

CODE ÉCRIT SUR MATLAB POUR MODÉLISER PAR LE FORMALISME DES FONCTIONS DE GREEN HORS ÉQUILIBRE LE TRANSPORT ÉLECTRONIQUE DANS DES NANO-DISPOSITIFS

FICHE N° 981

Période de fabrication : 2000-2024

Fabricant : Institut des Matériaux, de Microélectronique et des Nanosciences de Provence (Im2nP)

Domaines : Physique

Sous-domaines :

Organisme : Institut des Matériaux, de Microélectronique et des Nanosciences de Provence (Im2nP)

Ville : Marseille

Modèle : Inconnu

Matériaux :

Description

Le document numérique associé à l'image de l'ordinateur est un code de modélisation du déplacement des électrons dans les matériaux semi-conducteurs.

Ce code a dans un premier temps été développé pour modéliser des transistors de très petites dimensions (longueur de grille inférieure à 20nm). Il a depuis été adapté à la modélisation de systèmes optoélectronique inorganique et organique comme les cellules photovoltaïques et de photocatalyse et les systèmes de refroidissement. Ce code est installé sur des nombreuses stations de calcul, au sein de l'IM2NP mais également dans d'autres universités. Chaque utilisateur est en mesure de le modifier ce qui en fait un objet non matériel et pluri forme qui continue à évoluer. Le principe de modélisation repose sur la discrétisation numérique de l'espace définissant la partie active du composant à modéliser. La force de l'approche est ici de pouvoir modéliser des composants ouverts, c'est-à-dire connectés avec des systèmes de grandes dimensions. Le code est donc en mesure de calculer l'effet, sur la partie active nanométrique, qu'a sa connexion avec le monde macroscopique. Cette approche permet également de considérer la partie active en interaction avec des réservoirs de chaleur (phonon) et de rayonnement (photons).

Thèmes de recherche :

Modélisation du transport électronique quantique dans les systèmes semi-conducteurs nano-structurés. Les systèmes étudiés sont les transistors, les cellules PV, les systèmes thermoélectriques, les photo-détecteurs, les jonctions tunnels.... Les principaux matériaux considérés sont le Si, les III-V et les matériaux 2D.

Lien: <http://www.nqs-group.com/>

Utilisation

L'objet est utilisé pour la recherche dans le IM2P (en entier)

PRÉSERVER
SAUVEGARDER
VALORISER

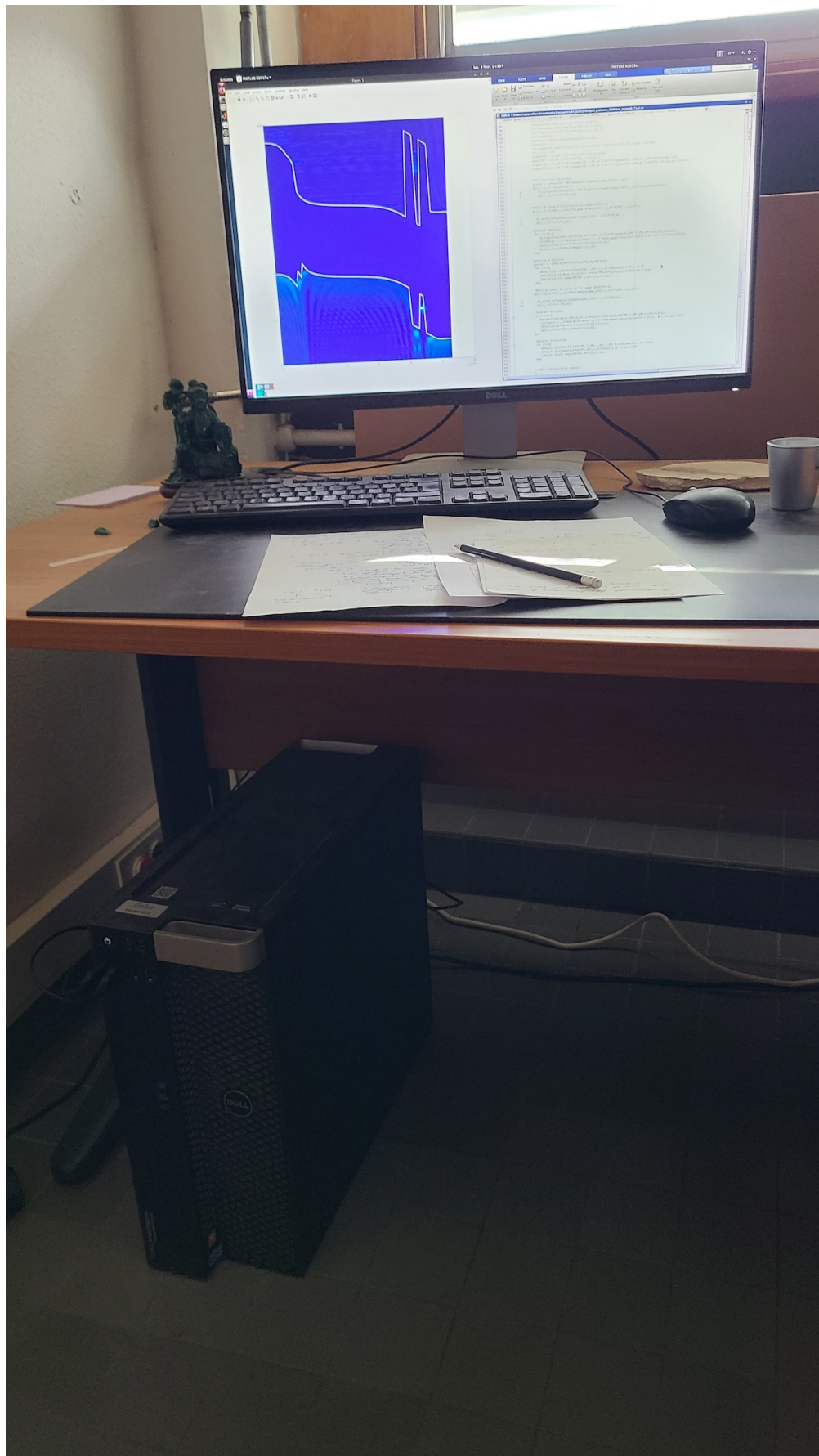
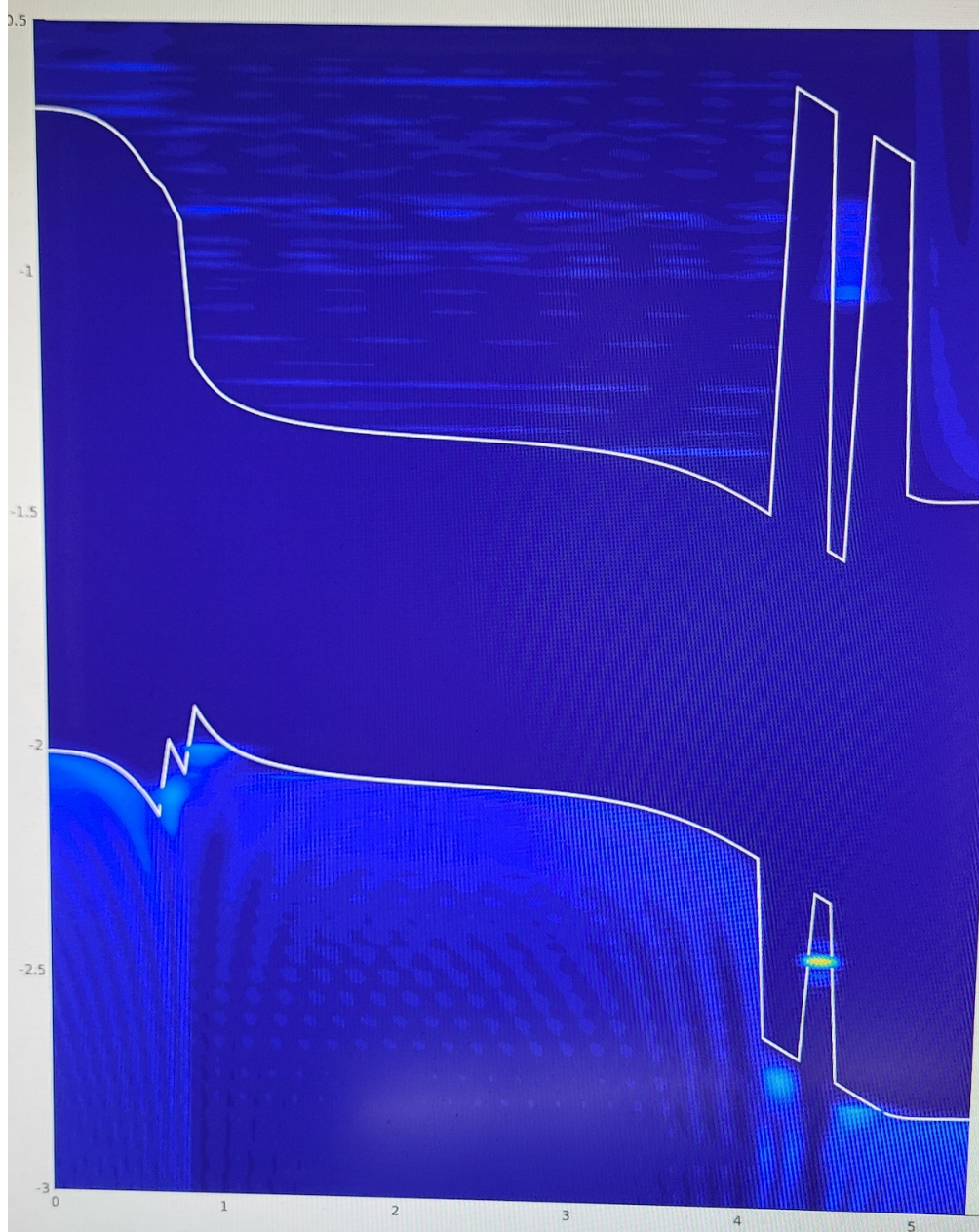
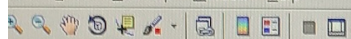


Figure 1

Insert Tools Desktop Window Help



```

[U,T]=schur(F);[US,TS]=ordschur(U,T,'udi');
nn=length(A);
X=US(nn+1:2*nn,1:nn)*inv(US(1:nn,1:nn));
Gr=X*inv(A');
SIG_D=A*Gr*A';%petit matrice representant la partie drte de sigma retardee
%SIG_D(2,2)=0;
sigmaR(NT-1:NT,NT-1:NT)=SIG_D;%sigma retardee
gamaD(NT-1:NT,NT-1:NT)=li*(SIG_D-SIG_D');
sigmaL(NT-1:NT,NT-1:NT)=sigmaL(NT-1:NT,NT-1:NT)+li*gamaD(NT-1:NT,NT-1:NT)*fD;%sign
sigmaG(NT-1:NT,NT-1:NT)=sigmaG(NT-1:NT,NT-1:NT)-li*gamaD(NT-1:NT,NT-1:NT)*(1-fD);%

%%fct de Green Retardee
Ainter = ee*eye(NT)-HKP-diag(UU)-sigmaR-sigma_inTR(:, :, k);
GR(:, :, k, n)=inv(Ainter);
GR_sp=sparse(ee*eye(NT)-HKP-diag(UU)-sigmaR-sigma_inTR(:, :, k))\sparse(eye(NT));
GR(:, :, k, n)=full(GR_sp);

%%fct de Green d electron G< (L comme LESS) GL
GL(:, :, k, n)=GR(:, :, k, n)*(sigmaL+sigma_intL(:, :, k))*(GR(:, :, k, n))';
GL_sp=GR_sp*sparse(sigmaL+sigma_intL(:, :, k))*(GR_sp)';
GL(:, :, k)=full(GL_sp);

%courant des elec
for i=1:N-1
    GLdiaginf=GL(2*i-1:2*2*i+2,2*i-1:2*i,k,n);GLdiagsup=GL(2*i-1:2*i,2*i-1+2:2*i+2,k,n);
    JJ=(beta(:, :, i)*GLdiaginf-beta(:, :, i)*GLdiagsup);%courant entre i et i+1 l ener
    Jh(k, i, n)=pi*(2*n+1)*real(JJ(2,2)+JJ(1,1));
    Jc(k, i, n)=pi*(2*n+1)*real(JJ(1,1));
end

%densite d electron
prefact = -dE*pi*(2*n+1)*2*li/(2*pi*pi*R^2*a);
for i=1:N
    dens_c(i, k, n)=prefact*(GL(2*i-1,2*i-1,k,n));%densite d elec en BC
    dens_e(i, k, n)=dens_c(i, k, n) + prefact*GL(2*i,2*i,k,n);%densite d elec
    ldos_e(i, k, n)=imag(GR(2*i-1,2*i-1,k,n))/pi;
end

%%fct de Green de trous G> (G comme GREATER) GG
GG(:, :, k, n)=GR(:, :, k, n)*(sigmaG+sigma_intG(:, :, k))*(GR(:, :, k, n))';
GG_sp=GR_sp*sparse(sigmaG+sigma_intG(:, :, k))*(GR_sp)';
GG(:, :, k)=full(GG_sp);

%courant de trous
for i=1:N-1
    GGdiaginf=GG(2*i+1:2*2*i+2,2*i-1:2*i,k,n);GGdiagsup=GG(2*i-1:2*i,2*i+1:2*i+2,k,n);
    JJ=(beta(:, :, i)*GGdiaginf-beta(:, :, i)*GGdiagsup);%courant entre i et i+1 l energie
    Jh(k, i, n)=pi*(2*n+1)*real(JJ(2,2)+JJ(1,1));
    Jv(k, i, n)=pi*(2*n+1)*real(JJ(2,2));
end

%densite d electron
for i=1:N
    dens_h(i, k, n)=prefact*GG(2*i-1:2*i-1,2*i-1:2*i-1,k,n);%densite de trous
    dens_v(i, k, n)=prefact*GG(2*i,2*i,k,n);%densite de trous en BV
    ldos_h(i, k, n)=-imag(GR(2*i,2*i,k,n))./pi;
end

end%fin de boucle en energie
%
```

Pour nous citer :

Base de la Mission nationale de sauvegarde et de valorisation du patrimoine scientifique et technique contemporain, PATSTEC, Code écrit sur Matlab pour modéliser par le formalisme des fonctions de Green hors équilibre le transport électronique dans des nano-dispositifs (Institut des Matériaux, de Microélectronique et des Nanosciences de Provence (Im2nP)), <https://www.patstec.fr/ressources/objets/detail?id=32412>, consulté le 2026-10-20