont celles du modèle introduit par F-S, qui tient en compte les effets des surfaces externes, et celui de M-S pour tenir compte des effets des joints de grains, sans oublier les effets des diffusions par les phonons, avec les deux premiers modelés unidimensionnels, Dans le chapitre qui suit, nous présenterons d'autre modèles qui permettent des représentations tridimensionnelles appelé (modèles statistiques) qui tiennent en compte les effets simultanés dus aux surfaces externes et des joints de grains et des diffusions par les phonons.

Chapitre III

Les modèles statistiques

III.1-Le modèle statistique unidimensionnel:

III.1.1- Effet des joints de grains:

Ce modèle comparable au le modèle de Cottey est étendu pour le modèle M-S, la proportion d'électrons qui fournissent la même contribution au courant avant et après avoir franchi le joint de grains appelé le coefficient de transmission t et la proportion (1-t) diffusés dans toutes les direction . la contribution des électrons au courant électrique est réduite d'un facteur t chaque fois qu'un joint est franchi . la probabilité que des électrons franchissent une distance L sans être diffusés par un plan réflecteur dépend du nombre N de plans réflecteur et du coefficient de transmission t :

$$P = t^{N} = exp(-Nlogt^{-1})$$
(III.1)

En admettant que le coefficient de transmission est voisin de 1,on peut considérer que la probabilité p d'électrons qui franchissent la distance L sans être diffusés peut s'écrire :

$$P = exp\left(-\frac{L}{\lambda^*}\right) \tag{III.2}$$

Où : λ^* est le libre parcours moyen associé aux collision sur les joint de grains .



Figure (III-1) : La géométrie du modèle statistique unidimensionnel.

L'expression de L est :

$$L = \sum_{i} d_{i} \left(|\cos \theta| \right)^{-1} \tag{III.3}$$

avec: $\sum_i d_i = ND_g$

 D_g est l'espacement régulier entre les joints de grains .

En combinant les trois dernières équations, on peut écrire le libre parcours moyen λ^* associé aux collisions sur les joints de grains sous la forme :

$$\lambda^* = D_g \left(\log\left(\frac{1}{t}\right) \left| \cos\theta \right| \right)^{-1} \tag{III.4}$$

Si un temps de relaxation unique peut être défini par l'ensemble des processus de collisions ,supposés superposables ,un libre parcours moyen λ_g (de grains) peut être défini par :

$$\frac{1}{\lambda_g} = \frac{1}{\lambda_0} + \frac{1}{\lambda^*}$$
(III.5)

Soit :

$$\lambda_g = \lambda_0 \left(1 + \frac{\log(\frac{1}{t})}{D_g} |\cos\theta| \right)^{-1}$$
(III.6)

qui peut s'écrire :

$$\lambda_g = \lambda_0 \left(1 + \frac{|\cos\theta|}{\nu} \right)^{-1} \tag{III.7}$$

Avec :

$$\nu = \frac{D_g}{\lambda_0 \log\left(\frac{1}{t}\right)} \tag{III.8}$$

L'équation de Boltzmann s'écrit alors :

$$-\frac{eE}{m}grad_{\nu}F_{0}(r) = -\frac{1}{\tau_{g}}F_{1}(K,r) - \nu gradF_{1}(K,r)$$
(III.9)

Soit :

$$\frac{eE}{m}\frac{\partial F_0}{\partial V_X} = \frac{F_1}{\tau_g} + V_X \frac{\partial F_1}{\partial X}$$
(III.10)

Avec :

$$\tau_g v = \lambda_g \tag{III.11}$$

Comme le coefficient de transmission est supposé voisin de 1, l'équation définissant λ_g suggère que la fonction de distribution est indépendante de x, l'équation de Boltzmann se réduit alors à :

$$\frac{eE}{m}\frac{\partial F_0}{\partial V_X} = \frac{F_1}{\tau_g} \tag{III.12}$$

On peut calculer la densité de courant après introduisant les coordonnées polaires dans l'équation suivant :

$$J = -2e \left(\frac{m}{\hbar}\right)^3 \iiint v_x F_1 dv_x dv_y dv_z$$
(III.13)
Avec : $v_x = v \cos \theta$

En utilisant les relations (III.7) et (III.12), la densité de courant s'écrit, après l'intégration en φ , sous la forme :

$$J = -\frac{4\pi e^2}{m} \left(\frac{m}{\hbar}\right)^3 E\lambda_0 \int_0^\infty v^2 \frac{\partial F_0}{\partial V_X} dv \int_0^\pi \frac{\cos^2\theta \sin\theta}{1 + v^{-1} |\cos\theta|} d\theta$$
(III.14)

Puisque on a :

$$\int_0^\infty v^2 \frac{\partial F_0}{\partial v_x} dv = \bar{v}^2 \tag{III.15}$$

Et:
$$\sigma_0 = \frac{8\pi}{3} e^2 \frac{m^2 \bar{v}^2 \lambda_0}{h^3}$$
 (III.16)

Où σ_0 :est la conductivité du métal massif, donc l'expression de J devient :

Les modèles statistiques

$$J = \frac{3}{2}\sigma_0 E \int_0^{\pi} \frac{\cos^2\theta \sin\theta}{1+\nu^{-1}|\cos\theta|} d\theta$$
(III.17)

La conductivité due aux joints de grains , σ_g ,est alors égale à :

$$\sigma_g = \frac{3}{2}\sigma_0 \int_0^{\pi} \frac{\cos^2\theta \sin\theta}{1+\nu^{-1}|\cos\theta|} d\theta$$
(III.18)

D' où :

$$\frac{\sigma_g}{\sigma_0} = \frac{3}{2}\nu - 3\nu^2 + 3\nu^3 \log\left(1 + \frac{1}{\nu}\right)$$
(III.19)

Pour établir un modèle de conduction des couches minces polycristallines au utilisé le modèle statistique tridimensionnel qui tient en compte l'effet des joints de grains [14].

III.2-Le modèle tridimensionnel:

Dans[14] les couches minces polycristallines les joints de grains peuvent être représentées par trois séries de barrières de potentiel planes perpendiculaires respectivement aux axes x,y,z (figures II-a , II-b et III-c). ces plans pourraient être définis de façon statistique, par un espacement moyen Dg.

Cependant, quand un électron a été transmis spéculairement par un grand nombre de joints de grains, le libre parcours moyen lié à la diffusion par les joints de grains peut être calculé de façon statistique à partir de la distance moyenne Dg qui sépare deux plans consécutifs. Il est ă noter cependant que cette simplification ne pourrait être utilisée dans le traitement mathématique proposé par Mayadas et Shatzkes [10] pour la détermination de la conductivité (et de la résistivité).

III.2.1-Analyse théorique :

La distance[14] D séparent deux plans consécutifs, elle est mesurée suivant les directions ox, oy et oz a la même valeur quelque soit la direction considérée si on admet que le grain moyen est cubique .

Aux coordonnées polaire (r, θ, ψ) , la trajectoire de l'électron est déterminée par les angles θ et ψ . Si l_x , l_y et l_z sont les distances mesurées entre deux points successifs de la trajectoire de l'électron appartenant aux plans perpendiculaire respectivement aux axes x, y et z, (figure II-a à II-c), on peut écrire :

$$l_x = D |\cos \psi|^{-1} |\sin \theta|^{-1} \tag{III.20}$$

$$l_y = D|\sin\psi|^{-1}|\cos\theta|^{-1} \tag{III.21}$$

$$l_z = D |\cos \theta|^{-1} \tag{III.22}$$



Х





Figure-2-La géométrie du modèle statistique tridimensionnel.

Pour chaque direction définie par les angles θ et ψ , nous désignons par t la fraction d'électrons qui sont transmis avec conservation du vecteur d'onde k à travers les plans réflecteurs, et la fraction restante (1-t) des électrons est diffusée uniformément dans tout l 'espace, donc elle ne contribue plus au courant..

Si le nombre de transmissions spéculaires successives subies par un électron avant d'être diffusé est grand, La probabilité totale p qu'a un électron de parcourt une distance L sans être diffusé suit une loi exponentielle et peut s'écrire sous deux forme :

$$P = exp(-l\lambda_g^{-1}) \tag{III.23}$$

Où : λ_g est libre parcours moyen relatif à l'effet de joint de grain

Soit :
$$P = t^{(N_x + N_y + N_z)}$$
(III.24)

 N_x , N_y et N_z sont donnés par les relations :

$$N_x = l. l_x^{-1} \tag{III.25}$$

$$N_y = l. l_y^{-1} \tag{III.26}$$

$$N_z = l. l_z^{-1} \tag{III.27}$$

puisque l'électron dont la trajectoire est définie par les angles θ et ψ parcourt les distances ℓx , ℓy et ℓz entre chaque plan réflecteur perpendiculaire respectivement aux axes x, y et z. d'où

$$P = t^{l.(l_x^{-1} + l_y^{-1} + l_z^{-1})}$$
(III.28)

La comparaison des deux expressions donnant p entraine :

$$exp(-l\lambda_g^{-1}) = \exp\left(-l\left(l_x^{-1} + l_y^{-1} + l_z^{-1}\right)\log\frac{1}{t}\right)$$
(III.29)

En remplaçant l_x , l_y , l_z par leur valeur on obtient la relation :

$$\lambda_g^{-1} = D^{-1} \left(\log \frac{1}{t} \right) \left[|\cos \psi| |\sin \theta| + |\sin \psi| |\cos \theta| + |\cos \theta| \right]$$
(III.30)

En utilisant l'approximation :

$$|\cos\psi| + |\sin\psi| \approx c \tag{III.31}$$

Avec:
$$c = \frac{4}{\pi}$$

 $\lambda_g^{-1} = D^{-1} \left(log \frac{1}{t} \right) [c|\sin\theta| + |\cos\theta|]$
(III.32)

Ce qui permet d'écrire λ_g^{-1} sous deux formes[14] différentes :

$$\lambda_g^{-1} = D^{-1} \left(\log \frac{1}{t} \right) \left[c^2 + (1 - c) |\cos \theta| \right]$$
(III.33)

$$\lambda_g^{-1} = D^{-1} \left(\log \frac{1}{t} \right) \left[c + (c-1) |\cos \theta| \right]$$
(III.34)

Ce modèle fait donc intervenir, d'un point de vue statistique, les effets moyens des réflexions des électrons sur trois séries de plans perpendiculaires aux axes x, y et z.

III.3-Conductivité électrique :

La conductivité [10] électrique total est calculée à partir de trois mécanismes de diffusion de l'électron simultanément : collision internes (phonons), les diffusions sur les joints de grains et les surfaces externes.

Nous supposons que ces trois phénomènes électriques donnent des effets indépendants pour déterminer le libre parcours moyen total des électrons.

III.3.1-Expression du libre parcours moyen :

Comme [14]les trois types de diffusion sont supposés avoir des effets indépendants, le libre parcours moyen résultant λ est donné par la relation :

$$\lambda^{-1} = \lambda_0^{-1} + \lambda_g^{-1} + \lambda_s^{-1}$$
(III.35)

Où:

 λ_0 : est le libre parcours moyen des électrons dans le métal massif. λ_g : est le libre parcours moyen concernant la diffusion sur les joints de grains. λ_s : est le libre parcours moyen traduisant l'effet des surfaces externes.

Le libre parcours moyen λ_g est donné par l'expression suivante :

$$\lambda_g^{-1} = D^{-1} \left(\log \frac{1}{t} \right) \left[c^2 + (1 - c) |\cos \theta| \right]$$
(III.36)

Aussi le libre parcours moyen à relatif à la collision sur les surfaces externes peut être donné sous la forme :

$$\lambda_s = d^{-1} \log\left(\frac{1}{p}\right) \left|\cos\theta\right| \tag{III.37}$$

Où : p est la probabilité qu'a un électron de subisse une diffusion et d est l'épaisseur de la couche.

En remplaçant λ_g et λ_s par leur valeurs dans l'équation (III.35)on obtient :

$$\lambda^{-1} = \lambda_0^{-1} \left[1 + \lambda_0 D^{-1} \left(\log \frac{1}{t} \right) \left[c^2 + (1 - c) \left| \cos \theta \right| \right] + \lambda_0 d^{-1} \log \left(\frac{1}{p} \right) \left| \cos \theta \right| \right]$$
(III. 38)

III.3.2-Expression générale de la conductivité :

Quand une couche mince [14]est soumise à un champ électrique \vec{E} dirigé selon l'axe des x, l'équation de transport de Boltzmann s'écrit :

$$\frac{eE_x}{m}\frac{\partial F}{V_x} = \frac{F - F_0}{\tau} \tag{III.39}$$

Où τ est le temps de relaxation qui s'exprime en fonction du libre parcours moyen λ et de la vitesse v de l'électron suivant la relation :

$$\tau = \frac{\lambda}{v} \tag{III.40}$$

En posant $F = F_0 + F_1$, où F_0 est la fonction de Fermi-Dirac, l'équation (1.38) a pour solution général :

$$F_1 = \frac{eE}{mV^2} V_x \lambda \tag{III.42}$$

La densité de courant électrique J est donnée par la relation :

$$J = -2e\left(\frac{m}{\hbar}\right)^3 \iiint V_x F_1 dV_x dV_y dV_z$$
(III.43)

En coordonnées sphérique (V, θ , ψ) cette équation devient:

$$J = -2e\left(\frac{m}{\hbar}\right)^{3} V^{2}\lambda_{0}E \int_{0}^{2\pi} \cos^{2}\psi \,d\psi \,\int_{0}^{\pi} \frac{\sin^{3}\theta \,d\theta}{\lambda_{0}\lambda^{-1}}$$
(III.44)

La conductivité de la couche mince σ_F est définie par :

$$\sigma_F = \frac{J}{E} \tag{III.45}$$

Elle s'écrit donc :

$$\sigma_F = 2e \left(\frac{m}{\hbar}\right)^3 V^2 \lambda_0 \int_0^{2\pi} \cos^2 \psi \, d\psi \, \int_0^{\pi} \frac{\sin^3 \theta \, d\theta}{\lambda_0 \lambda^{-1}} \tag{III.46}$$

Or, la conductivité électrique du métal massif σ_0 est égale à :

$$\sigma_0 = \frac{8\pi}{3} \frac{m^2 V^2}{\hbar^3}$$
(III.47)

De plus , $\int_0^{2\pi} \cos^2 \psi \, d\psi = \pi$, ce qui entraine :

$$\frac{\sigma_F}{\sigma_0} = \frac{3}{4} \int_0^\pi \frac{\sin^3\theta \, d\theta}{\lambda_0 \lambda^{-1}} \tag{III.48}$$

d'où :

$$\frac{\sigma_F}{\sigma_0} = \frac{3}{4} \int_0^{\pi} \frac{\sin^3\theta \, d\theta}{1 + \lambda_0 D^{-1} \left(\log \frac{1}{t} \right) [c^2 + (1-c) |\cos \theta|] + \lambda_0 d^{-1} \log \left(\frac{1}{p} \right) |\cos \theta|} \tag{III.49}$$

• Définition des paramètres dimensionnels :

On définit deux paramètres dimensionnels ν et μ par:

$$\nu = D\lambda_0^{-1} \left(\log\left(\frac{1}{t}\right) \right)^{-1} \tag{III.50}$$

$$\mu = d\lambda_0^{-1} \left(\log\left(\frac{1}{p}\right) \right)^{-1} \tag{III.51}$$

 ν : est un paramètre qui caractérise le gain.

 μ : est un paramètre qui caractérise l'effet dimensionnel de la couche.

L'expression de la conductivité s'écrit sous la forme :

$$\frac{\sigma_F}{\sigma_0} = \frac{3}{4} \int_0^{\pi} \frac{\sin^3\theta \, d\theta}{1 + \frac{c^2}{\nu} + \left(\frac{1-c}{\nu} + \frac{1}{\mu}\right) |\cos\theta|} \tag{III.52}$$

Apres intégration, on obtient :

$$\frac{\sigma_F}{\sigma_0} = \frac{3}{2} b \left[a - \frac{1}{2} + (1 - a^2) log \left(1 + \frac{1}{a} \right) \right]$$
(III.53)

Où

$$a = \left(1 + \frac{c^2}{\nu}\right)b$$

$$b = \left(\frac{1}{\mu} + \frac{1-c}{\nu}\right)^{-1}$$
(III.55)
(III.55)

La relation (III.53)donne la conductivité électrique dans la couche mince en fonction des paramètres μ et ν . Dans ce cas encore, certains cas limites sont à considérer :

Si la couche suffisamment épaisse, pour que les réflexions sur les surfaces externes soient négligeables, alors :

$$\mu \gg 1 \text{ et } \frac{\sigma_F}{\sigma_0} \text{ devient } \frac{\sigma_g}{\sigma_0} \text{ où } \sigma_g \text{ est la conductivité due aux joints de grains.}$$

$$\frac{\sigma_g}{\sigma_0} = \frac{3}{2} b_g \left[a_g - \frac{1}{2} + \left(1 - a_g^2\right) log \left(1 + \frac{1}{a_g}\right) \right]$$
(III.56)

Avec :

$$a_g = \frac{\nu + c^2}{1 - c} \tag{III.57}$$

$$b_g = \frac{\nu}{1-c} \tag{III.58}$$

L'autre cas limite est le cas où $\nu \gg 1$ c'est -à-dire quand les grains sont très épais , la conductivité est due uniquement aux effets de surface et s'écrit sous la forme [1]:

$$\frac{\sigma_s}{\sigma_0} = \frac{3}{2}\mu \left[\mu - \frac{1}{2} + (1 - \mu^2)\log\left(1 + \frac{1}{\mu}\right)\right]$$
(III.59)

Car a=b et b= μ

Conclusion :

L'essentiel de l'utilisation des modèles statistiques consiste à établir un formalisme mathématique complet perméttant de trouver des équations relativement simples qui tiennent en compte simultanément de l'effet des diffusions
par les phonons, par les surfaces externes et par les joints des grains d'une part et d'autre part qui permettent des interprétations adéquates des résultats expérimentaux, Dans le chapitre suivant nous étudions comparatives par réinterprétation de certains données expérimentales de cuivre, l'argent et de platine relatives à la variation de la conductivité électrique en fonctions de l'épaisseur puis on étudie l'effet de température sur la conductivité électrique des couches minces métalliques d'aluminium, de Zinc et Molybdène.

Chapitre IV

Résultats et Discussion L'objectif du travail prévu dans ce mémoire, consiste à étudier des effets dimensionnels sur la conductivité électrique dans les couches minces métalliques dans le cadre des modèles statistiques. Dans les chapitres précédents nous avons présenté les différents modèles théoriques les plus utilisés, tel que les expressions obtenues sont généralement sous forme d'équations mathématiques complexes, ce chapitre est composé de quatre paragraphes, à savoir :

- Le premier paragraphe est consacré à la modélisation numérique, en utilisant les trois modèles de conduction (Modèle de Fuchs-Sondheimer, Modèle de Mayadas-Shedzkes, Modèle statistique).
- Dans le deuxième paragraphe nous examinons la réinterprétation de certaines données expérimentales des métaux pures (cuver, l'argent et platine) dans le cadre des modèles statistiques.
- Dans le troisième paragraphe, nous étudions l'effet de recuit sur la résistivité électrique des couches minces métalliques (Aluminium, Zinc, Molybdene), en utilisant les coefficients de réflexion spéculaire effectifs P_{eff}
- Le quatrième paragraphe est consacré à l'étude de la conductivité électrique des alliages. Nous examinons les données expérimentales de deux alliages : le premier alliage est composé de Nikel et fer (NiFe), et le deuxième est composé de Cobalt et fer (CoFe), toujours à partir des modèles statistiques.

Donc, comme nous dirons précédemment les expressions qui obtenues à partir des différents modèles sont complexes et partant les interprétations des résultats expérimentaux souvent sont difficiles, pour cela nous utilisons dans le premier paragraphe les expressions asymptotiques déduites dans les différents cas et qui permettent dans beaucoup de cas de rendre compte de manière satisfaisante de la réalité physique.

IV.1-Modélisation numérique :

Le travail présenté dans ce paragraphe traite des modèles essentiels présentés dans les deux premiers chapitres .En effet l'influence de quelques paramètres physiques pris en compte dans chacun de ces modèles est présentée ici ; ce ci nous permet de mettre en évidence l'influence de chacun de ces paramètres dans

les trois modèles de conduction :

- Modèle de Fuchs-Sondheimer.
- Modèle de Mayadas-Shedzkes.
- Modèle statistique.

IV.1.1-Modèle Fuchs-Sondheimer:

IV.1.1.a- Formules des équations asymptotiques déduites:

Expression de la fonction obtenue dans ce modèle [6] est numériquement difficile à intégrer ,les formules asymptotiques présentées dans les cas des couches épaisses (K>>1) et les couches très minces (K<<1) sont les souvent utilisées, Ces équations sont :

$$\frac{\rho_f}{\rho_0} \approx 1 + \frac{3}{8k}(1-p) \qquad pour \ k \gg 1 \tag{IV-1}$$

$$\frac{\rho_f}{\rho_0} \approx \frac{4}{3} \left(\frac{1-p}{1+p}\right) \frac{1}{k \ln(1/k)} \qquad pour \ k \ll 1 \tag{IV-2}$$

Une équation linéaire tirée à partir de l'équation (IV-1) peut s'écrire comme suit :

$$\rho_f \approx \rho_\infty + (3/8)\rho_0\lambda_0(1-p)\frac{1}{d} \tag{IV-3}$$

Ou bien

$$\rho_f d \approx \rho_{\infty} d + (3/8)\rho_0 \lambda_0 (1-p)$$
 (IV-4)

Des calculs numériques montrent [6] que la formule asymptotique (équation (IV-1)) obtenue dans le cas des grandes valeurs de k c'est à dire $k \gg 1$ est une bonne approximation de l'équation originale même dans le cas où $k \ll 1$, donc on l'utilise pour quantifier l'effet de surfaces sur la résistivité.

IV.1.1.b- Influence du coefficient de réflexion p sur la résistivité électrique :

A partir de l'équation (IV-1) on a tracé la fonction de la résistivité électrique réduite $\frac{\rho_f}{\rho_0}$ en fonction de l'épaisseur réduite K pour différentes valeurs de coefficient de réflexion sur les surfaces externes p, pour des valeurs de p allant de 0 à 1



Figure (IV-1): la variation de la résistivité réduite en fonction de l'épaisseur réduite à différentes valeurs du coefficient p

La figure (IV-1) indique que la résistivité électrique diminue avec l'augmentation de l'épaisseur réduite K (donc l'augmentation de l'épaisseur d) pour chaque valeur de coefficient de réflexion des électrons p. comme elle diminue avec l'augmentation de ce coefficient.

IV.1.2-Modèle de Mayadas-Shatzkes:

IV.1.2.a - Formules des équations assymptotiques déduites:

L'équation de la résistivité électrique réduite qui représente l'influence des joints de grains, proposée par Mayadas-Shatzkes est représentée ci-dessous :

$$\frac{\rho_f}{\rho_0} = \left[1 - \frac{3}{2}\alpha + 3\alpha^2 - 3\alpha^3 ln\left(1 + \frac{1}{\alpha}\right)\right]^{-1}$$
(IV-5)

Deux expressions asymptotiques sont extraites de l'équation (IV-5) du paramètre, $\alpha \ll 1$ et $\alpha \gg 1$:

$$\frac{\rho_f}{\rho_0} = 1 + \frac{3}{2}\alpha \qquad pour \ \alpha \ll 1 \tag{IV-6}$$

$$\frac{\rho_f}{\rho_0} \approx \frac{4}{3}\alpha \qquad pour \ \alpha \gg 1$$
 (IV-7)

D'après Mayadas et Shatzkes [10] la formule asymptotique obtenue dans le cas où le paramètre $\alpha \ll 1$ (équation (I-6)) est une bonne approximation à l'équation (IV-5). Avec :

$$\alpha = \frac{D_g}{\lambda_0} \frac{R}{1-R}$$
(IV-8)

D'après les formules précédentes, on obtient l'expression ci-dessous qui nous permet de calculer le coefficient de réflexion sur les joints de grains R [10] :

$$\rho_f = \rho_\infty + \left(\frac{3}{2}\lambda_\infty\rho_\infty \frac{R}{1-R}\right)/n.d$$
(IV-9)

Ou bien

$$\rho_f \cdot d = \rho_\infty \cdot d + \left(\frac{3}{2}\lambda_\infty \rho_\infty \frac{R}{1-R}\right)/n \tag{IV-10}$$

IV.1.2.b-La variation de paramètre α en fonction du coefficient de réflexion R :

En se basant sur l'équation (IV-8) on a étudié la variation de paramètre α en fonction du coefficient de réflexion R, pour des valeurs de R allant de 0 à 1.



Figure (IV-2): la variation de paramètre α en fonction du coefficient de réflexion R

On remarque à partir de la figure (IV-2) que le paramètre α croît avec l'augmentation du coefficient de réflexion R, tel que R le coefficient de réflexion sur les joint de grain.

IV.1.2.c-influence du coefficient de réflexion R sur la résistivité électrique :

En se basant sur l'équation (IV-5) on a tracé la fonction de la résistivité électrique réduite $\frac{\rho_f}{\rho_0}$ en fonction du paramètre α pour des valeurs de α allant de 0.01 à 100.



Figure (IV-3) : influence du paramètre α sur la résistivité réduite.

On peut observer dans la figure (IV-3) que La résistivité électrique croit avec l'augmentation du paramètre α , et on a précédemment trouve que le paramètre α croît avec l'augmentation du coefficient de réflexion R, donc $\frac{\rho_f}{\rho_0}$ croit quand R augmente.

On rappeler, que le modèle Mayadas et Shatzkes suppose que le diamètre de grain moyen dans une couche égale à son épaisseur $(D_g = d)$.

En utilisant cette hypothèse, et en se basant sur l'équation (IV-6) on a étudié la variation de la résistivité électrique réduit en fonction de l'épaisseur réduite K, la figure(IV-4) a

donné Les résultats obtenus pour différentes valeurs du coefficient R, avec R localisé entre 0 et 1.



Figure (IV-4) : La variation de ρ_f / ρ_0 en fonction de l'épaisseur réduite K.

Nous pouvons constater que La résistivité ρ_f décroît avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche et elle croit quand R augmente.

IV.3-Modèle statistique:

IV.3.1.Expressions la conductivité électrique par usage nouveaux paramètres dimensionnels:

Le domaine de la validité de l'équation de la conductivité électrique peut être étendu si on remplace μ et ν donnes précédemment par :

$$\mu = \frac{d}{\lambda_0} \left[\frac{(1+p)}{2(1-p)} \right] \tag{IV-11}$$

$$\nu = \frac{D_g}{\lambda_0} \left[\frac{(1+T)}{2(1-T)} \right] \tag{IV-12}$$

Les expressions linéarisées de la conductivité électrique d'une couche mince métallique quelque soit sa structure peuvent être obtenues dans un large domaine de la validité des valeurs du coefficient de réflexion spéculaire p ; on écrit le rapport :

$$\frac{\sigma_0}{\sigma_f} = \frac{\rho_f}{\rho_0} = \mathcal{C}(\mu, \nu) \tag{IV-13}$$

Avec :

$$C(\mu,\nu) = \frac{2b}{3} \left[a - \frac{1}{2} + (1 - a^2) ln \left(1 + \frac{1}{a} \right) \right]^{-1}$$
(IV-14)

Et

$$b = \frac{1}{\mu} + \frac{c_1}{\nu} \tag{IV-15}$$

$$a = \frac{1}{b} \left(1 + \frac{c_2}{\nu} \right) \tag{IV-16}$$

 $c_1 = 1 - c$: cas des couches polycristallines . $c_1 = -c$: cas des couches monocristallines et en colonnes . Avec :

$$c = \frac{4}{\pi}$$
(IV-17)

Les expressions asymptotiques de la conductivité réduite proposées, [15] se présentent comme suit :

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_0} \approx \frac{2}{3b} \left(ln \frac{1}{a} - \frac{1}{2} \right) \qquad a \ll 1 \tag{IV-18}$$

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_0} \approx (ba + c_2 b)^{-1} \qquad a \gg 0.1 \tag{IV-19}$$

Avec :

$$c_2 = 0.375$$
 (IV-20)

La résistivité électrique réduite s'écrit :

$$\frac{\rho_f}{\rho_0} = ba + c_2 b \tag{IV-21}$$

En introduisant les équations (IV-15) et (IV-16) dans l'équation (IV-21) on obtient :

$$\frac{\rho_f}{\rho_0} = 1 + \frac{c^2}{\nu} + c_2 \left(\frac{1}{\mu} + \frac{c_1}{\nu}\right)$$
(IV-22)

La résistivité ρ_{∞} , d'une couche métallique infiniment épaisse déduite de l'équation (IV-22) est :

$$\rho_{\infty} = \rho_0 \left(1 + \frac{c^2 + c_1 c_2}{\nu} \right) \tag{IV-23}$$

L'équation (IV-23) prend la forme suivante :

$$\rho_f = \rho_\infty + \rho_0 \frac{c_2}{\mu} \qquad \mu > 0.1 \tag{IV-24}$$

En remplaçant μ dans l'équation (IV-24), on obtient l'équation suivante :

$$\rho_f = \rho_{\infty} + 2\lambda_0 \rho_0 c_2 \frac{(1-p)}{(1+p)} \frac{1}{d}$$
(IV-25)

Ou par autre forme :

$$\rho_f \cdot d = \rho_\infty \cdot d + 2\lambda_0 \rho_0 c_2 \frac{(1-p)}{(1+p)}$$
(IV-26)

Et en remplaçant ν (équation (IV-12)) dans l'équation (IV-23) on obtient l'équation suivante :

$$\frac{\rho_{\infty}}{\rho_0} - 1 = \frac{\lambda_0 2}{D_g} \frac{(c^2 + c_1 c_2)(1 - T)}{1 + T}$$
(IV-27)

Les équations précédentes nous ont permis de trouver l'expression ci-dessous qui nous aide à calculer les déférents paramètres physique, tels que coefficient de réflexion spéculaire P ou coefficient de réflexion sur joints de grains R et le coefficient de transmission T des modèles statistiques.

IV.1.4-Etude de la conductivité électrique à partir des modèles statistiques :

Maintenant, nous allons nous intéressér à l'étude de l'influence de quelques paramètres physiques sur la conductivité électrique des couches minces métalliques dans cadre ce modèle. Etant donné que le domaine de validité des équations (IV-1) à (IV-19) est étendu c'est-à-dire sans restriction sur la valeur du coefficient de réflexion p, notre étude va se faire en utilisant les expressions des équations linéarisées données antérieurement.

IV.1.4.1-Variation du paramètre dimensionnel μ en fonction du coefficient de réflexion spéculaire p :

Les variations du paramètre dimensionnel μ donné par l'équation (IV-11) ont été calculées, en fonction du coefficient de réflexion spéculaire p pour différentes valeurs de l'épaisseur réduite. En effet sur la courbe suivante, nous représentons les résultats numériques obtenus pour les valeurs de K suivantes : k=0.5, k=1 et k=1.5.



Figure (IV-5) : Variation du paramètre dimensionnel µ avec le coefficient de réflexion p

donc pour les différentes valeurs de K, le paramètre dimensionnel μ augmente avec l'augmentation du coefficient de réflexion spéculaire p.

IV.1.4.2-Variation du paramètre dimensionnel v en fonction du coefficient T :

nous étudions la variation de v en fonction de T pour différents rapports de $\frac{D_g}{\lambda_0}$, Les variations du paramètre dimensionnel v donné par l'équation(IV-12).



Figure (IV-6) : Variation du paramètre dimensionnel v avec le coefficient

de transmission T

• Le paramètre dimensionnel de grains v augmente avec l'augmentation du coefficient de transmission T.

• L'allure des courbes obtenues pour différents rapports de D_g/λ_0 est similaire à celle obtenue précédemment. Ce résultat est prévisible étant donné la similitude des expressions mathématiques utilisées.

• Les équations précédentes montrent qu'il ya une relation entre le coefficient de transmission T de modèle statistique et le coefficient de réflexion R de modèle Mayadas et Shatzkes .

IV.1.4.3-Variation de la résistivité électrique réduite en fonction du paramètre dimensionnel μ :

En se basant sur l'équation (IV-13) nous avons calculé les variations de la résistivité électrique réduite $\frac{\rho_f}{\rho_0}$ d'une couche mince métallique en fonction du paramètre dimensionnel μ pour différentes valeurs du paramètre du grain v. Les résultats obtenus sont représentés sur la figure (IV-7) pour les couches polycristallines



Figure (IV-7) : résistivité électrique réduite en fonction du paramètre dimensionnel μ Pour différentes valeurs du paramètre v

A partir de la figure (IV-7) on peut remarquer que la résistivité électrique décroît avec l'augmentation du paramètre μ , donc avec la croissance d'épaisseur de la couche.

IV.1.4.4-Variation de la résistivité électrique réduite en fonction du paramètre du grain v :

Nous étudions les variations de la résistivité électrique réduite $\frac{\rho_f}{\rho_0}$ d'une couche mince métallique en fonction du paramètre du grain v pour les différentes valeurs du dimensionnel μ . Les résultats obtenus sont représentés sur la figure (IV-8) pour les couches Polycristallines.



parametre du grain v

Figure (IV-8) : résistivité électrique réduite en fonction du paramètre v Pour différentes valeurs du paramètre dimensionnel µ

Donc, la résistivité électrique décroît avec l'augmentation du paramètre de grains v alors avec la croissance du grain.

Comme il a été précédemment montré le paramètre d'épaisseur µ augmente avec

l'augmentation du coefficient p et le paramètre de grain v augmente aussi avec l'augmentation du coefficient de transmission T. Il est attendu que la résistivité électrique diminue avec l'augmentation de l'un ou de l'autre des coefficients de réflexion p et ou transmission T à travers les joins de grains.

Ce formalisme mathématique va être utilisé dans les paragraphes suivants pour déterminer certains paramètres physiques et interpréter des résultats expérimentaux.

IV.2-Etude de la conductivité électrique des couches minces métalliques pures :

Pour déterminer les différents paramètres physiques, nous avons utilisé les équations linéarisées obtenues dans le cas des deux modèles statistiques et celui du Mayadas-Shatzkes. La variation de la résistivité électrique ρ_f en fonction de l'inverse de l'épaisseur $(\frac{1}{d})$ de la couche mince est une droite, et en plus la variation du produit de la résistivité ρ_f et l'épaisseur d ($\rho_f d$) en fonction de l'épaisseur (d) est aussi une droite. On peut comparer ces deux lois théoriques avec les résultats expérimentaux.

La courbe
$$\rho_f = f(\frac{1}{d})$$
 est une droite de la forme :

$$\rho_f = \mathbf{A}\left(\frac{1}{d}\right) + \mathbf{B} \tag{IV-28}$$

Tel que : $\rho_{\infty} = B$ (IV-29)

En comparant (IV-28) avec les équations linéarisées des différents modèles, la pente A

nous permet de calculer p ou R, en fonction du modèle utilisé :

$$A = 2\lambda_0 \rho_0 c_2 \frac{(1-p)}{(1+p)}$$
(IV-30)

$$A = \left(\frac{3}{2}\lambda_{\infty}\rho_{\infty} \frac{R}{1-R}\right)/n \tag{IV-31}$$

Aussi on peut calculer les différents paramètres à partir des courbes $(\rho_{f}d)$ en fonction de l'épaisseur (d).

Si on connait le diamètre moyen de grain D_g et la résistivité électrique à épaisseur infinie, on peut calculer le coefficient de transmission aux joints de grains T à partir de cette équation

$$\frac{\rho_{\infty}}{\rho_0} - 1 = \frac{\lambda_0 2}{D_g} \frac{(c^2 + c_1 c_2)(1 - T)}{1 + T}$$
(IV-32)

IV.2.1-Couches de Cuivre:

Dans ce qui suit nous allons présenter une application des études théoriques des modèles statistiques décrits précédemment.

Nous étudions les résultats expérimentaux donnés par H.Marom [16], concernant des couches minces de cuivre obtenues par processus d'élaboration magnétron sputtering

Nous avons tracé la courbe ρ_f en fonction de l'épaisseur d (Figures (IV-9)). puis On a tracé la variation du produit de la résistivité par l'épaisseur ρ_f d en fonction de l'épaisseur d (Figures (IV-10)). Et la Figure (IV-11) représente la variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'inverse l'épaisseur d, dans les deux derniers cas les courbes sont des droites.

Les résultats obtenus sont représentés sur les figures (IV-9), (IV-10) et (IV-11).







Figure (IV-10) : variation du produit ρ_f d en fonction de l'épaisseur d.



Figure (IV-11) : variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'inverse d'épaisseur (1/d)

A partir des expressions linéaires (IV-29) on peut déterminer la résistivité à épaisseur infinie ρ_{∞} et le coefficient de réflexion sur les surfaces externes p en utilisant (IV-30), et le coefficient de transmissions aux joints de grains T en utilisant (IV-32).

Les valeurs de ρ_0 et λ_0 dans le métal massif sont: $\lambda 0 = 39 \text{ nm} [16]$ $\rho_0 = 1.67 \ \mu \Omega. \ cm [16]$

	Diamètre de grain	Résistivité à épaisseur	Coefficient de réflexion	Coefficient de réflexion	le coefficient de
	moyen Dg (nm)	infinie $\rho_{\infty}(\mu\Omega. cm)$	spéculaire p (donne)	spéculaire p (calcule)	transmissions
H Marom[1]	59	2 18	0.05	0.03	0.73
	57	2.10	0.05	0.05	0.75

Les résultats obtenus sont donnés dans le tableau suivant :

1- Le tableau indique bien que la valeur du coefficient de réflexion spéculaire obtenue à partir de modèle statistique est en très bonne accord avec celle donnée par H.Marom [16].

IV.2.2-Couches d'argent :

En procédant de manière similaire à celle relative à l'étude des couches de cuivre, nous allons réexaminer les travaux expérimentaux publiés par K.Sarakions [17].

Les travaux donnés par l'auteur traitent de la résistivité électrique de trois couches minces de l'argent obtenues par processus d'élaboration de magnétron sputtering.

1- la première couche pour la référence dc MS.

2-la deuxième couche dépôt à I =22 A.

3-la troisième couche dépôt à I=11A.

Pour chaque couche, nous avons tracé :

- La courbe ρ_f en fonction de l'épaisseur d.

- Puis on tracé la variation du produit de la résistivité par l'épaisseur (ρ_f .d) en fonction de l'épaisseur d.

- La variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'inverse l'épaisseur d,

Les résultats obtenus sont représentés sur les figures suivantes :



Figure (IV-12): variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'épaisseur d. (référence de MS)



Figure (IV-13): variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'épaisseur d. (dépôt à I =22 A)



Figure (IV-14) : variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'épaisseur d. (dépôt à I =11 A)



Figure (IV-15): variation du produit ρ_f .d en fonction de l'épaisseur d. (référence dcMS)



Figure (IV-16): variation du produit ρ_f .d en fonction de l'épaisseur d. (dépôt à I =22 A)



Figure (IV-17): variation du produit ρ_f .d en fonction de l'épaisseur d. (dépôt à I =11 A)



Figure (IV-18): variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'inverse de l'épaisseur (1/d) (référence dcMS)



Figure (IV-19): variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'inverse de l'épaisseur (1/d) (dépôt à I =22 A)



Figure (IV-20): variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'inverse de l'épaisseur (1/d) (dépôt à I =11 A)

En procédant de manière similaire à celle utilisée dans le précédent paragraphe, nous avons calculé les paramètres physiques (ρ_{∞} ,P et T) dans le cadre du modèle statistique puis on a compare avec ceux qui sont donnés par l'auteur.

les valeurs de ρ_0 et λ_0 dans le métal massif sont:

λ0 =55 nm [17]

 $ρ_0 = 1.6 μ Ω. cm[17]$

Les résultats obtenus sont donnés dans le tableau suivant :

	Diamètre de grain moyen Dg (nm)	Résistivité à épaisseur infinie $\rho_{\infty}(\mu\Omega.cm)$	Coefficient de réflexion spéculaire p (donne)	Coefficient de réflexion spéculaire p (calcule)	le coefficient de transmissions T
dcMS	22	2.55	0.55	0.30	0.85
I=22 A	23.5	2.25	0.6	0.39	0.90
I=11 A	15.25	3.92	0.42	0.21	0.78

A partir du tableau on remarque que :

- 1- Les résultats obtenus montrent de manière très claire que la résistivité électrique diminue avec l'augmentation du coefficient de réflexion spéculaire p.
- 2- La résistivité électrique diminue avec l'augmentation du coefficient de transmission aux joins de grains T.
- 3- la comparaison des résultats du coefficient de réflexion spéculaire accordés avec ceux qui sont donnés par K.Sarakions [17], et montre que l'erreur est faible.

IV.2.3.-Couche de platine :

1-De la même manière, nous allons réexaminer les travaux expérimentaux de M. Avrekh [18].Les travaux donnés par l'auteur investigations sur la résistivité électrique de couche mince de platine, avec l'épaisseur dans la gamme de 2,6 à 19 nm formés en utilisant une méthode de dépôt par plasma.

Nous avons tracé les courbes :

- ρ_f en fonction de l'épaisseur d.

-la variation du produit de la résistivité par l'épaisseur (ρ_f .d) en fonction de l'épaisseur d.

-Et la variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'inverse l'épaisseur d.

Les résultats obtenus sont représentés sur les figures suivantes :



Figure (IV-21) : variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'épaisseur d



Figure (IV-22) : variation du produit ρ_f d en fonction de l'épaisseur d.



Figure (IV-23): variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'inverse de l'épaisseur (1/d)

- À partir d'équation (IV-30) on peut déterminer la résistivité d'épaisseur infinie ρ_∞ et le coefficient de réflexion P sur les surfaces externes. En utilisant l'équation (IV-32), on peut déterminer le coefficient de transmission aux joints de grains T.
- les valeurs de ρ_0 et λ_0 dans le métal massif sont: $\lambda 0 = 22 \text{ nm} [18]$ $\rho_0 = 1.6 \mu \Omega. cm [18]$

• Les résultats obtenus sont donnés dans le tableau suivant :

	Diamètre de	Résistivité à	Coefficient	le coefficient
	grain	épaisseur	de réflexion	de
	moyen	infinie	spéculaire	transmissions
	Dg (nm)	$\rho_{\infty}(\mu\Omega.cm)$	p (calcule)	
				Т
M. Avrekh	8	29.72	0.29	0.62
[3]				

2- De la manière similaire, nous étudions les résultats expérimentaux donnés par :Hoffman et Vancea [19] mais dans ce cas les couches de Platine, sont obtenues par évaporation sous vide sur des substrats de verre.

On fait une étude pour des vitesses d'évaporation différentes pour trois couches et les vitesses d'évaporations que nous étudions sont :

- a = 0.25 nm sec⁻¹
- b = 0.3 nm sec⁻¹

 $c = 0.5 nm sec^{-1}$

Nous avons tracé les courbes ρ_f en fonction de l'épaisseur d, nous avons obtenu les figures ((a-IV-24), (b-IV-25)et(c-IV-26))

Les courbes du produit de la résistivité par l'épaisseur (ρ_f .d) en fonction de l'épaisseur d, sont données par les figures ((a-IV-27), (b-IV-28)et(c-IV-29)) pour les différentes couches minces de platine.

Puis la variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'inverse de l'épaisseur d, est représentée par les figures ((a-IV-30), (b-IV - 31) et (c-IV - 32) :



Figure (a-IV-24) : variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'épaisseur d.



Figure (b-IV-25) : variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'épaisseur d.



Figure (c-IV-26) : variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'épaisseur d.



Figure (a-IV-27) : variation du produit ρ_f d en fonction de l'épaisseur d.



Figure (b-IV-28) : variation du produit ρ_f d en fonction de l'épaisseur d.



Figure (c-IV-29) : variation du produit ρ_f d en fonction de l'épaisseur d.



Figure (a-IV-30) : variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'inverse de l'épaisseur (1/d)



Figure (b-IV-31): variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'inverse de l'épaisseur (1/d)



Figure(c-IV-32):variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'inverse de l'épaisseur (1/d)

Ce qui permet d'appliquer les expressions linéarisées précédemment. On rappelle, pour chaque série de couches le diamètre de grain moyen Dg prend une valeur constante, ces valeurs sont données dans le tableau.

Les résultats obtenus sont donnés dans le tableau, qui suit :

	Vitesse	Diamètre	P (donnée)	P (calculé)	T donnée	T calculé
	d'évaporation	de grain	Coefficient	Coefficient	Coefficient	Coefficient
	$(nm sec^{-1})$	moyen	de réflexion	de réflexion	de	de
		D _g (nm)			transmission	transmission
a	0.25	9.7	0.3	0.27	0.68	0.70
b	0.3	8.1	0.22	0.22	0.86	0.86
c	0.5	9.8	0.69	0.689	0.61	0.63

En examinant le tableau, il apparait que les valeurs du coefficient de réflexion P obtenues à partir des modèles statistiques sont en très bon accord avec celles de p donné, aussi la comparaison des résultats du coefficient de transmission est en accord avec celle de T donné.

IV.3.l'effet de recuit sur la résistivité électrique des couches minces métalliques :

Dans ce paragraphe nous allons présenter une étude décrivant le formalisme mathématique relatif à la variation du coefficient de réflexion spéculaire p lors d'un traitement thermique de la couche mince métallique.

En effet le traitement thermique joue un rôle important dans l'amélioration des propriétés physiques (électrique, mécanique , optique...).

Le travail présenté dans ce paragraphe est réparti en deux parties, à savoir :

- formalisme mathématique relatif au coefficient de réflexion spéculaire effectif
- Application expérimentale aux couches de Zinc, d'Aluminium et de Molybdene.

L'effet de recuit induira à fortiori une modification de l'état des deux surfaces de la couche mince, du fait que l'une est solidaire du substrat alors que l'autre est exposée de manière directe à l'effet de la température, ce phénomène a été examiné auparavant et un formalismes a été développé dans le cadre des modèles statistiques, en utilisant un coefficient de réflexion spéculaire effectif, les formalismes mathématiques essentiels permettent d'étudier l'effet du recuit sur les couches minces métalliques.

IV.3.1- Forme générale du coefficient de réflexion spéculaire effectif :

Il est connu que l'effet d'un traitement thermique en général induit des modifications des propriétés physiques des matériaux auxquels il est appliqué. L'influence du recuit sur des le coefficient de réflexion spéculaire p des couches minces de Zinc, d'aluminium et Molybdene sera examinée dans le cadre de ce paragraphe.

Cette étude sera basée sur les expressions de la conductivité électrique des couches minces métalliques présentant des propriétés non identiques aux surfaces [15].

Le modèle proposé par les auteurs [15], est basé sur :

• Le procédé de calcul de Fuchs-Sondheimer décrivant les effets dimensionnels dans les couches minces métalliques,

• L'utilisation de la méthode des libres parcours moyens de manière similaire à celle proposée par Cottey [9].

• L'introduction des deux coefficients de réflexion spéculaire différents sur la

surface de la couche mince métallique.

En Procédant de manière similaire à celle décrite dans le deuxième chapitre et en supposant que les surfaces de la couche mince ont des coefficients de réflexion spéculaire différents P_1 et P_2 , respectivement sur la première et la deuxième surface de la couche mince, le problème est résolu en utilisant un procédé similaire à celui de Cottey [9]. On considère dans ce cas la couche mince métallique d'épaisseur 2d, représentée sur la figure (IV-33) (a), elle peut être remplacée par un empilement de deux couches minces métalliques fictives chacune d'épaisseur 2d, avec l'un des coefficients de réflexion spéculaire prennant la valeur P_1 à la première couche figure (IV-33) (b), et la valeur P_2 , à la deuxième couche, figure(IV-33) (c).

Tous ces points de vue peuvent être simultanément pris considérant pour décrire les variations du

coefficient de réflexion spéculaire P à la surface de la couche mince métallique, durant le processus du recuit.



figure(IV-33) :représentation géométrique pour des surfaces avec des coefficients de réflexions spéculaires différents

Il a été établi qu'un coefficient de réflexion spéculaire effectif noté P_{eff} peut être défini sous la forme[20] :

$$P_{eff} = \sqrt{P_1 P_2} \tag{IV-33}$$

Où P_1 et P_2 sont les coefficients de réflexion spéculaire relatifs aux surfaces de la couche métallique .

Rappelons que le paramètre dimensionnel μ , défini dans le troisième chapitre est de la forme :

$$\mu = \frac{d}{\lambda_0} \left[\frac{(1+p)}{2(1-p)} \right] \tag{IV-34}$$

d est l'épaisseur de la couche mince et λ_0 est le libre parcours moyen dans le métal massif.

En supposant que l'inverse du libre parcours moyen relatif à la couche réelle est la somme des inverses des libres parcours moyens relatifs aux deux couches fictives, le libre parcours moyen décrivant les effets des surfaces externes s'écrit :

$$\frac{1}{\lambda_s} = \frac{|\cos\theta|}{2d} ln \frac{1}{P_1} + \frac{|\cos\theta|}{2d} ln \frac{1}{P_2} = \frac{|\cos\theta|}{2d} ln \sqrt{\frac{1}{P_1 P_2}}$$
(IV-35)

Le paramètre dimensionnel de la couche mince polycristalline se met alors sous la forme :

$$\mu = \frac{1}{\frac{\lambda_0 \left[2(1-P_1)}{d \left[\frac{2(1-P_1)}{1+P_1} + \frac{2(1-P_2)}{1+P_2}\right]}\right]}$$
(IV-36)

$$\mu = \frac{d}{\lambda_0} \frac{(1+P_1)(1+P_2)}{2(1-P_1P_2)} \tag{IV-37}$$

En conséquence, l'équation (IV-34), peut être utilisée pour des couches minces recuites ou non recuites présentant des propriétés de surface non identiques à condition que le coefficient P soit remplacé par P_{eff} , donné par :

$$P_{eff} = \frac{(1+P_1)(1+P_2) - (1-P_1P_2)}{(1+P_1)(1+P_2) + (1-P_1P_2)}$$
(IV-38)

Quand P_1 et P_2 prennent des valeurs proches de l'unité :

$$P_1 = 1 - \varepsilon_1 \qquad \varepsilon_1 \ll 1 \tag{IV-39}$$

$$P_2 = 1 - \varepsilon_2 \qquad \varepsilon_2 \ll 1 \tag{IV-40}$$

L'équation (IV-38), s'écrit :

$$P_{eff} = 1 - \frac{1}{2}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \qquad \qquad \varepsilon_1, \varepsilon_2 \ll 1 \qquad (\text{IV-41})$$

Il est bien clair que l'équation (IV-41) est similaire à celle déduite de l'équation(IV-33)

IV.3.2 - Expressions asymptotiques linearisees de la résistivité électrique :

Pour interpréter les effets dimensionnels dans les couches minces polycristallines à partir de certaines formules assymptotiques dont la forme générale est donnée par :

$$\rho_f = \rho_\infty + \frac{3}{8}(1-p)\frac{\rho_0\lambda_0}{d} \tag{IV-42}$$

Où : ρ_f est la résistivité de la couche mince métallique, ρ_{∞} est la valeur de ρ_f à épaisseur infinie et ρ_0 est la résistivité du métal massif.

La première expression approchée obtenue de manière empirique a été proposée par Wissmann, mais elle est moins générale, car il est supposé dans cette expression que ρ_{∞} est une fonction du diamètre de grain.

On admet la formule générale suivante :

$$\rho_f = \rho_\infty + \frac{3}{8} \frac{\rho_0 \lambda_0}{\mu} \tag{IV-43}$$

Les données expérimentales relatives aux couches de Zinc, Mo Et aluminium à partir de cette l'expression.

IV.3.3-Interprétation des résultats expérimentaux:

On rappelle que, l'expression de P_{eff} est valable pour différentes valeurs de P_1 et de P_2 . Ceci dit que nous pouvons faire certaines hypothèses simplificatrices, afin de donner les interprétations adéquates.

les dépôts obtenus par pulvérisation cathodique se font par un processus de nucléation qui se fait en deux étapes :

- La première couche croît progressivement jusqu'à une épaisseur critique, puis une deuxième couche croissant sur la première est macroscopiquement homogène.
- ► Les variations de ρ_f en fonction de 1/d, sont donc linéaires jusqu'à la limite de l'épaisseur critique et par conséquent la valeur de P_2 est indépendante de l'épaisseur de la couche dans le domaine expérimental ou d est supérieure à l'épaisseur critique.
- ➢ Comme la résistivité électrique est grande, pour les épaisseurs inférieures à l'épaisseur critique, nous supposons que celle-ci ne joue pas un rôle important dans la conductivité électrique et que P_1 n'est pas modifié par le recuit.
- ➢ Le fait de supposer que la deuxième couche est homogène, nous permet de supposer que la couche est parfaitement réfléchissante à partir de la valeur critique de l'épaisseur, et par conséquent nous pouvons supposer que P_1 est égal à l'unité.

nous obtenons l'expression de la valeur du coefficient de réflexion spéculaire des couches non recuites notée P_{ad} , en prenant $P_1=1$, alors :

$$P_{ad} = \frac{1+3P_{20}}{3+P_{20}} \tag{IV-44}$$

 P_{20} :est le coefficient de réflexion spéculaire de la surface externe non recuite. La formes asymptotique de l'équation (IV-44) est[20] :
$$P_{ad} = \frac{1}{3} \left(1 + \frac{8}{3} P_{20} \right) \qquad \qquad P_{20} \ll 1 \tag{IV-45}$$

En procédant de manière similaire la valeur de P2 relative aux couches recuites, notée P_{2A} , (annealed) et en prenant $P_1=1$ dans ce cas, nous pouvons montrer que l'équation (IV-38) donne :

$$P'_{eff} = \frac{1+3P_{2A}}{3+P_{2A}}$$
(IV-45)

Une expression approchée de cette équation est :

$$P'_{eff} = 1 - \frac{1}{2}(1 - P_{2A}) \qquad 1 - P_{2A} \ll 1 \qquad (\text{IV-46})$$

En procédant de manière similaire à celle présentée dans le paragraphe précédent nous avons calculé les valeurs des coefficients de réflexion spéculaire avant et après recuit, pour les couches d'Aluminium, de zinc [20]et de Mo[21].

A cette effet nous avons :

- On a tracé les courbes donnant les variations de la résistivité électrique en fonctions de l'inverse de l'épaisseur d avant et après recuit les figures (IV-34), (IV-35)et (IV-36)
- Tracé les courbes donnant les variations de la résistivité électrique en fonctions de l'inverse de l'épaisseur 1/d avant et après recuit les figures (IV-37), (IV-38)et (IV-39).

Les résultats obtenus sont représentés sur les figures suivantes :



Figure (IV-34): variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'épaisseur (d)



Figure (IV-35): variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'épaisseur (d)



Figure (IV-36): variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'épaisseur (d)



Figure (IV-37): variation de la résistivité ρ_f/ρ_0 en fonction de l'inverse de l'épaisseur

(1/d)1,6 1,4 1,2 1 ρf/po 0,8 0,6 Zn avant recuit 0,4 Zn après recuit 0,2 0 0 0,05 0,1 0,15 0,2 0,25 1/d(nm)-1

Figure (IV-38): variation de la résistivité ρ_f/ρ_0 en fonction de l'inverse de l'épaisseur (1/d)



Figure (IV-39): variation de la résistivité ρ_f / ρ_0 en fonction de l'inverse de l'épaisseur (1/d)

Les différents paramètres physiques utilisés et les résultas obtenus par application de ce modèle sont représentés dans le tableau suivant :

		Avant rec	uit	Apres recuit				
	Al	Zn	Мо	Al	Al Zn		Ло	
						700°c	900°c	
P _{eff}	0.418	0.449	0.38	0.574	0.612	0.55	0.80	
<i>P</i> ₂	0.087	0.13	0.062	0.148	0.224	0.10	0.60	

A partir des résultats de ce tableau on remarque, que le coefficient de réflexion spéculaire P augmente après recuit sur les couches minces, il est bien claire qui les valeurs de P calculées sur la couche Mo passent pratiquement de 0.062 à plus de 0.60.

IV.1.4. Etude de la conductivité électrique des alliages :

Dans ce paragraphe, nous allons présenter de manière similaire à celle des couches pures, une application des études théoriques des modèles statistiques aux couches minces d'alliages, pour étudier les résultats expérimentaux donnés par Trindade et les autres[22], concernant des couches minces deux alliages sont obtenus par faisceau d'ions (IBD)[ion beam deposition] sur des substrats de verre .

- Première couche est composée de Nikel et fer.
- Deuxième couche est composée de cobalt et fer.

Nous avons tracé pour chaque couche les courbes du :

- > La variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'épaisseur (d).
- Au produit de la résistivité par l'épaisseur (ρ_f .d) en fonction de l'épaisseur d.
- Els courbes de la résistivité ρ_f en fonction de l'inverse l'épaisseur (1/d).

Les deux dernières courbes sont des droites, sauf pour quelque valeurs correspondant aux cas des très faibles épaisseurs, Les résultats obtenus sont représentés sur les figures suivantes :



Figure (IV-40) : variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'épaisseur d (pour NiFe).



Figure (IV-41) : variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'épaisseur d (pour CoFe).



Figure (IV-42) : variation de la résistivité ρ_f .d en fonction de l'épaisseur d. (pour NiFe).



Figure (IV-43) : variation de la résistivité ρ_f .d en fonction de l'épaisseur d. (pour CoFe).



Figure (IV-44): variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'inverse l'épaisseur (1/d)

(pour NiFe).





Dans le cadre du modèle statistique, on a calculé les paramètres physiques tels que P (coefficient de réflexion spéculaire) et la résistivité à épaisseur infinie ρ_{∞} , et le coefficient de transmission aux joints de grains T à partir l'équation de (IV-30), (IV-32) respectivement.

Puis une comparaison avec ceux donnés par les auteurs. Les résultats de ce

travail	sont	résumés	dans	le	table	au	suivant	::

	$ ho_0$	λο	$ ho_\infty$	P(calculé)	P(donné)
	$(\mu\Omega.cm)$	(nm)	$(\mu\Omega.cm)$	coefficient de	Coefficient de
				réflexion spéculaire	réflexion spéculaire
Ni ₈₁ Fe ₁₉	20	40	22.56	0.41	0.5
$Co_{85}F_{15}$	15	53	19	0.36	0.5

Ce travail a montré que :

En examinant le tableau, il apparait que les valeurs du coefficient de réflexion P obtenues à partir des modèles statistiques sont en très bon accord avec celles données par Ni₈₁Fe₁₉, et par conséquent l'erreur dans ce cas est faible.

➢ La comparaison des résultats obtenus pour les valeurs du Coefficient de réflexion P avec celles données par $Co_{85}Fe_{15}$ montre que l'erreur est de l'ordre de 0.14 ce qui veut dire que les modèles statistiques appliqués dans ce cas sont très valables et décrivent les phénomènes de conduction.

• Maintenant, nous allons étudier d'autres résultats expérimentaux donnés par Trindade et les autres[22]. concernant des couches minces de $Ni_{81}Fe_{19}$ et $Co_{85}Fe_{15}$ obtenues par la méthode faisceau d'ions (IBD)[ion beam deposition], mais sur différentes sous couche sur des substrats de verre .

En effet, on étudié pour sous couche différentes quatre séries des couches telles que deux couches pour chaque alliage, à savoir :

• $(Ni_{81}Fe_{19})$ I développées sur sous couche de Ta70A°/de Ru13A°

- •(*Ni*₈₁*Fe*₁₉) II développées sur sous couche deTa70A°/de Ru13A°/NiFe10nm /Ru13 A°
- $(Co_{85}Fe_{15})$ I développées sur sous couche de Ta70A°/de Ru13A°

• $(Co_{85}Fe_{15})$ II développées sur substrats de Ta70A°/de Ru13A°/CoFe20nm/Ru13 A° Pour simplifier l'étude, on a indique les couches comme suit :

a:
$$(Ni_{81}Fe_{19})$$
 I
b : $(Ni_{81}Fe_{19})$ II
c : $(Co_{85}Fe_{15})$ I
d: $(Co_{85}Fe_{15})$ II

Nous avons tracé les courbes suivantes :

- Variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'épaisseur (d) les figures (a-IV-46),
 (b-IV-46), (c-IV-46)et(d-IV-46)
- Produit de la résistivité par l'épaisseur (ρ_f.d) en fonction de l'épaisseur d les figures(a-IV-47), (b-IV-47), (c-IV-47)et(d-IV-47).
- La résistivité ρ_f en fonction de l'inverse de l'épaisseur (1/d) les figures (a-IV-48), (b-IV-48), (c-IV-48) et (d-IV-48).

Les résultats obtenus sont représentés sur les figures suivantes :



Figure (a-IV-46) : variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'épaisseur d.



Figure (b-IV-46) : variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'épaisseur d.



Figure (c-IV-46) : variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'épaisseur d.



Figure (d-IV-46) : variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'épaisseur d.



Figure (a-IV-47) : variation du produit ρ_f d en fonction de l'épaisseur d.



Figure (b-IV-47) : variation du produit ρ_f d en fonction de l'épaisseur d.



Figure (c-IV-47) : variation du produit ρ_f d en fonction de l'épaisseur d.



Figure (d-IV-47) : variation du produit ρ_f d en fonction de l'épaisseur d.



Figure (a-IV-48): variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'inverse de l'épaisseur (1/d)



Figure(b-IV-48): variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'inverse de l'epaisseur(1/d)



Figure (c-IV-48): variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'inverse de l'épaisseur (1/d)



Figure (d-IV-48): variation de la résistivité ρ_f en fonction de l'inverse d'épaisseur (1/d).

On applique des expressions linéaires précédentes pour déterminer des paramètres physiques, toujours dans le cadre du modèle statistique :

- L'équation (IV-29) pour déterminer la résistivité à épaisseur infinie ρ_{∞} .
- L'équation (IV-30) pour déterminer le coefficient de réflexion sur les surfaces externes p.
- L'équation (IV-32) pour déterminer le coefficient de transmissions aux joints de grains T.

	$ ho_0$	λ_{0}	$ ho_\infty$	Р	Т
	$(\mu\Omega.cm)$	(nm)	(µΩ.cm)	coefficient	coefficient de
				de réflexion	transmissions
				spéculaire	
(<i>Ni</i> ₈₁ <i>Fe</i> ₁₉) I	20	40	25.46	0.18	0.79
(<i>Ni</i> ₈₁ <i>Fe</i> ₁₉)II	20	40	23.5	0.32	0.86
$(Co_{85}Fe_{15})$ I	15	53	19.5	0.30	0.86
(<i>Co</i> ₈₅ <i>Fe</i> ₁₅)II	15	53	21.5	0.34	0.80

Et les résultats obtenus sont donnés dans le tableau suivant :

- Les résultats indiqués dans le tableau sont accordées avec l'auteur, puisqu'il a trouvé que la conductivité électrique de (Ni₈₁Fe₁₉) I est inférieure à (Ni₈₁Fe₁₉) II, ce ci peut interpréter les résultats du tableau après l'application du modèle statistique tel que P de (Ni₈₁Fe₁₉) I inférieure à (Ni₈₁Fe₁₉) II.
- Aussi pour les deux couches de CoFe, l'auteur a trouvé que la conductivité électrique de $(Co_{85}Fe_{15})$ I est semblable à $(Co_{85}Fe_{15})$ II, et à partir du tableau, on remarque que le coefficient de réflexion P de $(Co_{85}Fe_{15})$ I est presque égale au coefficient de réflexion P de $(Co_{85}Fe_{15})$ II.

Résultats et discussion

ce chapitre a montré que :

 \blacktriangleright à partir du 1^{*er*} paragraphe on peut trouver, que la résistivité électrique dans les couches minces métalliques diminue avec l'augmentation du nombre des électrons subissant une réflexion spéculaire aux surfaces externes de la couche mince, et l'augmentation du coefficient de transmission aux joints de grains T.par contre elle augmente avec l'augmentation du coefficient de réflexion R aux joints de grains.

► L'examen des résultats expérimentaux relatifs aux couches pure de cuivre et de l'argent, a montré la validité des modèles statistiques pour interpréter les phénomènes de conductions dans les couches minces métalliques pures.

► Les variations du coefficient de réflexion spéculaire dans les couches de platine montrent que l'état de surface, est fortement influencé par la vitesse d'évaporation.

► Les résultats obtenus dans le $3^{\acute{e}me}$ paragraphe, sur les couches Zn, Al et Mo, montrent que le coefficient de réflexion spéculaire P augmente après traitement de recuit.

Conclusion générale

Conclusion

le travail présenté dans ce mémoire a révélé les points essentiels suivants :

- les premiers modèles ayant décrit les phénomènes de la conduction électrique dans les métaux ont été proposés par Drude (1900) et Sommerfeld (1928).
- Une couche mince d'un matériau donné est un élément de ce matériau dont une des dimensions, qu'on appelle l'épaisseur, a été fortement réduite, de telle sorte qu'elle s'exprimera en nanomètres. Cette très faible distance entre les deux surfaces limite une perturbation de la majorité des propriétés physique
- Plusieurs mécanismes contribuant au calcul de la résistivité des couches minces ont été élaborés pour comprendre l'influence des paramètres physiques inclus en ces mécanismes. Ce sont les collisions internes et les diffusions sur les surfaces externes et sur les joints de grains.
- le modèle de Fuchs-Sondheimer, premier modèle qui traite la conductivité électrique dans les couches minces métalliques, les effets des surfaces externes sont tenus en compte, le plus important paramètre dans ce modèle est p (appelé le coefficient de réflexion spéculaire). Et ce lui de Mayada-Shatzkes qui a élaboré un autre modèle, pour tenir compte des effet des joints de grains.les modèles statistiques sont basés sur la procédure de calcul de Cottey, pour les libres parcours moyens qui tiennent compte des effets simultanés dus aux surfaces externes et des joints de grains.

- Les équations linéarisées approchées, déduites des modèles statistiques multidimensionnelles semblent à ce jour constituer des formulations convenables et simples permettant l'étude de la conductivité électrique.
- Des effets dimensionnels dans les couches minces métalliques dans le cadre des modèles de conduction statistique ont été examinés dans ce mémoire.
- L'examen des résultats expérimentaux relatifs aux couches de cuivre et de platine, ont montré la validité des équations linéarisées approchées déduites des modèles statistiques et ont permis le calcul de quelques paramètres physiques très importants.
- Les variations du coefficient de réflexion spéculaire dans les couches de platine montrent que l'état de surface, est fortement influencé par la vitesse d'évaporation.
- Les résultats obtenus par l'effet de recuit sur les couches minces de zinc et d'aluminium et Molybdenum ont montré que le coefficient de réflexion spéculaire augmente .
- Le travail relatif à l'examen des résultats expérimentaux des couches de nikel-fer et cobalt-fer a montré que les modèles statistiques sont très valables et décrivent de façon très satisfaisante les phénomènes de conduction dans les couches métalliques des alliages.

Bibliographie

[1] N.W.Ashcroft, N.David Mermin, «solid state Physics», Sounders college, Philadelphia, (1988).

[2] Yves QUÉRÉ, «Physique des matériaux», Ecole Polytechnique- ellipse, Paris,1988.

[3]Kittel,C «Physique de l'état solide»,7^{éme} édition, Dunod, Parise,1998.

[4] Salima Messaadi «influence des paramètres physiques sur la conductivité électrique minces métalliques»mémoire de magister université de Batna.

[5]C,Kittel, B, A, ph, D.« Introduction à la physique de l'état solide»,3^{éme}édition, Dunod, UNIV, Californie.

[6]R . Chouchane « Modalisation de la résistivité électrique dans les couches minces métalliques applications aux amorphes métalliques » mémoire de magister, Université de Batna (2008).

[7] K.Fuchs, Pro.Cambringe Philos.Soc .34(1938).

[8] E.H.Sondheimer, adv. Phy.1(1952).

[9] A.A.Cottey, Thin Solid Films, 1(1967)297.

[10] A.F.Mayadas, M.Shatzkes, Phys.Rev.B1 (1970)1382.

[11] A. Emre Yarimbiyik , Harry A. Schafft , Richard A. Allen , Mona E. Zaghloul , David L. Blackburn 46 (2006) 1050–1057

[12]M. Bedda .<< effets thermiques des couches amorphes chimiques du type Nip études préliminaires théoriques et technologiques>> thèse de doctorat, Université de Nancy, 1985.

[13] H.-D. Liu, Y.-P. Zhao, G. Ramanath, S.P. Murarka, G.-C. Wang Thin Solid Films 384 (2001). 151_156

[14] Christiane Pichard, «Analyse des propriétés électriques de couches métalliques à l'aide de libre parcours moyens » thèse de docteur-es-sciences Université de Nancy,(1985).

[15] M.Bedda, S.Messaadi, C.R.Pichard et A.J.Tosser, J.Mater.Sci, 21(1986)2643.

[16] H. Marom, M. Ritterband, M. Eizenberg, Thin Solid Films 510 (2006) 62 - 67

[17]K. Sarakinos , J. Wördenweber , F. Uslu , P. Schulz , J. Alami , M. Wuttig, Technology 202 (2008) 2323–2327

[18]M. Avrekh, O.R. Monteiro, I.G. Brown 158_2000.217-222

[19]S. Messaadi, C. Pichard, A. J. Tosser (1986)823-875

[20] S. Messaadi, C. Pichard, A. J. Tosser(1986)1036-1038

[21] U. Schmid, H. Seidel Thin Solid Films 489 (2005) 310 – 319

[22] I.G. Trindade , D.Leita^o , R.Fermento , Y.Pogorelev , J.B.Sousa 321 (2009) 2494–2498

Résumé :

Le travail présenté dans ce mémoire de magister est consacré à l'étude la conductivité électrique, nous avons présenté d'abord un bref rappel sur la théorie élémentaire dans la conduction électrique dans les métaux massifs, puis certaines théorie de base décrivant la conductions électrique dans les couches minces métalliques. Présenté Les modèles de Fuchs-Sondheimer, Cottey, Mayadas-Schatzkes. Nous introduisons les notions de base décrivant les modèles de conduction statistiques. La dernier étape consacré à l'application aux donné expérimentales sur les couches pures de cuivre, l'argent et platine, et sur les couches d'alliages de nikel-fer et cobalt-fer, et d'autre part nous avons étudié l'influence du recuit sur des couches minces de zinc, d'aluminium et de molbeden.

Abstract:

The work presented in this thesis magister is devoted to the study of electrical conductivity, we initially presented a short recall on the elementary theory of electrical conduction in bulk metal, then certain basic theories describing the electronic conductions in the metallic films. Presented models of Fuchs-Sondheimer Cottey, Mayadas-Schatzker. we introduce the basics models describing conduction statistics. The last step is devoted to the application given experimental layers of pure copper, silver and platinum, and the layers of nikel-iron alloys and cobalt-iron, and secondly we studied the influence of annealing on thin layers of zinc and of aluminum and molbedyoum.

مل خص الع مل المقدم في هده المذكرة، مقسم إلي أربعة أقسام. حيث قمنا في الجزء الأول بتقديم المفاهيم الأولية النا قلية الكهربائية في المعادن أما الجزء الثاني يتعلق بدراسة الناقلية الكهربائية في الصفائح الرقيقة من خلال النماذج المتعلقة بها (نماذج كل من فوكس-سنديمر. مياداس-شتكس .كوطي.). وفي الجزء الثالث ندخل المفاهيم الأساسية المتعلقة بالنماذج الإحصائية وفي الأخير ندرس نتائج تجريبية حول صفائح نقية للنحاس و الفضة و البلاتين ، وصفائح سبيكة(نيكل-حديد) و(كوبالت- حديد). كما ندرس تأثير المعالجة الحرارية على صفائح الزنك و الألمنيوم و الملباديوم .