

Université de Montréal

Amélioration de la modélisation par méthode de  
Monte-Carlo du transport des porteurs de charge dans  
G4CMP (*GEANT4 Condensed Matter Physics*) pour  
les détecteurs cryogéniques de matière sombre de  
SuperCDMS au Si et Ge

par

Émile Michaud

Département de physique  
Faculté des arts et des sciences

Thèse présentée en vue de l'obtention du grade de  
Philosophiæ Doctor (Ph.D.)  
en physique

Juin 2026



# Université de Montréal

Faculté des arts et des sciences

---

Cette thèse intitulée

**Amélioration de la modélisation par méthode de Monte-Carlo  
du transport des porteurs de charge dans G4CMP  
(*GEANT4 Condensed Matter Physics*) pour les détecteurs  
cryogéniques de matière sombre de SuperCDMS au Si et Ge**

présentée par

**Émile Michaud**

a été évaluée par un jury composé des personnes suivantes :

*Michel Côté*

---

(président-rapporteur)

*Alan Robinson*

---

(directeur de recherche)

*Richard Mackenzie*

---

(membre du jury)

*Guillaume Giroux*

---

(examineur externe)

*Richard Martel*

---

(représentant du doyen de la FESP)



# Résumé

---

G4CMP (*GEANT4 Condensed Matter Physics*) est un outil de simulation par méthode de Monte-Carlo du transport des porteurs de charge et des phonons dans des cristaux de Si et de Ge à des températures cryogéniques.

Dans cette thèse, nous proposons une amélioration du modèle de transport des électrons et des trous de G4CMP. Ce dernier incluait déjà l'accélération oblique des charges par un champ électrique, l'émission de phonons acoustiques intravallées ainsi qu'un modèle simple de diffusion intervallée, de piégeage de charges, de recombinaison aux surfaces et d'ionisation d'impact.

Au terme de ce travail, nous y avons ajouté les effets sur la cinématique du transport de la non-parabolicité des bandes de conduction et de valence. De plus, nous avons implémenté un modèle de diffusions intervallées basé sur des principes premiers et révisé le processus d'émissions de phonons acoustiques intravallées. Parmi ces changements, on note aussi le développement des distributions angulaires de l'émission de phonons par une charge lors de diffusions avec des phonons acoustiques intravallées, optiques intravallées et intervallées.

Nous montrons que les données de la simulation, après l'amélioration du transport des porteurs de charge, sont en accord avec des données expérimentales, telles que la vitesse de dérive des électrons et des trous et la densité de charges aux surfaces. Nous observons aussi une différence de moins de 0,01 % entre l'énergie totale des phonons de Neganov-Trofimov-Luke (NTL) attendue et celle obtenue par la simulation.

Dans les détecteurs de SuperCDMS, l'information mesurée ne provient pas directement des charges électriques, mais des phonons NTL qu'elles émettent lors de leur déplacement. La trajectoire des électrons et des trous, leurs diffusions et leurs interactions avec le réseau cristallin déterminent le nombre, l'énergie, la direction et le temps d'arrivée des phonons au TES (*Transistor Edge Sensor*), et donc la forme finale du signal. Une modélisation réaliste du transport des charges est donc indispensable pour reconstruire correctement les dépôts d'énergie dans nos détecteurs de matière sombre.

**Mots-clés:** Matière sombre, SuperCDMS, G4CMP, GEANT4, simulation, transport des paires électron-trou, méthode de Monte-Carlo, phonons Neganov-Trofimov-Luke (NTL), silicium, germanium

# Abstract

---

G4CMP (GEANT4 Condensed Matter Physics) is a Monte-Carlo-based simulation tool for the transport of charge carriers and phonons in silicon and germanium crystals at cryogenic temperatures.

In this thesis, we propose an improvement to the electron and hole transport model implemented in G4CMP. The existing framework already included oblique acceleration of charge carriers under an electric field, intravalley acoustic phonon emission, as well as a simplified model for intervalley scattering, charge trapping, surface recombination, and impact ionization.

At the end of this work, we have incorporated the effects of non-parabolicity of the conduction and valence bands on the kinematics of charge transport. In addition, we implemented an intervalley scattering model based on first principles and revised the intravalley acoustic phonon emission process. Among these developments, we also introduce the angular distributions for phonon emission by charge carriers during intravalley acoustic, intravalley optical, and intervalley phonon scattering events.

We show that the simulation results, after the improvement of the charge transport model, are consistent with experimental data such as electron and hole drift velocities and surface charge densities. We also observe a discrepancy of less than 0.01% between the expected total Neganov–Trofimov–Luke (NTL) phonon energy and that obtained from the simulation.

In SuperCDMS detectors, the measured information does not originate directly from electric charges, but from the NTL phonons emitted during their transport. The trajectories of electrons and holes, their scattering processes, and their interactions with the crystal lattice determine the number, energy, direction, and arrival time of phonons at the TES (Transition Edge Sensor), and therefore the final signal shape. A realistic modeling of charge transport is thus essential for accurately reconstructing energy depositions in our dark matter detectors.

**Keywords:** Dark matter, SuperCDMS, G4CMP, GEANT4, Monte-Carlo methods, electron-hole pairs transport, Neganov-Trofimov-Luke (NTL) phonons, simulations, silicon, germanium



# Table des matières

---

|                                                                  |      |
|------------------------------------------------------------------|------|
| Résumé .....                                                     | v    |
| Abstract .....                                                   | vii  |
| Liste des tableaux .....                                         | xv   |
| Liste des figures .....                                          | xvii |
| Liste des sigles et des abréviations .....                       | xxi  |
| Remerciements .....                                              | xxv  |
| Introduction .....                                               | 1    |
| Chapitre 1. La matière sombre .....                              | 3    |
| 1.1. Les preuves de son existence .....                          | 3    |
| 1.1.1. Vitesse de libération des étoiles de la Voie lactée ..... | 3    |
| 1.1.2. Masse de l'amas Coma .....                                | 4    |
| 1.1.3. Vitesse de rotation des galaxies .....                    | 5    |
| 1.1.4. Lentilles gravitationnelles .....                         | 6    |
| 1.1.5. Rayonnement fossile .....                                 | 8    |
| 1.1.5.1. Modèle $\Lambda$ CDM .....                              | 8    |
| 1.1.5.2. CMB .....                                               | 9    |
| 1.1.6. Amas du boulet .....                                      | 12   |
| 1.2. Détection de la matière sombre .....                        | 13   |
| 1.3. Détecteurs de SuperCDMS .....                               | 14   |
| 1.3.1. Le cristal des détecteurs de SuperCDMS .....              | 14   |
| 1.3.2. Fonctionnement du QET .....                               | 16   |
| 1.3.3. Fonctionnement du TES .....                               | 16   |
| 1.3.4. Modélisation du détecteur .....                           | 17   |

|                                                                                                   |           |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>Chapitre 2. Transport des porteurs de charges et des phonons dans un semi-conducteur .....</b> | <b>19</b> |
| 2.1. Théorème de Bloch .....                                                                      | 19        |
| 2.2. Théorie des bandes .....                                                                     | 20        |
| 2.2.1. Masse effective.....                                                                       | 25        |
| 2.2.1.1. Masse tensorielle.....                                                                   | 26        |
| 2.2.1.2. Approximations masses scalaires :.....                                                   | 28        |
| 2.2.1.3. Résumé des différentes masses .....                                                      | 30        |
| 2.2.2. Vitesse de groupe .....                                                                    | 30        |
| 2.2.2.1. Vitesse moyenne .....                                                                    | 31        |
| 2.2.2.2. Masse effective.....                                                                     | 32        |
| 2.2.3. Quantité de mouvement et quasi-quantité de mouvement .....                                 | 32        |
| 2.2.4. La force et l'accélération .....                                                           | 33        |
| 2.2.4.1. Modèle semi-classique.....                                                               | 34        |
| 2.2.4.2. La force .....                                                                           | 35        |
| 2.2.4.3. Accélération .....                                                                       | 36        |
| 2.2.5. Transformation de Herring-Vogt.....                                                        | 36        |
| 2.2.6. Non-parabolicité.....                                                                      | 39        |
| 2.2.7. Résumé des équations de la cinématique des porteurs de charge .....                        | 41        |
| 2.3. Processus de diffusion des électrons .....                                                   | 41        |
| 2.3.1. Théorie et calculs des probabilités de diffusion .....                                     | 42        |
| 2.3.2. Diffusions avec des phonons.....                                                           | 43        |
| 2.3.2.1. Phonons acoustiques intravallées.....                                                    | 49        |
| 2.3.2.2. Phonons optiques intravallées .....                                                      | 60        |
| 2.3.2.3. Phonons intervallées .....                                                               | 67        |
| 2.3.2.4. Phonons piézoélectriques acoustiques et polaires optiques .....                          | 74        |
| 2.3.3. Recombinaison de paires $e^-/h^+$ .....                                                    | 74        |
| 2.3.4. Ionisation d'impact .....                                                                  | 75        |
| 2.3.5. Surfaces .....                                                                             | 77        |
| 2.3.6. Diffusion avec des électrons/trous/plasmons.....                                           | 78        |
| 2.3.7. Diffusions avec des impuretés .....                                                        | 79        |
| 2.3.7.1. Impuretés chargées.....                                                                  | 79        |
| 2.3.7.2. Impuretés neutres.....                                                                   | 81        |

|                                                                                   |           |
|-----------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 2.3.8. Résumé .....                                                               | 81        |
| <b>Chapitre 3. G4CMP .....</b>                                                    | <b>83</b> |
| 3.1. Équation de transport de Boltzmann .....                                     | 84        |
| 3.2. Modélisation du transport des porteurs de charges par méthode de Monte-Carlo | 86        |
| 3.2.1. Géométrie et physique du système .....                                     | 88        |
| 3.2.2. Conditions initiales .....                                                 | 88        |
| 3.2.3. Temps de vol entre les diffusions .....                                    | 89        |
| 3.2.3.1. Méthode d'auto-diffusion ou <i>self-scattering</i> .....                 | 92        |
| 3.2.3.2. Méthode itérative de $P(\mathbf{k})$ .....                               | 93        |
| 3.2.4. Accélération entre les collisions .....                                    | 94        |
| 3.2.5. Sélection du processus .....                                               | 95        |
| 3.2.6. Sélection de l'état final .....                                            | 96        |
| 3.2.6.1. Émissions (et absorption) de phonons .....                               | 96        |
| 3.2.6.2. Diffusions avec des impuretés .....                                      | 98        |
| 3.2.6.3. Autres processus .....                                                   | 98        |
| 3.2.7. Simulation des bandes électroniques au complet. ....                       | 99        |
| 3.3. Processus physiques dans G4CMP .....                                         | 99        |
| 3.3.1. Création de paires e/h et de phonons .....                                 | 100       |
| 3.3.2. Transport des charges .....                                                | 103       |
| 3.3.2.1. Émission Luke-Neganov-Trofimov .....                                     | 104       |
| 3.3.2.2. Phonons optiques intravallées .....                                      | 106       |
| 3.3.2.3. Diffusions intervallées .....                                            | 106       |
| 3.3.2.4. Charge Trapping .....                                                    | 108       |
| 3.3.2.5. Ionisation d'impact .....                                                | 109       |
| 3.3.2.6. Surfaces .....                                                           | 110       |
| 3.3.3. Transport des phonons .....                                                | 110       |
| 3.3.3.1. Désintégration anharmonique .....                                        | 111       |
| 3.3.3.2. Diffusion isotopique .....                                               | 112       |
| 3.3.3.3. Surfaces et quasiparticules de Bogolioubov .....                         | 112       |
| <b>Chapitre 4. Amélioration du transport des porteurs de charge dans G4CMP</b>    |           |
| .....                                                                             | 115       |

|          |                                                                |     |
|----------|----------------------------------------------------------------|-----|
| 4.1.     | Importance de la simulation.....                               | 116 |
| 4.2.     | Non-parabolicité de la structure de bande.....                 | 117 |
| 4.3.     | Phonons acoustiques intravallées.....                          | 118 |
| 4.3.1.   | Non-parabolicité.....                                          | 119 |
| 4.3.1.1. | Taux de diffusions.....                                        | 120 |
| 4.3.1.2. | Distribution angulaire.....                                    | 122 |
| 4.3.1.3. | Énergie des phonons.....                                       | 123 |
| 4.3.2.   | Choix des paramètres.....                                      | 124 |
| 4.3.2.1. | Choix des masses.....                                          | 124 |
| 4.3.2.2. | Choix du potentiel de déformation.....                         | 125 |
| 4.3.2.3. | Choix de la vitesse du son.....                                | 126 |
| 4.3.3.   | Transformations de Herring-Vogt de l'énergie du phonon.....    | 127 |
| 4.4.     | Diffusions intervalles.....                                    | 127 |
| 4.4.1.   | Taux de diffusions à partir de principes premiers.....         | 129 |
| 4.4.2.   | Choix des paramètres.....                                      | 132 |
| 4.4.2.1. | Choix des potentiels de déformation.....                       | 132 |
| 4.4.2.2. | Choix des énergies des phonons.....                            | 132 |
| 4.4.3.   | Sélection de l'état final et émission de phonons.....          | 134 |
| 4.4.3.1. | Ancien modèle.....                                             | 134 |
| 4.4.3.2. | Nouveau modèle.....                                            | 134 |
| 4.4.4.   | Matrice de rotations.....                                      | 139 |
| 4.4.4.1. | Matrices de rotation des anti-vallées.....                     | 140 |
| 4.4.4.2. | Précision des éléments de matrice.....                         | 141 |
| 4.4.4.3. | Convention matrices de rotation.....                           | 141 |
| 4.5.     | Comparaison avec les données expérimentales.....               | 146 |
| 4.5.1.   | Conservation de l'énergie.....                                 | 147 |
| 4.5.2.   | Vitesse de dérive.....                                         | 149 |
| 4.5.3.   | Positions finales des électrons à la surface du détecteur..... | 151 |
| 4.6.     | Limites du modèle et autres améliorations possibles.....       | 155 |
| 4.6.1.   | Limites du modèle.....                                         | 155 |
| 4.6.2.   | Ajustement des paramètres.....                                 | 156 |
| 4.6.3.   | Phonons optiques intravallées.....                             | 156 |

|                           |                                                                                                                                                                                    |            |
|---------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 4.6.4.                    | Diffusion avec des impuretés .....                                                                                                                                                 | 157        |
| 4.6.5.                    | Surfaces .....                                                                                                                                                                     | 157        |
| 4.6.6.                    | Processus Umklapp .....                                                                                                                                                            | 158        |
| 4.6.7.                    | Ajout d'autres vallées .....                                                                                                                                                       | 159        |
| 4.6.8.                    | Relation de dispersion des phonons.....                                                                                                                                            | 159        |
| 4.6.9.                    | Relativité restreinte .....                                                                                                                                                        | 160        |
| 4.7.                      | Conclusion.....                                                                                                                                                                    | 162        |
| <b>Conclusion .....</b>   |                                                                                                                                                                                    | <b>163</b> |
| <b>Bibliographie.....</b> |                                                                                                                                                                                    | <b>167</b> |
| <b>Références .....</b>   |                                                                                                                                                                                    | <b>169</b> |
| <b>Annexe A.</b>          | <b>Théorème de la masse effective .....</b>                                                                                                                                        | <b>179</b> |
| <b>Annexe B.</b>          | <b>Théorème d'Ehrenfest d'un électron en présence d'un champ<br/>électromagnétique extérieur et d'un potentiel périodique. ...</b>                                                 | <b>183</b> |
| <b>Annexe C.</b>          | <b>Résolution de <math> f'(q_0^*) </math> pour le cas non parabolique de l'émission<br/>de phonons acoustiques intravallées .....</b>                                              | <b>187</b> |
| <b>Annexe D.</b>          | <b>Schéma supplémentaires de la diffusions IV : angle d'émission<br/>maximal et direction de <math>k'^*</math> .....</b>                                                           | <b>191</b> |
| <b>Annexe E.</b>          | <b>Exemple de calcul pour trouver les fonctions de conversion de<br/>l'énergie <math>E(k^*)</math> vers la quantité de mouvement <math>\langle p \rangle</math> et vice-versa.</b> | <b>193</b> |
| <b>Annexe F.</b>          | <b>Autres réalisations.....</b>                                                                                                                                                    | <b>195</b> |



## Liste des tableaux

---

|     |                                                                                                                                                                                                            |     |
|-----|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 1.1 | Résultats de Planck 2018 sur les densités masse-énergie de l'univers.....                                                                                                                                  | 11  |
| 2.1 | Tableau des différentes masses pour le Si et le Ge autour de $T \approx 0$ K.....                                                                                                                          | 30  |
| 2.2 | Comparaison des équations de cinématiques entre les différents modèles<br>mathématiques des structures de bandes.....                                                                                      | 42  |
| 2.3 | Tableau des proportions de phonons acoustiques dans chaque mode <b>[130]</b> .....                                                                                                                         | 50  |
| 2.4 | Énergies des phonons IV $\hbar\omega_{iv}$ , des potentiels de déformations $D_{iv}$ , de l'ordre du<br>processus et du nombre de vallées finales accessibles $Z_{iv}$ pour chaque mode de<br>phonon. .... | 70  |
| 4.1 | Comparaison des équations de cinématique pour les électrons et les trous dans<br>G4CMP avant et après les changements décrits dans le texte. ....                                                          | 118 |
| 4.2 | Comparaison des équations du taux de diffusions acoustiques intravallées, de sa<br>distribution angulaire et de la quantité de mouvement du phonon émis avant et<br>après nos modifications .....          | 121 |
| 4.3 | Valeurs du potentiel de déformation acoustique intravallées pour les électrons et<br>les trous dans le Si et le Ge .....                                                                                   | 125 |
| 4.4 | Comparaison des équations du taux de diffusions intervallées et de la distribution<br>angulaire avant et après nos modifications.....                                                                      | 129 |
| 4.5 | Valeurs du potentiel de déformation et de l'énergie du phonon IV associé pour le<br>Si et le Ge dans la littérature.....                                                                                   | 133 |
| 4.6 | Coefficients de la relation de dispersion quadratique pour chaque branche de<br>phonons du Si.....                                                                                                         | 160 |



# Liste des figures

---

|      |                                                                                                                                                                                     |    |
|------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1.1  | Vitesse de rotation des régions d'hydrogène gazeux de la galaxie NHC 3198.....                                                                                                      | 6  |
| 1.2  | Arcs de cercle de l'amas de galaxies Abell 1689.....                                                                                                                                | 7  |
| 1.3  | Carte du rayonnement fossile (CMB) de l'expérience Wilkinson Microwave Anisotropy Probe (WMAP).....                                                                                 | 10 |
| 1.4  | Spectre de puissance des fluctuations de température du rayonnement fossile CMB en fonction du moment multipolaire $l$ . ....                                                       | 11 |
| 1.5  | Amas du boulet.....                                                                                                                                                                 | 12 |
| 1.6  | Diagramme de Feynman représentant les trois méthodes de détection de la matière sombre.....                                                                                         | 13 |
| 1.7  | Schéma de la création de phonons immédiats et de paires électron-trou lors du dépôt d'énergie initiale.....                                                                         | 14 |
| 1.8  | Schéma du fonctionnement du QET.....                                                                                                                                                | 16 |
| 1.9  | Schéma du fonctionnement du TES.....                                                                                                                                                | 17 |
| 1.10 | Distribution de l'énergie des phonons des données de calibration .....                                                                                                              | 18 |
| 2.1  | Structure de bande du silicium.....                                                                                                                                                 | 23 |
| 2.2  | Structure de bande du germanium.....                                                                                                                                                | 23 |
| 2.3  | Schéma des bandes de valence et de conduction du germanium et leur position dans la zone de Brillouin.....                                                                          | 24 |
| 2.4  | Schéma des relations de dispersion pour les différentes bandes.....                                                                                                                 | 29 |
| 2.5  | Comparaison de la quasi-quantité de mouvement (ou quantité de mouvement du cristal) $\hbar\mathbf{k}$ et de la quantité de mouvement moyenne $\langle\hat{\mathbf{p}}\rangle$ ..... | 34 |
| 2.6  | Comparaison schématique de l'approximation de la bande de conduction ou de valence par une parabole et avec le facteur de non-parabolicité.....                                     | 39 |
| 2.7  | Mécanismes de diffusions des électrons et des trous dans un cristal.....                                                                                                            | 43 |

|      |                                                                                                                                                                                                        |     |
|------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 2.8  | Représentation schématique de l'émission et de l'absorption de phonons de quantité de mouvement $\mathbf{q}$ par un électron ou un trou avec une quantité de mouvement initiale $\mathbf{k}$ .....     | 44  |
| 2.9  | Représentation schématique de la relation de dispersion des phonons dans le Si et le Ge.....                                                                                                           | 45  |
| 2.10 | Représentation des angles entre les axes du système de coordonnées, le vecteur d'impulsion initial du porteur de charge $\mathbf{k}^*$ et la quantité de mouvement du phonon $\mathbf{q}^*$ .....      | 53  |
| 2.11 | Illustration des diffusions intervalles f et g pour les vallées $L$ du Si. ....                                                                                                                        | 68  |
| 2.12 | Représentation schématique de la recombinaison de paires e/h.....                                                                                                                                      | 75  |
| 2.13 | Taux de diffusions des électrons en fonction de leur énergie. ....                                                                                                                                     | 82  |
| 3.1  | Schéma montrant les étapes d'une modélisation du transport de porteurs de charge par méthode de Monte-Carlo.....                                                                                       | 87  |
| 3.2  | Représentation du taux total de diffusion constant $P_0$ . ....                                                                                                                                        | 93  |
| 3.3  | Schéma des processus inclus dans G4CMP.....                                                                                                                                                            | 100 |
| 3.4  | Simulation de G4CMP du transport des électrons (noir) dans un cristal de Ge (100) (gauche) et de Si (111) (droite) de 1,67 cm de hauteur. ....                                                         | 105 |
| 4.1  | Schéma de l'émission de phonons acoustiques dans le référentiel de Herring-Vogt                                                                                                                        | 119 |
| 4.2  | Comparaison du taux de diffusion acoustique intravallée avant et après l'amélioration. ....                                                                                                            | 120 |
| 4.3  | Comparaison de la distribution angulaire entre les phonons et les électrons lors de diffusions intravallées acoustiques dans le Ge pour différentes énergies lorsqu'on inclut la non-parabolicité..... | 122 |
| 4.4  | Comparaison de l'énergie des phonons acoustiques intravallées émis en fonction de l'angle d'émission .....                                                                                             | 123 |
| 4.5  | Spectre d'émission de l'énergie des phonons acoustiques dans le Ge.....                                                                                                                                | 128 |
| 4.6  | Nombre de diffusions IV par événement par longueur d'interaction pour l'ancien taux de diffusions IV et le nouveau taux en fonction du voltage .....                                                   | 130 |
| 4.7  | Étapes de la sélection de l'état final de l'électron lors d'une diffusion IV .....                                                                                                                     | 135 |
| 4.8  | Schéma de l'émission de phonons intervalles dans le référentiel de Herring-Vogt.                                                                                                                       | 136 |

|      |                                                                                                                                                                                               |     |
|------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 4.9  | Distribution angulaire parabolique de l'émission de phonons IV dans le Ge . . . . .                                                                                                           | 137 |
| 4.10 | Histogramme du cosinus de l'angle entre la vallée finale et le vecteur d'onde final de l'électron après le processus de sélection de l'état final du nouveau modèle de diffusions IV. . . . . | 139 |
| 4.11 | Modélisation de la trajectoire de 10 électrons dans G4CMP . . . . .                                                                                                                           | 148 |
| 4.12 | Histogramme de l'énergie totale des phonons dans G4CMP comparativement à la valeur attendue. . . . .                                                                                          | 150 |
| 4.13 | Vitesse de dérive en fonction du champ électrique. . . . .                                                                                                                                    | 151 |
| 4.14 | Densité des électrons à la surface du cristal de Si(111). . . . .                                                                                                                             | 152 |
| 4.15 | Densité des électrons à la surface du cristal du Ge(100). . . . .                                                                                                                             | 154 |
| 4.16 | Diffusion IV dans le Si pour un processus de type g (normal) et de type f (Umklapp)                                                                                                           | 158 |
| D.1  | Schéma de l'angle maximal d'émission par un électron lors de diffusions IV . . . . .                                                                                                          | 191 |
| D.2  | Schéma de la sélection de l'état final $\mathbf{k}'^*$ lors de diffusions intervallées en fonction de l'énergie de l'électron. . . . .                                                        | 192 |



## Liste des sigles et des abréviations

---

|        |                                                                                                 |
|--------|-------------------------------------------------------------------------------------------------|
| GEANT4 | Outils de simulation                                                                            |
| G4CMP  | GEANT4 physique de la matière condensée, de l'anglais <i>GEANT4 Condensed Matter Physics</i>    |
| MC     | Monte Carlo                                                                                     |
| TES    | Capteur à transition supraconductrice, de l'anglais <i>Transistor Edge Sensor</i>               |
| QET    | de l'anglais <i>Quasiparticle-trap-assisted Electrothermal-feedback Transition-edge-sensors</i> |
| NTL    | Neganov-Trofimov-Luke                                                                           |
| HV     | Herring-Vogt                                                                                    |
| IV     | Intervallée                                                                                     |
| QP     | Quasi-particule                                                                                 |

|                 |                                                                                              |
|-----------------|----------------------------------------------------------------------------------------------|
| SuperCDMS       | Recherche cryogénique de la matière sombre, de l'anglais <i>Cryogenic Dark Matter Search</i> |
| e/h             | Paire électron-trou                                                                          |
| LEEE            | Excès d'événement à basses énergies, de l'anglais <i>Low Excess Energy Events</i>            |
| Si              | Silicium                                                                                     |
| Ge              | Germanium                                                                                    |
| W               | Tungstène                                                                                    |
| Al              | Aluminium                                                                                    |
| $\Lambda$ CDM   | Modèle Lambda matière sombre froide, de l'anglais <i>Lambda Cold Dark Matter</i>             |
| FLRW            | Friedmann-Lemaître-Robertson-Walker                                                          |
| CMB             | Fond diffus cosmologique, de l'anglais <i>Cosmic Microwave Background</i>                    |
| $E_{\text{ph}}$ | Énergie totale des phonons                                                                   |

|                                               |                                                              |
|-----------------------------------------------|--------------------------------------------------------------|
| $E_{\text{R}}$                                | Énergie de recul                                             |
| $Y$                                           | Degré d'ionisation, de l'anglais <i>Ionization Yield</i>     |
| $n_{\text{eh}}$                               | Nombre moyen de paires électron-trou                         |
| $D_{\text{ac}}, D_{\text{op}}, D_{\text{iv}}$ | Potentiels de déformation acoustique, optique et intervallée |



# Remerciements

---

J'aimerais tout d'abord remercier mon directeur de recherche, Alan Robinson, pour son enthousiasme contagieux pour la physique, pour ses nombreux conseils, sa patience et ses corrections. Je souhaiterais également le remercier de m'avoir permis d'explorer la physique de la modélisation pour laquelle j'ai eu un coup de coeur.

Je voudrais aussi remercier mes nombreux collègues de SuperCDMS. En particulier, je voudrais dire merci à : Mike, Miriam, David, Warren, Stefan, Birgit, Ziqing pour leur aide et pour toutes les discussions que nous avons eues.

Merci également aux autres étudiants du groupe d'Alan : Mathieu, Jérémy, Hantz et David pour les bons moments passés ensemble.

Merci à ma mère pour son amour inconditionnel, ses encouragements et sa patience. Merci de m'avoir transmis ce que je considère être les trois qualités les plus importantes de tout physicien : être travaillant, curieux et persévérant. Merci de m'avoir soutenu dans mes études pendant toutes ces années et de m'avoir encouragé à me dépasser constamment. Merci d'avoir fait le travail surhumain de deux parents.

Merci à mon frère Simon pour sa générosité et son sens de l'humour. Merci de m'avoir fait découvrir la musique punk et pour tous les spectacles de musique que nous sommes allés voir ensemble.

Merci également à tous mes amis pour les excellents moments passés en votre compagnie. Merci en particulier à : Alexandre, Benjamin, Bogdan, Charles-Antoine, Dominic, Étienne, Geordi, Guillaume, Ian, Isaac, Jean-François, Jérémie, Karim, Kevin, Léa, Léo, Marie-Ève, Mathieu, Mathieu, Nathan, Nicolas, Thomas, Tristan et Xavier pour votre sens de l'humour, votre joie de vivre et votre générosité. Vous êtes vraiment les meilleurs amis que l'on puisse avoir.

Finalement, je voudrais remercier l'amour de ma vie, Marianne, pour son soutien «psychologique» indéfectible, ses encouragements, sa patience, son sens de l'écoute, sa gentillesse, sa curiosité et pour tout le reste. Merci de m'avoir poussé à finir ce projet, je n'y serais pas arrivé sans toi. Je t'aime!



# Introduction

---

L'univers est composé à environ 70% d'énergie sombre, 25% de matière sombre et 5% de matière ordinaire [149]. Bien que la (ou les) particule derrière la matière sombre (MS) n'ont pas encore été détectées, leurs effets gravitationnels ont été bien étudiés au cours des cent dernières années. Depuis quelques décennies, plusieurs expériences s'attèlent donc à la lourde tâche de détecter cette fameuse matière sombre, mais sans succès jusqu'à présent. Parmi ces expériences, on retrouve SuperCDMS (Super Cryogenic Dark Matter Search), une expérience de détection directe qui utilise des détecteurs cryogéniques au silicium et au germanium capables d'atteindre une résolution d'une seule paire électron-trou [27]. Cette résolution est atteinte grâce à l'amplification du signal induite par l'effet Neganov-Trofimov-Luke (NTL), lorsque les charges, soumises à un champ électrique, dérivent à l'intérieur du cristal.

Afin de mieux comprendre le transport des charges et des phonons dans ces détecteurs, SuperCDMS a développé dans les dernières années un outil de simulation appelé G4CMP [69, 21] (GEANT4 *Condensed Matter Physics*) ou GEANT4 [4, 8, 9] physique de la matière condensée en français. Cet outil modélise le transport des porteurs de charges et des phonons dans les détecteurs de SuperCDMS. Celui-ci inclut plusieurs processus physiques, comme l'accélération oblique des charges, l'émission de phonons acoustiques intravallées, un modèle simple de diffusions intervallées (IV) pour le transport des porteurs de charge. Pour les phonons, la simulation inclut le transport anisotrope, les désintégrations anharmoniques, les diffusions isotopiques et l'excitation de quasi-particules de Bogouliobov dans les fines couches supraconductrices. Malgré tous ces processus, le modèle est incomplet. Il ne permet pas de reproduire certaines des données expérimentales de SuperCDMS, telles que la forme exacte des signaux (le temps d'arrivée des phonons affecte la forme de la queue) et l'excès d'événements de basse énergie ou LEE (Low Excess Energy Events en anglais). Le but de cette thèse est d'améliorer G4CMP en incluant de nouveaux processus physiques et en ajustant ceux déjà existants, avec accent sur le transport des charges en particulier.

La modélisation a toujours joué un rôle important dans la compréhension des phénomènes expérimentaux. Elle permet d'informer l'analyse des données, la calibration, les coupures aux

signaux, etc. Il nous apparait donc important de la rendre plus exacte, non seulement pour SuperCDMS, mais aussi pour les autres branches de la physique qui ont commencé à utiliser G4CMP dans les dernières années pour modéliser, par exemple, le transport des phonons dans les télescopes MKID [134] et les effets de la radiations sur les qubits [92, 137, 140].

Au premier chapitre, nous commencerons par une revue de littérature des preuves les plus importantes historiquement de l'existence de la matière sombre. Toujours dans ce premier chapitre, nous poursuivrons avec les méthodes de détection de la matière sombre et le fonctionnement du détecteur SuperCDMS.

Au chapitre suivant, nous traiterons en détail le transport des porteurs de charges dans les semi-conducteurs, en particulier le germanium et le silicium. Nous y rappellerons, en premier, les éléments essentiels de la physique du solide. Puis nous détaillerons les différents processus de diffusions des paires électrons-trous, tels que l'émission (et l'absorption) de phonons, la recombinaison, l'ionisation d'autres charges, les effets de surface et les collisions avec les impuretés.

Au troisième chapitre, nous parlerons de la modélisation par méthode de Monte-Carlo du transport des porteurs de charge dans les semi-conducteurs [66, 64, 128, 87, 22, 108, 38, 113]. Ensuite, nous dresserons le portrait de G4CMP avant nos améliorations. Notamment, nous parlerons des processus physiques déjà implémentés et de leurs limites.

Au quatrième et dernier chapitre, nous aborderons les changements apportés à l'ancien modèle de transport des porteurs de charge de G4CMP. Les quatre principales améliorations dont nous discuterons sont : l'inclusion de la non-parabolicité de la structure électronique, l'implémentation d'un modèle de diffusions IV basé sur des principes premiers, la révision du mécanisme de diffusion électron-phonon acoustique intravallée et l'ajout de nouvelles distributions angulaires théoriques du spectre d'émission des phonons. Puis, nous comparerons notre modèle amélioré à plusieurs valeurs expérimentales, telles que la vitesse de dérive des électrons et des trous, à la position des charges aux surfaces du cristal lorsqu'accéléérées par un champ électrique et à la conservation de l'énergie des phonons NTL. Nous concluons ce chapitre en discutant des limites du modèle, même après tous ces changements et comment l'améliorer davantage dans le futur.

# Chapitre 1

---

## La matière sombre

L'univers est composé à environ 68,5% d'énergie sombre, 26,4% de matière sombre (MS) et 5,1% de matière dite ordinaire [149]. On ne connaît que peu de choses de la matière sombre, mais on peut résumer le peu que l'on connaît (ou plutôt que l'on suppose fortement) en une courte phrase : la matière sombre, froide et stable, est responsable de la structure actuelle de l'univers. Si l'on décortique la phrase précédente mot à mot, on sait qu'il s'agit de matière et donc qu'elle possède une masse (et, par conséquent, affecte la gravité). On sait aussi que cette dernière est sombre, c'est-à-dire qu'elle n'interagit pas avec les photons. De plus, on pense que la MS est froide (non relativiste) et stable (ne se désintègre pas en une ou plusieurs particules). Pour finir, on sait qu'elle est à l'origine, de par sa présence au début de l'univers, de la structure actuelle de l'univers.

### 1.1. Les preuves de son existence.

Aujourd'hui, nous n'avons toujours pas détecté la ou les particules à l'origine de la matière sombre, mais nous avons tout de même de bonnes raisons de croire que celle-ci existe bel et bien. Dans ce chapitre, nous allons voir les nombreuses indices et expériences menées depuis plus de 100 ans qui ont mené à la théorisation de cette fameuse masse invisible [42, 16]. Nous ne présenterons ici que quelques-unes des expériences les plus importantes qui ont convaincu la communauté scientifique de son existence. Il en existe bien d'autres au-delà de celles qui seront mentionnées ici, mais, par souci de concision, nous nous contenterons des plus percutantes et importantes historiquement.

#### 1.1.1. Vitesse de libération des étoiles de la Voie lactée

En 1932, Jan Oort étudia le mouvement des étoiles de notre galaxie, la Voie lactée. Plus précisément, il calcula la vitesse de ces dernières à l'aide de leur décalage Doppler. Puis, il estima la masse de notre galaxie au moyen de la luminosité des objets lumineux la

composant et du ratio masse-lumière ( $M/L$ ) bien connu. Ce ratio, couramment employé en astronomie, permet de déterminer la masse d'un objet d'après la lumière qu'il émet. Le soleil, par exemple, a un ratio  $M/L = 5,1 \times 10^3$  kg/W. Oort arriva à la surprenante conclusion que les étoiles de la Voie lactée se déplacent plus vite que la vitesse de libération de l'emprise gravitationnelle de notre galaxie et que, par conséquent, les étoiles devraient s'échapper de leur orbite. Or, dans les faits, on observe le contraire. À l'époque, il en conclut qu'environ 85% de la lumière de notre galaxie doit être obscurcie par de la poussière, ce qui fausse l'estimation de la masse de cette dernière [100].

### 1.1.2. Masse de l'amas Coma

L'année suivante, Fritz Zwicky tomba lui aussi sur un problème de «masse cachée» dans ses observations. Notamment, il calcula, également à partir de l'effet Doppler, la vitesse des galaxies composant l'amas de galaxies Coma. Il se servit ensuite du théorème du viriel pour estimer la masse de l'amas. Ce théorème, dans sa forme la plus générale, est défini de la façon suivante [26]:

$$\sum_i \frac{1}{2} m_i \overline{v_i^2} = -\frac{1}{2} \sum_i \overline{\vec{r}_i \cdot \vec{F}_i}. \quad (1.1.1)$$

Ce dernier décrit donc un système stable de particules (ou galaxies dans notre cas) de masse  $m_i$ , de vitesse  $v_i$ , situées à une position  $r_i$  et subissant une force  $F_i$ . Le terme de gauche correspond donc à l'énergie cinétique moyenne  $K$ . Dans le cas de Zwicky, il n'a considéré que la force gravitationnelle ( $F = GmM/r^2$ ) et, puisque  $F = -\nabla U$ , où  $U$  est le potentiel gravitationnel, on peut finalement réécrire le théorème du viriel sous sa forme plus moderne :

$$\langle K \rangle = -\frac{1}{2} \langle U \rangle. \quad (1.1.2)$$

Ainsi, à partir du théorème du viriel, Zwicky détermina que la masse totale de l'amas était d'environ  $M_{amas} \approx 4,5 \times 10^{13} M_\odot$  et que, comme Coma est composé d'environ 1000 nébuleuses, la masse de chaque nébuleuse est d'environ  $M_{amas} \approx 4,5 \times 10^{10} M_\odot$  [147, 148]. Par comparaison, en utilisant le ratio  $M/L$  des nébuleuses, on trouve plutôt une masse équivalente à 2% de celle estimée par Zwicky. Il en conclut que les galaxies ne représentent qu'une petite fraction de la masse totale d'un amas et qu'il doit exister une matière «cachée» ou du moins non lumineuse qui compose les amas et qu'il va appeler *Dunkle Materie* (matière sombre). Aujourd'hui, on sait qu'environ 10% de la masse des amas est compris dans les gaz intergalactiques et on a une connaissance plus précise et plus exacte de la constante de Hubble, ce qui nous permet de conclure que Zwicky s'est trompé d'environ un ordre de grandeur. Malgré tout, l'interprétation de Zwicky, soit qu'une grande partie de la matière de l'univers est sombre, reste exacte.

### 1.1.3. Vitesse de rotation des galaxies

Près de 40 ans plus tard, Vera Rubin, Kent Ford et Ken Freeman et d'autres collaborateurs étudièrent la vitesse de rotation de plusieurs dizaines de galaxies spirales [116, 117] en s'assurant de choisir des galaxies dont une moitié s'approche de la Terre et l'autre moitié s'éloigne de notre planète. À défaut de pouvoir mesurer la vitesse des étoiles dont la luminosité est trop faible, ils calculèrent plutôt la vitesse de rotation de plusieurs nuages de gaz riche en hydrogène et en hélium (qu'on retrouve autour des étoiles) qu'ils comparèrent à leur position par rapport au centre de la galaxie. La mécanique classique veut que les étoiles en orbite dans une galaxie suivent la loi suivante :

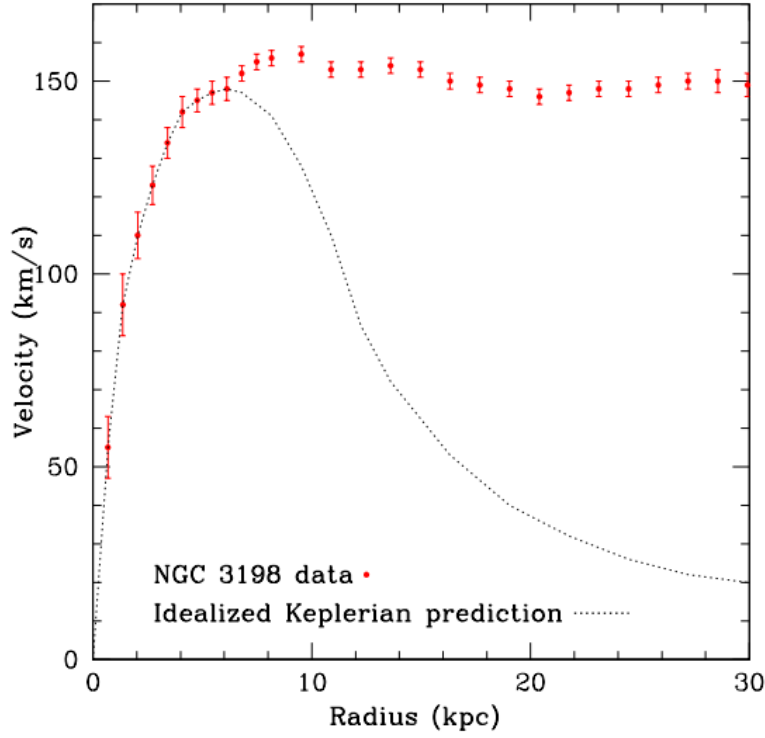
$$v(r) = \sqrt{\frac{Gm(r)}{r}}. \quad (1.1.3)$$

où  $G$  est la constante gravitationnelle,  $v(r)$  est la vitesse de rotation de l'étoile qui est située à une distance  $r$  du centre de la galaxie et  $m(r)$  est la masse comprise à l'intérieur d'une sphère de rayon  $r$ .

On peut ainsi distinguer trois cas dépendamment de la dépendance en  $r$  de la masse  $m(r)$ . Premier cas, si la masse croît en  $r$ , alors la vitesse devient constante. Deuxième cas, si la masse croît plus rapidement qu'en  $r$ , comme par exemple en  $r^2$ , alors la vitesse de rotation augmente elle aussi avec le rayon. Troisième et dernier cas, la masse reste constante et alors la vitesse de rotation diminue avec le rayon.

Dans une galaxie typique, la majorité de la matière lumineuse se trouve au centre de la galaxie et il n'y a presque pas de matière lumineuse en bordure de la galaxie. On devrait donc s'attendre à ce que la vitesse de rotation des étoiles augmente avec le rayon au début (deuxième cas) et qu'elle diminue en fonction du rayon ensuite (troisième cas, qu'on appelle aussi comportement keplérien) étant donné la répartition de la masse lumineuse. Rubin, Ford et Freeman mesurèrent plutôt une courbe qui augmente bel et bien au début, mais qui atteint ensuite un plateau et reste constante (premier cas) indiquant la présence d'une masse supplémentaire invisible à l'oeil nu. Ils en conclurent que les galaxies sont donc composées de matière cachée non lumineuse et que, dorénavant, on ne peut plus utiliser uniquement la lumière émise par une galaxie pour estimer sa masse.

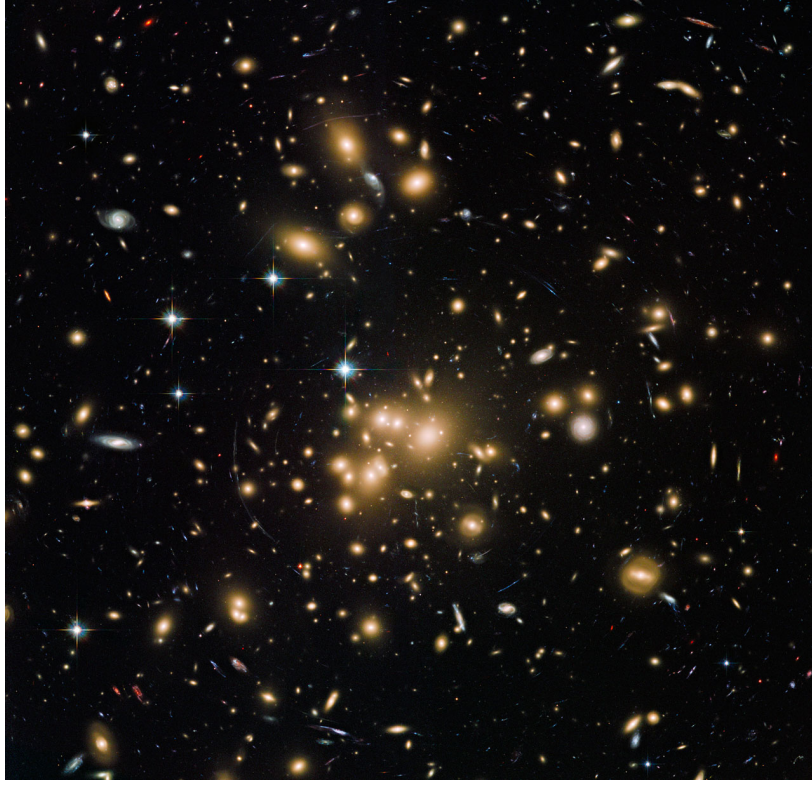
D'autres chercheurs, tels que Begeman, ont mesuré une courbe similaire [13, 42] à celle de Rubin et al. On retrouve d'ailleurs la courbe de Begeman à la figure 1.1 de même que la courbe «théorique» attendue si l'on ne tenait compte que de la matière lumineuse.



**Fig. 1.1.** Vitesse de rotation des régions d’hydrogène gazeux de la galaxie NHC 3198 avec une courbe du comportement keplérien attendu. Tiré de [13].

#### 1.1.4. Lentilles gravitationnelles

La relativité générale d’Einstein prédit que tout objet massif produit une déformation de l’espace-temps autour de lui. Cette déformation affecte la trajectoire des autres objets célestes ou particules passant près de ce dernier, y compris ceux n’ayant pas de masse, telle que les photons. C’est ainsi qu’un rayon de lumière s’aventurant proche d’un objet massif sera dévié de sa trajectoire et suivra la courbure de l’espace-temps engendré par le champ gravitationnel. On appelle ce phénomène une lentille gravitationnelle. Comme il faut une très grande masse pour courber suffisamment la trajectoire de la lumière, on mesure généralement les lentilles gravitationnelles causées par des amas de galaxies qui sont situés devant des objets lumineux plus distants, tel que des quasars ou des galaxies. La courbure de la lumière se présente généralement sous la forme d’arcs de cercle lumineux autour de l’amas de galaxies. La première détection de cette forme de lentilles gravitationnelles revient à Walsh et al. en 1979 [138]. Dix ans plus tard, soit en 1989, Lynds et al. mesurèrent eux aussi le même type d’arc autour d’amas de galaxies. Un exemple de ces arcs pris en photo par le télescope Hubble autour de l’amas Abell 1689 se trouve à la figure 1.2.



**Fig. 1.2.** Arcs de cercle de l'amas de galaxies Abell 1689. Photo prise par le télescope Hubble [61].

Comme la courbure de la lentille gravitationnelle dépend de la masse de l'amas, il est possible de lier le rayon de l'arc lumineux,  $\theta_E$ , à la masse  $M$  de la lentille (l'amas) :

$$\theta_E = \sqrt{\frac{4GMd_{LS}}{c^2d_Ld_S}}. \quad (1.1.4)$$

où  $c$  est la vitesse de la lumière et  $d_{LS}$ ,  $d_L$  et  $d_S$  sont les distances angulaires entre la source et la lentille, entre l'observateur et la lentille et entre l'observateur et la source respectivement. En 1990, Bergmann et al. [15] calculèrent la masse de l'amas Abell 370 à l'aide de la méthode décrite plus haut et trouvèrent une grande disparité entre la masse calculée et la masse estimée par le ratio  $M/L$ , indiquant la présence encore une fois de matière sombre. Il en est de même pour Taylor et al. [133] qui arrivèrent à une conclusion similaire en 1998 pour l'amas Abell 1689.

## 1.1.5. Rayonnement fossile

### 1.1.5.1. Modèle $\Lambda$ CDM.

Pour bien comprendre comment le rayonnement fossile nous permet de déduire la quantité de matière sombre dans l'univers, il faut, en premier, se tourner vers la relativité générale de Einstein et sa fameuse équation des champs [53]:

$$R_{\mu\nu} - \frac{1}{2}g_{\mu\nu}R + \Lambda g_{\mu\nu} = \frac{8\pi G}{c^4}T_{\mu\nu}. \quad (1.1.5)$$

où  $R_{\mu\nu}$  et  $R$  sont le tenseur et le scalaire de Ricci respectivement,  $g_{\mu\nu}$  la métrique,  $\Lambda$  la constante cosmologique et  $T_{\mu\nu}$  le tenseur masse-énergie. Une solution (métrique) exacte à l'équation de Einstein (1.1.5) plus haut pour un univers homogène et isotrope (les lois de la physique sont les mêmes, peu importe l'endroit et la direction regardée) fut proposée par Friedmann-Lemaître-Robertson-Walker (FLRW) :

$$c^2 ds^2 = c^2 dt^2 - a(t)^2 \left( \frac{dr^2}{1 - kr^2} + r^2 d\theta^2 + r^2 \sin^2 \theta d\phi^2 \right). \quad (1.1.6)$$

où  $ds$  est un intervalle d'espace-temps,  $t$  le temps,  $a(t)$  le facteur d'échelle (le taux d'expansion relatif de l'univers) et  $k$  décrit la courbure de l'univers et peut prendre les trois valeurs suivantes :  $-1$  (univers ouvert),  $0$  (univers plat) ou  $+1$  (univers fermé). En remplaçant la métrique de FLRW dans l'équation de Einstein, on trouve la solution suivante :

$$H^2 = \frac{8\pi G\rho}{3} - \frac{kc^2}{a^2} + \frac{\Lambda c^2}{3}. \quad (1.1.7)$$

$$2\frac{\ddot{a}}{a} + \left(\frac{\dot{a}}{a}\right)^2 = -\frac{8\pi Gp}{3c^2} - \frac{kc^2}{a^2} + \Lambda c^2. \quad (1.1.8)$$

où  $H$  est le paramètre de Hubble défini par  $H = \dot{a}/a$  (avec  $\dot{a}$  représentant la dérivée par rapport au temps du facteur d'échelle  $a$ ),  $\rho$  est la densité matière énergie de l'univers et  $p$  la pression de l'univers. Aujourd'hui (qu'on définit par le temps  $t_0$ ), le paramètre de Hubble vaut :

$$H_0 = H(t_0) = 100 h \text{ km s}^{-1} \text{ Mpc}^{-1}. \quad (1.1.9)$$

où  $h = 0.674 \pm 0.005$  [149] est la constante de Hubble adimensionnée. Ce paramètre est utilisé, car, historiquement, la valeur de Hubble était beaucoup moins précise. On définit la densité critique  $\rho_c$  comme la densité de l'univers aujourd'hui pour le cas où  $k = \Lambda = 0$  :

$$\rho_c = \frac{3H_0^2}{8\pi G}. \quad (1.1.10)$$

On peut ensuite définir une densité relative (au temps  $t_0$ ) pour chacun des termes de l'équation 1.1.7 par rapport à la densité critique :

$$\Omega_i = \frac{\rho_i(t_0)}{\rho_c}. \quad (1.1.11)$$

où les  $\rho_i$  représentent les composantes de la densité totale  $\rho_{totale}$ , c'est-à-dire les contributions venant de la radiation  $\rho_R$ , de la matière baryonique  $\rho_B$ , de la matière sombre froide («cold dark matter» en anglais)  $\rho_c$ , de la constante cosmologique  $\rho_\Lambda = \Lambda c^2/8\pi G$  et de la courbure de l'univers  $\rho_k = 3kc^2/8\pi G$ . On regroupe la densité de matière sombre et de matière baryonique sous un même terme (densité de matière) :  $\rho_M = \rho_B + \rho_c$ . De même, le  $\rho$  de l'équation 1.1.7 peut se diviser en  $\rho = \rho_M + \rho_R$ . Au final, on peut réécrire l'équation de FLRW en fonction des densités relatives  $\Omega_i$ , mais à un certain moment  $a(t)$  en tenant compte de la dépendance au facteur d'échelle de la matière ( $\propto a^{-3}$ ) et de la radiation ( $\propto a^{-4}$ ) :

$$\frac{H^2}{H_0^2} = \Omega_R a^{-4} + \Omega_M a^{-3} + \Omega_k a^{-2} + \Omega_\Lambda. \quad (1.1.12)$$

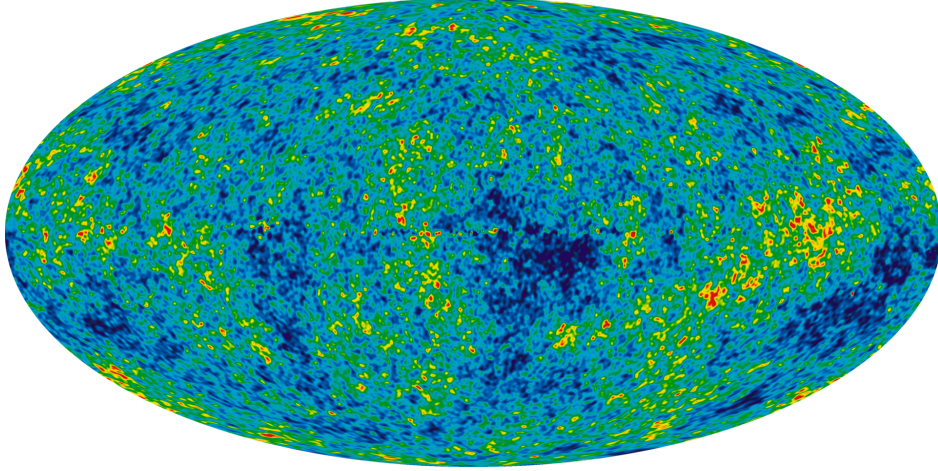
Ainsi, les  $\Omega_i$  décrivent quelle proportion de la densité d'énergie totale de l'univers vient de la composante  $i$ . Naturellement, on s'attend à ce que la somme de toutes les composantes redonne l'unité :  $\sum_i \Omega_i = 1$ . On peut mesurer chacune de ces contributions, notamment celle venant de la matière sombre, à partir du fond diffus cosmologique (FDC) ou en anglais «Cosmic Microwave Background» (CMB).

#### 1.1.5.2. CMB.

Le rayonnement fossile nous vient de 380 000 ans après le big bang (qu'on appelle l'époque de la recombinaison). En effet, peu de temps après le big bang, l'univers était un plasma très chaud et dense de protons, électrons et photons. À cause de la très forte densité de l'univers, les photons étaient constamment diffusés sur les particules chargées libres (électrons et protons). L'univers prit ensuite de l'expansion et se refroidit suffisamment pour que les électrons et les protons puissent se recombiner en atomes d'hydrogène neutre (époque de la recombinaison). Cette recombinaison ne fut possible que 380 000 ans après le big bang, car l'énergie moyenne des photons eut refroidi suffisamment (par l'entremise de l'expansion de l'univers) pour être inférieure à l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène. Les photons furent alors capables de se promener librement dans l'univers sans entrer en collision avec les autres particules. Ce sont ces photons nous venant de la recombinaison qu'on appelle le rayonnement fossile. Aujourd'hui, ces derniers ont refroidi jusqu'à une température de 2,73 K [39] et agissent comme un spectre de corps noir homogène et isotrope. Le rayonnement fossile fut découvert en 1964 au laboratoire Bell par Arno Penzias et Robert Wilson qui mesurèrent un bruit de fond d'onde radio 100 fois plus élevé que prévu dans toutes les directions et à

tout temps de la journée, même après avoir éliminé toutes les sources d'onde radio venant de la terre [104].

Le CMB est extrêmement homogène (une température d'environ 2.73 K partout dans le ciel), mais comporte tout de même sa part d'inhomogénéités qu'on appelle aussi anisotropies. Ces anisotropies provoquent de petites fluctuations de l'ordre de  $30\mu\text{K}$  dans la température du CMB. Elles sont causées, à grande échelle, par l'effet Sachs-Wolfe alors qu'à petite échelle, elles sont plutôt causées par les oscillations acoustiques des baryons. Les fluctuations de température sont donc dépendantes de la densité de baryons au moment de la recombinaison. On peut d'ailleurs extraire cette densité de baryons au moyen du spectre de puissance du CMB comme nous le verrons dans les lignes qui suivent. Finalement, on peut voir une carte du CMB à la figure 1.3.



**Fig. 1.3.** Carte du rayonnement fossile (CMB) de l'expérience Wilkinson Microwave Anisotropy Probe (WMAP) [14]

On peut décomposer la carte des températures du CMB en termes d'harmoniques sphériques de la manière suivante :

$$T(\theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{l,m} Y_{l,m}(\theta, \phi). \quad (1.1.13)$$

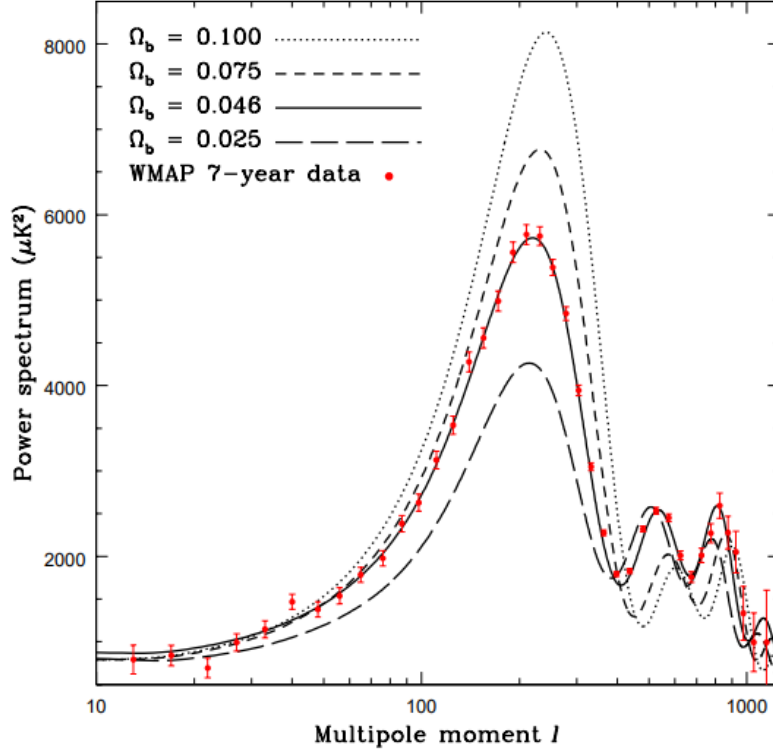
où  $a_{l,m}$  sont les amplitudes des différents modes et  $Y_{l,m}(\theta, \phi)$  les harmoniques sphériques. La variation en température (ou spectre de puissance) peut être écrite ainsi :

$$\Delta T^2 = \frac{l(l+1)C_l}{2\pi}. \quad (1.1.14)$$

avec les coefficients suivants :

$$C_l = \frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^l |a_{lm}|^2. \quad (1.1.15)$$

Un graphique du spectre de puissance en fonction du moment multipolaire  $l$  se trouve à la figure 1.4. On peut analyser ce dernier pour extraire les densités relatives de chaque composante de la densité d'énergie-masse de l'univers.



**Fig. 1.4.** Spectre de puissance des fluctuations de température du rayonnement fossile CMB en fonction du moment multipolaire  $l$ . Tiré de [67]

En effet, la position angulaire du premier pic nous indique que l'univers est plat alors que la hauteur relative des autres pics par rapport au premier nous permet de déduire la fraction des  $\Omega_i$ . Les résultats les plus récents de Planck [2] donnent, par exemple :

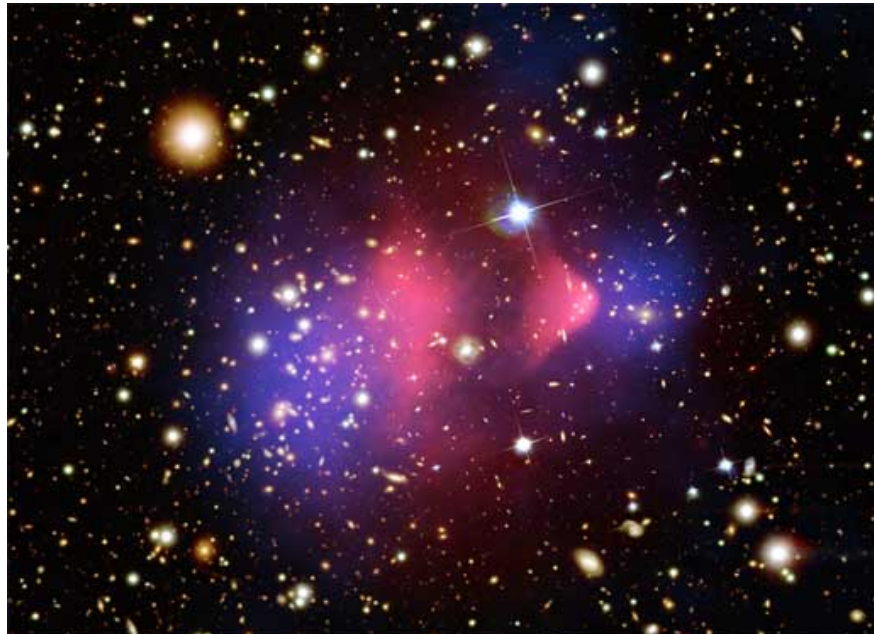
|                  |                       |
|------------------|-----------------------|
| $\Omega_b h^2$   | $0,02212 \pm 0,00022$ |
| $\Omega_c h^2$   | $0,1206 \pm 0,0021$   |
| $\Omega_\Lambda$ | $0,679 \pm 0,013$     |
| $\Omega_m$       | $0,321 \pm 0,013$     |

**Tableau 1.1.** Résultats de Planck 2018 sur les densités masse-énergie de l'univers.

Les données de Planck corroborent donc les autres expériences. L'univers est bel et bien composé à environ 68% d'énergie sombre et à 32% de matière.

### 1.1.6. Amas du boulet

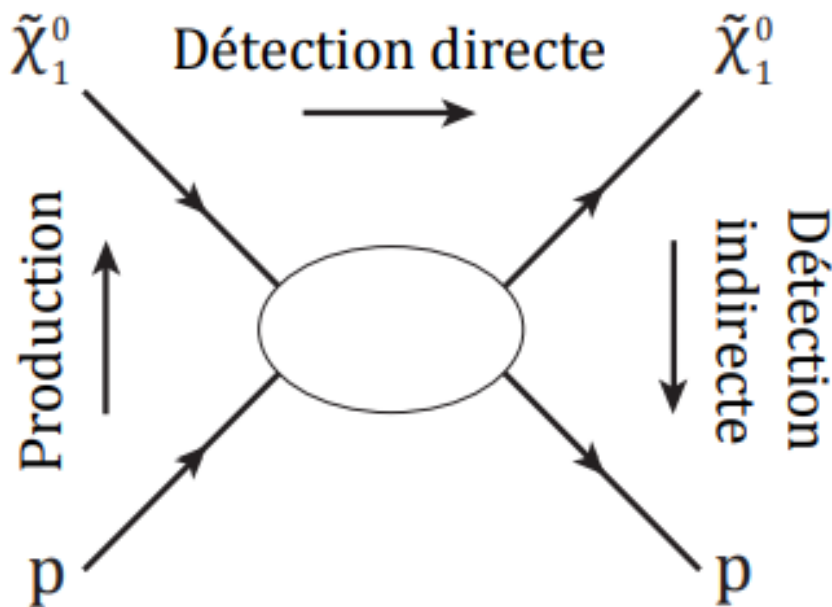
L'amas du boulet est souvent considéré comme «l'artillerie lourde» des preuves de la matière sombre de par ses conclusions sans équivoque. L'amas du boulet fait référence, en premier lieu, à la collision qui a eu lieu entre le sous-amas (qu'on appelle le boulet) et l'amas de galaxies 1E 0657-56. Comme les galaxies sont très distancées entre elles, aucune d'entre elles n'est entrée en collision lorsque les deux amas se sont croisés. Toutefois, la majorité de la masse baryonique d'un amas se trouve sous forme gazeuse entre les galaxies. Ce sont les particules de ce gaz intergalactique des deux amas qui s'entrechoquèrent lors de la collision. Le gaz se réchauffa jusqu'à une température de  $10^6$  K ce qui émit une grande quantité de rayons X. En 2006, le télescope Chandra X-Ray Observatory de la NASA observa ce rayonnement, qu'il compara aux effets de lentilles gravitationnelles du même amas [33]. Les rayons X nous indiquent ainsi l'emplacement de la matière baryonique de l'amas alors que les effets de lentille gravitationnelle nous renseignent plutôt sur la position de la masse totale. Le télescope Chandra X-Ray Observatory trouva une importante disparité entre la région de l'amas émettant des rayons X (matière baryonique) et la région où la majorité de la masse se trouve, confirmant qu'il existe une grande quantité de matière non baryonique à l'intérieur de cet amas. On retrouve une image de la collision à la figure 1.5



**Fig. 1.5.** Amas du boulet. En rouge, la région émettant des rayons X et en bleu, la position de la matière sombre comme prédit par la méthode des lentilles gravitationnelles.

## 1.2. Détection de la matière sombre

Nous avons vu dans la section précédente plusieurs indices qui pointent toutes vers la présence de matière sombre dans l'univers. Nous n'avons toujours pas, à ce jour, observé la ou les particules derrière cette matière sombre. Nous n'avons vu que ses effets gravitationnels, ce qui fait que l'on ne connaît que très peu de choses sur la ou les particules. On ne connaît pas, par exemple, sa masse ou son spin. Plusieurs modèles différents de particules ont été proposés, tels que l'axion [10, 135, 70] ou le WIMP [149] (*Weakly Interacting Massive Particle* ou particule massive interagissant faiblement en français). En l'absence de données quant aux propriétés de cette particule hypothétique, plusieurs méthodes de détection différentes furent développées pour couvrir l'ensemble des possibilités.



**Fig. 1.6.** Diagramme de Feynman représentant les trois méthodes de détection de la matière sombre, soit directe, indirecte et production.

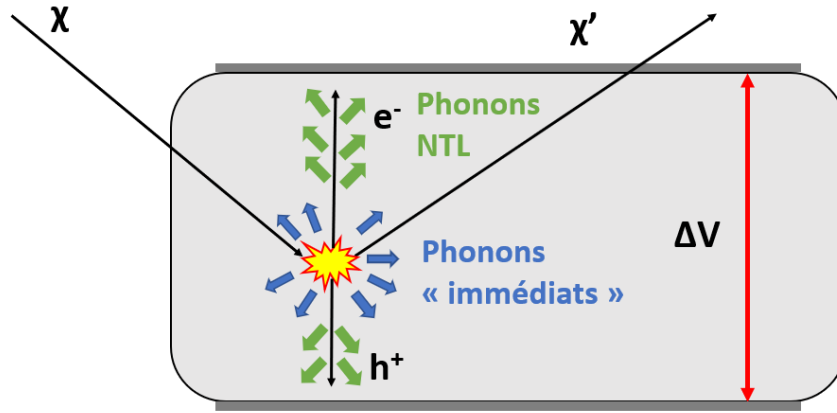
La détection de la matière sombre peut se diviser en trois catégories : détection directe, indirecte et production. Dans la méthode directe, la matière sombre est diffusée sur de la matière ordinaire. Notre expérience, SuperCDMS (Super Cryogenic Dark Matter Search), utilise l'approche directe pour tenter de détecter la matière sombre. Nous reparlerons du fonctionnement de ses détecteurs à la prochaine section. Dans la méthode indirecte, la matière sombre s'annihile avec elle-même et produit de la matière ordinaire. Pour ce qui est de la production, la matière ordinaire collisionne ensemble et produit de la matière sombre. On représente souvent ces trois moyens de détection au moyen d'un diagramme de Feynman

(voir figure 1.6). La détection directe se lit de gauche à droite, la détection directe du haut vers le bas et la production du bas vers le haut.

### 1.3. Détecteurs de SuperCDMS

Dans cette section, nous aborderons le fonctionnement des détecteurs cryogéniques de matière sombre de SuperCDMS. On peut séparer sommairement ces détecteurs en trois parties : le cristal en silicium (Si) ou en germanium (Ge), la fine couche d'aluminium (Al) et le TES (*Transition Edge Sensor*) en tungstène (W). Des phonons athermiques sont créés dans le cristal à la suite d'un dépôt d'énergie initiale et de l'accélération des charges sous l'effet d'une différence de potentiel. L'aluminium supraconducteur agit ensuite comme un absorbeur de phonons, libérant des quasi-particules de Bogolioubov (QP) qui seront ensuite piégées dans la partie en tungstène, maintenu dans la région de transition entre l'état supraconducteur et normal. Ces QP réchaufferont légèrement le TES, le sortant de son état de transition, engendrant un grand changement de résistance électrique et menant à un signal mesurable. On regroupe souvent la partie en aluminium et en tungstène sous le nom de QET (*Quasiparticle-trap-assisted Electrothermal-feedback Transition-edge-sensors*). Parlons en plus de détails, à commencer par le cristal, de ces parties du détecteur de SuperCDMS.

#### 1.3.1. Le cristal des détecteurs de SuperCDMS



**Fig. 1.7.** Schéma de la création de phonons immédiats et de paires électron-trou lors du dépôt d'énergie initiale survenant de la collision d'une particule avec le cristal de Si ou de Ge des détecteurs de SuperCDMS.

La grosseur du cristal et le type de matériau (silicium ou germanium) varient selon le modèle de détecteur. Malgré tout, ils ont essentiellement les mêmes propriétés. Lorsqu'une particule de MS ou toute autre particule interagit avec le cristal, celle-ci dépose une partie de son énergie. Ceci a pour effet de produire un grand nombre de phonons, que nous appellerons phonons «immédiats», et d'exciter un certain nombre de paires électron-trou. Ces paires dérivent ensuite vers les extrémités des faces du détecteur en raison de la différence de potentiel appliquée au substrat. Les électrons dérivent vers la face positive et les trous vers la face négative. Pendant leur déplacement, les charges produisent d'autres phonons athermiques qu'on appelle phonons de Neganov-Trofimov-Luke (NTL) [86, 97]. La figure 1.7 illustre ce principe.

Par conservation de l'énergie, ces phonons NTL ont nécessairement une énergie totale égale à l'énergie potentielle due à la différence de potentiel, soit la charge totale multipliée par le potentiel électrique (nombre de paires électron-trou  $\cdot e \cdot V$ ). Ainsi, l'énergie totale des phonons produits par la collision initiale de la particule est :

$$E_{ph} = E_R + n_{eh} \cdot e \cdot V. \quad (1.3.1)$$

où  $E_R$  est l'énergie de recul déposée par la particule,  $n_{eh}$  le nombre de paires électrons-trous,  $e$  la charge de l'électron et  $V$  la tension appliquée au détecteur. De plus, le nombre moyen de paires électron-trou produites est donné par :

$$n_{eh} = Y \frac{E_R}{\epsilon_{eh}}. \quad (1.3.2)$$

où  $Y$  est le degré d'ionisation [84] et  $\epsilon_{eh}$  est l'énergie moyenne requise pour exciter une paire électron-trou. Dans le Si, par exemple, cette valeur est de 3,7 eV<sup>1</sup> [118, 25, 31, 120, 78, 103, 85] alors que dans le Ge, elle est de 2,96 eV [32, 139]. Pour des collisions électroniques,  $Y = 1$  alors que pour des collisions nucléaires, le degré d'ionisation est compris entre 0 et 1. Enfin, on peut réécrire l'équation 1.3.1 comme :

$$E_{ph} = E_R \left( 1 + \frac{Y \cdot e \cdot V}{\epsilon_{eh}} \right). \quad (1.3.3)$$

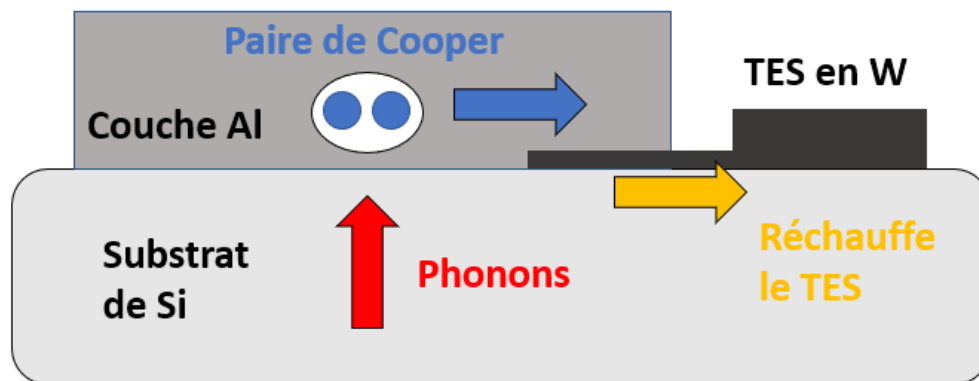
En appliquant une grande différence de potentiel électrique, on peut donc amplifier l'énergie des phonons NTL et ainsi mesurer un très petit nombre de paires électron-trou. En finissant, il est important de noter que les charges, en accélérant sous l'effet du champ électrique, peuvent en exciter d'autres ou devenir piégées. Ces deux processus affectent le nombre de charges dans le cristal. L'énergie totale des phonons est donc moindre que la formule 1.3.3 si un piégeage a lieu et supérieure si une excitation d'une autre charge s'est produite.

---

<sup>1</sup>Les détecteurs SuperCDMS opèrent à des températures de quelques dizaines de mK où l'énergie moyenne pour créer une paire électron-trou dans le silicium est environ 3,7 eV contrairement à 3,62 eV à 300 K.

### 1.3.2. Fonctionnement du QET

Par la suite, l'énergie des phonons est récoltée par un capteur QET. On retrouve un schéma du QET à la figure 1.8.



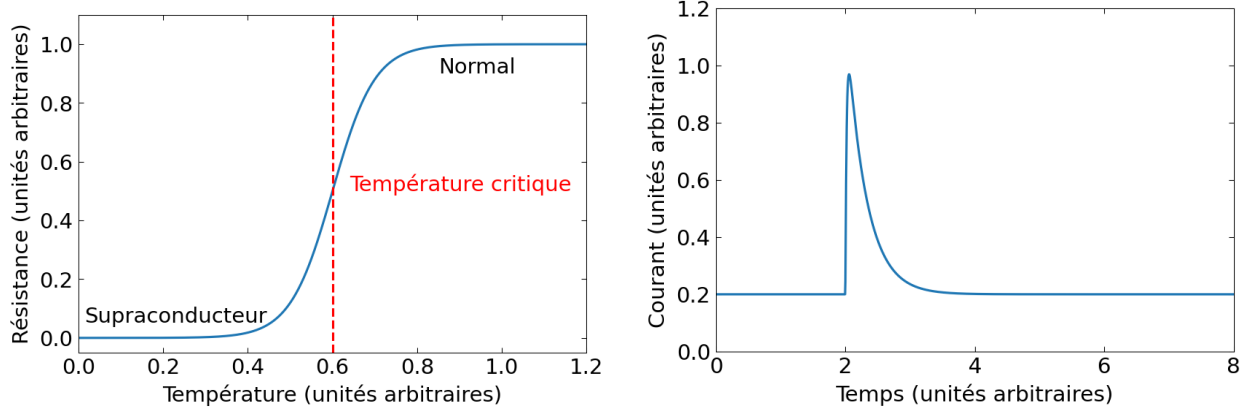
**Fig. 1.8.** Schéma du fonctionnement du QET (*Quasiparticle-trap-assisted Electrothermal-feedback Transition-edge-sensors*. Les phonons athermiques NTL brisent les paires de Cooper de la fine couche supraconductrice d'aluminium, menant à l'excitation de quasi-particules de Bogolioubov. Ces dernières sont alors piégées dans le W où elles déposent leur énergie sous forme de chaleur, réchauffant le TES en W.)

Le mode de fonctionnement du QET est le suivant : une mince couche d'aluminium supraconductrice est placée sur le substrat de silicium et est refroidie, comme l'ensemble du détecteur, à une température de  $\approx 50$  mK grâce à un réfrigérateur à dilution. Les phonons produits plus tôt dans le cristal se déplacent vers la couche d'aluminium où ils sont absorbés par les paires de Cooper si leur énergie est supérieure à deux fois l'énergie de gap de l'aluminium supraconducteur ( $2\Delta$ ). En étant absorbé, le phonon va briser ces paires de Cooper et exciter des quasi-particules de Bogolioubov. Ces dernières dérivent ensuite vers le tungstène où elles seront piégées de par l'énergie de gap du tungstène plus petite que celle de l'aluminium [114]. Les QP, piégées dans le tungstène, finissent par y déposer leur énergie sous forme de chaleur [75].

### 1.3.3. Fonctionnement du TES

Ces dépôts d'énergie sont très petits; c'est pourquoi on utilise un TES pour les mesurer. Le TES est refroidi et maintenu à la limite de sa température critique grâce à un très faible courant électrique, de sorte qu'un tout petit dépôt de chaleur de la part des phonons et des

QP réchauffe suffisamment le tungstène pour le faire sortir de l'état supraconducteur. Il en résulte alors une grande variation dans la résistance électrique que l'on peut facilement mesurer et ainsi déterminer l'énergie déposée par les phonons. La figure 1.9 montre de manière schématique l'état de transition du W et la forme des signaux qui résultent du réchauffement du TES. Lorsque le TES se réchauffe et sa résistance augmente, cela réduit la puissance dissipée par effet Joule, ce qui tend à ramener le TES vers son point de fonctionnement, d'où l'acronyme de rétroaction électrothermique négative dans QET.



(a) Schéma de la température critique du TES (b) Exemple de signal lors d'un changement de résistance du TES

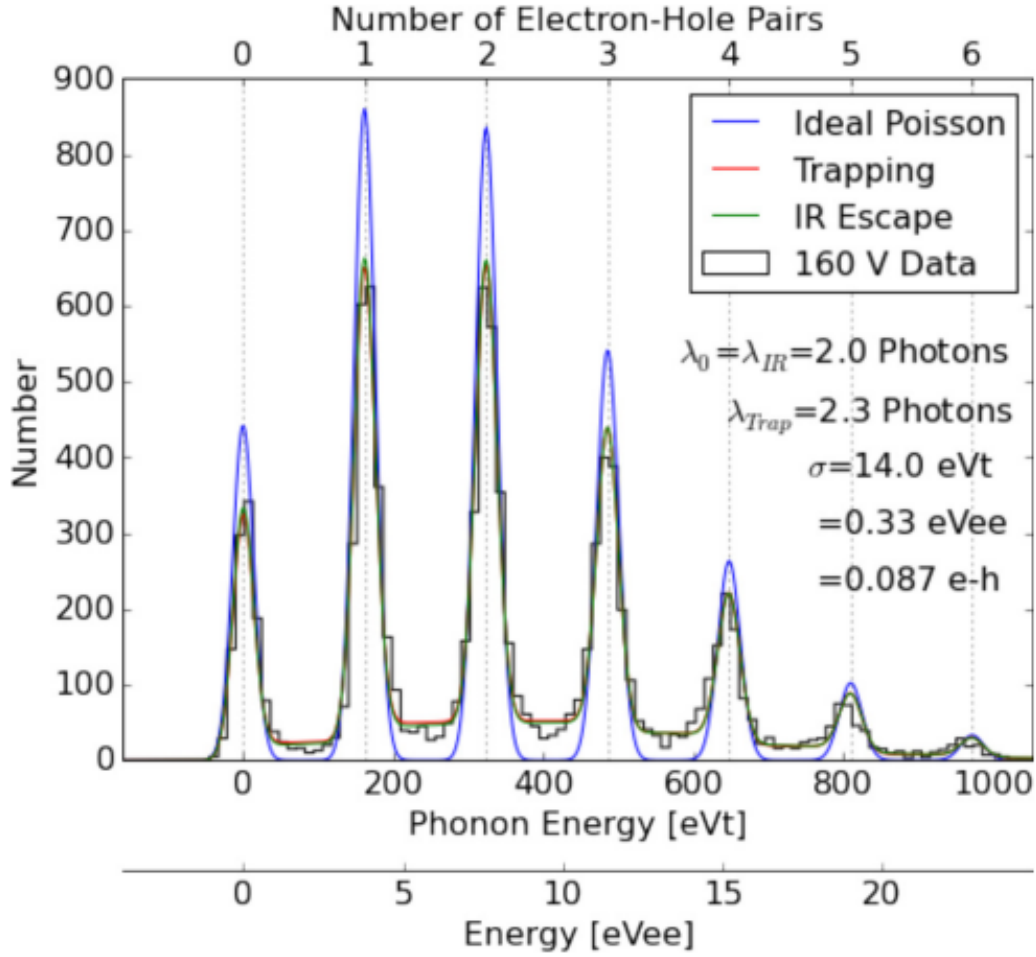
**Fig. 1.9.** Schéma du fonctionnement du TES (*Transition Edge Sensor*). Lorsqu'un dépôt d'énergie réchauffe le TES, il sort de sa région de transition entre son état supraconducteur et normal, engendrant une grande variation de résistance (à gauche). Cela engendre à son tour un signal dans les détecteurs de SuperCDMS (à droite).

### 1.3.4. Modélisation du détecteur

Depuis 2017, SuperCDMS est capable d'atteindre une résolution d'une seule paire électron-trou [115, 59] comme on peut le voir à la figure 1.10. Dans ce graphique, un phonon de 160 eVt<sup>2</sup> correspond au signal d'une seule paire électron-trou ( $e/h$ ), pour une tension de 160 V et pas ou plutôt presque pas d'énergie de recul. Les signaux entre les pics correspondent aux événements de piégeage de charge ou d'ionisation pour lesquelles le nombre de charges a fluctué pendant leur accélération.

Malgré une aussi bonne résolution et un seuil de détection aussi bas, SuperCDMS ne mesure que l'énergie des phonons. Ses détecteurs ne mesurent pas la trajectoire des charges.

<sup>2</sup>Les unités eVt représentent l'énergie totale des phonons soit l'énergie de recul nucléaire (nulle pour les photons) plus l'énergie des phonons de NTL.



**Fig. 1.10.** Distribution de l'énergie des phonons d'un détecteur au Si de 1cm x 1cm x 4mm et opérant à 35 mK. Données de calibration prises avec un laser monochromatique pulsé de 650 nm (1,91 eV) et une différence de potentiel de 160V. Tiré de [115]. Les unités eVee représentent l'énergie déposée lors d'une collision électronique.

Il y a toutefois un moyen d'estimer leur trajectoire : la modélisation. Celle-ci permet de simuler le transport des charges et des phonons émis par ces dernières. Au fil des ans, SuperCDMS a développé plusieurs outils de simulation pour mieux comprendre la microphysique de ses détecteurs. Dans le cadre de cette thèse, nous nous intéresserons en particulier à l'outil de simulation G4CMP (*GEANT4 Condensed Matter Physics*) qui modélise par méthode de Monte-Carlo le transport des charges et des phonons dans des cristaux cryogéniques. Nous chercherons à l'améliorer au fil de cette thèse afin qu'il rende encore plus compte de la réalité physique. Nous sommes privilégiés d'avoir des instruments avec une précision d'une seule paire électron-trou. Cela nous permet de confronter nos observations expérimentales aux modèles théoriques que sont les modélisations et voir si celles-ci sont robustes.

# Chapitre 2

---

## Transport des porteurs de charges et des phonons dans un semi-conducteur

Les détecteurs cryogéniques de matière sombre de SuperCDMS au silicium et germanium sont des machines complexes faisant intervenir beaucoup de concepts de la physique du solide [27, 112]. Pour en comprendre le fonctionnement, il est indispensable de maîtriser des notions telles que les paires électron-trou, les phonons, les paires de Cooper et bien d'autres quasi-particules. Comme cet ouvrage vise à modéliser le comportement de ces détecteurs, une compréhension approfondie de ces phénomènes est essentielle. Plus particulièrement, cette thèse s'intéresse au transport des porteurs de charge, c'est-à-dire au déplacement des électrons et des trous, dans les cristaux de Si et de Ge de SuperCDMS à des températures cryogéniques.

Dans ce chapitre, nous commencerons avec un résumé des éléments importants du transport des porteurs de charges et des phonons dans un semi-conducteur, notamment le théorème de Bloch et la théorie des bandes. Nous attaquerons ensuite les mécanismes de diffusions des électrons et des trous : la diffusion électron-phonon, les collisions avec les impuretés, les processus de surface, la recombinaison et la création de paires  $e^-h^+$  ainsi que les interactions avec d'autres porteurs de charge.

### 2.1. Théorème de Bloch

Dans un cristal parfait, les atomes du réseau cristallin, de par leur position régulière et périodique, génèrent un potentiel lui aussi périodique de la forme suivante :

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r}). \quad (2.1.1)$$

où  $\mathbf{R}$  est un vecteur du réseau de Bravais [11, 91, 71]. L'équation de Schrödinger d'un seul électron placé dans un tel réseau cristallin est alors :

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + U(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.1.2)$$

où  $\hbar$  est la constante de Planck réduite,  $E$  l'énergie,  $\psi(\mathbf{r})$  la fonction d'onde de l'électron et  $m_0$  sa masse. La solution à cette équation est connue sous le nom de théorème de Bloch en hommage au physicien qui l'a découverte [20]. La fonction d'onde  $\psi(\mathbf{r})$  est composée d'une onde plane et d'une fonction périodique  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  de même périodicité,  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , que le potentiel  $U(\mathbf{r})$  :

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.1.3)$$

où  $n$  est l'indice de la bande (sujet de la prochaine section),  $\mathbf{k}$  est le vecteur d'onde de l'électron et  $\hbar\mathbf{k}$  sa quantité de mouvement dans le cristal ou quasi-quantité de mouvement. Cette forme est similaire à la solution à l'équation de Schrödinger de l'électron libre, mais à laquelle on ajoute une fonction périodique  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ . Dans le cas de l'électron libre,  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  et l'on retrouve la formule classique de la quantité de mouvement lorsque l'on multiplie cette expression par  $\hbar$ .

Le vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  n'est pas unique dans le sens où il peut aussi s'écrire comme  $\mathbf{k} + \mathbf{G}$ , où  $\mathbf{G}$  est un vecteur du réseau réciproque. En effet, l'onde plane et la fonction  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  sont aussi périodiques en  $\mathbf{k}$  :

$$e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.1.4)$$

Pour le reste du présent document, nous nous limiterons, sauf cas contraire, à la première zone de Brillouin, soit la cellule primitive dans l'espace réciproque et dans laquelle chaque valeur de  $\mathbf{k}$  ne correspond qu'à un et à un seul vecteur ( $\mathbf{G} = 0$ ).

En résumé, l'onde de Bloch décrit un électron dans un solide avec un potentiel périodique, tel que le silicium ou le germanium.

## 2.2. Théorie des bandes

La théorie des bandes décrit la relation entre l'énergie des électrons (et des trous) à l'intérieur d'un solide et leur quantité de mouvement. Elle permet également de définir les valeurs d'énergies possibles et celles interdites. La théorie des bandes porte aussi le nom de relation de dispersion ou structure de bande et on la dénote par  $E_n(\mathbf{k})$ .

Le concept de bandes apparaît d'ailleurs dans l'équation de Schrödinger 2.1.2 si l'on remplace la fonction d'onde par une onde de Bloch :

$$\begin{aligned}
E_n(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \left(\frac{-\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + U(\mathbf{r})\right)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\
&= \frac{-\hbar^2}{2m_0}\nabla\left(i\mathbf{k}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\nabla u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\right) + U(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\
&= \frac{-\hbar^2}{2m_0}\left(-\mathbf{k}^2e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + 2i\mathbf{k}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\nabla u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\nabla^2 u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\right) \\
&\quad + U(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \tag{2.2.1} \\
&= \frac{\hbar^2}{2m_0}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}(-i\nabla + \mathbf{k})^2 u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\
\Rightarrow E_n(\mathbf{k})u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \left[\frac{\hbar^2}{2m_0}(-i\nabla + \mathbf{k})^2 + U(\mathbf{r})\right]u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\
&= \hat{H}_{\mathbf{k}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}).
\end{aligned}$$

noindent Le reste de l'équation est impossible à résoudre en l'absence de la forme exacte du potentiel  $U(\mathbf{r})$ , mais on peut tout de même dégager quelques conclusions de ce développement mathématique. La première est que la relation de dispersion  $E_n(\mathbf{k})$  décrit un ensemble continu d'énergie (une bande) et ces valeurs d'énergie sont les valeurs propres de  $\hat{H}_{\mathbf{k}}$  associées aux fonctions  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ . La deuxième conclusion nous renseigne sur la périodicité en  $\mathbf{k}$  de la relation de dispersion, qui est la même que l'onde de Bloch  $E_n(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = E_n(\mathbf{k})$ . La troisième et dernière conclusion est plus subtile et concerne la quantité de mouvement. On remarque que la quantité de mouvement  $\mathbf{p}$  de la fonction périodique  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  est formée de deux termes, soit  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla + \hbar\mathbf{k}$  où le premier terme est la quantité de mouvement habituelle, alors que le deuxième terme correspond à la quantité de mouvement de l'électron dans le réseau réciproque du cristal ou quasi-quantité de mouvement. Nous compléterons plus tard la différence entre ces quantités de mouvement dans la section 2.2.3.

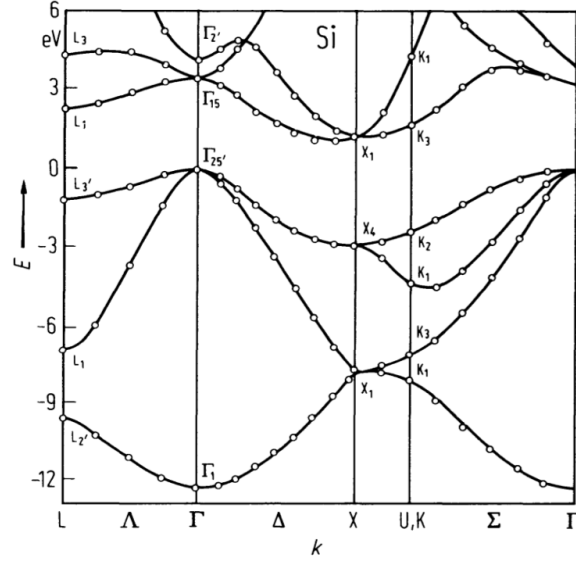
D'un point de vue moins mathématique, on peut comprendre comment le phénomène de bande apparait naturellement dans des matériaux condensés en partant d'un simple atome isolé. Ce dernier a des niveaux d'énergies bien définis et discrets que peuvent avoir ses électrons. Quand on rapproche un deuxième atome de même élément du premier, leurs orbitales se chevauchent. Par le principe d'exclusion de Pauli, ces deux orbitales de même énergie vont se transformer en deux orbitales avec chacune une énergie différente, mais proche [46, 58]. Le principe est comparable dans un cristal où l'on n'a pas 2, mais environ  $10^{22}$  atomes. Les niveaux d'énergie discrets des atomes s'y séparent en autant de niveaux qu'il y a d'atomes à cause du chevauchement des orbitales. Ces nouveaux états sont séparés par une différence d'énergie infinitésimale théorique (généralement de l'ordre de  $\approx 10^{-22}$

eV) [49, 24, 60]. Cet espacement est si petit qu'on peut alors parler de bandes d'énergies continues.

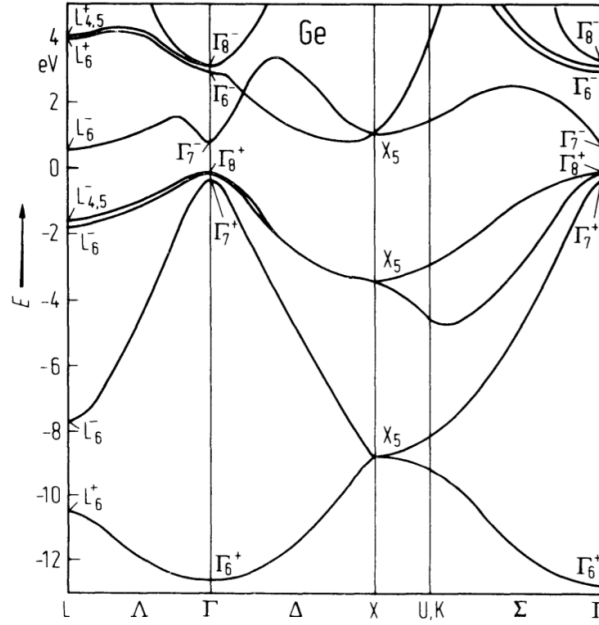
Pour les non-métaux, à 0 K, la bande de valence est la dernière bande complètement occupée par les électrons alors que la bande de conduction est la première bande vide. À une température non nulle, on retrouve quelques électrons dans la bande de conduction et la bande de valence n'est plus complètement remplie. En effet, à  $T > 0$  K, certains électrons sont excités thermiquement de la bande de valence vers la bande de conduction laissant un emplacement libre dans la bande de valence. On appelle ces emplacements vides des trous, une quasi-particule qui agit comme une particule chargée positivement. La bande de conduction et de valence sont séparées par une énergie allant de quelques eV pour les isolants et d'environ 1 eV pour les semi-conducteurs à aucun gap pour les métaux [11]. Cette différence d'énergie entre le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction se nomme énergie de gap  $E_g$ . On parle de gap direct lorsque la bande de conduction est directement au-dessus de la bande de valence, c'est-à-dire que le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence se trouvent à la même valeur de  $\mathbf{k}$ . On parle de gap indirect lorsque la valeur de  $\mathbf{k}$  change entre ces deux extremums.

La figure 2.1 et 2.2 montrent la structure de bande du silicium [90] et du germanium [89], les deux semi-conducteurs que nous allons traiter dans le cadre de ce travail, car les détecteurs de matière sombre de superCDMS sont composés de l'un ou l'autre de ces éléments. La position des bandes dans l'espace réciproque est donnée par une lettre ( $L, X, \Gamma$ , etc.). Les nombres en indice indiquent l'irrep du groupe de symétrie du cristal ainsi que le type d'orbitales ( $s$  ou  $p$ ). Nous reparlerons brièvement de ces irreps lors des règles de sélection de certains états finaux, notamment à la section 2.3.2.3. Chacune de ces bandes pourrait aussi être dénotée par un autre indice,  $n$ , comme dans l'équation 2.1.3 afin de préciser de laquelle exactement on parle.

Dans le cas du germanium, le maximum de la bande de valence est à  $\Gamma$  ou  $[\mathbf{k} = (0,0,0)]$  où il y a 2 bandes dégénérées qu'on appelle «light» et «heavy» ou légère et lourde en référence à la masse effective des trous qui diffère entre ces deux bandes. Il y a également une troisième bande moins énergétique et séparée par l'énergie du couplage spin-orbite, soit 0,29 eV [89]. Les minimums de la bande de conduction sont dans les vallées  $L$   $[\mathbf{k} = (\frac{\pi}{a_0}, \frac{\pi}{a_0}, \frac{\pi}{a_0})]$ ,  $a_0$  est le paramètre cristallin qui sont au nombre de 4 (ou 8 demi-bandes). L'énergie de gap indirecte entre ces vallées  $L$  et la bande de valence est de 0,744 eV à 1 K [89]. La bande de conduction à  $\Gamma$  est séparée, quant à elle, de la bande de valence par une énergie de 0,898 eV à 1,5 K [89]. Finalement, on retrouve les six bandes dans la direction  $X$   $[\mathbf{k} = (k,0,0)]$ . Le minimum de ces bandes (ou vallées) se trouve à environ 85% de la limite de la première zone de Brillouin et une énergie de 1,2 eV les sépare du minimum de la bande

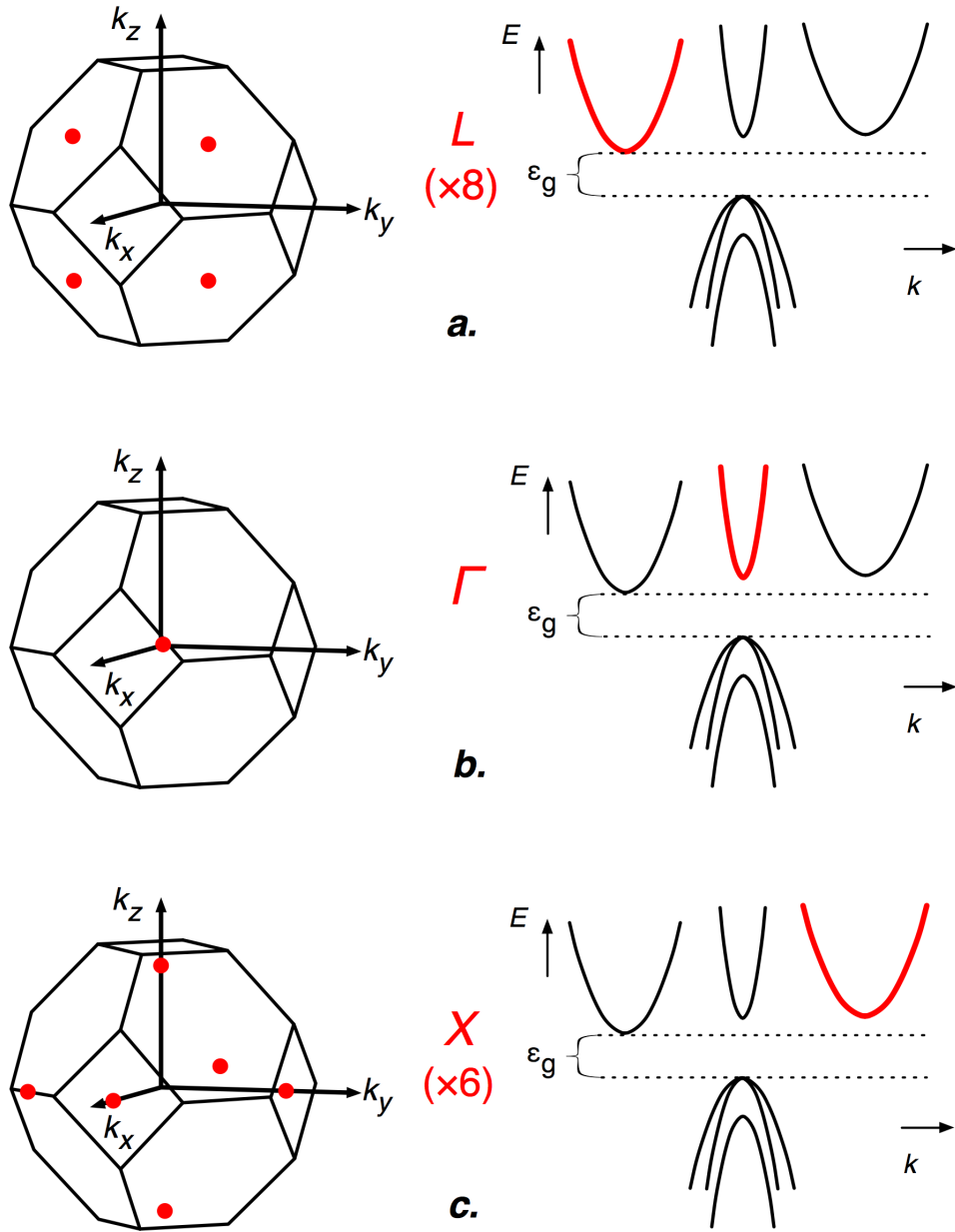


**Fig. 2.1.** Structure de bande du silicium. Les bandes de valence sont à  $\Gamma_{25'}$  et les premières bandes de conduction à 85% de  $X_1$ . Tiré de [90].



**Fig. 2.2.** Structure de bande du germanium. Les bandes de valence légères et lourdes sont à  $\Gamma_8^+$  alors que celle spin-orbite est à  $\Gamma_7^+$ . Les premières bandes de conduction sont à  $L_6^-$ . Tiré de [89].

de valence. La figure 2.3 montre un schéma de ces bandes ainsi que leur position dans la zone de Brillouin.



**Fig. 2.3.** Schéma des bandes de valence et de conduction du germanium et leur position dans la zone de Brillouin. En a), les 8 demi-vallées  $L$ . En b), la vallée  $\Gamma$ . En c), les 6 vallées  $X$ . Tiré de [128].

Pour le silicium, le maximum de la bande de valence est aussi à  $\Gamma$  avec 2 bandes dégénérées, la légère et la lourde. Il y a une troisième bande, séparée de 0,044 meV par le couplage spin-orbite. On néglige cette séparation spin-orbite à la figure 2.1. C'est pourquoi les trois bandes (légère, lourde et couplage spin-orbite) sont représentées comme dégénérées à  $\Gamma$ . La dégénérescence des bandes légère et lourde est levée entre  $X$  et  $U, K$ . Les minimums de la

bande de conduction se trouvent le long des lignes  $\Delta$ , soit dans les vallées  $X$  et se trouvent eux aussi à environ 85% de la limite de la première zone de Brillouin [64]. L'énergie de gap indirecte est alors de 1,14 eV à  $T = 0$  K [90]. Contrairement au germanium, les minimums des autres bandes de conduction sont plus éloignés. Le gap entre les bandes  $L$  et la bande de valence est de 2.04 eV alors qu'il est d'environ 3,5 eV entre la bande de conduction  $\Gamma$  et la bande de valence  $\Gamma$ .

Le silicium et le germanium ont tous deux une structure cristalline face centrée cubique avec 2 atomes. Les calculs qui permettent de déterminer la forme exacte des bandes d'un matériau sont assez compliqués et demandent généralement l'utilisation de modèles, d'approximations et d'une certaine puissance de calculs numériques. Dans tous les cas, on peut généralement approximer la structure de bande proche de ses extremums par un développement en série de Taylor, ce qui donne des bandes paraboliques (il n'y a pas de terme d'ordre 1 en  $\mathbf{k}$  est, car la dérivée première est nulle à un extremum) [71, 91, 11, 64] :

$$\begin{aligned} E(\mathbf{k}) &= E_0 + \frac{\hbar^2}{2} \mathbf{k}^T [\mathbf{m}^{*-1}] \mathbf{k} + \mathcal{O}(\mathbf{k}^3) \\ &\approx E_0 + \sum_{i,j} \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{1}{m^*} \right)_{ij} k_i k_j. \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

où  $[\mathbf{m}^{*-1}]$  est le tenseur de la masse effective inverse. Ses éléments de matrice sont donnés par :

$$[\mathbf{m}^{*-1}]_{ij} = \left( \frac{1}{m^*} \right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}. \quad (2.2.3)$$

Pour finir, la théorie des bandes est essentielle pour comprendre comment les charges (électrons et trous) se déplacent dans un cristal. Cela peut être très différent d'électron libre. Par exemple, la force électrique sur un électron dans un cristal n'est pas nécessairement parallèle au champ électrique externe. Dans les prochaines sous-sections, nous allons expliquer en de plus amples détails les effets de cette structure cristalline sur les porteurs de charges.

### 2.2.1. Masse effective

Nous avons mentionné brièvement plus haut que les électrons dans un potentiel cristallin périodique agissent différemment des électrons libres à cause du dit potentiel. Une des manières de modéliser le mouvement de ces charges dans un solide est de les traiter comme des électrons libres, mais avec une masse effective plutôt que leur masse au repos habituelle  $m_0$ . Plusieurs expressions de la masse effective existent dépendamment de ce que l'on souhaite calculer. Nous présentons ici les plus importantes. Nous verrons comment le concept de

masse effective affecte la quantité de mouvement, la force, l'accélération et la vitesse de groupe, entre autres.

#### 2.2.1.1. Masse tensorielle.

Relation de dispersion isotrope :

Prenons le cas le plus simple en premier. Dans l'équation 2.2.2, si la bande est isotrope et centrée à  $\mathbf{k} = 0$ , alors la surface d'énergie constante est une sphère ( $E(\mathbf{k}) = \text{constante}$ ). L'énergie de la bande dépend alors de la norme de  $\mathbf{k}$  seulement :

$$E(\mathbf{k}) = E_0 + \frac{\hbar^2}{2m^*} \mathbf{k}^2. \quad (2.2.4)$$

La masse effective est représentée par  $m^*$  et remplace la masse de l'électron ou du trou libre. Cette relation de dispersion est la plus simple qui soit et décrit relativement bien la bande de conduction à  $\Gamma$  et les 2 bandes de valence dégénérées du silicium et du germanium. Nous verrons dans les prochaines sous-sections que les bandes de valence des trous sont en fait un peu compliquées à mathématiser que cette relation isotrope.

Malgré la simplicité de ce cas, il peut nous aider à comprendre l'existence des trous, ces quasi-particules qui correspondent au trou laissé par les électrons lorsqu'ils sont excités de la bande de valence vers la bande de conduction. Pour la bande de valence, on rajoute un signe moins devant le deuxième terme, car la parabole est inversée et donc la masse effective des trous est «négative». Cette masse négative implique que les trous subissent une force électrique dans le sens contraire des électrons, ce qui revient à les traiter comme des particules avec une masse et une charge positive.

Relation de dispersion non-isotrope :

Lorsque l'on regarde les minimums des bandes de conduction du Si et du Ge, comme par exemple, les vallées  $L$  et  $X$ , la relation de dispersion n'est plus isotrope et la surface d'énergie constante est un ellipsoïde. Le développement en série de Taylor se fait autour des minimums des bandes, soit  $(k_{0,x}, k_{0,y}, k_{0,z})$  :

$$E(\mathbf{k}) = E_0 + \frac{\hbar^2}{2m_x^*} (k_x - k_{0,x})^2 + \frac{\hbar^2}{2m_y^*} (k_y - k_{0,y})^2 + \frac{\hbar^2}{2m_z^*} (k_z - k_{0,z})^2. \quad (2.2.5)$$

où  $m_x^*$ ,  $m_y^*$ ,  $m_z^*$  sont les masses le long des axes  $x$ ,  $y$  et  $z$  respectivement. Le minimum de la bande de conduction n'est plus centré à  $(0,0,0)$  à cause du décalage  $k_{0,x}$ ,  $k_{0,y}$  et  $k_{0,z}$ .

Généralement, on réécrit l'équation 2.2.5 en termes des composantes longitudinales et transverses de  $\mathbf{k}$  de la manière suivante :

$$E(\mathbf{k}) = E_0 + \frac{\hbar^2}{2m_l}k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m_t}(k_y^2 + k_z^2) = E_0 + \frac{\hbar^2}{2m_l}k_l^2 + \frac{\hbar^2}{2m_t}k_t^2. \quad (2.2.6)$$

où  $k_t$  et  $k_l$  sont les composantes transversales et longitudinales de  $\mathbf{k}$  et  $m_t$  et  $m_l$  les masses transverses et longitudinales respectivement. L'équation présume également qu'on se trouve dans un référentiel centré sur le minimum de la bande, d'où pourquoi il n'y a plus de  $k_{0,x}$ ,  $k_{0,y}$  et  $k_{0,z}$ . Sans perdre de généralité, on adopte la direction  $x$  comme la direction longitudinale. On trouve ainsi que le tenseur de la masse effective inverse est, de par l'équation 2.2.3 :

$$[\mathbf{m}^{*-1}] = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_l} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_t} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_t} \end{pmatrix}. \quad (2.2.7)$$

On ne peut donc plus traiter la masse de l'électron comme un scalaire, il faut maintenant tenir compte de la direction de son mouvement pour connaître sa masse. Voir le tableau 2.1 pour les valeurs exactes de  $m_l$  et  $m_t$  pour le Si et le Ge. Celles-ci dépendent, bien évidemment, de la vallée dans laquelle le porteur de charge se trouve. Généralement, on donne la masse de l'électron dans la première bande de conduction, soit  $X$  pour le Si et  $L$  pour le Ge. Pour le silicium, pour qui les autres bandes de conduction sont très éloignées, la quasi-majorité des électrons se retrouvent dans cette première bande, surtout à faible température. Il est donc moins important de considérer ces autres bandes de conduction. Pour le germanium, le minimum des bandes  $L$ ,  $X$  et  $\Gamma$  se retrouvent proche et il peut y avoir une plus grande population d'électrons dans les bandes  $X$  et  $\Gamma$ . On pourrait donc inclure leur masse transversale et inverse. Nous ne le ferons toutefois pas, car, dans notre simulation, nous ne considérons que la première bande de conduction pour le moment, avec pour but d'inclure les autres bandes prochainement.

#### Relations pour les trous :

Nous avons traité deux approximations de la relation de dispersion plus haut, qui sont toutes deux de relativement bonnes approximations des bandes de conduction. Pour ce qui est des deux ou trois bandes de valence que l'on retrouve dans les semi-conducteurs, tel que le germanium et le silicium, une approche plus précise est nécessaire. Rappelons-nous que dans le germanium, deux des bandes sont dégénérées et que la troisième a une énergie maximale plus petite que les deux autres. La figure 2.3 montre de manière schématique ces trois bandes. Pour le silicium, il y a deux bandes, elles aussi dégénérées, à  $\Gamma$ .

Nous nous baserons sur le développement mathématique de [64, 66, 128, 75] ici et nous nous contenterons de donner les principales formules sans entrer en trop de détails. On

commence par considérer la dégénérescence des deux bandes et un développement en série de Taylor pour des petites valeurs de  $k$ , ce qui nous conduit à :

$$E(\mathbf{k}) = Ak^2 \pm [B^2k^4 + C^2 (k_x^2k_y^2 + k_x^2k_z^2 + k_y^2k_z^2)]^{1/2}. \quad (2.2.8)$$

Le signe  $-$  est pour la bande des trous lourds ou Heavy holes et le signe  $+$  pour la bande des trous légers ou light holes. On retrouve la valeur des paramètres  $A, B$  et  $C$  dans le tableau 2.1.

La troisième bande, dans le cas du germanium, nécessite d'ajouter des perturbations à notre hamiltonien et encore plus de développement mathématique, ce que nous ne ferons pas ici, mais nous suggérons de consulter les références énumérées plus haut. On peut généralement négliger cette troisième bande, car sa densité d'états est assez faible et elle est moins énergétique que les deux autres bandes de valence [64].

Si l'on ne cherche pas à aller dans autant de détails mathématiques, l'approche isotrope reste une approximation suffisamment bonne pour des trous avec une faible quantité de mouvement. Dans un tel cas, la bande appelée trou lourd (*Heavy hole*) peut s'écrire comme l'équation 2.2.4 avec une masse scalaire effective de  $0,350 m_0$  pour le germanium et de  $0,50 m_0$  pour le silicium. La bande des trous légers s'écrit de la même manière, mais avec des masses de  $0,043 m_0$  pour le germanium et de  $0,153 m_0$  pour le silicium. Présentement, SuperCDMS utilise l'approximation de la bande isotrope des trous lourds et ne considère que cette bande pour la simulation du transport des trous. Nous avons toutefois le projet de peaufiner ce modèle dans un futur rapproché.

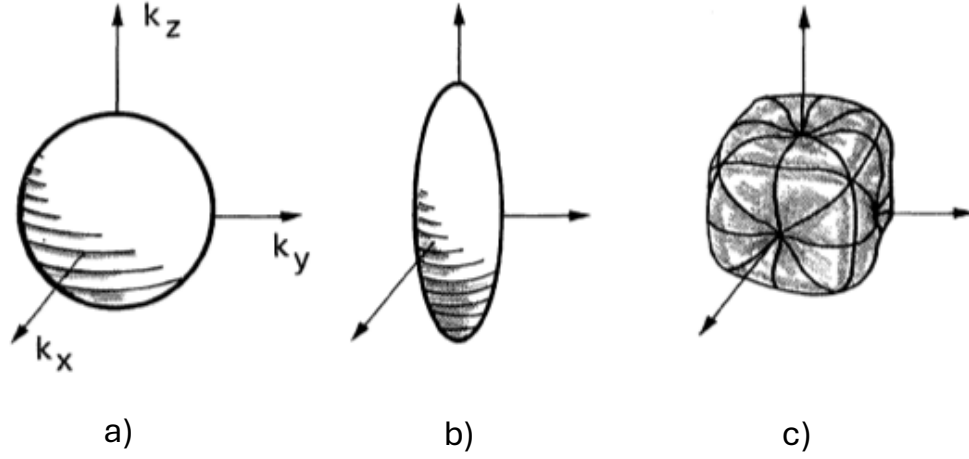
La figure 2.4 montre de manière schématique les trois bandes que nous venons de voir soit le cas isotrope ou sphérique, anisotrope ou ellipsoïdal et tordu pour les bandes de valence.

#### 2.2.1.2. Approximations masses scalaires :

Nous venons de voir que dans le cas ellipsoïdal (et aussi pour les trous), la masse du porteur de charge dépend de sa direction. L'analogie de l'électron libre, mais avec une masse effective différente, devient boiteuse dans ce cas. On peut toutefois revenir à une expression scalaire de la masse indépendante de la direction de l'électron ou du trou. Les deux approximations de masse scalaire à partir d'une masse anisotrope sont la masse densité d'état et la masse conductivité. Commençons avec la première.

##### Masse de densité d'états :

Il est possible d'extraire ce qu'on appelle la masse densité d'état en comparant la densité d'état à la concentration d'électrons dans la bande de conduction, notamment au moyen de



**Fig. 2.4.** Schéma des relations de dispersion pour le cas : a) isotrope ou sphérique, b) non isotrope ou ellipsoïdal et c) pour les trous ou tordu. Tiré de [64].

valeurs expérimentales. Pour une relation de dispersion parabolique anisotrope ellipsoïdale, la masse effective est la suivante [125, 122] :

$$m_d = (m_l m_t^2)^{1/3}. \quad (2.2.9)$$

De plus, on peut multiplier  $m_d$  par un facteur  $(N_{\text{vallées}})^{2/3}$  pour avoir la densité totale pour toutes les bandes de même énergie.

### Masse conductivité

Il est aussi possible de prendre la moyenne des inverses des composantes longitudinales et transverses des masses de l'électron pour simplifier les calculs. On appelle une telle masse effective la masse de conductivité  $m_c$ . Pour une relation de dispersion parabolique anisotrope, la masse de conductivité est donnée par [71] :

$$\frac{1}{m_c} = \frac{1}{3} \left( \frac{1}{m_l} + \frac{1}{m_t} + \frac{1}{m_t} \right) \quad (2.2.10)$$

### 2.2.1.3. Résumé des différentes masses.

Nous pouvons regrouper et comparer les valeurs expérimentales des différentes définitions de masses abordées ici plus haut pour le silicium et le germanium dans le tableau 2.1 ci-dessous. Les masses sont données en unités de  $m_0$  alors que les paramètres A, B et C sont sans unités. Les données proviennent de [66, 90, 89].

**Tableau 2.1.** Tableau des différentes masses pour le Si et le Ge autour de  $T \approx 0$  K. Pour le Ge, valeurs de la bande  $L$ , alors que pour le Si, valeurs de la bande  $X$  pour  $m_l$  et  $m_t$  en unités de  $m_0$ .

| Matériau | $m_l$ | $m_t$ | $m_c$ | $m_d$ | $m_h$ (lourde) | $m_h$ (légère) | A     | B    | C     |
|----------|-------|-------|-------|-------|----------------|----------------|-------|------|-------|
| Ge       | 1,588 | 0,081 | 0,118 | 0,218 | 0,350          | 0,043          | 13,38 | 8,48 | 13,14 |
| Si       | 0,91  | 0,19  | 0,258 | 0,32  | 0,5            | 0,153          | 4,22  | 0,78 | 4,80  |

La température affecte légèrement la forme des bandes et donc la masse densité d'état varie un peu selon la température [47]. Comme notre détecteur fonctionne à environ 50 mK, nous prenons les valeurs expérimentales des masses à cette température ou tout près.

Nous n'avons considéré que les masses des électrons de la première bande de conduction pour le Si et le Ge, c'est-à-dire les bandes  $L$  pour le Ge et les bandes  $X$  pour le Si. Présentement, c'est aussi les seules bandes que nous traitons dans notre simulation avec, encore une fois, le but de rajouter des transitions vers ces autres bandes de conduction. C'est ce que nous appelons diffusions intervallées et dont nous aurons le plaisir de reparler plus tard dans cet ouvrage. Pour les trous, nous donnons la masse de la bande lourde ou *heavy hole* et la bande légère ou *light hole*.

### 2.2.2. Vitesse de groupe

Les électrons de Bloch sont à la fois des particules et des ondes; ils possèdent donc une vitesse de groupe, déterminée par la structure de bande [11] :

$$\mathbf{v}_g = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) = \hbar [\mathbf{m}^{*-1}] \mathbf{k}. \quad (2.2.11)$$

où la partie à droite du deuxième égal est obtenue en dérivant l'équation 2.2.2. On remarque dès lors que la vitesse de groupe ne dépend plus seulement de la quasi-quantité de mouvement ( $\hbar \mathbf{k}$ ) comme dans le cas de l'électron libre ( $v = \frac{1}{m_0} \hbar \mathbf{k}$ ), mais aussi de la direction de l'électron en raison de la masse tensorielle. Ainsi, deux vecteurs d'ondes  $\mathbf{k}$  de même norme, mais de direction différente peuvent donner des vitesses de groupe différentes, ce qui n'est pas le cas pour l'électron libre.

### 2.2.2.1. Vitesse moyenne.

Il est possible de montrer que la vitesse de groupe des électrons de Bloch correspond également à leur valeur moyenne grâce à la méthode  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  [71]. On commence par exprimer l'énergie  $E(\mathbf{k})$  comme une série de Taylor autour de  $\mathbf{k} + \mathbf{q}$  sachant que  $\mathbf{q}$  est petit par rapport à  $\mathbf{k}$  :

$$E(\mathbf{k} + \mathbf{q}) = E(\mathbf{k}) + \sum_i \frac{\partial E}{\partial k_i} q_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j + \dots \quad (2.2.12)$$

L'hamiltonien  $\hat{H}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ , qu'on peut dériver en remplaçant  $\mathbf{k}$  par  $\mathbf{k} + \mathbf{q}$  dans l'équation 2.2.1 peut se séparer en deux parties, soit l'hamiltonien non perturbé  $\hat{H}_{\mathbf{k}}$  et une perturbation  $\hat{H}_{\mathbf{q}}$  en  $\mathbf{q}$ . Si on applique  $\hat{H}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$  sur l'état perturbé  $u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\mathbf{r})$  on retrouve  $E(\mathbf{k} + \mathbf{q})$  :

$$\hat{H}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k} + \mathbf{q}) u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\mathbf{r}). \quad (2.2.13)$$

En théorie des perturbations indépendante du temps, les états perturbés et leurs énergies propres s'écrivent comme une série de Taylor en  $\mathbf{q}$ . Nous avons déjà exprimé les énergies propres comme une série à l'équation 2.2.12. Les états  $u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\mathbf{r})$  perturbés s'écrivent aussi en série :  $u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \mathbf{q} u_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}) + \mathbf{q}^2 u_{\mathbf{k}}^{(2)}(\mathbf{r}) + \dots$  de sorte que [80] :

$$\begin{aligned} \left( \hat{H}_{\mathbf{k}} + \hat{H}_{\mathbf{q}} \right) \left( u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \mathbf{q} u_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}) + \dots \right) &= \left( E(\mathbf{k}) + \sum_i \frac{\partial E}{\partial k_i} q_i + \dots \right) \times \left( u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \mathbf{q} u_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}) + \dots \right) \\ \left( \hat{H}_{\mathbf{k}} + \frac{\hbar^2}{m_0} \mathbf{q} \cdot (\mathbf{k} - i\nabla) + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_0} \right) \left( u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \mathbf{q} u_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}) + \dots \right) &= \dots \end{aligned} \quad (2.2.14)$$

À l'ordre 0 en  $\mathbf{q}$ , on retrouve l'équation 2.2.1 tel qu'attendu soit :  $\hat{H}_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ . Au premier ordre en  $\mathbf{q}$  de la théorie des perturbations, on a donc :

$$\hat{H}_{\mathbf{k}} \mathbf{q} u_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}) + \sum_i \frac{\hbar^2}{m_0} q_i (\mathbf{k} - i\nabla)_i u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k}) \mathbf{q} u_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}) + \sum_i \frac{\partial E}{\partial k_i} q_i u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.2.15)$$

En multipliant par  $u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})$  de chaque côté et en intégrant sur l'ensemble du domaine, le premier terme à gauche de l'égalité et le premier terme à droite de l'égalité s'annulent entre eux. L'équation est vraie  $\forall \mathbf{q}$ , ce qui implique que chaque coefficient de  $q_i$  doivent s'égaliser de part et d'autre de l'égalité et il reste :

$$\begin{aligned}
\int d\mathbf{r}^3 u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \sum_i \frac{\hbar^2}{m_0} q_i (\mathbf{k} - i\nabla)_i u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \int d\mathbf{r}^3 \sum_i \frac{\partial E}{\partial k_i} q_i u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\
\int d\mathbf{r}^3 u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \frac{\hbar^2}{m_0} (\mathbf{k} - i\nabla) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \nabla_k E(\mathbf{k}) \int d\mathbf{r}^3 u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\
\int d\mathbf{r}^3 \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \left( \frac{-i\hbar\nabla}{m_0} \right) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(\mathbf{k}) \\
\langle \hat{\mathbf{v}} \rangle &= \mathbf{v}_g.
\end{aligned} \tag{2.2.16}$$

où on s'est servi du développement mathématique de l'équation 2.2.1 pour réinsérer l'onde de Bloch au complet et de la normalisation des états  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  pour se débarrasser de l'intégrale à droite.

### 2.2.2.2. Masse effective.

À l'ordre 2 en  $\mathbf{q}$ , on retrouve l'équation de la masse effective. Le développement mathématique au long se trouve à l'annexe A. En effet, on obtient :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 E_n(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j} &= \frac{\hbar^2}{m} \delta_{ij} \\
&+ \left( \frac{\hbar^2}{m} \right)^2 \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n, \mathbf{k} | -i\nabla_i | n', \mathbf{k} \rangle \langle n', \mathbf{k} | -i\nabla_j | n, \mathbf{k} \rangle + \langle n, \mathbf{k} | -i\nabla_j | n', \mathbf{k} \rangle \langle n', \mathbf{k} | -i\nabla_i | n, \mathbf{k} \rangle}{E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k})}.
\end{aligned} \tag{2.2.17}$$

où  $|n, \mathbf{k}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  et nous avons tenu compte de l'indice  $n$  de la bande. Le terme à gauche du égal est l'expression de la masse effective.

### 2.2.3. Quantité de mouvement et quasi-quantité de mouvement

Nous avons brièvement abordé plus haut la différence entre la quantité de mouvement de l'électron de Bloch et la quantité de mouvement du cristal  $\hbar\mathbf{k}$ . Il est maintenant temps de combiner ce que nous avons vu dans la section précédente sur la vitesse de groupe à la quantité de mouvement moyenne afin de trouver une expression simple reliant cette dernière à la quasi-quantité de mouvement. Les équations 2.2.11 et 2.2.16 nous ont appris que  $\langle \hat{\mathbf{v}} \rangle = \mathbf{v}_g = \hbar[\mathbf{m}^{*-1}]\mathbf{k}$ . On combine cela à  $\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = m_0 \langle \hat{\mathbf{v}} \rangle$  et on obtient la relation importante :

$$\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = m_0[\mathbf{m}^{*-1}] \hbar\mathbf{k}. \tag{2.2.18}$$

Cette équation sera utilisée à plusieurs reprises dans le reste de cet ouvrage et elle apparaîtra à de nombreuses reprises dans les simulations de SuperCDMS. Elle permet de passer d'une

quantité de mouvement à l'autre par une simple transformation lorsque l'une ou l'autre est nécessaire pour un calcul.

Dans le cas d'une bande isotrope (sphérique), un cas que nous allons souvent traiter dans ce travail, on peut remplacer le tenseur de masse  $[\mathbf{m}^{*-1}]$  par la masse effective  $m^*$  comme par exemple  $m_h$  pour un trou. Calculons, au long, la quantité de mouvement moyenne de notre onde de Bloch :

$$\begin{aligned}
\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle &= \int d\mathbf{r} \psi_{n\mathbf{k}}^* (-i\hbar \nabla) \psi_{n\mathbf{k}} \\
&= \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) (-i\hbar \nabla) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\
&= \hbar \mathbf{k} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} i\hbar \nabla u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.2.19) \\
&= \hbar \mathbf{k} \int d\mathbf{r} \psi_{n\mathbf{k}}^* \psi_{n\mathbf{k}} - \int d\mathbf{r} u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) i\hbar \nabla u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\
&= \hbar \mathbf{k} - \int d\mathbf{r} u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) i\hbar \nabla u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}).
\end{aligned}$$

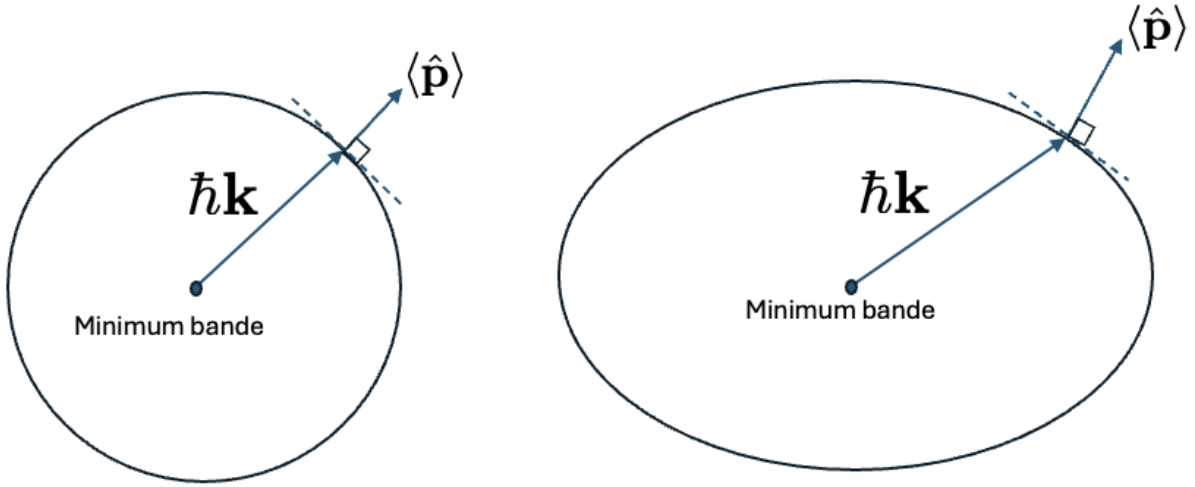
Le deuxième terme à droite de l'équation nous indique une différence entre les deux quantités de mouvement énumérées plus haut et qu'elles ne pointent pas nécessairement dans la même direction. Dans le cas d'une relation de dispersion isotrope, le deuxième terme de  $\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle$  pointe dans la même direction que la quantité de mouvement du cristal alors que, dans une relation anisotrope, il pointe dans une autre direction la plupart du temps.

Pour le comprendre, remarquons premièrement que  $\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = (m_0/\hbar) \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$ . Par définition, le gradient de l'énergie est perpendiculaire à la surface de la relation de dispersion. Dans une relation isotrope, la surface d'énergie constante est une sphère de rayon  $\hbar k$  et le gradient, perpendiculaire à la sphère, pointe dans le même sens que le rayon. Pour une relation anisotrope, la surface ellipsoïdale aura aussi un rayon égal à la quasi-quantité de mouvement, mais le gradient d'une telle surface n'est pas parallèle au rayon, sauf à quelques endroits sur la surface. On peut voir de manière schématique cette situation à la figure 2.5.

#### 2.2.4. La force et l'accélération

Considérons le cas où nous avons maintenant une force extérieure  $\mathbf{F}_{\text{ext}}$  telle que la force électromagnétique en plus du potentiel périodique des ions. L'Hamiltonien d'un tel électron, à la fois dans un cristal et dans un champ électromagnétique, s'écrit [80] :

$$H_{\text{EM}} = \frac{1}{2m_0} (\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r},t))^2 + U(\mathbf{r}) + eV(\mathbf{r},t). \quad (2.2.20)$$



**Fig. 2.5.** Comparaison de la quasi-quantité de mouvement (ou quantité de mouvement du cristal)  $\hbar \mathbf{k}$  et de la quantité de mouvement moyenne  $\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle$  pour une bande sphérique (à gauche) et une bande ellipsoïdale (à droite).

où  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  est le potentiel vecteur,  $V(\mathbf{r}, t)$  le potentiel scalaire et  $e$  la charge électrique. Nous voulons trouver une expression similaire au cas classique qui relie la dérivée par rapport au temps de la quantité de mouvement à la force. Dans le cas d'un électron plongé dans un champ électromagnétique, la quantité de mouvement devient plutôt  $\mathbf{p} = m_0 \mathbf{v} + e\mathbf{A}$ . Pour se simplifier la vie, faisons nos calculs avec seulement la composante  $x$  de la quantité de mouvement. À partir du théorème d'Ehrenfest, on peut montrer (voir annexe B) que :

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle m_0 \mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{F}_{\text{ext}} \rangle + \langle \mathbf{F}_U \rangle = \langle \mathbf{F}_{\text{totale}} \rangle. \quad (2.2.21)$$

où  $\mathbf{F}_{\text{totale}}$  est la force totale qui comprend la force extérieure et la force du potentiel périodique. La quantité de mouvement moyenne est affectée par ces deux forces, ce qui peut compliquer les calculs si l'on doit toujours tenir compte du potentiel périodique. On peut contourner ce problème avec le modèle semi-classique.

#### 2.2.4.1. Modèle semi-classique.

Dans une approche semi-classique, les champs électromagnétiques extérieurs sont traités de manière classique et le champ périodique des ions de manière quantique. On fait cette distinction, car la longueur sur laquelle les champs électromagnétiques varient est beaucoup plus grande que l'étalement des paquets d'ondes des électrons de Bloch qui, lui est beaucoup plus grand que le paramètre du réseau cristallin. Dans ce modèle, on traite l'électron de

Bloch comme une particule classique entre les collisions, mais les mécanismes de diffusions, comme nous allons le voir dans la section suivante, de manière quantique.

Regardons maintenant s'il s'agit de bonnes approximations. Pour que l'électron de Bloch soit «classique», il faut que sa position  $x$  et sa quantité de mouvement  $p$  soient connues en même temps et de manière précise. Toutefois, on se rappelle que le principe d'incertitude d'Heisenberg permet difficilement de connaître ces deux quantités en maintenant. Il faut, au moins, s'assurer que l'incertitude sur  $p$  soit plus petite que  $p$  et que l'incertitude sur  $x$  plus petite que le libre parcours moyen  $l$  entre les collisions. Il faut donc que :  $\Delta p \ll p$  et  $\Delta x \ll l = v\tau = (p/m)\tau$ , où  $\tau$  est le temps moyen entre chaque collision. Ainsi, en combinant le tout, on obtient :

$$\frac{\hbar}{2} \approx \Delta p \Delta x \ll \frac{p^2}{m} \tau. \quad (2.2.22)$$

où encore  $\tau \gg \hbar/k_B T \approx 10^{-13}$  sec si on considère que l'énergie moyenne des électrons est donnée par le théorème d'équipartition de l'énergie. Si l'on considère plutôt une énergie moyenne des électrons de quelques eV, ce qui est une bonne approximation aux conditions d'opérations de SuperCDMS, on obtient plutôt une limite de  $\tau \gg 10^{-16}$ . Nous verrons, dans notre cas, que les collisions se produisent à un temps beaucoup plus petit que  $10^{-13}$  secondes, pourvu que les électrons ne dépassent pas quelques eV d'énergie. À ces grandes énergies, il pourrait devenir nécessaire d'utiliser un traitement quantique complet.

#### 2.2.4.2. La force.

Revenons à notre problème de la dérivée de la quantité de mouvement moyenne de l'électron de Bloch qui dépend, à la fois de la force extérieure, comme un champ électromagnétique, et de la force venant du potentiel du cristal. Dans un modèle semi-classique, la solution est d'utiliser la quasi-quantité de mouvement. En effet, celle-ci est seulement affectée par la force extérieure. Considérons les équations de la vitesse et de l'énergie que nous avons développées plus haut et qui englobent déjà le potentiel périodique dans leur expression. En ajoutant une force extérieure, le travail accompli par cette force sur les électrons de Bloch sera [11]:

$$\begin{aligned} \partial E &= \mathbf{F}_{\text{ext}} \cdot \mathbf{v}_g \partial t \\ \partial E &= \mathbf{F}_{\text{ext}} \cdot \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}} \partial t. \end{aligned} \quad (2.2.23)$$

ou encore :

$$\frac{\partial}{\partial t} \hbar \mathbf{k} = \mathbf{F}_{\text{ext}}. \quad (2.2.24)$$

Et donc, on ne peut traiter que la force extérieure dans nos calculs si on tient compte de la quasi-quantité de mouvement et on peut passer de l'un à l'autre facilement au moyen de l'équation 2.2.18 comme nous l'avons vu. On traite la force extérieure classiquement.

#### 2.2.4.3. Accélération.

On trouve l'accélération d'un électron de Bloch en dérivant sa vitesse par rapport au temps. On retourne donc au premier Hamiltonien dans lequel il n'y a pas encore de force extérieure, mais seulement le potentiel périodique (équation 2.1.2). On a montré que les expressions pour la vitesse de groupe et la vitesse moyenne sont équivalentes, on utilise donc l'expression de l'équation 2.2.11 :

$$a_i = \frac{dv_i}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_i} \right) = \sum_j \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \frac{\partial k_j}{\partial t} = \sum_j [\mathbf{m}^{*-1}]_{ij} (\hbar \dot{k}_j) = \sum_j [\mathbf{m}^{*-1}]_{ij} (F_{\text{ext}})_j. \quad (2.2.25)$$

ou encore,

$$\mathbf{F}_{\text{ext}} = [\mathbf{m}^*] \mathbf{a}. \quad (2.2.26)$$

Et donc, les équations de cinématique sont similaires au cas classique, mais avec la masse effective plutôt que la masse de l'électron libre au repos  $m_0$ . Dans le cas d'une force extérieure électromagnétique ou de Lorentz, on a :

$$[\mathbf{m}^*] \mathbf{a} = \hbar \dot{\mathbf{k}} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}). \quad (2.2.27)$$

Comme nous le verrons dans la sous-section qui suit, cela mène à des comportements non intuitifs dans des cristaux, tels que le silicium ou le germanium où, en fonction de l'orientation du cristal, la force électrique sur un électron n'est pas nécessairement parallèle au champ électrique.

#### 2.2.5. Transformation de Herring-Vogt

Les bandes anisotropes comme à l'équation 2.2.5 nous demandent des changements de référentiel afin de s'assurer que la direction  $(k_x, 0, 0)$  soit dans la direction longitudinale avant de multiplier par la matrice de masse effective.

Afin de simplifier les calculs, on utilise les transformations de Herring-Vogt. Ces dernières transforment l'énergie de surface constante ellipsoïdale en une sphère. Ces transformations vont comme suit [124, 57]:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_c} \sqrt{m_c} \mathbf{k}^T T_i^T [\mathbf{m}^{*-1}] \sqrt{m_c} T_i \mathbf{k} = \frac{\hbar^2}{2m_c} \mathbf{k}^{*2}. \quad (2.2.28)$$

avec :

$$\mathbf{k}^* = \sqrt{[\mathbf{m}^{*-1}]} \sqrt{m_c} T_i \mathbf{k}. \quad (2.2.29)$$

où les  $T_i$  sont des matrices de rotation emmenant la vallée  $i$  à  $(k_x, 0, 0)$  car nous avons défini, sans perdre de généralité, cette direction comme la direction longitudinale. Pareillement, on peut choisir une masse arbitraire tel que  $m_c$  au lieu de  $m_0$  pour notre transformation sans perdre de généralité pour les calculs d'énergie. Pour les autres quantités, telles que l'accélération et la vitesse, nous verrons que le choix de masse n'a pas d'influence, car s'annule aussi. Nous garderons  $m_c$  par convention, car c'est elle utilisée dans la simulation de SuperCDMS.

Il existe une infinité de matrices de rotation dont le seul critère est de transformer un vecteur pointant dans la direction de la vallée  $i$  en un vecteur pointant vers l'axe des  $k_x$ . Nous reparlerons plus en détail de la convention que nous avons choisi et pourquoi, mais, pour le moment, voici les 6 matrices de rotations des vallées  $X$  du silicium (3 vallées et 3 anti-vallées) et les 8 demi-vallées  $L$  du germanium (4 demi-vallées et 4 demi-anti-vallées) que nous utilisons chez SuperCDMS. En commençant par celles pour le Si :

$$[100] \rightarrow T_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad [\bar{1}00] \rightarrow T_0 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.2.30)$$

$$[010] \rightarrow T_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad [0\bar{1}0] \rightarrow T_1 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.2.31)$$

$$[001] \rightarrow T_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad [00\bar{1}] \rightarrow T_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.2.32)$$

Puis, celles pour le Ge :

$$[111] \rightarrow T_0 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{-1}{\sqrt{6}} & \frac{-1}{\sqrt{6}} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \quad [\bar{1}\bar{1}\bar{1}] \rightarrow T_0 = \begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{3}} & \frac{-1}{\sqrt{3}} & \frac{-1}{\sqrt{3}} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{-\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}. \quad (2.2.33)$$

$$[\bar{1}11] \rightarrow T_1 = \begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{-1}{\sqrt{6}} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \quad [1\bar{1}\bar{1}] \rightarrow T_{\bar{1}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{-1}{\sqrt{3}} & \frac{-1}{\sqrt{3}} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{-1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{-\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}. \quad (2.2.34)$$

$$[\bar{1}\bar{1}1] \rightarrow T_2 = \begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{3}} & \frac{-1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \quad [11\bar{1}] \rightarrow T_{\bar{2}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{-1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{-1}{\sqrt{6}} & \frac{-1}{\sqrt{6}} & \frac{-\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}. \quad (2.2.35)$$

$$[1\bar{1}\bar{1}] \rightarrow T_3 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{-1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{-1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \quad [\bar{1}1\bar{1}] \rightarrow T_{\bar{3}} = \begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{-1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{-1}{\sqrt{6}} & \frac{-\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}. \quad (2.2.36)$$

On veut s'assurer de retrouver les équations de la vitesse, de la quantité de mouvement et de l'accélération que nous avons développées jusqu'à présent, mais en tenant compte maintenant de cette transformation.

On retrouve facilement l'expression de la vitesse de groupe par un développement similaire à l'équation 2.2.11 :

$$\langle \hat{\mathbf{v}} \rangle = T_i^T [\mathbf{m}^{*-1}] T_i \hbar \mathbf{k}. \quad (2.2.37)$$

Et on retrouve la quantité de mouvement moyenne en multipliant par  $m_c$  :

$$\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = T_i^T m_c [\mathbf{m}^{*-1}] T_i \hbar \mathbf{k}. \quad (2.2.38)$$

Finalement, l'expression de l'accélération sera différente elle aussi sous l'effet des transformations de Herring-Vogt, mais on peut la retrouver en dérivant la quantité de mouvement ou la vitesse par rapport au temps, moyennant un facteur  $m_c$  de différence :

$$\mathbf{a} = \frac{\mathbf{F}}{m_c} = \frac{1}{m_c} \frac{d\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle}{dt} = V_i^T [\mathbf{m}^{*-1}] V_i \frac{d(\hbar \mathbf{k})}{dt} = V_i^T [\mathbf{m}^{*-1}] V_i (\mathbf{F}_{ext}). \quad (2.2.39)$$

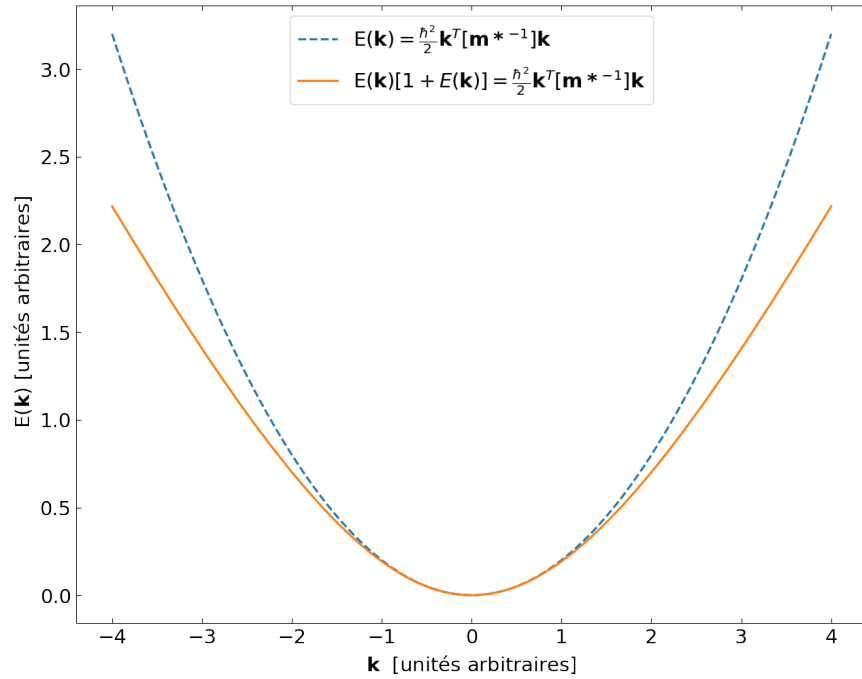
Comme nous le verrons dans les chapitres suivants, cette transformation nous indique que l'accélération que subit un électron sous l'effet d'un champ électrique n'est plus nécessairement parallèle au champ électrique. En fait, dépendamment de l'orientation du cristal, il peut exister, par exemple, quatre différentes directions d'accélération pour un électron dans du Ge(111) ou trois pour un électron dans du Si(111) si le champ électrique est orienté dans

la direction de  $k_z$ . Ces 4 directions correspondent aux 4 vallées (et anti-vallées) du Ge et aux 3 vallées (et anti-vallées) du Si.

On remarque également que l'expression plus haute nous donne maintenant l'accélération venant de la force totale, car on dérive la quantité de mouvement moyen, mais que cette expression fait intervenir la force extérieure et une série de transformations de Herring-Vogt. Pour les besoins de la simulation, nous verrons plus tard, que la force ou l'accélération totale est nécessaire pour expliquer le déplacement oblique des électrons et donc leur position finale lorsqu'ils frappent une des surfaces du détecteur.

### 2.2.6. Non-parabolicité

Nous avons approximé la structure de bande proche de ses extremums par une relation de dispersion parabolique. Cette relation est relativement bonne proche de l'extremum, mais devient moins exacte lorsque l'on s'en éloigne (voir figure 2.6).



**Fig. 2.6.** Comparaison schématique de l'approximation de la bande de conduction ou de valence par une parabole et avec le facteur de non-parabolicité.

Généralement, on rajoute un facteur de non-parabolicité  $\alpha$  à l'expression 2.2.2 pour garder une forme semi-analytique [64]:

$$\begin{aligned}
E(\mathbf{k})(1 + \alpha E(\mathbf{k})) &= E_0 + \frac{\hbar^2}{2} \mathbf{k}^T [\mathbf{m}^{*-1}] \mathbf{k} \\
&= E_0 + \sum_{i,j} \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{1}{m^*} \right)_{ij} k_i k_j.
\end{aligned} \tag{2.2.40}$$

Le facteur  $\alpha$  varie entre  $0,3 \text{ eV}^{-1}$  et  $0,65 \text{ eV}^{-1}$  pour la bande  $L$  du germanium et est de  $0,5 \text{ eV}^{-1}$  pour la bande  $X$  du silicium [65, 62, 64]. Nous utilisons présentement  $0,3 \text{ eV}^{-1}$  pour le Ge dans notre simulation. On a maintenant une expression de second degré en  $E(\mathbf{k})$  qu'on peut résoudre au moyen de la formule quadratique.

$$E(\mathbf{k}) = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4\alpha(E_0 + \frac{\hbar^2}{2} \mathbf{k}^T [\mathbf{m}^{*-1}] \mathbf{k})}}{2\alpha}. \tag{2.2.41}$$

Cette non-parabolicité affecte, comme nous allons le voir, les calculs de probabilité de diffusion des électrons et des trous. Cet effet devient encore plus important à haute température et haut voltage, où les électrons ont plus d'énergie et sont donc encore plus éloignés des minimums des bandes de conduction. Cette approximation tient généralement jusqu'à des énergies d'environ  $1 \text{ eV}$  pour un électron ou un trou.

Pour des bandes ellipsoïdales, on inclut les transformations de Herring-Vogt de l'équation 2.2.29. L'équation 2.2.41 devient alors (en négligeant  $E_0$  dans l'équation 2.2.6) :

$$E(\mathbf{k}^*) = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4\alpha(\frac{\hbar^2}{2m_c} \mathbf{k}^{*2})}}{2\alpha}. \tag{2.2.42}$$

qui est l'équation que nous allons utiliser pour dériver les calculs des taux de diffusions dans la section suivante. Par une démarche similaire à la section précédente, on peut redériver les expressions pour la vitesse de groupe :

$$\langle \hat{\mathbf{v}} \rangle = \frac{1}{1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)} T_i^T [\mathbf{m}^{*-1}] T_i \hbar \mathbf{k}. \tag{2.2.43}$$

et donc, pour la quantité de mouvement (on multiplie par  $m_c$ ) :

$$\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = \frac{1}{1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)} T_i^T m_c [\mathbf{m}^{*-1}] T_i \hbar \mathbf{k}. \tag{2.2.44}$$

Et finalement, pour l'accélération :

$$\begin{aligned}
\mathbf{a} &= \frac{\mathbf{F}}{m_c} = \frac{1}{m_c} \frac{d\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle}{dt} = \frac{1}{1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)} T_i^T [\mathbf{m}^{*-1}] T_i \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} \\
&\quad - \frac{2\alpha}{[1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)]^3} \hbar \mathbf{k}^T T_i^T [\mathbf{m}^{*-1}] T_i \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} (T_i^T [\mathbf{m}^{*-1}] T_i \hbar \mathbf{k}) \\
&= \frac{1}{1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)} T_i^T [\mathbf{m}^{*-1}] T_i (\mathbf{F}_{\text{ext}}) - \frac{2\alpha}{1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)} \langle \vec{v} \rangle (\mathbf{F}_{\text{ext}}) \langle \vec{v} \rangle.
\end{aligned} \tag{2.2.45}$$

On a donc un deuxième terme négatif dans notre expression de l'accélération pour une bande non parabolique. Ce terme de correction est généralement petit et a été développé dans le cadre de ce travail.

### 2.2.7. Résumé des équations de la cinématique des porteurs de charge

Le tableau 2.2 synthétise les équations importantes de la vitesse, de l'énergie, de la force, de la quantité de mouvement pour les différents cas que nous avons abordés. Par souci de simplicité, nous avons réécrit la masse effective tensorielle  $[\mathbf{m}^{*-1}] = \frac{1}{M}$ .

Dans les prochaines sous-sections, nous allons expliquer chaque mécanisme de diffusion en détail. Pour chacun de ceux-ci, nous donnerons une brève explication physique du phénomène. Puis, nous calculerons à quel taux ceux-ci se produisent ainsi que la cinématique post-diffusion des particules en jeux dans le processus.

## 2.3. Processus de diffusion des électrons

Les processus de diffusion d'un électron ou d'un trou dans un cristal sont multiples. Les principaux mécanismes de diffusion sont l'émission ou l'absorption de phonons, la collision avec des impuretés ou avec d'autres porteurs de charges, l'ionisation d'autres charges, la recombinaison et les diffusions de surface [87, 22, 64, 66]. Dans un modèle semi-classique, ces porteurs de charge se déplacent de manière classique entre les collisions, la distance entre les processus étant donnée approximativement par la longueur de parcours moyen. Ces processus sont considérés comme instantanés et la cinématique des électrons/trous s'en trouve changée après la diffusion.

Le schéma 2.7 illustre de manière synthétisée les divers mécanismes de diffusion mentionnés plus haut que peut entreprendre l'électron ou le trou se trouvant dans un cristal.

**Tableau 2.2.** Comparaison des équations de cinématiques entre les différents modèles mathématiques des structures de bandes.

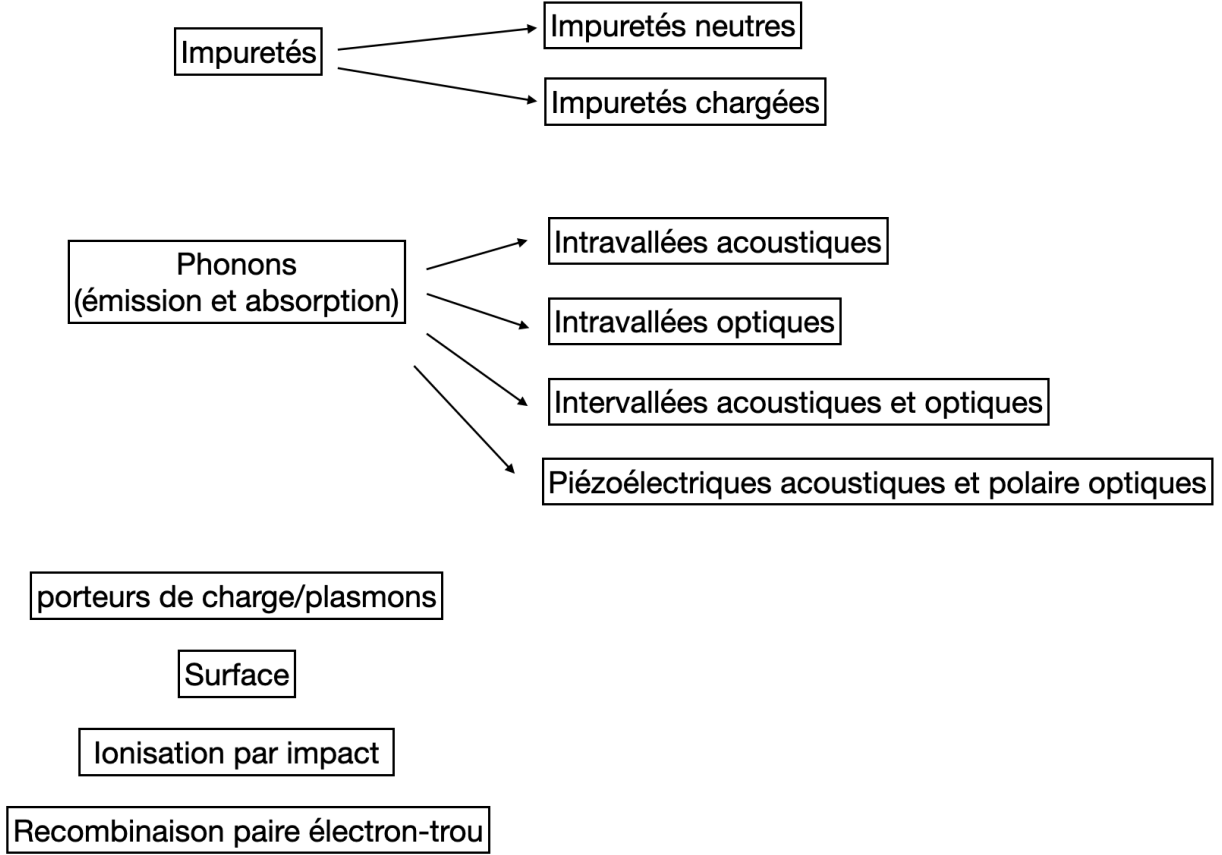
|                                                                                  | $e^-$<br>libre                             | Paraboli-<br>que<br>sphérique              | Parabolique<br>ellipsoïdale                          | Ellipsoïdale non<br>parabolique                                                |
|----------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------|--------------------------------------------|------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------|
| Quasi-quantité<br>de mouvement                                                   | $\hbar \mathbf{k}$                         | $\hbar \mathbf{k}$                         | $\hbar \mathbf{k}$                                   | $\hbar \mathbf{k}$                                                             |
| HV                                                                               | —                                          | —                                          | $\mathbf{k}^* = \sqrt{\frac{m_c}{M}} T_i \mathbf{k}$ | $\mathbf{k}^* = \sqrt{\frac{m_c}{M}} T_i \mathbf{k}$                           |
| Énergie $E(\mathbf{k})$                                                          | $\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$                 | $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$                 | $\frac{\hbar^2 k^{*2}}{2m_c}$                        | $\frac{-1 + \sqrt{1 + 4\alpha \frac{\hbar^2 k^{*2}}{2m_c}}}{2\alpha}$          |
| $\frac{m}{\hbar} \langle \mathbf{p} \rangle = \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$ | $\hbar \mathbf{k}$                         | $\hbar \mathbf{k}$                         | $T_i^T \frac{m_c}{M} T_i \hbar \mathbf{k}$           | $\frac{1}{1 + 2\alpha E(\mathbf{k})} T_i^T \frac{m_c}{M} T_i \hbar \mathbf{k}$ |
| $\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$ | $\frac{\hbar \mathbf{k}}{m_0}$             | $\frac{\hbar \mathbf{k}}{m^*}$             | $T_i^T \frac{1}{M} T_i \hbar \mathbf{k}$             | $\frac{1}{1 + 2\alpha E(\mathbf{k})} T_i^T \frac{1}{M} T_i \hbar \mathbf{k}$   |
| $\mathbf{a}_{tot} = \frac{1}{m} \frac{d\langle \mathbf{p} \rangle}{dt}$          | $\frac{\hbar}{m_0} \frac{d\mathbf{k}}{dt}$ | $\frac{\hbar}{m^*} \frac{d\mathbf{k}}{dt}$ | $T_i^T \frac{1}{M} T_i \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt}$ | équation 2.2.45                                                                |

### 2.3.1. Théorie et calculs des probabilités de diffusion

Avant de se lancer dans la description détaillée de chacun des processus de diffusions d'un porteur de charges dans un cristal, posons les bases théoriques du calcul des taux de diffusions. Cette première sous-section s'inspire fortement du développement de Jacoboni [64, 66]. On s'imagine que le porteur de charge initial ou non perturbé est décrit par une fonction d'onde de Bloch  $|\mathbf{k}\rangle$  et que la fonction d'onde au complet du système se sépare en deux parties. La première est la fonction d'onde de Bloch et l'autre la fonction d'onde du cristal  $|c\rangle$  :

$$|\mathbf{k}, c\rangle = |\mathbf{k}\rangle |c\rangle. \quad (2.3.1)$$

Le taux de transition différentiel d'un état initial  $|\mathbf{k}, c\rangle$  vers un état final  $|\mathbf{k}', c'\rangle$  à la suite d'une perturbation avec un Hamiltonien  $H'$  est donné par la règle d'or de Fermi (pour un continuum d'états):



**Fig. 2.7.** Mécanismes de diffusions des électrons et des trous dans un cristal.

$$P(\mathbf{k}, c; \mathbf{k}', c) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}', c' | H' | \mathbf{k}, c \rangle|^2 \delta [E(\mathbf{k}', c') - E(\mathbf{k}, c)] . \quad (2.3.2)$$

où  $E(\mathbf{k}, c)$  représente l'énergie totale du système. Chacun des mécanismes de diffusion mentionnés plus haut est décrit par un Hamiltonien d'interaction  $H'$ . En remplaçant cet Hamiltonien dans l'expression 2.3.2, on peut ainsi calculer la probabilité de diffusion par unité de temps. C'est d'ailleurs ce que nous ferons dans les prochaines sous-sections.

### 2.3.2. Diffusions avec des phonons

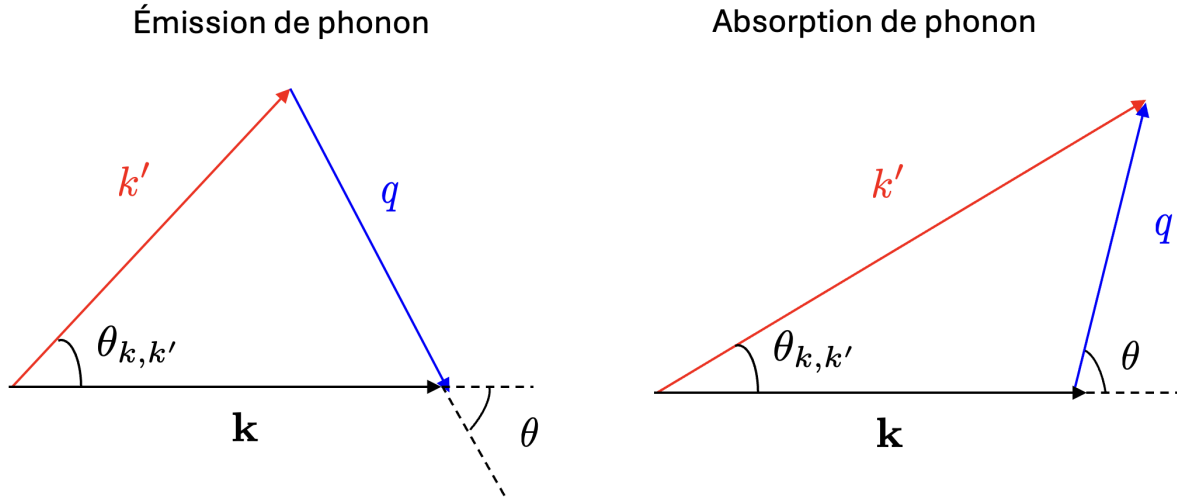
Les phonons sont des quasi-particules décrivant le mouvement collectif ou oscillation des atomes dans un cristal. La fréquence d'oscillation des phonons ( $\omega$ ) dépend de leur quantité de mouvement ( $\mathbf{q}$ ). C'est ce qu'on appelle la relation de dispersion. Pour le Si et le Ge, les relations de dispersion  $\omega(\mathbf{q})$  des phonons sont représentées de manière schématique à la figure 2.9. Il existe trois modes pour les phonons acoustiques : longitudinal (LA), transverse rapide (TFA) et transverse lent (TSA). La relation de dispersion pour les phonons acoustiques est

approximativement linéaire, du moins à basse quantité de mouvement  $\mathbf{q}$ . Pour les phonons optiques, il existe deux modes : longitudinal (LO) et transverse (TO). Ces deux modes ont une énergie relativement constante, peu importe la valeur de  $\mathbf{q}$ .

Un électron ou un trou peut interagir, en se déplaçant dans un cristal périodique, avec les atomes du réseau et émettre ou absorber un phonon. Dans un tel cas, le vecteur d'onde initial de l'électron ou du trou est de  $\mathbf{k}$ , celui du phonon  $\mathbf{q}$  et celui de l'électron diffusé est  $\mathbf{k}'$ . Par conservation de la quasi-quantité de mouvement,  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} \pm \mathbf{q}$ , on peut écrire :

$$k'^2 = k^2 + q^2 \pm 2kq \cos \theta. \quad (2.3.3)$$

où  $\theta$  est l'angle entre  $\mathbf{k}$  et  $\mathbf{q}$  et le signe  $+$  est pour les absorptions alors que le signe  $-$  est pour les émissions de phonons. La figure 2.8 montre ce processus de diffusion. Rappelons nous aussi qu'un vecteur  $\mathbf{k}'$  peut s'écrire en ajoutant un vecteur du réseau réciproque  $\mathbf{G}$  ou encore  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} \pm \mathbf{q} - \mathbf{G}$ .



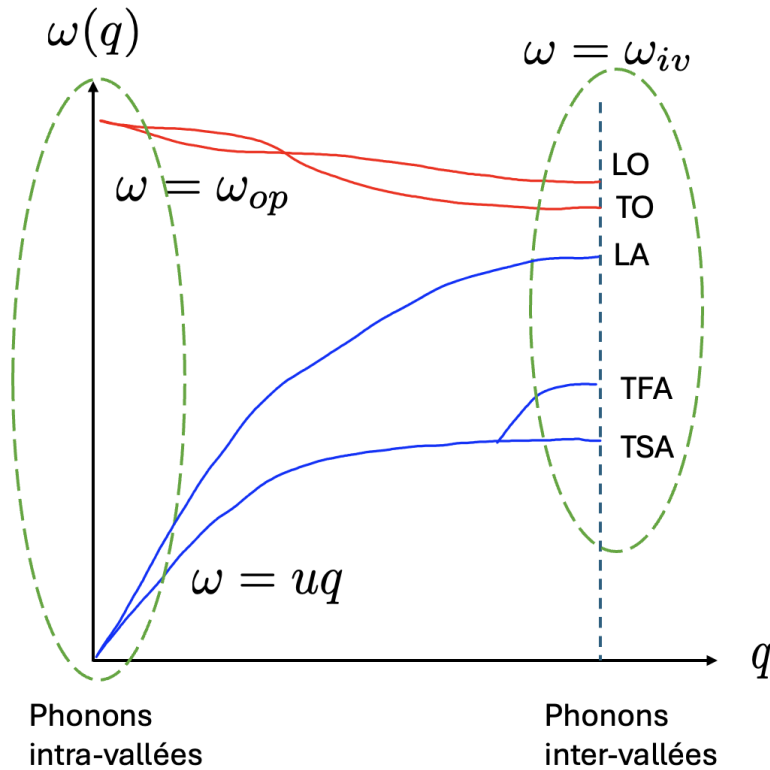
**Fig. 2.8.** Représentation schématique de l'émission et de l'absorption de phonons de quantité de mouvement  $\mathbf{q}$  par un électron ou un trou avec une quantité de mouvement initiale  $\mathbf{k}$ . L'angle entre les deux est  $\theta$ . Le porteur de charge, après la diffusion, se retrouve dans l'état final  $\mathbf{k}'$ . L'angle entre  $\mathbf{k}$  et  $\mathbf{k}'$  est représenté par  $\theta_{k,k'}$ .

Les phonons qui ont une quantité de mouvement proche de 0 sont considérés comme des phonons intravallés, qu'ils soient acoustiques ou optiques, car ils n'ont généralement pas une assez grande quantité de mouvement pour faire bouger les électrons et les trous d'une bande ou d'une vallée à une autre.

À l'opposé, les phonons ayant une quantité de mouvement proche de la première zone de Brillouin, qu'on appelle phonons intervallés, ont suffisamment d'impulsion pour faire

changer les porteurs de charges de vallées. En effet, dans l'espace réciproque du Ge et du Si, les vallées sont généralement séparées par une impulsion proche de l'extrémité de la première zone de Brillouin. Tout comme les phonons intravallés, les phonons intervallés peuvent être acoustique ou optiques. À cette quantité de mouvement, la relation de dispersion est environ constante pour ces deux modes, seule l'énergie varie un peu. La figure 2.9 montre de manière schématique ces relations et la différence entre phonons intra et intervallés.

À noter que, pour des phonons avec quantité de mouvement  $X$  (où la branche TFA et TSA se séparent), les phonons LA et TO partagent la même branche, ce qui n'est pas représenté à la figure 2.9. À cette valeur de  $q$ , ces deux branches devraient avoir une relation de dispersion moins constante que ce qui est représenté. Également, proche de la vallée  $L$ , la séparation en énergie entre les phonons acoustiques transverses et longitudinale devrait être plus grande. Bref, il s'agit d'une représentation schématique approximative.



**Fig. 2.9.** Représentation schématique de la relation de dispersion des phonons dans le Si et le Ge. En bleu, les trois branches acoustiques (LA, TFA et TSA). En rouge, les deux branches optiques (LO et TO). En bas à gauche, nous avons représenté la relation de dispersion linéaire des phonons acoustiques. En haut à gauche, celle constante des phonons optiques et à droite, la relation constante aussi pour les phonons intervallées, tant optique qu'acoustiques.

Calculons maintenant le taux d'émission et d'absorption de phonons par les électrons et les trous. Commençons par les phonons acoustiques, pour lesquels les atomes voisins bougent dans la même direction à  $q \approx 0$ . Pour ce genre de diffusion, l'Hamiltonien d'interaction est donné, par [71, 87] :

$$H'_A = D_A \frac{d\mathbf{u}}{d\mathbf{r}}. \quad (2.3.4)$$

où  $d\mathbf{u}/d\mathbf{r}$  est le déplacement des atomes par rapport à leur noeud dans le réseau cristallin et  $D_A$  est le tenseur du potentiel de déformation pour des phonons acoustiques. Ce dernier décrit le déplacement de la bande de conduction pour les électrons et la bande de valence pour les trous. Il dépend donc, comme nous allons le voir, de la bande dans laquelle se trouve le porteur de charge. En d'autres mots, le déplacement cohérents des atomes correspond aux phonons (acoustiques dans ce cas-ci) ce qui affecte le potentiel périodique du cristal dans lequel les charges se trouvent. Le potentiel de déformation traduit ce déplacement du réseau en décalage très léger des bandes d'énergie.

Dans l'approximation du médium continu, la position des atomes est décrite en fonction des opérateurs d'échelle [71] :

$$\mathbf{u} = \left( \frac{\hbar}{2\rho V \omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} (a_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} + a_{\mathbf{q}}^\dagger e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}) \boldsymbol{\xi}. \quad (2.3.5)$$

où  $\omega_{\mathbf{q}}$  est la fréquence angulaire du phonon,  $\rho$  la densité du cristal,  $V$  son volume,  $\boldsymbol{\xi}$  la polarisation du phonon,  $\mathbf{r}$  la coordonnée spatiale de l'électron et  $a_{\mathbf{q}}^\dagger$  et  $a_{\mathbf{q}}$  et sont les opérateurs de création et d'annihilation de phonons (acoustiques et optiques) respectivement. La quantité de mouvement associée à l'opérateur  $a_{\mathbf{q}}$  est donc négative, car elle détruit un phonon.

Pour des phonons optiques, pour lesquels les atomes voisins bougent dans des directions opposées à  $q \approx 0$ , l'expression de l'Hamiltonien d'interaction est plutôt :

$$H'_{\text{op}} = D_{\text{op}} \mathbf{u}. \quad (2.3.6)$$

Pour la suite des calculs, nous allons utiliser l'expression des phonons acoustiques (équation 2.3.5). Quand nous serons rendus à traiter les phonons optiques, nous reprendrons les mêmes expressions mathématiques de l'hamiltonien, mais en divisant par un facteur  $q^2$ . Nous utiliserons aussi un tenseur  $D$  avec des éléments différents, et une relation de dispersion différente pour la fréquence  $\omega_{\mathbf{q}}$

Bref, on remplace l'expression 2.3.5 dans l'équation 2.3.4 et on trouve :

$$H' = \left( \frac{\hbar}{2\rho V \omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} (a_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} + a_{\mathbf{q}}^{\dagger} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}) i D_{lj} q^l \xi^j. \quad (2.3.7)$$

où la sommation sur  $l$  et  $j$  est implicite. Il est à noter que la quantité de mouvement associée à l'opérateur  $a_{\mathbf{q}}^{\dagger}$  est négative, elle détruit un phonon. Finalement, on remplace cet Hamiltonien  $H'$  dans la règle d'or de Fermi soit l'équation 2.3.2. Calculons d'abord l'élément de matrice suivant pour simplifier les calculs :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}', c' | H' | \mathbf{k}, c \rangle &= \left( \frac{\hbar}{2\rho V \omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} D_{lj} q^l \xi^j \langle \mathbf{k}' | \langle c' | (a_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} + a_{\mathbf{q}}^{\dagger} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}) | \mathbf{k} \rangle | c \rangle \\ &= \left( \frac{\hbar}{2\rho V \omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} D_{lj} q^l \xi^j (\langle c' | a_{\mathbf{q}} | c \rangle \langle \mathbf{k}' | e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | \mathbf{k} \rangle + \langle c' | a_{\mathbf{q}}^{\dagger} | c \rangle \langle \mathbf{k}' | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | \mathbf{k} \rangle). \end{aligned} \quad (2.3.8)$$

Les opérateurs d'échelle, lorsqu'appliqués sur les états du cristal, redonnent la racine carré du nombre d'occupation moyen des phonons :

$$\langle c' | a_{\mathbf{q}} | c \rangle = \sqrt{N_q} \delta_{c', c-1} \quad \langle c' | a_{\mathbf{q}}^{\dagger} | c \rangle = \sqrt{N_q + 1} \delta_{c', c+1}. \quad (2.3.9)$$

où le terme de gauche correspond à l'absorption de phonons et le terme de droite à l'émission de phonons alors que  $N_q$  est le nombre d'occupation moyen des phonons, donnée par une distribution de Bose-Einstein.

On peut ensuite remettre l'expression précédente dans l'équation 2.3.8 et enlever les delta de Kronecker des expressions 2.3.9 :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}', c' | H' | \mathbf{k}, c \rangle &= \left( \frac{\hbar}{2\rho V \omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} D_{lj} q^l \xi^j \left[ \frac{\sqrt{N_q}}{\sqrt{N_q + 1}} \right] \langle \mathbf{k}' | e^{\pm i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | \mathbf{k} \rangle \\ &= \left( \frac{\hbar}{2\rho V \omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} D_{lj} q^l \xi^j \left[ \frac{\sqrt{N_q}}{\sqrt{N_q + 1}} \right] \frac{1}{N} \int d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k} \pm \mathbf{q} - \mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.3.10)$$

où on a séparé le problème en deux. La partie du haut avec  $N_q$  et le signe positif (+) correspond à l'absorption de phonon et la partie du bas avec  $N_q$  et le signe négatif (−) correspond à l'émission de phonons. le facteur  $1/N$  vient du nombre de cellules unitaires. Par la suite, on substitue  $\mathbf{r} = \mathbf{r}' + \mathbf{R}$  dans l'intégrale où  $\mathbf{R}$  est un vecteur du réseau cristallin. De plus, on change l'intégrale sur le cristal par une somme d'intégrales sur les cellules.

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}', c' | H' | \mathbf{k}, c \rangle &= \sum_{\mathbf{R}} \left( \frac{\hbar}{2\rho V \omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} D_{lj} q^l \xi^j \left[ \frac{\sqrt{N_q}}{\sqrt{N_q + 1}} \right] \frac{1}{N} \\ &\times \int_{\text{cellule}} d\mathbf{r}' e^{i(\mathbf{k} \pm \mathbf{q} - \mathbf{k}') \cdot (\mathbf{r}' + \mathbf{R})} u_{n\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}' + \mathbf{R}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}' + \mathbf{R}). \end{aligned} \quad (2.3.11)$$

On utilise la propriété de la périodicité, soit  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ . On sait aussi que  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} \pm \mathbf{q} - \mathbf{G}$ , que l'on remplace dans l'équation précédente :

$$\langle \mathbf{k}', c' | H' | \mathbf{k}, c \rangle = \sum_{\mathbf{R}} \left( \frac{\hbar}{2\rho V \omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} D_{lj} q^l \xi^j \left[ \frac{\sqrt{N_q}}{\sqrt{N_q + 1}} \right] \frac{1}{N} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}} \int_{\text{cellule}} d\mathbf{r}' e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}'} u_{n\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}') u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}'). \quad (2.3.12)$$

et on combine le tout à l'identité  $\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}} = N$  car  $e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}} = 1$  pour simplifier le terme  $1/N$ . La somme sur  $\mathbf{R}$  se faisant sur les  $N$  cellules :

$$\langle \mathbf{k}', c' | H' | \mathbf{k}, c \rangle = \left( \frac{\hbar}{2\rho V \omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} D_{lj} q^l \xi^j \left[ \frac{\sqrt{N_q}}{\sqrt{N_q + 1}} \right] \int_{\text{cellule}} d\mathbf{r}' e^{i(\mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}'} u_{n\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}') u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}'). \quad (2.3.13)$$

Les termes où  $\mathbf{G} = 0$  sont des diffusions normales alors que ceux où  $\mathbf{G} \neq 0$  sont des diffusions Umklapp.

Ayant simplifié cet élément de matrice, on le met au carré dans l'expression 2.3.2 en oubliant les indices  $c$  et  $c'$  pour l'énergie  $E(\mathbf{k})$  et la probabilité  $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ . L'énergie est en fait simplement celle donnée par la relation de dispersion de la structure de bande, alors que la probabilité qu'un électron ou un trou de vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  soit diffusé (émission ou absorption) par un phonon en un électron de vecteur d'onde  $\mathbf{k}'$  est :

$$P(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\pi}{\rho V \omega_{\mathbf{q}}} \left[ \frac{N_q}{N_q + 1} \right] I(\mathbf{k}, \mathbf{k}') |D_{ij} q_j \xi_i|^2 \delta[E(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k}) \mp \hbar \omega_{\mathbf{q}} + \Delta E_{fi}]. \quad (2.3.14)$$

où  $\hbar \omega_{\mathbf{q}}$  est l'énergie du phonon,  $\Delta E_{fi}$  la différence d'énergie entre la vallée initiale dans laquelle l'électron ou le trou est et la vallée finale dans laquelle il se retrouve. Si, après la perturbation, le porteur de charges reste dans la même bande ou est transporté dans une bande équivalente (e.g. une autre bande  $L$  si initialement dans une bande  $L$ ), alors  $\Delta E_{fi} = 0$ . Quant à  $I(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ , c'est l'intégrale de chevauchement, définie par :

$$I(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \left| \int_{\text{cellule}} d\mathbf{r}' e^{i(\mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}'} u_{n\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}') u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \right|^2. \quad (2.3.15)$$

Il est pratiquement impossible de trouver la valeur exacte de cette intégrale de chevauchement sans la forme exacte de  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ . Dans la littérature, plusieurs approximations de cette intégrale existent et varient selon le type de phonons et le porteur de charge impliqué. Nous nous contenterons d'encourager le lecteur à consulter Jacoboni [64] pour les différentes implémentations de  $I(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ . À toutes fins pratiques, nous considérerons que ce terme vaut 1, ce qui est une bonne approximation pour les électrons et les trous si l'on ne considère qu'une bande de valence sphérique simple à  $\Gamma$ .

### 2.3.2.1. Phonons acoustiques intravallées.

Nous voulons tout d'abord traiter l'émission ou l'absorption de phonons acoustiques intravallées par un porteur de charges. Par acoustique, on entend les phonons ayant une relation de dispersion linéaire, que ce soit la branche longitudinale ou l'une des deux branches transverses. Par intravallée, on entend des phonons avec une petite quantité de mouvement, suffisamment petite pour que l'électron, après diffusion, ne puisse pas changer de bandes. Dans ce régime (petite quantité de mouvement  $q$ ), la relation de dispersion linéaire est assez exacte pour les phonons acoustiques.

#### Électrons

Commençons par la diffusion de phonons (émission et absorption) par des électrons. Comme on s'intéresse à des diffusions intravallées le terme  $\Delta E_{fi}$  dans l'équation 2.3.14 est égal à zéro. Simplifions davantage l'expression avec, notamment, l'intégrale de chevauchement que l'on peut approximer comme étant égale à 1, comme cela a été discuté plus haute. Ensuite, comme on traite l'émission et l'absorption de phonons acoustiques, on pose  $w_q = qu$  où  $u$  est la vitesse du son. On doit séparer la probabilité de diffusion en deux, une probabilité pour les phonons acoustiques longitudinaux et une pour les phonons transverses que l'on écrit ainsi à partir de l'équation des transformations de HV (équation 2.2.29) :

$$P(\mathbf{k}^*, \mathbf{k}'^*)_l = \frac{\pi}{\rho V u_l q} \left[ \frac{N_q}{N_q + 1} \right] (\Xi_d + \Xi_u \cos^2 \theta)^2 q^2 \delta[E(\mathbf{k}'^*) - E(\mathbf{k}^*) \mp \hbar u_l q]. \quad (2.3.16)$$

$$P(\mathbf{k}^*, \mathbf{k}'^*)_t = \frac{\pi}{\rho V u_t q} \left[ \frac{N_q}{N_q + 1} \right] (\Xi_u \sin \theta \cos \theta)^2 q^2 \delta[E(\mathbf{k}'^*) - E(\mathbf{k}^*) \mp \hbar u_t q]. \quad (2.3.17)$$

où  $u_l$  et  $u_t$  sont les vitesses du son longitudinales et transverses (la moyenne des deux branches) respectivement. Les termes  $\Xi_d$  et  $\Xi_u$  sont les constantes de déformations de dilatation et de cisaillement uniaxial respectivement [57]. L'angle  $\theta$  est l'angle entre  $\mathbf{k}$  et  $\mathbf{q}$ .

Le potentiel de déformation de dilatation correspond au changement d'énergie de toutes les vallées sous l'effet de compression ou de dilatation; il est donc associé le plus souvent aux phonons longitudinaux pour lesquels les atomes vibrent en direction parallèle à la quantité de mouvement du phonon. Le potentiel de déformation de cisaillement correspond plutôt au changement d'énergie d'une seule vallée par rapport aux autres quand un cisaillement a lieu. Il est donc le plus souvent associé aux phonons transverses pour lesquelles les atomes vibrent de manière perpendiculaire à la direction de propagation du phonon.

On peut montrer que l'anisotropie entre les deux taux est négligeable [29] de sorte qu'on écrit, par simplicité, un seul taux moyen comprenant l'émission et l'absorption de phonons longitudinaux et transverses :

$$P(\mathbf{k}^*, \mathbf{k}'^*) = \frac{\pi q}{\rho V u} \left[ \frac{N_q}{N_q + 1} \right] D_{ac}^2 \delta[E(\mathbf{k}'^*) - E(\mathbf{k}^*) \mp \hbar u q]. \quad (2.3.18)$$

où  $u$  est la vitesse moyenne du son dans le matériau. Dans la littérature [64, 87], on suggère d'utiliser  $u = \frac{1}{3}(u_l + 2u_t)$  car il y a une branche longitudinale et deux branches transverses. SuperCDMS a décidé d'utiliser plutôt la densité d'état des phonons dans chacun des modes pour savoir quelle est la proportion de phonons acoustiques dans chacune de ces branches. Le tableau 2.3 montre ces valeurs pour le Ge et le Si. Cette méthode est, selon nous, meilleure, car elle ne change rien à la règle d'or de Fermi et préserve la validité du calcul tout en ayant une valeur plus exacte de la vitesse du son moyenne des phonons.

**Tableau 2.3.** Tableau des proportions de phonons acoustiques dans chaque mode [130]

| Matériau | $TSA$   | $TFA$   | $LA$     |
|----------|---------|---------|----------|
| Si       | 0,531   | 0,376   | 0,093    |
| Ge       | 0.36677 | 0.53539 | 0.097834 |

Nous avons également remplacé les deux expressions du tenseur du potentiel de déformation par une seule constante, soit le potentiel acoustique de déformation  $D_{ac}$ . Pour approximer cette dernière, on commence par prendre la valeur moyenne sur le carré des expressions longitudinales et transverses du potentiel de déformation en intégrant de 0 à  $\pi$  :

$$\Xi_{LA}^2 = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \Xi_{LA}(\theta)^2 d\theta = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi (\Xi_d + \Xi_u \cos^2 \theta)^2 d\theta = \Xi_d^2 + \Xi_d \Xi_u + \frac{3}{8} \Xi_u^2. \quad (2.3.19)$$

$$\Xi_{TA}^2 = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \Xi_{TA}(\theta)^2 d\theta = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi (\Xi_u \sin \theta \cos \theta)^2 d\theta = \frac{\Xi_u^2}{8}. \quad (2.3.20)$$

De là, on estime que la constante du potentiel de déformation acoustique  $D_{ac}$  est donnée par :

$$D_{ac}^2 = \Xi_{LA}^2 + \left(\frac{u_l}{u_t}\right)^2 \Xi_{TA}^2. \quad (2.3.21)$$

Il existe plusieurs articles dans la littérature qui se sont penchés sur la valeur de ces différents potentiels de déformation (voir tableaux 4.3 et 4.5), que ce soit en les mesurant expérimentalement ou les estimant par la théorie. Certains préfèrent donner uniquement la valeur du potentiel de déformation  $D_{ac}$ . D'autres donnent les valeurs des potentiels de dilatation  $\Xi_u$  et de cisaillement  $\Xi_u$  alors que certains donnent les valeurs intermédiaires longitudinales  $\Xi_{LA}$  et transverses  $\Xi_{TA}$ . Nous reviendrons sur ces valeurs dans le chapitre 4 plus tard. Pour le moment, on sait que  $D_{ac}$  varie autour de quelques eV, mais varie selon le type de matériau ainsi que du fait qu'il s'agit d'un trou ou d'un électron. [142]

Revenons finalement à ce qui nous intéresse, soit la probabilité qu'un électron, initialement dans l'état  $\mathbf{k}$ , soit diffusé dans l'état final  $\mathbf{k}'$  en émettant ou absorbant un phonon acoustique avec un vecteur d'onde  $\mathbf{q}$ . On intègre la probabilité  $P(\mathbf{k}^*, \mathbf{k}'^*)$  de l'équation 2.3.18 sur tous les états finaux  $d\mathbf{k}'$  :

$$P(\mathbf{k}^*) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int P(\mathbf{k}^*, \mathbf{k}'^*) d\mathbf{k}'. \quad (2.3.22)$$

On commence par changer la variable d'intégration pour  $\mathbf{k}'^*$  au lieu de  $\mathbf{k}'$  en sachant que :

$$d\mathbf{k}' = dk'_x dk'_y dk'_z = \sqrt{\frac{m_l}{m_c}} dk'_x \sqrt{\frac{m_t}{m_c}} dk'_y \sqrt{\frac{m_t}{m_c}} dk'_z = \left(\frac{m_d}{m_c}\right)^{3/2} d\mathbf{k}'^*.$$

$$P(\mathbf{k}^*) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{\pi D_{ac}^2 q}{\rho V u} \left[ \frac{N_q}{N_q + 1} \right] \delta[E(\mathbf{k}'^*) - E(\mathbf{k}^*) \mp \hbar u q] \left(\frac{m_d}{m_c}\right)^{3/2} d\mathbf{k}'^*. \quad (2.3.23)$$

Après quoi, on procède à un autre changement de variable pour transformer l'intégrale sur  $d\mathbf{k}'^*$  en une intégrale en coordonnées sphériques sur les  $d\mathbf{q}^*$  où l'axe des  $\mathbf{k}$  devient l'axe polaire. On peut se servir de l'équation  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} \pm \mathbf{q}$  pour la transformation :

$$\begin{aligned}
P(\mathbf{k}^*) &= \pm \frac{D_{ac}^2 m_d^{3/2}}{8\pi^2 \rho u m_c^{3/2}} \int q \left[ \begin{matrix} N_q \\ N_q + 1 \end{matrix} \right] \delta[E(\mathbf{k}'^*) - E(\mathbf{k}^*) \mp \hbar u q] d\mathbf{q}^* \\
&= \pm \frac{D_{ac}^2 m_d^{3/2}}{8\pi^2 \rho u m_c^{3/2}} \iiint q \left[ \begin{matrix} N_q \\ N_q + 1 \end{matrix} \right] \delta[E(\mathbf{k}'^*) - E(\mathbf{k}^*) \mp \hbar u q] d\phi \sin \theta d\theta q^{*2} dq^*. \quad (2.3.24)
\end{aligned}$$

où le signe négatif  $(-)$  du  $\pm$  devant l'intégrale va être annulé dans le cas de l'émission de phonons comme nous allons le voir, redonnant toujours un taux de probabilité positif. Il faut trouver la relation permettant de trouver le scalaire  $q$  en fonction du scalaire  $q^*$  pour avoir une intégrale entièrement sur  $q^*$ . On commence par exprimer la grandeur de  $q$  comparativement à celle dans le référentiel de Herring-Vogt  $q^*$  par :

$$q \equiv q^* \left[ \frac{m_l}{m_c} \cos^2 \theta_{q^*v} + \frac{m_t}{m_c} \sin^2 \theta_{q^*v} \right]^{1/2} = q^* \left[ \frac{m_l - m_t}{m_c} \cos^2 \theta_{q^*v} + \frac{m_t}{m_c} \right]^{1/2} = q^* \left[ \frac{m_q}{m_c} \right]^{1/2}. \quad (2.3.25)$$

où  $m_q = \left[ \frac{m_l - m_t}{m_c} \cos^2 \theta_{q^*v} + \frac{m_t}{m_c} \right]^{1/2}$  et  $\theta_{q^*v}$  est l'angle entre  $q^*$  et l'axe de la vallée  $(1,0,0)$  soit celle que nous avons choisie comme direction longitudinale dans le référentiel de Herring-Vogt. Cela implique donc la relation suivante aussi :

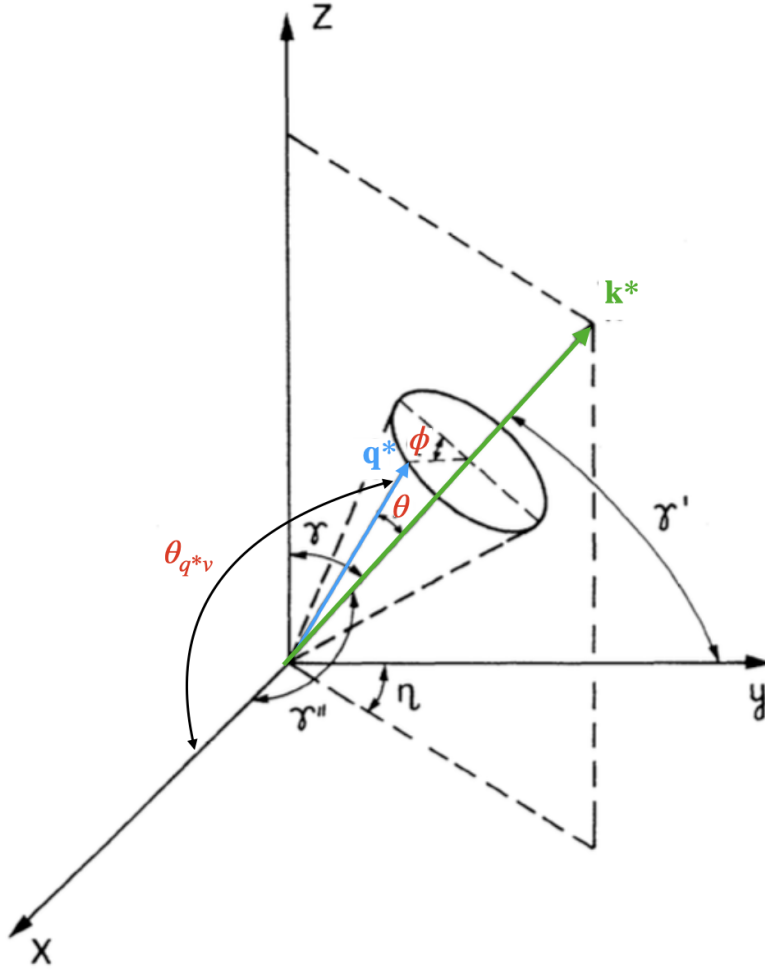
$$\mathbf{q}^* \cdot \hat{\mathbf{x}} = q^* \cos \theta_{q^*v} = q_x^*. \quad (2.3.26)$$

Essayons maintenant d'exprimer l'angle  $\theta_{q^*v}$  en fonction des angles  $\theta$  et  $\phi$  où ce dernier est mesuré en sens antihoraire autour de  $\mathbf{k}^*$  en partant de la direction qui pointe vers l'axe  $+z$ . La figure 2.10 montre la relation entre ces différents angles de même que les angles  $\gamma$ ,  $\gamma'$  et  $\gamma''$  soient les angles entre  $\mathbf{k}^*$  et les axes  $x, y$  et  $z$  respectivement et l'angle  $\eta$  soit celui entre l'axe  $y$  et la composante du plan  $xy$  de  $\mathbf{k}^*$ .

On décompose le vecteur  $\mathbf{q}^*$  en termes de tous ces angles :

$$\begin{aligned}
q_x^* &= q^* (\cos \theta \cos \gamma'' - \sin \theta \cos \phi \sin \eta \cos \gamma + \sin \theta \sin \phi \cos \eta) \\
q_y^* &= q^* (\cos \theta \cos \gamma' - \sin \theta \cos \phi \cos \eta \cos \gamma - \sin \theta \sin \phi \sin \eta) \\
q_z^* &= q^* (\cos \theta \cos \gamma + \sin \theta \cos \phi \sin \gamma). \quad (2.3.27)
\end{aligned}$$

Puis, on compare l'expression pour  $q_x^*$  à l'équation 2.3.26 et de cette dernière, on obtient une expression de l'angle  $\theta_{q^*v}$  en fonction des angles d'intégration :



**Fig. 2.10.** Représentation des angles entre les axes du système de coordonnées, le vecteur d'impulsion initial du porteur de charge  $\mathbf{k}^*$  et la quantité de mouvement du phonon  $\mathbf{q}^*$ . Tiré de [64].

$$\cos \theta_{q^*v} = (\cos \theta \cos \gamma'' - \sin \theta \cos \phi \sin \eta \cos \gamma + \sin \theta \sin \phi \cos \eta). \quad (2.3.28)$$

On peut remplacer cette dernière expression dans l'équation 2.3.24 et la triple intégrale devient alors :

$$P(\mathbf{k}^*) = \pm \frac{D_{ac}^2 m_d^{3/2}}{8\pi^2 \rho u m_c^{3/2}} \iiint \left( \frac{m_q}{m_c} \right)^{1/2} q^{3*} \begin{bmatrix} N_q \\ N_q + 1 \end{bmatrix} \delta[E(\mathbf{k}'^*) - E(\mathbf{k}^*) \mp \hbar u q] d\phi \sin \theta d\theta dq^*. \quad (2.3.29)$$

où  $m_q$  est maintenant exprimé en termes des angles  $\theta$  et  $\phi$ . Cela rend le calcul de la triple intégrale plus exacte, mais aussi plus difficile. Ici, nous nous contenterons, pour le reste du développement mathématique, d'approximer  $m_q \approx m_d$  comme c'est fait dans la majorité des articles sur le transport par méthode de Monte-Carlo des porteurs de charge [66]. Nous sommes conscients que ce n'est pas la meilleure des approximations, surtout pour le Ge, pour qui le ratio entre la masse longitudinale  $m_l$  et la masse transverse  $m_t$  est assez grand ( $\frac{m_l}{m_t} \approx 19,6$ ).

Nous voulions tout de même montrer qu'il est possible de développer une expression exacte de la dépendance angulaire, car, à ma connaissance, ce n'est pas fait ailleurs dans la littérature, ou du moins pas en fonction des angles polaires entre  $\mathbf{q}^*$  et  $\mathbf{k}^*$ . Nous voulons toutefois donner un dernier détail sur la manière de réaliser cette intégrale, notamment sur les bornes de celle-ci. Il faudrait alors prendre la dérivée de l'expression 2.3.25 de  $\mathbf{q}^*$  par rapport à  $\theta$  et  $\phi$  et mettre ces dérivées égales à zéro. On poserait ensuite  $\mathbf{q}^* = 0$  pour trouver l'autre borne. Nous reviendrons sur l'expression exacte de  $\mathbf{q}^*$  un peu plus tard dans cette sous-section.

Bref, avec  $m_q \approx m_d$ , on repart de l'équation 2.3.24 et on trouve :

$$P(\mathbf{k}^*) = \pm \frac{D_{ac}^2 m_d^2}{4\pi \rho u m_c^2} \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \int_0^\pi q^{*3} \begin{bmatrix} N_q \\ N_q + 1 \end{bmatrix} \delta[E(\mathbf{k}'^*) - E(\mathbf{k}^*) \mp \hbar u q] \sin \theta d\theta dq^*. \quad (2.3.30)$$

où nous avons intégré de 0 à  $2\pi$  sur  $\phi$  ce qui donne un facteur  $2\pi$  quand il n'y a plus de dépendance sur cet angle dans l'expression de  $m_q$ . On intègre ensuite le reste du taux en faisant le changement de variables  $\sin \theta d\theta = -d \cos \theta$  et on se sert de l'équation 2.2.42 pour réécrire les expressions de l'énergie à l'intérieur du delta Dirac :

$$P(\mathbf{k}^*) = \mp \frac{D_{ac}^2 m_d^2}{4\pi \rho u m_c^2} \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \int_{-1}^1 \left\{ q^{*3} \begin{bmatrix} N_q \\ N_q + 1 \end{bmatrix} \times \delta \left[ \frac{-1 + \sqrt{1 + 4\alpha \frac{\hbar^2 k^{*2}}{2m_c}}}{2\alpha} - \frac{-1 + \sqrt{1 + 4\alpha \frac{\hbar^2 k^{*2}}{2m_c}}}{2\alpha} \mp \hbar q u \right] d(\cos \theta) dq^* \right\}. \quad (2.3.31)$$

On remplace ensuite  $\mathbf{k}'^*$  par l'expression 2.3.3 et on simplifie quelque peu l'intérieur du delta Dirac :

$$\begin{aligned}
P(\mathbf{k}^*) = & \mp \frac{D_{ac}^2 m_d^2}{4\pi \rho u m_c^2} \int_{q_{\min}^*}^{q_{\max}^*} \int_{-1}^1 \left\{ q^{*3} \begin{bmatrix} N_q \\ N_q + 1 \end{bmatrix} \right. \\
& \times \delta \left[ \frac{\sqrt{1 + 4\alpha \frac{\hbar^2}{2m_c} (k^{*2} + q^{*2} \pm 2q^* k^* \cos \theta)}}{2\alpha} - \frac{\sqrt{1 + 4\alpha \frac{\hbar^2 k^{*2}}{2m_c}}}{2\alpha} \mp \hbar q u \right] d(\cos \theta) dq^* \left. \right\}.
\end{aligned} \tag{2.3.32}$$

Finalement, on se sert des propriétés de la distribution delta Dirac pour réécrire la fonction à l'intérieur de  $\delta$  comme une fonction  $f$  qui dépend de  $\cos \theta$ , soit  $f(\cos \theta)$  :

$$\begin{aligned}
P(\mathbf{k}^*) &= \frac{D_{ac}^2 m_d^2}{4\pi \rho u m_c^2} \int_{q_{\min}^*}^{q_{\max}^*} \int_{-1}^1 q^{*3} \begin{bmatrix} N_q \\ N_q + 1 \end{bmatrix} \delta[f(\mp \cos \theta)] d(\mp \cos \theta) dq^* \\
&= \frac{D_{ac}^2 m_d^2}{4\pi \rho u m_c^2} \int_{q_{\min}^*}^{q_{\max}^*} q^{*3} \begin{bmatrix} N_q \\ N_q + 1 \end{bmatrix} \frac{1}{|f'(\cos \theta_0)|} dq^*.
\end{aligned} \tag{2.3.33}$$

où  $\cos \theta_0$  est le zéro de cette fonction. Il faut maintenant trouver les zéros de la fonction à l'intérieur du delta Dirac. On repart de la fonction  $f(\cos \theta)$ , qui garantit la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement. On pose  $f(\cos \theta) = 0$  et on envoie les deuxième et troisième termes à droite de l'équation, et on met ensuite l'équation au carré. Après un peu d'algèbre, on trouve :

$$q^{*2} \pm 2k^* q^* \cos \theta_0^* = 2\alpha m_c u^2 q^2 + \pm 2m_c \frac{uq}{\hbar} [1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)]. \tag{2.3.34}$$

On peut alors utiliser la même approximation pour transformer  $q \approx \left(\frac{m_d}{m_c}\right)^{1/2} q^*$  :

$$q^* = \frac{1}{1 - 2\alpha m_d u^2} \left[ \mp 2k^* \cos \theta_0 \pm 2\sqrt{m_c m_d} \frac{u}{\hbar} [1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)] \right]. \tag{2.3.35}$$

On se rappelle que le signe positif (+) est pour l'absorption de phonon et le signe négatif (−) pour l'émission. Nous arrivons, finalement, à une expression pour  $\cos \theta_0$  :

$$\cos \theta_0 = \mp \frac{q^*}{2k^*} (1 - 2\alpha m_d u^2) + \sqrt{m_c m_d} \frac{u}{\hbar k^*} [1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)]. \tag{2.3.36}$$

Évaluons finalement  $\frac{1}{|f'(\cos \theta_0)|}$  :

$$\begin{aligned} \frac{1}{|f'(\cos \theta_0)|} &= \left| 4\alpha \sqrt{1 + 4\alpha \frac{\hbar^2}{2m_c} (k^{*2} + q^{*2} \pm 2q^*k^* \cos \theta_0)} \frac{2m_c}{4\alpha \hbar^2 (\pm 2q^*k^*)} \right| \\ &= \frac{m_c}{\hbar^2 q^* k^*} \sqrt{1 + 4\alpha \frac{\hbar^2}{2m_c} (k^{*2} + q^{*2} \pm 2q^*k^* \cos \theta_0)}. \end{aligned} \quad (2.3.37)$$

On remplace l'expression de  $\cos \theta_0$  plus haut dans la ligne juste au-dessus, ce qui nous permet de trouver, après simplification :

$$\frac{1}{|f'(\cos \theta_0)|} = \frac{m_c}{\hbar^2 q^* k^*} \left[ 1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*) \pm 2\alpha \hbar u q^* \left( \frac{m_d}{m_c} \right)^{1/2} \right]. \quad (2.3.38)$$

On remet le tout dans l'intégrale 2.3.33 pour compléter l'expression :

$$P(\mathbf{k}^*) = \frac{D_{ac}^2 m_d^2}{4\pi \hbar^2 k^* \rho u m_c} \int_{q_{\min}^*}^{q_{\max}^*} q^{*2} \begin{bmatrix} N_q \\ N_q + 1 \end{bmatrix} \left[ 1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*) \pm 2\alpha \hbar u q^* \left( \frac{m_d}{m_c} \right)^{1/2} \right] dq^*. \quad (2.3.39)$$

Il ne nous reste plus qu'une seule intégrale. Premièrement, essayons de trouver les bornes de celle-ci. Repartons de l'équation 2.3.35 :

$$q^* = \frac{1}{1 - 2\alpha m_d u^2} \left[ \mp 2k^* \cos \theta \pm 2\sqrt{m_c m_d} \frac{u}{\hbar} [1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)] \right]. \quad (2.3.40)$$

On peut trouver les valeurs maximales et minimales possibles de  $q$  de cette dernière. Cela nous aidera à définir les bornes de l'intégrale sur les  $dq^*$ . Il faut étudier les deux cas, absorption et émission, de manière séparée et vérifier que l'intégrande demeure une fonction.

Commençons avec l'émission de phonons. On prend alors le signe  $-$  du  $\pm$  de l'expression de  $q^*$  plus haut et on obtient que  $q_{\max}^*$  se retrouve à  $\cos \theta^* = 1$  alors que  $q_{\min}^* = 0$  car un phonon ne peut avoir de quantité de mouvement négative :

$$\begin{aligned} q_{\max, \text{é}}^* &= \frac{2}{1 - 2\alpha m_d u^2} \left[ k^* - \sqrt{m_c m_d} \frac{u}{\hbar} [1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)] \right] \\ q_{\min, \text{é}}^* &= 0. \end{aligned}$$

Pour que les solutions soient valides, il faut aussi nécessairement que  $q_{\max}^* \geq 0$ , pour la même raison que  $q_{\min}^* = 0$ , ce qui arrive si  $k^* \geq \sqrt{\frac{m_d m_c u^2}{\hbar^2 (1 - 2\alpha m_d u^2)}}$ . À cette valeur minimale de  $k^*$ , l'angle d'émission du phonon est nécessairement de 0 soit dans la même direction que  $k^*$ .

Pour l'absorption de phonon, commençons par regarder le cas où  $k^* \geq \sqrt{\frac{m_d m_c u^2}{\hbar^2 (1 - 2\alpha m_d u^2)}}$ . On obtient alors que  $q_{\max}^*$  se retrouve à  $\cos \theta^* = -1$  et que  $q_{\min}^* = 0$  :

$$\begin{aligned}
q_{\max,a}^* &= \frac{2}{1 - 2\alpha m_d u^2} \left[ k^* + \sqrt{m_c m_d} \frac{u}{\hbar} [1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)] \right] \\
q_{\min,a}^* &= 0.
\end{aligned} \tag{2.3.41}$$

À l'inverse, si  $k^* \leq \sqrt{\frac{m_d m_c u^2}{\hbar^2(1-2\alpha m_d u^2)}}$ , on a plutôt :

$$\begin{aligned}
q_{\max,a}^* &= \frac{2}{1 - 2\alpha m_d u^2} \left[ k^* + \sqrt{m_c m_d} \frac{u}{\hbar} [1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)] \right] \\
q_{\min,a}^* &= \frac{2}{1 - 2\alpha m_d u^2} \left[ -k^* + \sqrt{m_c m_d} \frac{u}{\hbar} [1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)] \right].
\end{aligned} \tag{2.3.42}$$

Il ne nous reste plus qu'un détail dans la dernière intégrale : le nombre d'occupation moyen des phonons  $N_q$ . Ces derniers suivent une distribution de Bose-Einstein à l'équilibre thermique :

$$N_q = \frac{1}{e^{\frac{\hbar u q^* \sqrt{m_d}}{kT\sqrt{m_c}}} - 1}. \tag{2.3.43}$$

Comme SuperCDMS opère son détecteur à basse température  $T \approx 50$  mK, on peut dire que  $N_q \approx 0$  et donc oublier l'absorption de phonon par des électrons, tout simplement, car il n'y a presque pas de phonons thermiques à cette température. Pour ce qui est de l'émission, l'intégrale 2.3.39 se réduit à

$$P(\mathbf{k}^*) = \frac{D_{ac}^2 m_d^2}{4\pi \hbar^2 k^* \rho u m_c} \int_{q_{\min}^*}^{q_{\max}^*} q^{*2} \left[ 1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*) - 2\alpha \hbar u q^* \left( \frac{m_d}{m_c} \right)^{1/2} \right] dq^*. \tag{2.3.44}$$

Ainsi, comme  $q_{\min} = 0$ , l'intégrale se simplifie encore plus :

$$P(\mathbf{k}^*) = \boxed{\frac{D_{ac}^2 m_d^2}{4\pi \hbar^2 k^* \rho u m_c} \left[ \frac{q_{\max}^{*3}}{3} + 2\alpha E(\mathbf{k}^*) \frac{q_{\max}^{*3}}{3} - 2\alpha \hbar u \frac{q_{\max}^{*4}}{4} \left( \frac{m_d}{m_c} \right)^{1/2} \right]}. \tag{2.3.45}$$

Ce taux représente la probabilité d'émission d'un phonon par un électron avec une quantité de mouvement  $\mathbf{k}$  dans un cristal de Ge ou de Si. Nous avons tenu compte de la non-parabolicité de la bande de conduction, mais avons simplifié le nombre d'occupation des phonons thermiques présents à 0 ce qui réduit la complexité des calculs. Dans certaines autres références, telles que Jacoboni [66, 64, 12], une solution est donnée en tenant compte de ce nombre d'occupation des phonons en faisant l'approximation que  $N_q \approx K_B T / \hbar q u - 1/2$  ce qui n'est pas valide proche de 0 K. Nous avons donc redérivé le taux de diffusion de phonon acoustique intravallée sans cette approximation dans le cadre de ce travail.

Nous avons résolu la triple intégrale en gardant l'intégrale sur les  $dq^*$  pour la fin. On aurait tout aussi pu bien inverser l'ordre de ces deux intégrales. Cela nous aurait donné une expression qui correspond à la distribution angulaire d'émission ou d'absorption des phonons, soit la probabilité d'émissions des phonons en fonction de l'angle entre le phonon et l'électron. Essayons de trouver cette relation. On repart de l'équation 2.3.32 et on intègre le delta par rapport à  $q^*$  au lieu de  $\cos \theta$ . On garde aussi l'élément d'intégrale  $\sin \theta d\theta$  au lieu de  $-d \cos \theta$ . Finalement, on redéfinit les bornes des intégrales pour que celle sur les angles aille maintenant de  $\theta_{\min}$  à  $\theta_{\max}$  :

$$\begin{aligned}
P(\mathbf{k}^*) &= \pm \frac{D_{ac}^2 m_d^2}{4\pi \rho u m_c^2} \int_{\theta_{\min}^*}^{\theta_{\max}^*} \int_0^\infty \left\{ q^{*3} \begin{bmatrix} N_q \\ N_q + 1 \end{bmatrix} \right. \\
&\quad \times \delta \left[ \frac{\sqrt{1 + 4\alpha \frac{\hbar^2}{2m_c} (k^{*2} + q^{*2} \pm 2q^* k^* \cos \theta)}}{2\alpha} - \frac{\sqrt{1 + 4\alpha \frac{\hbar^2 k^{*2}}{2m_c}}}{2\alpha} \mp \hbar q u \right] dq^* \sin \theta d\theta \Big\} \\
&= \frac{D_{ac}^2 m_d^2}{4\pi \rho u m_c^2} \int_{\theta_{\min}^*}^{\theta_{\max}^*} q_0^{*3} \begin{bmatrix} N_q \\ N_q + 1 \end{bmatrix} \frac{1}{|f'(q_0^*)|} \sin \theta d\theta.
\end{aligned} \tag{2.3.46}$$

avec les angles  $\theta_{\max}$  et  $\theta_{\min}$  déterminés par l'expression 2.3.26. En considérant les deux extremums  $q_{\min}^*$  et  $q_{\max}^*$ , on trouve alors que les angles  $\theta$  sont compris entre deux valeurs possibles. Cela donne  $\theta_{\min} = 0$  et  $\theta_{\max} = \arccos \left( \frac{\sqrt{m_d m_c} u}{\hbar} (1 + 2\alpha E(k)) \right)$ .

On calcule  $|f'(q_0^*)|$  :

$$\begin{aligned}
|f'(q_0^*)| &= \frac{\frac{4\alpha \hbar^2}{2m_c} (2q_0^* \pm 2k^* \cos \theta)}{4\alpha \sqrt{1 + \frac{4\alpha \hbar^2}{2m_c} (k^{*2} + q_0^{*2} \pm 2k^* q_0^* \cos \theta)}} \mp \hbar u \sqrt{\frac{m_d}{m_c}} \\
&= \frac{\frac{\hbar^2}{2m_c} q_0^* (1 - 2m_d \alpha u^2)^2}{(1 + 2\alpha E) [1 + 2\alpha m_d u^2] - \frac{4k^* \cos \theta \alpha \hbar \sqrt{m_d}}{\sqrt{m_c}}}.
\end{aligned} \tag{2.3.47}$$

où nous avons sauté ici le développement mathématique et ne donnons que la réponse simplifiée (voir annexe C pour les détails). Nous pouvons confirmer que l'expression est la bonne en vérifiant que nous obtenons la même expression de  $P(\mathbf{k}^*)$  que précédemment en intégrant de  $\theta_{\max}$  à  $\theta_{\min}$  l'expression 2.3.46, chose que nous allons faire dans les lignes qui suivent. Tout d'abord, reprenons cette équation et calculons et remplaçons-y notre valeur de  $\frac{1}{|f'(q_0^*)|}$  :

$$\begin{aligned}
P(\mathbf{k}^*) &= \frac{D_{ac}^2 m_d^2}{4\pi \rho u m_c^2} \int_{\theta_{\min}^*}^{\theta_{\max}^*} q_0^{*3} \left[ \begin{array}{c} N_q \\ N_q + 1 \end{array} \right] \frac{(1 + 2\alpha E) [1 + 2\alpha m_d u^2] - \frac{4k^* \cos \theta \alpha u \hbar \sqrt{m_d}}{\sqrt{m_c}}}{\frac{\hbar^2}{2m_c} q_0^* (1 - 2m_d \alpha u^2)^2} \sin \theta d\theta \\
&= \int_{\theta_{\min}^*}^{\theta_{\max}^*} P(\mathbf{k}^*, \theta) d\theta.
\end{aligned} \tag{2.3.48}$$

Cela nous permet de déduire que la distribution angulaire est alors :

$$\begin{aligned}
P(\mathbf{k}^*, \theta) &= \boxed{\frac{D_{ac}^2 m_d^2}{2\hbar^2 \pi \rho u m_c} \frac{1}{(1 - 2\alpha m_d u^2)^2} \left( \mp 2k^* \cos \theta \pm 2\sqrt{m_c m_d} \frac{u}{\hbar} \right)^2} \\
&\quad \times \left\{ (1 + 2\alpha E) [1 + 2\alpha m_d u^2] - \frac{4k^* \cos \theta \alpha u \hbar \sqrt{m_d}}{\sqrt{m_c}} \right\} \sin \theta.
\end{aligned} \tag{2.3.49}$$

En intégrant cette distribution de  $\theta_{max}$  à  $\theta_{min}$ , on retrouve en effet le même résultat que 2.3.45.

Dans la limite  $\alpha \rightarrow 0$ , on retrouve l'expression parabolique qui est celle utilisée présentement dans notre simulation. Ici, nous proposons une amélioration de la distribution angulaire des phonons acoustiques intravallés en tenant compte de la non-parabolicité de la bande de conduction. Comme ce processus d'émission est le plus fréquent pour des électrons de faible énergie (entre quelques dizaines de meV et 1 eV environ) et à température proche du zéro absolu, il importe d'en avoir une description détaillée. Cette correction non parabolique a un impact sur l'angle d'émission des phonons et donc sur le transport des électrons dans des cristaux tels que le Ge et le Si. La figure 4.3, au chapitre 4, montre la distribution angulaire, normalisée en divisant par  $P(\mathbf{k})$ , pour quelques énergies d'électrons dans le Ge.

## Trous

Intéressons-nous maintenant à la diffusion de phonons acoustiques par les trous. On peut repartir du développement de 2.3.14 et suivre une approche similaire à celle que nous avons utilisée pour les électrons à quelques différences près. Si l'on voulait être le plus exacte possible, on devrait tenir compte de la structure de bande complexe des trous (équation 2.2.8), du potentiel de déformation tensorielle [128] et de l'intégrale de chevauchement qui serait différente de l'unité. Nous ne ferons pas ce développement ici.

En très grosse approximation, on peut remplacer les trois bandes de valence anisotropes à  $\Gamma$ , dont deux dégénérées, par une seule bande sphérique. C'est l'approximation que fait SuperCDMS dans ses simulations. Dans un tel cas, l'intégrale de chevauchement est environ de 1 car on ne considère que des états  $s$  [64]. De plus, pour des raisons de symétrie, car

la bande de valence est sphérique, le potentiel de déformation est un scalaire  $D_{ac,h}$ . Sa valeur est différente de celle de l'électron  $D_{ac,h}$ . En effet, ce potentiel décrit la déformation d'une bande d'énergie ou vallée sous l'effet d'une perturbation. Considérant que les trous et les électrons habitent deux bandes vraiment différentes et sont de masses différentes, il est normal que les potentiels de déformation soient différents aussi. La structure de bande est aussi grandement simplifiée, le tenseur de masse étant remplacé par une masse scalaire  $m^*$ .

Bref, la probabilité d'émission de phonon acoustique  $P(\mathbf{k}^*)$  est la même pour les trous que pour les électrons, mais on remplace les masses  $m_c$  et  $m_d$  par la masse effective scalaire  $m^*$ . On doit également remplacer tous les  $q^*$  par des  $q$  et les  $k^*$  par des  $k$  car la transformation de Herring-Vogt n'est pas nécessaire. Finalement, pour le cas sphérique, on doit remplacer la vitesse du son  $u$  par  $u_l$  soit sa composante longitudinale. En effet, si l'on retourne à l'équation 2.3.14, on a le terme  $|D_{ij}q^j\zeta^i|^2$ . Comme  $D_{ij}$  est en fait un scalaire, il ne reste que le produit scalaire entre la quantité de mouvement du phonon et sa polarisation (ou direction du mouvement) :  $\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\zeta}$ . Cette dernière est nulle pour des phonons transverses, car le mouvement des atomes voisins est perpendiculaire à la direction de propagation. Seuls les phonons longitudinaux sont émis par les trous et donc on garde la vitesse du son longitudinale dans les équations. Bref, on trouve :

$$P(\mathbf{k}) = \frac{D_{ac,h}^2 m^*}{12\pi\hbar^2 k \rho u_l} q_{\max}^3 \left[ 1 + 2\alpha E(\mathbf{k}) - \frac{3}{2}\alpha\hbar u q_{\max} \right], \quad (2.3.50)$$

avec :

$$q_{\max} = \frac{1}{1 - 2\alpha m^* u^2} \left[ 2k - 2m^* \frac{u_l}{\hbar} (1 + 2\alpha E(\mathbf{k})) \right]. \quad (2.3.51)$$

et pour la distribution angulaire, on a :

$$P(\mathbf{k}^*, \theta) = \frac{D_{ac,h}^2 m^*}{2\pi\hbar^2 \rho u_l} \frac{\sin \theta}{(1 - 2\alpha m^* u_l^2)^2} \left( 2k \cos \theta - 2m^* \frac{u_l}{\hbar} \right)^2 \times \left\{ (1 + 2\alpha E)(1 + 2\alpha m^* u_l^2) - 4k \cos \theta \alpha u_l \hbar \right\}. \quad (2.3.52)$$

### 2.3.2.2. Phonons optiques intravallées.

Les phonons optiques intravallées ont une énergie beaucoup plus grande que ceux acoustiques, mais ont une quantité de mouvement proche de zéro comme les phonons acoustiques. Ils ne permettent donc pas à l'électron de changer de vallée. Leur relation de dispersion est constante, elle ne dépend pas de leur quantité de mouvement. Généralement, les phonons optiques ont une énergie de quelques dizaines de meV dans le Si et le Ge. Les atomes voisins

d'un phonon optique oscillent en direction opposée pour  $q \approx 0$ . Cela implique donc une forme du potentiel de déformation optique différente de celui acoustique. En effet, l'expression 2.3.6 démontre bien qu'il y a un facteur  $q^2$  de différence au numérateur avec 2.3.4.

Évaluons le taux de diffusion de phonons optiques intravallées. Le développement sera similaire au cas des phonons acoustiques intravallées, mais à quelques différences près. En bref, le taux de diffusion 2.3.14 tient encore, mais la forme du potentiel de déformation optique sera différente, de même que l'énergie du phonon. Cela implique qu'il n'y a pas de facteur  $q^2$  au numérateur dans l'expression 2.3.14 et qu'on remplace  $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$  par une énergie constante. De plus, le terme  $\Delta E_{fi} = 0$  comme pour les phonons acoustiques intravallées. Ainsi, on a plutôt le taux de diffusion suivant :

$$P(\mathbf{k}^*, \mathbf{k}'^*) = \frac{\pi}{\rho V \omega_{\mathbf{q}}} \left[ \frac{N_q}{N_q + 1} \right] D_{\text{op}}^2 \delta[E(\mathbf{k}'^*) - E(\mathbf{k}^*) \mp \hbar\omega_{\mathbf{q}}]. \quad (2.3.53)$$

Le potentiel de déformation  $D_{\text{op}}$  est d'environ  $5,5 \times 10^8$  eV/cm pour le Ge et l'énergie des phonons optiques de quelques dizaines de meV [66]. Nous reviendrons sur sa valeur exacte dans les prochains chapitres. On adopte la même stratégie, on intègre sur tous les  $\mathbf{k}'^*$  pour trouver la probabilité de diffusion de phonons optiques intravallées par un porteur de charge ayant une quantité de mouvement initiale  $\mathbf{k}$ .

$$\begin{aligned} P(\mathbf{k}^*) &= \frac{V}{(2\pi)^3} \int P(\mathbf{k}^*, \mathbf{k}'^*) d\mathbf{k}' \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} \left[ \frac{N_q}{N_q + 1} \right] \int \frac{\pi}{\rho V \omega_{\text{op}}} D_{\text{op}}^2 \delta[E(\mathbf{k}'^*) - E(\mathbf{k}^*) \mp \hbar\omega_{\text{op}}] d\mathbf{k}'^* \left( \frac{m_d}{m_c} \right)^{3/2}. \end{aligned} \quad (2.3.54)$$

Nous avons utilisé  $d\mathbf{k}' = dk'_x dk'_y dk'_z = \sqrt{\frac{m_l}{m_c}} dk'_x \sqrt{\frac{m_t}{m_c}} dk'_y \sqrt{\frac{m_t}{m_c}} dk'_z = \left( \frac{m_d}{m_c} \right)^{3/2} d\mathbf{k}'^*$  pour remplacer l'intégrale sur la différentielle  $d\mathbf{k}'$  par une sur la différentielle  $d\mathbf{k}'^*$ .

Nous avons également sorti le nombre d'occupation moyen des phonons optiques  $N_q$  de l'intégrale parce que ce nombre ne dépend pas de  $q$  pour des phonons optiques puisque :

$$N_q = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_{\text{op}}}{kT}} - 1}. \quad (2.3.55)$$

avec l'énergie des phonons  $\hbar\omega_{\text{op}}$  une constante. Cette distribution de Bose-Einstein est valide à l'équilibre thermodynamique à laquelle il n'y a presque plus de phonons optiques. Toutefois, notons que lors d'un dépôt d'énergie dans notre détecteur, cela engendre beaucoup de phonons optiques athermiques. Il en est de même lorsque le porteur de charges dérive dans le cristal de notre détecteur et émet des phonons NTL. Nous misons sur le fait que

ces dépôts d'énergie sont très peu fréquents et que les phonons optiques vont rapidement se désintégrer en phonons de plus basses énergies et se thermaliser.

Dans les faits, il est vrai que les phonons optiques ont une relation de dispersion qui n'est pas parfaitement constante, mais cela reste une assez bonne approximation dans notre situation. Nous reviendrons, dans les chapitres suivants, sur une meilleure manière de représenter cette relation de dispersion que par constante dont la valeur varie pour les modes transverses et longitudinales.

### Électrons

Commençons par les électrons dont la structure de bande est ellipsoïdale et non parabolique. En coordonnées sphériques, on intègre sur  $\theta$  et  $\phi$  en premier, ce qui donne un facteur  $4\pi$ . Après simplification, nous obtenons :

$$P(\mathbf{k}^*) = \frac{D_{\text{op}}^2 m_d^{3/2}}{2\pi m_c^{3/2} \rho \omega_{\text{op}}} \left[ \frac{N_q}{N_q + 1} \right] \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \delta[E(\mathbf{k}'^*) - E(\mathbf{k}^*) \mp \hbar\omega_{\text{op}}] k^{*'} dk^{*'} \quad (2.3.56)$$

Il est à noter qu'ici, contrairement au taux pour des phonons acoustiques, notre expression ne dépend pas de  $q$  et on peut facilement réaliser notre intégrale sur l'élément infinitésimal  $d\mathbf{k}'^*$  plutôt que sur  $d\mathbf{q}^*$ . Cela à l'avantage d'être simple à calculer. En effet, on peut faire un changement de variable de  $dk^{*'}$  par  $dE(\mathbf{k}^*)$  dont les différentielles se trouvent par la relation de dispersion :

$$\begin{aligned} \frac{dE(\mathbf{k}^*)}{dk^{*'}} &= \frac{1}{4\alpha\sqrt{1 + 4\alpha\frac{\hbar^2 k^{*'}2}{2m_c}}} \frac{4\alpha\hbar^2}{2m_c} 2k^{*'} \\ dk^{*'} &= dE(\mathbf{k}^*) \frac{m_c[1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)]}{\hbar^2 k^{*'}} \end{aligned} \quad (2.3.57)$$

On remet le tout dans l'équation et on obtient :

$$P(\mathbf{k}^*) = \frac{D_{\text{op}}^2 m_d^{3/2}}{2\pi m_c^{1/2} \rho \hbar^2 \omega_{\text{op}}} \left[ \frac{N_q}{N_q + 1} \right] \int \delta[E(\mathbf{k}'^*) - E(\mathbf{k}^*) \mp \hbar\omega_{\text{op}}] k^{*'} [1 + 2\alpha E(k^{*'})] dE(\mathbf{k}^*). \quad (2.3.58)$$

On peut finalement résoudre l'intégrale à partir des propriétés de la distribution delta Dirac. Cela revient essentiellement à remplacer les  $E(\mathbf{k}'^*)$  par  $E(\mathbf{k}^*) \pm \hbar\omega_{\text{op}}$ . Nous pouvons aussi réécrire  $\mathbf{k}'^* = \frac{\sqrt{2m_c}}{\hbar} \sqrt{E(\mathbf{k}^*)(1 + \alpha E(\mathbf{k}^*))}$  de telle sorte que le résultat final de l'intégrale est :

$$P(\mathbf{k}^*) = \frac{D_{\text{op}}^2 m_d^{3/2}}{2^{1/2} \pi \rho \hbar^3 \omega_{\text{op}}} \left[ \frac{N_q}{N_q + 1} \right] [E(\mathbf{k}^*) \pm \hbar \omega_{\text{op}}]^{1/2} (1 + \alpha [E(\mathbf{k}^*) \pm \hbar \omega_{\text{op}}])^{1/2} \times [1 + 2\alpha [E(\mathbf{k}^*) \pm \hbar \omega_{\text{op}}]]. \quad (2.3.59)$$

Ceci représente le taux de diffusion de phonons optiques intravallées par un électron de quantité de mouvement  $\mathbf{k}^*$  dans un cristal de Ge ou de Si. Tout comme pour le cas des phonons acoustiques intravallées, on peut trouver la distribution angulaire d'émission des phonons optiques. La démarche est pareille, on peut donc repartir du résultat 2.3.46, seule les constantes devant l'intégrale, la dépendance à la quantité de mouvement  $q^*$  et l'énergie du phonon à l'intérieur de la distribution delta Dirac changent :

$$\begin{aligned} P(\mathbf{k}^*) &= \pm \frac{D_{\text{op}}^2 m_d^{3/2}}{4\pi \rho \omega_{\text{op}} m_c^{3/2}} \left[ \frac{N_q}{N_q + 1} \right] \int_{\theta_{\min}^*}^{\theta_{\max}^*} \int_0^\infty \left\{ q^{*2} \right. \\ &\quad \times \delta \left[ \frac{\sqrt{1 + 4\alpha \frac{\hbar^2}{2m_c} (k^{*2} + q^{*2} \pm 2q^* k^* \cos \theta)}}{2\alpha} - \frac{\sqrt{1 + 4\alpha \frac{\hbar^2 k^{*2}}{2m_c}}}{2\alpha} \mp \hbar \omega_{\text{op}} \right] dq^* \sin \theta d\theta \Big\} \\ &= \sum_i \frac{D_{\text{op}}^2 m_d^{3/2}}{4\pi \rho \omega_{\text{op}} m_c^{3/2}} \left[ \frac{N_q}{N_q + 1} \right] \int_{\theta_{\min}^*}^{\theta_{\max}^*} q_{0i}^{*2} \frac{1}{|f'(q_0^*)_i|} \sin \theta d\theta. \end{aligned} \quad (2.3.60)$$

où  $q_{0i}^*$  sont les zéros de la fonction  $f(q^*)$ , qui est donnée par :

$$f(q^*) = \frac{\sqrt{1 + 4\alpha \frac{\hbar^2}{2m_c} (k^{*2} + q^{*2} \pm 2q^* k^* \cos \theta)}}{2\alpha} - \frac{\sqrt{1 + 4\alpha \frac{\hbar^2 k^{*2}}{2m_c}}}{2\alpha} \mp \hbar \omega_{\text{op}}. \quad (2.3.61)$$

Il nous reste à trouver les zéros de la fonction  $f(q^*)$ . Celle-ci, on se rappelle, combine la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement. On pose cette expression comme étant égale à zéro pour trouver nos valeurs de  $q_0^*$  :

$$q_{0i}^* \pm 2k^* q_{0i}^* \cos \theta - 2\alpha m_c \omega_{\text{op}}^2 \mp 2m_c \frac{\omega_{\text{op}}}{\hbar} [1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)] = 0. \quad (2.3.62)$$

Cette équation quadratique a deux racines possibles ( $\sigma_i = +1$  ou  $-1$ ) :

$$q_{0i}^* = \mp k^* \left( \cos \theta + \sigma_i \sqrt{\cos^2 \theta + \frac{2\alpha m_0 \omega_{iv}^2}{k^{*2}} \pm 2m_0 \frac{\omega_{iv}}{\hbar k^{*2}} [1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)]} \right). \quad (2.3.63)$$

Pour évaluer  $\frac{1}{|f'(q_0^*)_i|}$ , on peut repartir de la première ligne l'expression 2.3.47 à la différence que le deuxième terme est zéro dans le cas des phonons optiques, car la relation de dispersion est constante et donc la dérivée est nulle.

$$\frac{1}{|f'(q_0^*)_i|} = \frac{\sqrt{1 + \frac{4\alpha \hbar^2}{2m_c} (k^{*2} + q_{0i}^{*2} \pm 2k^* q_{0i}^* \cos \theta)}}{\frac{\hbar^2}{2m_c} (2q_{0i}^* \pm 2k^* \cos \theta)}. \quad (2.3.64)$$

avec l'indice  $i$  pour les deux racines possibles, correspondant, comme on vient de le voir, à  $\sigma_i = +1$  ou  $-1$ . En remettant cette expression dans l'équation 2.3.60 et en sommant sur ces deux racines, on obtiendrait la distribution angulaire pour l'émission et l'absorption de phonons optiques par un électron. Comme le développement est un peu long, nous nous contenterons ici de développer seulement l'expression parabolique ( $\alpha \rightarrow 0$ ) afin de montrer que l'on retombe bel et bien sur le taux de diffusion  $P(\mathbf{k}^*)$  de 2.3.59. Dans cette limite, l'équation au-dessus se simplifie ainsi :

$$\begin{aligned} \frac{1}{|f'(q_0^*)_i|} &= \frac{1}{\left| \frac{\hbar^2 (q_{0i}^*)_i}{m_c} \pm \frac{\hbar^2 k^* \cos \theta}{m_c} \right|} \\ &= \frac{1}{\left| \frac{\pm \hbar^2}{m_c} k^* \left( \cos \theta + \sigma_i \sqrt{\cos^2 \theta \pm 2m_c \frac{\omega_{op}}{\hbar k^{*2}}} \right) \pm \frac{\hbar^2 k^* \cos \theta}{m_c} \right|}. \end{aligned} \quad (2.3.65)$$

Les deux termes avec un  $\cos \theta$  s'annulent, de sorte qu'on a :

$$\frac{1}{|f'(q_0^*)_i|} = \frac{1}{\left| \frac{\pm \hbar^2}{m_c} k^* \sigma_i \sqrt{\cos^2 \theta \pm 2m_c \frac{\omega_{op}}{\hbar k^{*2}}} \right|}. \quad (2.3.66)$$

Toutefois, comme on en prend la valeur absolue, le signe de  $\sigma_i$  et du  $\mp$  disparaissent et le facteur  $\frac{1}{|f'(q_0^*)_i|}$  sera le même dans la somme des deux racines de  $q_{0i}^*$ , mais l'expression de  $q_{0i}^*$  sera différente, par contre.

$$\begin{aligned}
P(\mathbf{k}^*) &= \sum_i \frac{D_{\text{op}}^2 m_d^{3/2}}{4\pi\rho\omega_{\text{op}}m_c^{3/2}} \left[ \begin{matrix} N_q \\ N_q + 1 \end{matrix} \right] \int_{\theta_{\text{min}}^*}^{\theta_{\text{max}}^*} (q_0^*)_i^{*2} \frac{1}{|f'(q_0^*)_i|} \sin\theta d\theta \\
&= \frac{D_{\text{op}}^2 m_d^{3/2}}{2\pi\rho\hbar^2\omega_{\text{op}}m_c^{1/2}} \left[ \begin{matrix} N_q \\ N_q + 1 \end{matrix} \right] \int_{\theta_{\text{min}}^*}^{\theta_{\text{max}}^*} k^* \left( 2\cos\theta^2 \pm 2m_c \frac{\omega_{\text{op}}}{\hbar k^{*2}} \right) \frac{1}{\left| \sqrt{\cos\theta^2 \pm 2m_c \frac{\omega_{\text{op}}}{\hbar k^{*2}}} \right|} \sin\theta d\theta \\
&= \int_{\theta_{\text{min}}^*}^{\theta_{\text{max}}^*} P(\mathbf{k}^*, \theta) d\theta.
\end{aligned}
\tag{2.3.67}$$

ou encore :

$$P(\mathbf{k}^*, \theta) = \boxed{\frac{D_{\text{op}}^2 m_d^{3/2}}{2\pi\rho\hbar^2\omega_{\text{op}}m_c^{1/2}} \left[ \begin{matrix} N_q \\ N_q + 1 \end{matrix} \right] k^* \left( 2\cos\theta^2 \pm 2m_c \frac{\omega_{\text{op}}}{\hbar k^{*2}} \right) \frac{1}{\left| \sqrt{\cos\theta^2 \pm 2m_c \frac{\omega_{\text{op}}}{\hbar k^{*2}}} \right|} \sin\theta d\theta.}
\tag{2.3.68}$$

Pour le cas parabolique seulement, ceci est la probabilité d'émission ou d'absorption des phonons en fonction de leur angle de diffusion  $\theta$ , mesuré à partir de la direction du vecteur d'onde de l'électron  $k^*$ . Dans les autres articles et livres sur le transport par méthode de MC [66, 64, 87, 113, 12], l'émission de phonons optiques intravallées est considéré isotrope et on choisit un état final  $\mathbf{k}'$  complètement au hasard. Cette distribution est donc un nouvel ajout réalisé dans le cadre de cette thèse et montre ici qu'il y a une dépendance angulaire dont il faut tenir compte.

On veut confirmer qu'on réobtient bel et bien le taux  $P(\mathbf{k}^*)$  en intégrant cette distribution angulaire de  $\theta_{\text{min}}^*$  à  $\theta_{\text{max}}^*$ . On peut voir, assez facilement de 2.3.63 que les deux extremums sont  $\theta_{\text{min}}^* = 0$  et  $\theta_{\text{max}}^* = \arccos \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\text{op}}}{E(k^*)}}$ . Ces deux valeurs d'angles correspondent au minimum de  $q$ , soit  $q_{\text{min}} = 0$  et à sa valeur maximale. Si on intègre notre distribution angulaire sur cette plage d'angles, on a :

$$\begin{aligned}
P(\mathbf{k}^*) &= \frac{D_{\text{op}}^2 m_d^{3/2}}{2\pi\rho\hbar^2\omega_{\text{op}}m_c^{1/2}} \int_{\theta_{\text{min}}^*}^{\theta_{\text{max}}^*} k^* \left( 2\cos\theta^2 - 2m_c \frac{\omega_{\text{op}}}{\hbar k^{*2}} \right) \frac{1}{\left| \sqrt{\cos\theta^2 - 2m_c \frac{\omega_{\text{op}}}{\hbar k^{*2}}} \right|} \sin\theta d\theta \\
&= \frac{D_{\text{op}}^2 m_d^{3/2}}{2\pi\rho\hbar^2\omega_{\text{op}}m_c^{1/2}} k^* \left( -\cos\theta \sqrt{\cos\theta^2 - 2m_c \frac{\omega_{\text{op}}}{\hbar k^{*2}}} \right) \Big|_{\theta_{\text{min}}^*}^{\theta_{\text{max}}^*} \\
&= \frac{D_{\text{op}}^2 m_d^{3/2}}{2\pi\rho\hbar^2\omega_{\text{op}}m_c^{1/2}} k^* \left( \sqrt{1 - 2m_c \frac{\omega_{\text{op}}}{\hbar k^{*2}}} \right) \\
&= \frac{D_{\text{op}}^2 m_d^{3/2}}{\sqrt{2}\pi\rho\hbar^3\omega_{\text{op}}} \sqrt{E(\mathbf{k}^*) - \hbar\omega_{\text{op}}}.
\end{aligned} \tag{2.3.69}$$

Cette démarche redonne bel et bien le résultat attendu. On pourrait refaire le même développement, mais avec le cas non parabolique, dont les angles extremums seraient différents, et on retomberait sur le bon taux  $P(\mathbf{k}^*)$ .

### Trous

Intéressons-nous maintenant à la diffusion de phonons optiques par les trous. On peut réutiliser les mêmes arguments que ceux énumérés dans la section sur la diffusion de phonons acoustiques intravallées. Essentiellement, on peut utiliser la masse effective de la bande de valence lourde  $m^*$  au lieu des masses de conductivité et de densité d'état. Le potentiel de déformation optique est aussi différent pour le trou que pour l'électron. Finalement, on peut utiliser les quantités de mouvement dans le référentiel du cristal directement plutôt que dans le référentiel de HV. On applique ces changements à l'équation 2.3.59.

$$P(\mathbf{k}) = \boxed{\frac{D_{\text{op,h}}^2 m^{*3/2}}{2^{1/2}\pi\rho\hbar^3\omega_{\text{op}}} \left[ \frac{N_q}{N_q + 1} \right] [E(\mathbf{k}) \pm \hbar\omega_{\text{op}}]^{1/2} (1 + \alpha[E(\mathbf{k}) \pm \hbar\omega_{\text{op}}])^{1/2} \times [1 + 2\alpha[E(\mathbf{k}) \pm \hbar\omega_{\text{op}}]]}. \tag{2.3.70}$$

et pour la distribution angulaire :

$$P(\mathbf{k}, \theta) = \boxed{\frac{D_{\text{op,h}}^2 m^*}{2\pi\rho\hbar^2\omega_{\text{op}}} \left[ \frac{N_q}{N_q + 1} \right] k \left( 2\cos\theta^2 \pm 2m^* \frac{\omega_{\text{op}}}{\hbar k^2} \right) \frac{\sin\theta}{\left| \sqrt{\cos\theta^2 \pm 2m^* \frac{\omega_{\text{op}}}{\hbar k^2}} \right|}}. \tag{2.3.71}$$

## Règles de sélections

Il est à noter que certaines transitions sont interdites et d'autres permises par la théorie des groupes lorsque les quantités de mouvement  $\mathbf{k}$  et  $\mathbf{k}'$  sont le long de certains axes de symétrie, comme les vallées  $X$ ,  $L$  et  $\Gamma$ . Ainsi, l'émission de phonons optiques intravallées à l'ordre 0 (en termes de  $q$ ) est interdite pour les électrons dans la bande  $X$  (par exemple Si) et  $\Gamma$ , mais pas pour ceux dans la bande  $L$  (par exemple Ge) [52, 17]. Elles sont aussi permises pour les trous dans la bande de valence  $\Gamma$ .

Ces règles de sélections ne sont valides que pour des électrons au minimum de leur vallée. Comme ces derniers sont accélérés par un champ électrique dans notre détecteur, ils ont généralement une énergie et une quantité de mouvement plus grandes que cet extremum et certaines transitions à l'ordre 1 (terme  $q^2$ ) sont alors possibles. Nous recommandons l'article de Ferry pour le développement mathématique de cet ordre supérieur [35].

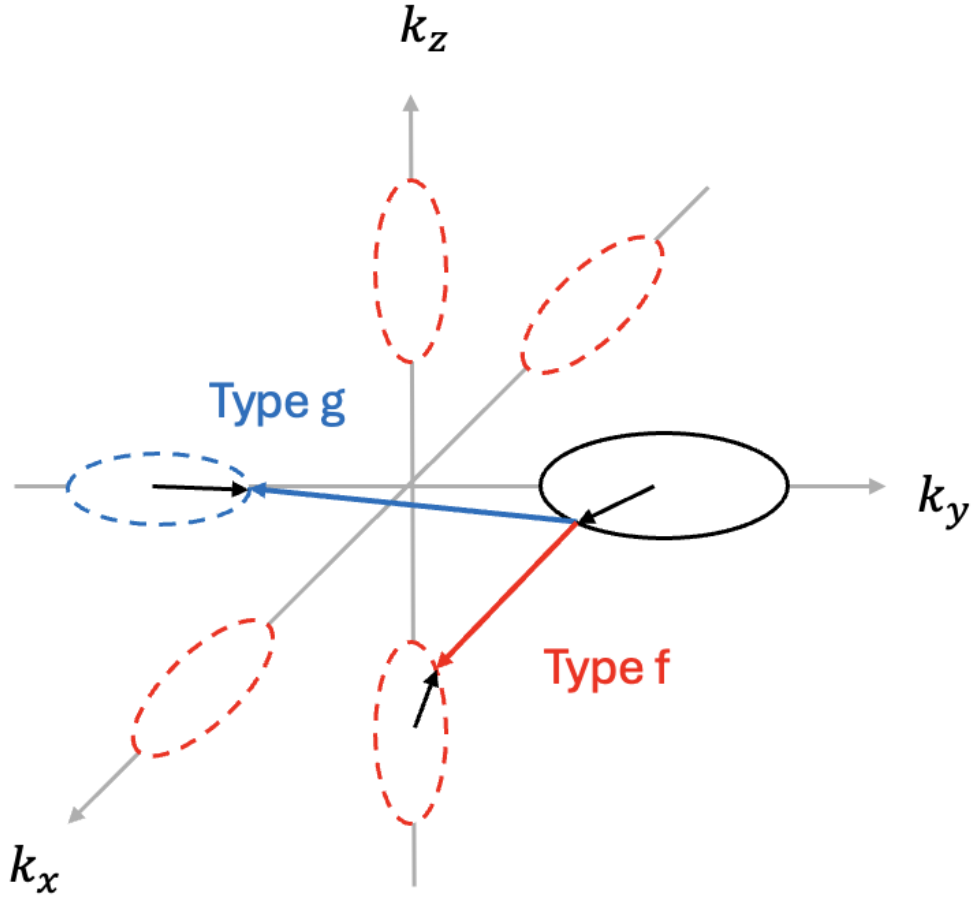
Nous reparlerons des règles de sélection en de plus amples détails dans la section suivante. Terminons seulement en mentionnant que les diffusions optiques dans le silicium, car au premier ordre, sont permises, mais fortement supprimées.

### **2.3.2.3. Phonons intervallées.**

Dans ce type de diffusion, l'électron ou le trou émet ou absorbe un phonon intervallée et change de vallée (soit du même type ou d'un autre) à la suite de cette diffusion. Les phonons intervallées peuvent être optiques ou acoustiques, mais ont la propriété d'avoir une grande quantité de mouvement  $q$ , généralement proche de celle de la limite de la première zone de Brillouin, nécessaire pour faire changer l'électron ou le trou de vallées. À cette limite, les phonons optiques, comme acoustiques, ont une relation de dispersion relativement constante, seule leur énergie est différente selon la branche.

On sépare les diffusions intervallées en deux types: f et g. Une diffusion g déplace l'électron de sa vallée vers son anti-vallée, soit celle en direction opposée dans l'espace réciproque. Une diffusion f résulte plutôt d'une transition vers n'importe quelle autre vallée que son anti-vallée (vallée perpendiculaire). La figure 2.11 illustre ces deux types de processus.

Si nous faisons la distinction entre ces deux mécanismes, c'est parce que cela affecte le taux de diffusion et le type de phonons capables de faire ces transitions. Par exemple, la théorie des groupes nous indique que seuls les phonons optiques longitudinaux peuvent faire des transitions g dans le Si, alors que les phonons longitudinaux acoustiques et transverses optiques sont responsables des processus f. Dans le cas du Ge, ce sont les branches acoustiques longitudinales et optiques longitudinales qui engendrent les diffusions intervallées [18].



**Fig. 2.11.** Illustration des diffusions intervalles f et g pour les vallées  $L$  du Si.

En effet, les électrons des bandes de conduction et les phonons possèdent certaines symétries cristallographique telles que l'invariance sous rotation, inversion, réflexion, etc. On peut illustrer ces groupes et opérations à l'aide de représentations irréductibles (irreps). Ces irreps dépendent du type de phonons et de la bande de conduction. Dans un processus d'émission de phonons, nous avons démontré la présence de l'élément de matrice suivant :

$$\langle \mathbf{k}', c' | H' | \mathbf{k}, c \rangle.$$

La partie  $\langle \mathbf{k}', c' |$ , qui correspond à l'état final de l'électron, l'Hamiltonien d'interaction électron-phonon  $H'$  et  $|\mathbf{k}, c\rangle$ , qui correspond à l'état initial de l'électron, se transforment selon une irrep de leur groupe de symétrie. Afin qu'une transition soit possible, il faut que le produit direct de l'irrep de l'état initial  $\Gamma_i$ , de l'Hamiltonien d'interaction  $\Gamma_{ph}$  et de l'état final  $\Gamma_f$  contiennent la représentation symétrique  $\Gamma_{sym}$  :  $\Gamma_i \otimes \Gamma_{ph} \otimes \Gamma_f \supset \Gamma_{sym}$ .

Si cette condition n'est pas satisfaite, l'élément de matrice est nul par symétrie et la transition est interdite.

La distinction est également importante, car chaque type de phonon (acoustique ou optique et type f ou g) a son propre tenseur du potentiel de déformation. Proche de la première zone de Brillouin, la distinction entre phonons optiques et acoustiques est moins évidente. Nous considérons malgré tout que l'hamiltonien de perturbation a la même forme que pour le cas optique (équation 2.3.6), soit :  $H'_{iv} = D_{iv}\mathbf{u}$  même pour les phonons «acoustiques». Comme pour les sections précédentes, nous considérons également que ce tenseur est une constante, mais différente pour chaque mode de phonons.

### À l'ordre 0

À l'ordre 0, l'énergie du phonon est constante et le potentiel de déformation intervallée est du même ordre que celui optique. Nous pouvons donc utiliser le même développement mathématique que la section précédente sur les phonons optiques, mais avec des énergies des phonons et des potentiels de déformation différents. Également, les taux de diffusion sont multipliés par un facteur  $Z_{iv}$  qui correspond au nombre de vallées finales après diffusions. Par exemple, si un électron est dans une vallée  $X$  dans le Si, il peut se diffuser dans 4 autres vallées pour une diffusion de type f. Dans ce cas-ci,  $Z_{iv} = 4$ . De plus, comme l'électron ou le trou peut passer d'une bande vers une autre d'énergie différente, on doit réinclure le terme  $\Delta E_{fi}$  :

$$P(\mathbf{k}^*) = \frac{Z_{iv}D_{iv}^2m_d^{3/2}}{2^{1/2}\pi\rho\hbar^3\omega_{iv}} \left[ \frac{N_q}{N_q + 1} \right] [E(\mathbf{k}^*) \pm \hbar\omega_{iv} + \Delta E_{fi}]^{1/2} \times (1 + \alpha[E(\mathbf{k}^*) \pm \hbar\omega_{iv} + \Delta E_{fi}])^{1/2} [1 + 2\alpha[E(\mathbf{k}^* \pm \hbar\omega_{iv} + \Delta E_{fi})]]. \quad (2.3.72)$$

La distribution angulaire sera aussi de la même forme que l'émission de phonons optique intravallée, mais avec une énergie de phonon différente, un potentiel de déformation différent et doit inclure le nombre de vallées finales accessibles, de même que la différence d'énergie entre deux bandes différentes. La figure 4.9a au chapitre 4 illustre la distribution angulaire pour un électron de 31 meV émettant un phonon de 10 meV.

$$P(\mathbf{k}^*, \theta) = \frac{Z_{iv} D_{iv}^2 m_d^{3/2}}{2\pi \rho \hbar^2 \omega_{iv} m_c^{1/2}} \left[ \begin{array}{c} N_q \\ N_q + 1 \end{array} \right] k^* \left( 2 \cos \theta^2 \pm 2m_c \frac{\omega_{op}}{\hbar k^{*2}} + \frac{\Delta E_{fi}}{\hbar^2 k^{*2}} \right) \sin \theta \times \left| \sqrt{\cos \theta^2 \pm 2m_c \frac{\omega_{iv}}{\hbar k^{*2}} + \frac{\Delta E_{fi}}{\hbar^2 k^{*2}}} \right|. \quad (2.3.73)$$

À l'ordre 1

Nous avons déjà mentionné que, par certaines règles de sélections et propriétés de symétrie, certaines transitions sont interdites dans les diffusions intervallées. C'est le cas des transitions TA et LA dans le silicium, par exemple. Le tableau 2.4 synthétise les énergies des phonons intervallées  $\hbar\omega_{iv}$ , leur potentiel de déformation  $D_{iv}$ , le mode du phonon, l'ordre de transition et le nombre de vallées finales accessibles  $Z_{iv}$  pour le Si et le Ge.

| Matériau | Énergie $\hbar\omega_{iv}$ (meV) | $D_{iv}$ ( $10^8$ eV/cm) | Transition   | Ordre | $Z_{iv}$ |
|----------|----------------------------------|--------------------------|--------------|-------|----------|
| Si       | 12.0                             | 0.5                      | TA (g1)      | 1     | 1        |
|          | 18.4                             | 0.8                      | LA (g2)      | 1     | 1        |
|          | 61.8                             | 11.0                     | LO (g3)      | 0     | 1        |
|          | 18.9                             | 0.3                      | TA (f1)      | 1     | 4        |
|          | 47.2                             | 2.0                      | LA (f2)      | 0     | 4        |
|          | 58.8                             | 2.0                      | TO (f3)      | 0     | 4        |
| Ge       | 27.6                             | 3.0                      | LA, LO (LL1) | 0     | 3        |
|          | 10.3                             | 0.2                      | TA (LL2)     | 0     | 3        |

**Tableau 2.4.** Énergies des phonons IV  $\hbar\omega_{iv}$ , des potentiels de déformations  $D_{iv}$ , de l'ordre du processus et du nombre de vallées finales accessibles  $Z_{iv}$  pour chaque mode de phonon. Nous ne considérons que les vallées  $X$  pour le Si et les vallées  $L$  pour le Ge. Ces valeurs sont celles utilisées dans G4CMP. Valeurs tirées de [66]

On s'inspire du formalisme de Ferry [35]. En considérant l'ordre suivant (en quantité de mouvement du phonon  $q$ ) dans nos diffusions intervallées, nous avons maintenant une contribution  $q^2 D_{iv}^2$  lorsque ce terme de premier ordre est pris au carré dans l'équation de la règle d'or de Fermi. L'énergie des phonons intervallées est constante et on peut réutiliser la même démarche qu'à l'ordre 0, mais avec une dépendance à  $q$  différente dans nos intégrales. Bref, on peut reprendre de l'équation 2.3.53 :

$$P(\mathbf{k}^*, \mathbf{k}'^*) = \frac{\pi}{\rho V \hbar \omega_{iv}} \left[ \frac{N_q}{N_q + 1} \right] q^2 D_{iv}^2 \delta[E(\mathbf{k}'^*) - E(\mathbf{k}^*) \mp \hbar \omega_{\mathbf{q}} + \Delta E_{fi}]. \quad (2.3.74)$$

L'intégrale de ce taux sur tous les états finaux possibles  $\mathbf{k}'$  suit un raisonnement mathématique encore une fois similaire. La dépendance sur les  $q$  est légèrement différente et on doit maintenant inclure l'énergie entre les vallées  $\Delta E_{fi}$  pour inclure les transitions d'une vallée à une bande différente, pas nécessairement de même énergie. Afin d'alléger la notation, nous allons retirer le terme  $\Delta E_{fi}$  des prochaines équations et à la toute fin remplacer  $\hbar \omega_{iv}^\dagger \rightarrow \hbar \omega_{iv} + \Delta E_{fi}$ .

On peut résoudre l'intégrale au long : en repartant de 2.3.33, mais avec une expression différente à l'intérieur du delta Dirac, des potentiels de déformations propres aux phonons intervallées, une relation de dispersion constante pour l'énergie des phonons et la possibilité de changer de vallées et donc d'énergie.

$$\begin{aligned} P(\mathbf{k}^*) &= \frac{V}{(2\pi)^3} \int P(\mathbf{k}^*, \mathbf{k}'^*) d\mathbf{k}' \\ &= \frac{D_{iv}^2 m_d^{5/2}}{4\pi \rho \omega_{iv} m_c^{5/2}} \left[ \frac{N_q}{N_q + 1} \right] \int_{q_{\min}^*}^{q_{\max}^*} q^{*4} \frac{1}{|f'(\cos \theta_0)|} dq^* \end{aligned} \quad (2.3.75)$$

avec :

$$f(\cos \theta) = \frac{\sqrt{1 + 4\alpha \frac{\hbar^2}{2m_c} (k^{*2} + q^{*2} \pm 2q^* k^* \cos \theta)}}{2\alpha} - \frac{\sqrt{1 + 4\alpha \frac{\hbar^2 k^{*2}}{2m_c}}}{2\alpha} \mp \hbar \omega_{iv}^\dagger.$$

On commence par trouver le zéro de cette fonction soit exactement la même démarche que pour les phonons optiques intravallées, mais en considérant maintenant l'énergie des phonons intervallées comme étant constante. Cela nous permet de trouver l'angle  $\theta_0$  auquel  $f(\cos \theta) = 0$  :

$$\cos \theta_0 = \mp \frac{q^*}{2k^*} \pm \frac{\alpha m_c \omega_{iv}^{\dagger 2}}{k^* q^*} + \frac{m_c \omega_{iv}^\dagger}{\hbar k^* q^*} [1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)]. \quad (2.3.76)$$

On peut ensuite trouver :

$$\begin{aligned} \frac{1}{|f'(\cos \theta_0)|} &= \frac{m_c}{\hbar^2 q^* k^*} \sqrt{1 + 4\alpha \frac{\hbar^2}{2m_c} (k^{*2} + q^{*2} \pm 2q^* k^* \cos \theta_0)} \\ &= \frac{m_c}{\hbar^2 q^* k^*} \left[ 1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*) \pm 2\alpha \hbar \omega_{iv}^\dagger \right]. \end{aligned} \quad (2.3.77)$$

ce qui se réduit à la même expression que pour le cas acoustique, mais on remplace l'énergie du phonon acoustique par l'énergie du phonon optique qui ne dépend plus de  $q$ . On repart de l'équation 2.3.75 juste au-dessus.

$$P(\mathbf{k}^*) = \frac{D_{iv}^2 m_d^{5/2}}{4\pi\omega_{iv}\rho\hbar^2 k^* m_c^{3/2}} \begin{bmatrix} N_q \\ N_q + 1 \end{bmatrix} \int_{q_{\min}^*}^{q_{\max}^*} q^{*3} \left[ 1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*) \pm 2\alpha\hbar\omega_{iv}^\dagger \right] dq^*. \quad (2.3.78)$$

ou encore :

$$P(\mathbf{k}^*) = \boxed{\frac{D_{iv}^2 m_d^{5/2}}{16\pi\omega_{iv}\rho\hbar^2 k^* m_c^{3/2}} \begin{bmatrix} N_q \\ N_q + 1 \end{bmatrix} \left[ 1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*) \pm 2\alpha\hbar\omega_{iv}^\dagger \right] (q_{\max}^{*4} - q_{\min}^{*4})}. \quad (2.3.79)$$

Les extremums de  $q$  se retrouvent à partir de l'expression pour  $f(\cos\theta)$ . On regarde quelle valeur de  $\theta$  maximise et minimise cette fonction :

$$q^{*2} \pm 2k^* q^* \cos\theta - 2\alpha m_c \omega_{iv}^{\dagger 2} \mp 2m_c \frac{\omega_{iv}^\dagger}{\hbar} [1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)] = 0. \quad (2.3.80)$$

Il en résulte deux valeurs possibles pour les deux racines, soit  $\sigma_i = +1$  ou  $-1$  :

$$q^* = \mp k^* \left( \cos\theta + \sigma \sqrt{\cos^2\theta - \frac{2\alpha m_c \omega_{iv}^{\dagger 2}}{k^{*2}} \pm 2m_c \frac{\omega_{iv}^\dagger}{\hbar k^{*2}} [1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)]} \right). \quad (2.3.81)$$

Pour le cas de l'émission, on prend le signe du bas soit le (+) du  $\mp$  au début de l'expression plus haute (ainsi que les autres signes correspondants).

$$\begin{aligned} q_{\max, \text{é}}^* &= k^* \left( 1 + \sqrt{1 - \frac{2\alpha m_c \omega_{iv}^{\dagger 2}}{k^{*2}} - 2m_c \frac{\omega_{iv}^\dagger}{\hbar k^{*2}} [1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)]} \right) \\ q_{\min, \text{é}}^* &= k^* \left( 1 - \sqrt{1 - \frac{2\alpha m_c \omega_{iv}^{\dagger 2}}{k^{*2}} - 2m_c \frac{\omega_{iv}^\dagger}{\hbar k^{*2}} [1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)]} \right). \end{aligned} \quad (2.3.82)$$

Pour le cas de l'absorption, on prend plutôt le signe du haut, soit le  $-$  du  $\mp$  au début de l'expression plus haut (ainsi que les autres signes correspondants).

$$\begin{aligned}
q_{\max,a}^* &= k^* \left( 1 + \sqrt{1 - \frac{2\alpha m_c \omega_{iv}^{\dagger 2}}{k^{*2}} + 2m_c \frac{\omega_{iv}^{\dagger}}{\hbar k^{*2}} [1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)]} \right) \\
q_{\min,a}^* &= k^* \left( -1 + \sqrt{1 - \frac{2\alpha m_c \omega_{iv}^{\dagger 2}}{k^{*2}} + 2m_c \frac{\omega_{iv}^{\dagger}}{\hbar k^{*2}} [1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)]} \right).
\end{aligned} \tag{2.3.83}$$

Par la suite, On peut remplacer les  $q_{\max}$  et  $q_{\min}$  pour avoir notre expression complète du taux de diffusion au premier ordre de phonons intervallées par un porteur de charge. Il ne faut pas oublier de remplacer  $\hbar\omega_{iv}^{\dagger} \rightarrow \hbar\omega_{iv} + \Delta E_{fi}$  si le processus implique un changement de vallée avec une énergie différente.

Par souci de vérification, nous aimerions une fois de plus trouver l'expression de distribution angulaire pour l'ordre 1. On repart de l'équation à l'ordre 0 (équation 2.3.67), mais avec maintenant  $q^4$  au lieu de  $q^2$ . Les racines sont les mêmes, avec  $\omega_{iv}$  au lieu de  $\omega_{op}$ . Par souci de simplicité, on en considère, encore une fois, que le cas parabolique.

$$\begin{aligned}
P(\mathbf{k}^*) &= \sum_i \frac{Z_{iv} D_{iv}^2 m_d^{5/2}}{4\pi \rho \omega_{iv} m_c^{5/2}} \left[ \begin{matrix} N_q \\ N_q + 1 \end{matrix} \right] \int_{\theta_{min}^*}^{\theta_{max}^*} (q_0^*)_i^4 \frac{1}{|f'(q_0^*)_i|} \sin \theta d\theta \\
&= \frac{Z_{iv} D_{iv}^2 m_d^{5/2}}{2\pi \rho \hbar^2 \omega_{iv} m_c^{3/2}} \left[ \begin{matrix} N_q \\ N_q + 1 \end{matrix} \right] \int_{\theta_{min}^*}^{\theta_{max}^*} k^{*3} \frac{\left( 8 \cos^4 \theta \pm 8 \cos^2 \theta \left( 2m_c \frac{\omega_{iv}}{\hbar} \right) + \left( 2m_c \frac{\omega_{iv}}{\hbar} \right)^2 \right)}{\left| \sqrt{\cos^2 \theta \pm 2m_c \frac{\omega_{iv}}{\hbar k^{*2}}} \right|} \sin \theta d\theta \\
P(\mathbf{k}^*) &= \int_{\theta_{min}^*}^{\theta_{max}^*} P(\mathbf{k}^*, \theta) d\theta.
\end{aligned} \tag{2.3.84}$$

ou encore :

$$P(\mathbf{k}^*, \theta) = \boxed{\frac{Z_{iv} D_{iv}^2 m_d^{5/2}}{2\pi \rho \hbar^2 \omega_{iv} m_c^{3/2}} \left[ \begin{matrix} N_q \\ N_q + 1 \end{matrix} \right] k^{*3} \frac{\left( 8 \cos^4 \theta \pm 8 \cos^2 \theta \left( 2m_c \frac{\omega_{iv}}{\hbar} \right) + \left( 2m_c \frac{\omega_{iv}}{\hbar} \right)^2 \right)}{\left| \sqrt{\cos^2 \theta \pm 2m_c \frac{\omega_{iv}}{\hbar k^{*2}}} \right|} \sin \theta d\theta.} \tag{2.3.85}$$

Il ne nous reste plus qu'à remplacer par  $\theta_{min} = 0$  et  $\theta_{max} = \arccos \sqrt{\frac{\hbar\omega_{iv}}{E(k^*)}}$  et on remarque qu'on retrouve bel et bien l'expression pour diffusion IV ordre 1 ;

$$\begin{aligned}
P(\mathbf{k}^*) &= \frac{Z_{iv} D_{iv}^2 m_d^{5/2}}{2\pi \rho \hbar^2 \omega_{iv} m_0^{3/2}} \int_{\theta_{min}^*}^{\theta_{max}^*} k^{*3} \frac{\left(8 \cos^4 \theta - 8 \cos^2 \theta \left(2m_c \frac{\omega_{iv}}{\hbar}\right) + \left(2m_c \frac{\omega_{iv}}{\hbar}\right)^2\right)}{\left|\sqrt{\cos^2 \theta - 2m_c \frac{\omega_{iv}}{\hbar k^{*2}}}\right|} \sin \theta d\theta \\
&= \frac{Z_{iv} D_{iv}^2 m_d^{5/2}}{2\pi \rho \hbar^2 \omega_{iv} m_c^{3/2}} k^{*3} \left( \cos \theta \left[2m_c \frac{\omega_{iv}}{\hbar k^{*2}} - 2 \cos^2 \theta\right] \sqrt{\cos^2 \theta - 2m_c \frac{\omega_{iv}}{\hbar k^{*2}}} \right) \Big|_{\theta_{min}^*}^{\theta_{max}^*} \\
&= \frac{Z_{iv} D_{iv}^2 m_d^{5/2}}{2\pi \rho \hbar^2 \omega_{iv} m_c^{3/2}} k^{*3} \left( \left[2 - 2m_c \frac{\omega_{iv}}{\hbar k^{*2}}\right] \sqrt{1 - 2m_c \frac{\omega_{iv}}{\hbar k^{*2}}} \right) \\
&= \frac{\sqrt{2} Z_{iv} D_{iv}^2 m_d^{5/2}}{\pi \rho \hbar^5 \omega_{iv}} \left( [2E(\mathbf{k}^*) - \hbar \omega_{iv}] \sqrt{E(\mathbf{k}^*) - \hbar \omega_{iv}} \right).
\end{aligned} \tag{2.3.86}$$

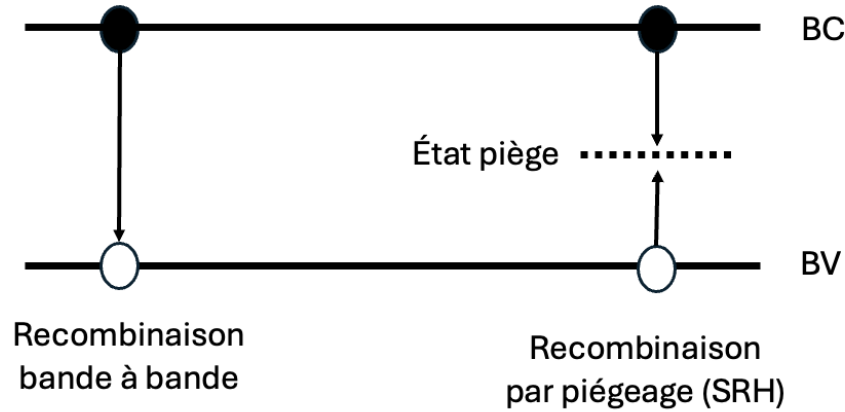
**2.3.2.4. Phonons piézoélectriques acoustiques et polaires optiques.** Dans les matériaux polaires, tels que le GaAs, il existe un autre type d'interaction électron-phonon. En effet, dans ces cristaux, le mouvement des atomes (phonons) s'accompagne d'ondes de polarisation et donc d'une force électrostatique sur les porteurs de charge [113]. Si cette onde de polarisation vient initialement de phonons acoustiques, on dit que c'est une interaction piézoélectrique alors que si elle provient de phonons optiques, on l'appelle polaire optique.

Nous n'entrerons pas plus en détail dans la description de ces phénomènes, car ils ne concernent pas le Ge et le Si qui sont non polaires. Toutefois, d'autres physiciens de la communauté de l'informatique quantique, plus particulièrement du volet des qubits quantiques, s'intéressent à notre logiciel de simulations pour modéliser le comportement ou le transport des phonons et des charges dans les qubits [140]. Comme ces qubits sont parfois composés de matériaux polaires, tels que le saphir, le LiF et le GaAs, il ne faut pas oublier de tenir compte de ces deux nouveaux types de phonons (piézoélectriques et polaires optiques), car ils peuvent être dominants à faible énergie, encore plus que les diffusions acoustiques intravallées non polaires. Certains des matériaux énumérés plus haut ont déjà été ajoutés à G4CMP, mais seulement la partie sur le transport des phonons [56]. Plusieurs scientifiques travaillent présentement sur la partie du transport des porteurs de charges et nous leur rappelons l'existence de ces nouveaux processus, pas inclus dans notre simulation pour le moment. Finalement, nous nous contenterons pour finir de référer à Jacoboni [64] pour plus de détails.

### 2.3.3. Recombinaison de paires $e^-/h^+$

Nous avons vu que le dépôt suffisamment grand d'énergie dans un cristal de Si ou de Ge peut exciter des paires électron-trou, que le dépôt soit électronique ou nucléaire. Les électrons et les trous peuvent accomplir le processus inverse, c'est-à-dire se recombiner et émettre des

photons ou des phonons. Dans des matériaux à gap direct comme le GaAs et le InAs, les électrons passent de la bande de conduction à la bande de valence où ils se recombinent avec les trous en émettant des photons [119]. À l'inverse, pour des matériaux à gap indirect comme le silicium et le germanium, les paires se recombinent plutôt de manière non radiative via l'intermédiaire de trappes, soit des impuretés ou des défauts à la surface et dans le volume du matériau. C'est ce qu'on appelle le modèle Shockley–Read–Hall (SRH) [123]. Ces trappes créent des niveaux d'énergie entre la bande de conduction et de valence vers lesquelles les électrons et les trous peuvent se désexciter ou s'exciter respectivement. Si un électron et un trou occupent cet état en même temps, soit avant que l'un ou l'autre retourne vers sa bande, il y a de la recombinaison et donc l'émission de phonons. Si la différence d'énergie entre la trappe et la bande de conduction ou de valence est petite ( $\ll k_B T$ ), on dit que c'est une trappe peu profonde, alors que si elle est élevée ( $\gg k_B T$ ), il s'agit d'une trappe dite profonde. La figure 2.12 montre de manière schématique des deux processus de recombinaisons : de bande à bande et SRH ou par trappe.



**Fig. 2.12.** Représentation schématique de la recombinaison de paires e/h. À gauche, la recombinaison de la bande de conduction à la bande de valence. À droite, la recombinaison via l'intermédiaire de pièges dans la bandes interdites.

### 2.3.4. Ionisation d'impact

Les électrons et les trous peuvent aussi ioniser d'autres charges s'ils ont suffisamment d'énergie pour exciter les électrons de la bande de valence vers la bande de conduction, soit de l'ordre de l'énergie de gap. Toutefois, comme cette énergie est d'environ 1 eV pour le Si et le Ge et que SuperCDMS applique des différences de potentiel de quelques dizaines de V au maximum, il est rare que les porteurs de charge aient suffisamment d'énergie pour créer d'autres paires d'électron-trou de cette manière.

Par contre, les détecteurs de SuperCDMS, même s'ils sont très purs, possèdent quelques impuretés, comme par exemple, des atomes de phosphore dans le Si et l'arsenic dans le Ge [107, 106]. Ces impuretés sont environ au nombre de  $10^{10}$  par  $\text{cm}^3$  [105]. On appelle ces donneurs d'électrons des donneurs hydrogéniques, car ils se comportent comme des atomes d'hydrogène. En effet, l'électron de valence supplémentaire est attiré par une force de Coulomb par le noyau positif de ces atomes. Toutefois, l'électron de valence supplémentaire a une masse effective  $m^*$  différente de celle de l'électron au repos et la force de Coulomb entre celui-ci et le noyau est écranté («screened») par une constante diélectrique  $\epsilon_r$ . Comme la constante diélectrique est plus grande que celle du vide et la masse effective plus petite que celle de l'électron, l'énergie de liaison de cet électron supplémentaire est très faible, généralement de quelques dizaines de meV [43]. Cela crée donc un état d'énergie légèrement en dessous de la bande de conduction. À la température de la pièce et plus élevé, il y aurait beaucoup d'excitations thermiques de ces électrons de valence supplémentaires vers la bande de conduction et donc une concentration importante d'électrons libres et de donneurs ionisés. Les détecteurs SuperCDMS fonctionnent à des températures cryogéniques de quelques dizaines de mK ( $k_B T \approx 4 \mu\text{eV}$ ) et n'ont donc pas assez d'énergie thermique pour mener à des excitations des électrons de ces donneurs hydrogéniques. Il faut que l'excitation ou l'ionisation d'impact proviennent des électrons et des trous avec une énergie cinétique plus grande que l'énergie de liaison de ces impuretés. Comme les énergies de liaisons sont très faibles, ces états d'impuretés créent des bandes d'énergie légèrement plus faibles que la bande de conduction. Bref, ce sont des trappes peu profondes.

Nous avons parlé uniquement d'impuretés de style donneur jusqu'à présent, mais il existe bien évidemment un phénomène similaire pour les trous et les accepteurs hydrogéniques. Ceux-ci ont un électron de valence en moins que le Si ou le Ge ou encore un trou de plus. Ils ont une énergie légèrement plus élevée que la bande de valence, aussi de quelques dizaines de meV et un trou ou un électron avec une énergie cinétique suffisante peut exciter ces trous supplémentaires.

Les impuretés ne sont pas les seules à pouvoir créer des trappes. Les défauts du cristal peuvent créer, comme nous l'avons mentionné, des états d'énergie dans la bande interdite. Si un porteur de charge se retrouve pris dans cette trappe, on se retrouve alors avec l'équivalent d'un donneur s'il s'agit d'un électron ou d'un accepteur s'il s'agit d'un trou. Un autre porteur de charge se déplaçant dans le cristal peut ensuite exciter cet électron ou ce trou pris dans la trappe s'il a suffisamment d'énergie cinétique comme dans le cas des impuretés. La différence principale ici est que les trappes causées par les défauts n'impliquent pas des atomes différents (autre que Si ou Ge) et peuvent être plus profondes. En effet, la déformation du cristal détermine la profondeur de la trappe et sa différence d'énergie avec la bande la plus proche.

Si cette différence est grande, il s'agit d'une trappe profonde, alors qu'une petite différence mène à une trappe peu profonde.

Pour plus de détails sur l'ionisation d'impact, en particulier sur la cinématique et le taux auquel ce processus survient, nous vous recommandons le livre de Landsberg [76]. On peut toutefois, donner une approximation de la section efficace d'ionisation d'impact qui n'inclut pas l'ionisation directe de la bande de valence à celle de conduction) [102] :

$$\sigma(E) = \begin{cases} 0, & \text{pour } E < \varepsilon_i \\ \sigma_0 \left( \frac{E - \varepsilon_i}{\varepsilon_i} \right), & \text{pour } \varepsilon_i \leq E < 2\varepsilon_i \\ 2\sigma_0 \left( \frac{\varepsilon_i}{E} \right), & \text{pour } E \geq 2\varepsilon_i \end{cases}$$

où  $E$  est l'énergie du porteur de charge,  $\varepsilon_i$  l'énergie de liaison (généralement de quelques dizaines de meV) de la charge supplémentaire de l'impureté ou du porteur de charge prise dans la trappe, alors que  $\sigma_0$  est une constante environ égale à  $\pi a_B^{*2}$  avec  $a_B^*$  le rayon de Bohr effectif de l'impureté hydrogénique :  $a_B^* = a_B \frac{m_0}{m^*} \epsilon_r$ . Ce rayon effectif est augmenté d'un facteur  $\frac{m_0}{m^*} \epsilon_r$  par rapport au rayon de Bohr de l'atome d'hydrogène, alors que l'énergie de liaison des impuretés hydrogéniques est diminuée d'un facteur  $\frac{m^*}{m_0 \epsilon_r}$ .

### 2.3.5. Surfaces

À la surface, l'électron peut aussi se recombiner dû à la présence de trappes proches de la surface. Ces trappes, différentes de celles causées par les impuretés et les défauts du cristal, viennent principalement des liaisons pendantes causées par l'arrêt soudain du potentiel périodique cristallin à la surface. Cela crée des états électroniques surfaciques entre la bande de valence et de conduction [88]. Il y a donc plusieurs captures de charge aux surfaces à cause de ces états intermédiaires, ce qui peut mener aussi à des recombinaisons si un électron et un trou occupent en même temps cet état de surface.

Autre processus possible aux surfaces, lorsque les porteurs de charge arrivent à une interface, les paires  $e^-h^+$  peuvent aussi réfléchir de manière spéculative ou diffuse en raison des irrégularités microscopiques proches de la surface [73, 12, 54]. Si la surface est polie, il y aura généralement réflexion spéculative et la collision sera cohérente et élastique. Au contraire, s'il y a beaucoup de rugosité surfacique, la réflexion de la charge sera généralement diffuse [68, 109, 108] et donc aléatoire. La réflexion diffuse engendre généralement aussi l'émission de phonons de surface. Il est à noter que plus la quantité de mouvement du porteur de charge est grande, plus sa longueur d'onde de de Broglie est petite. Si cette dernière devient de l'ordre de quelques paramètres de maille du réseau cristallin ( $a \approx 0,5$

nm pour le Si et le Ge), la surface sera moins «polie» et la réflexion diffuse. Finalement, dans les deux types de diffusion, il peut y avoir un changement de vallée à la suite de cette réflexion si la quantité de mouvement de la charge change assez de direction.

Il existe aussi une faible probabilité de transmission de l'électron vers le vide. L'électron est alors loin de la surface, au niveau atomique, mais reste proche du volume du matériau de sorte qu'il ne ressent pas les champs électriques extérieurs du vide. La fonction de travail du Si est, par exemple, de  $W \approx 4,7$  eV [82], ce qui implique que seuls les électrons avec une énergie plus que grande que cette valeur peuvent s'échapper dans le vide.

Finalement, il est également possible pour un porteur de charge de franchir l'interface entre le cristal de Si ou de Ge et le matériau conjoint (par exemple, de l'aluminium). À cette interface entre deux matériaux, il y aura une concentration des charges et une courbure des bandes de conduction et de valence afin d'équilibrer l'énergie de Fermi des deux matériaux. Pour du Si et du Ge non dopé comme notre cristal, cela conduit à une barrière de Schottky empêchant la plupart des électrons avec une énergie cinétique moindre que cette barrière de traverser du Si ou du Ge à l'aluminium.

La physique des surfaces est vraiment riche et complexe et mériterait qu'on s'y attarde plus longtemps que quelques paragraphes. Nous devons toutefois nous limiter à cette demi-page, mais avec l'intention de mieux comprendre les effets de surface présents dans nos détecteurs de matière sombre dans le futur. Il est difficile de prédire l'importance de ces effets de surfaces sur la reconstruction de nos signaux.

### 2.3.6. Diffusion avec des électrons/trous/plasmons

Les porteurs de charge interagissent principalement entre eux via deux moyens : par interaction coulombienne et par la création de plasmons. Ces phénomènes dépendent tous deux de la concentration d'électrons et de trous libres.

Comme les détecteurs SuperCDMS sont non dopés et ne contiennent donc presque pas d'impuretés, on sait que la concentration intrinsèque de trou et d'électron libre est environ la même soit [71] :

$$n_i = p_i = 2 \left( \frac{k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} (m_e^* m_h^*)^{3/4} \exp \left( -\frac{E_g}{2k_B T} \right).$$

ce qui donne essentiellement zéro à une température de 52 mK. Il n'y a donc presque aucun porteur de charge libre dans nos détecteurs et on peut ainsi négliger les interactions coulombiennes entre eux-ci.

Cela implique aussi qu'il n'y a pas de plasmon dû aux électrons libres de la bande de conduction, car la concentration en électron de conduction est beaucoup trop faible.

Par contre, des plasmons provenant des électrons de valence pourraient être excités dans nos cristaux, mais leur énergie, qui tient compte de la concentration en électron de valence du Si ou du Ge ( $n \approx 2 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ ) est d'environ 17 eV, ce qui est plusieurs fois l'énergie maximale qu'atteignent la plupart des paires électrons-trous dérivant dans nos détecteurs. On peut donc aussi négliger ce type de plasmons de volume. Sans oublier que, comme nous le verrons plus tard, notre simulation ne permet pas formellement d'interaction entre les particules comme deux électrons, chacun étant simulé indépendamment des autres.

### 2.3.7. Diffusions avec des impuretés

En plus des autres processus impliquant des impuretés décrits plus haut, les électrons et les trous peuvent également faire des diffusions cohérentes avec les atomes des impuretés. Après la collision, la quantité de mouvement initiale du porteur de charge  $\mathbf{k}$  est alors déviée d'un angle  $\theta_{k,k'}$  vers une quantité de mouvement finale  $\mathbf{k}'$  (voir la figure 2.8). Toutefois, seule la direction change, car le processus est élastique, la masse du porteur de charge étant beaucoup plus petite que celle de l'impureté. Il existe 2 types de collisions : avec des impuretés chargées et avec des impuretés neutres. Décrivons le premier cas en premier.

#### 2.3.7.1. Impuretés chargées.

De manière générale, l'hamiltonien de perturbation de ce processus est tout simplement une interaction de type Coulombien, semblable à la diffusion Rutherford. Les charges libres peuvent toutefois s'amonceler autour des impuretés chargées et créer un écrantage («screening») pour les autres charges. L'hamiltonien d'interaction est donc :

$$H' = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 r} e^{-\beta r}. \quad (2.3.87)$$

où  $L_D = 1/\beta$  est la longueur d'atténuation qui tend vers l'infini dans notre cas, car nous n'avons presque aucune charge libre telle qu'expliquée à la section précédente. On peut donc négliger l'effet d'écrantage et remplacer l'exponentiel  $e^{-\beta r}$  par 1.

On met cet hamiltonien de perturbation dans l'équation de la règle d'or de Fermi. En suivant un cheminement similaire à celle pour la diffusion des phonons, notre intégrale sur les fonctions d'onde de Bloch nous donne la probabilité de diffusion suivante :

$$P(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\pi N_I e^4 \delta(E(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k}))}{8\hbar(\epsilon_r\epsilon_0)^2 V k^4 \sin^4(\theta_{kk'}/2)}. \quad (2.3.88)$$

où nous avons posé que l'intégrale de chevauchement est unitaire, avons multiplié par le nombre d'impuretés  $N_I$  par volume  $V$  et avons utilisé de quelques approximations en presumant

que  $k' \approx k$  dans l'intégrale sur les angles. Pour plus de détails sur la démarche au long, consultez [128, 87].

Finalement, on peut évaluer l'intégrale de notre expression plus haute sur tous les états finaux possibles pour avoir un taux total de diffusion qui ne dépend que de l'énergie initiale de l'électron. Il est à noter que cette intégrale diverge vers l'infini pour un angle  $\theta_{k,k'} \rightarrow 0$  mais, qu'on peut régler ce problème en introduisant un paramètre d'impact maximal  $b$  soit la distance entre les impuretés et le porteur de charge [28] :

$$b_{max} = 1/2 N_I^{-1/3}. \quad (2.3.89)$$

Au-delà de cette distance, l'électron se retrouve plus proche du voisin. L'angle de diffusion  $\theta_{k,k'}$  dépend bien sûr de cette distance  $b$ . Plus elle est grande, plus l'interaction coulombienne est faible et l'angle de déviation aussi. Bref, un paramètre d'impact maximal conduit à un angle de diffusion minimal, réglant le problème de divergence.

Plus généralement, par géométrie et cinématique, le paramètre de collision est donné en fonction de l'angle de diffusion par :

$$b = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_r\epsilon_0 \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right)} \cdot \cot(\theta_{kk'}/2)$$

On peut alors intégrer sur l'espace des  $k'$  finaux avec une limite minimale sur l'angle, ce qui donne :

$$P(\mathbf{k}) = \frac{\pi N_I}{\sqrt{2m^* E(\mathbf{k})^3}} \left( \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} \right)^2 \log \left[ 1 + \left( \frac{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 E_{\mathbf{k}}}{Ze^2 N_I^{1/3}} \right)^2 \right].$$

À remarquer qu'ici, on utilise une masse effective  $m^*$  au lieu du développement tensoriel au long avec les masses longitudinales et transverses. On peut se permettre cette approximation, même dans le cas des électrons, car c'est un processus peu fréquent à cause de la faible densité d'impuretés. De plus, c'est un processus important seulement à très faible énergie (voir figure 2.13a à la fin de ce chapitre). Une différence de potentiel de quelques V est souvent suffisante pour se sortir de ce régime où les collisions avec les impuretés chargées dominent. De plus, ce mécanisme de diffusion agit essentiellement en changeant la direction de propagation des porteurs de charges, mais pas leur énergie. Bref, ce processus ne contribue que peu au transport total des porteurs de charges, qui sont plutôt dominés par des diffusions avec des phonons et donc des pertes d'énergies. Il est à noter qu'en l'absence de tension électrique (0V), ces collisions permettent d'expliquer, en partie, le mouvement aléatoire des électrons et des trous lorsqu'ils n'ont plus assez d'énergie pour émettre des phonons. Il ne faut pas oublier que si le porteur de charge a une énergie très faible, elle passe beaucoup de

temps proche de la charge électrique de l'impureté et subit une perturbation sur une période plus longue. Certaines des conditions de la règle d'or de Fermi tombent alors et le vrai taux pourrait être différent [87]. Les diffusions avec des impuretés peuvent mener à des diffusions intervalles si le changement de quantité de mouvement est assez grand (collisions avec un grand angle).

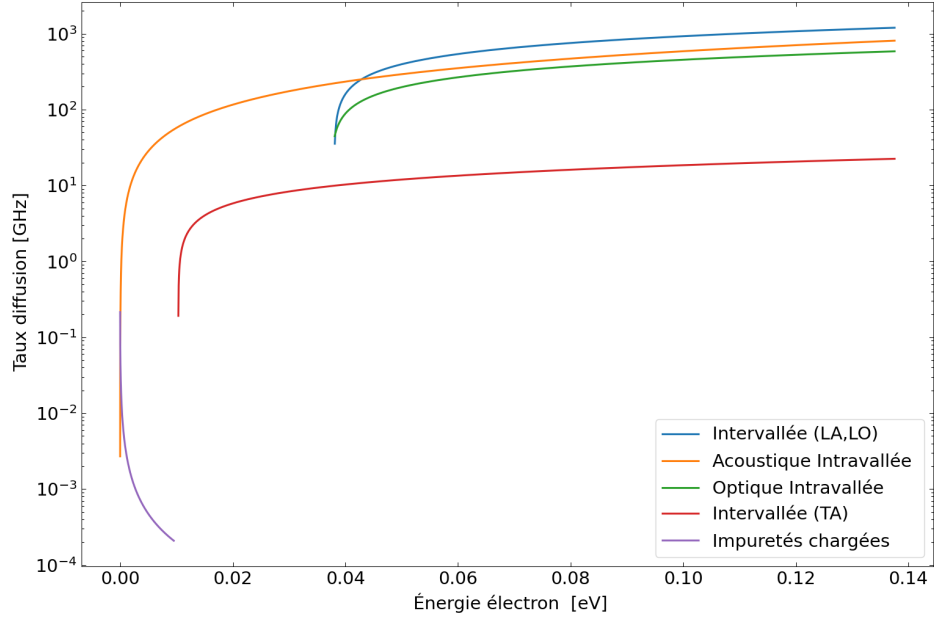
### 2.3.7.2. Impuretés neutres.

Dans un deuxième temps, il existe une interaction non coulombienne à très courte échelle entre les charges libres et les impuretés neutres. Sans rentrer dans les détails, cette interaction est souvent représentée par un puits fini de profondeur de l'énergie de Rydberg hydrogénique proche de l'impureté. En résolvant l'équation de Schrödinger pour ce potentiel et des ondes planes, on trouve un taux de diffusion de l'ordre de 1 collision par mètre traversée par la charge libre. Pour plus de détails, consultez [121]. Nous négligerons donc ce type de collisions pour le reste de cet ouvrage. À très faible énergie ( $< 1 \mu\text{eV}$ ), ce processus, comme les collisions avec les impuretés chargées, pourrait devenir plus important, participant à la randomisation élastique de la quantité de mouvement des charges.

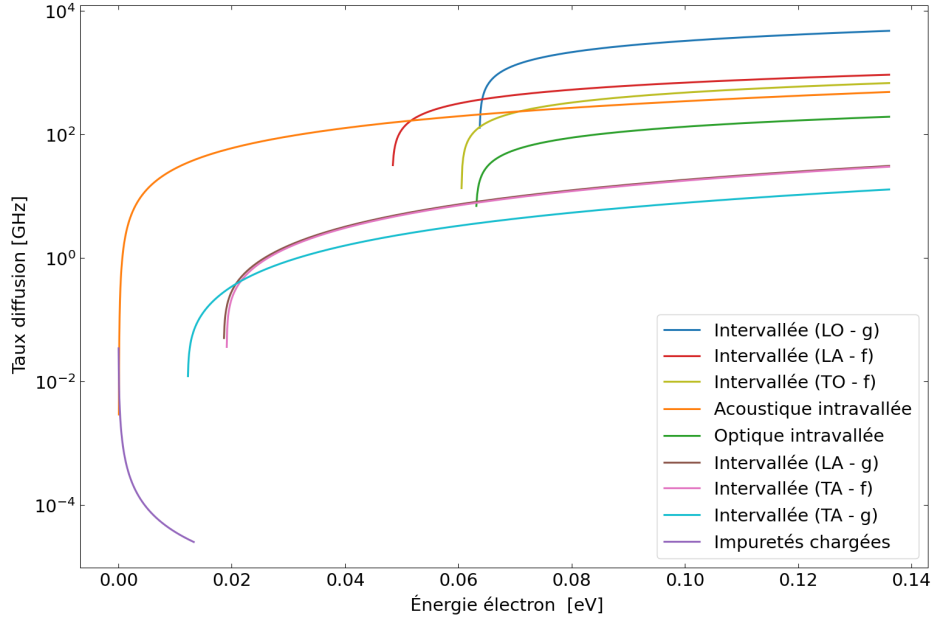
### 2.3.8. Résumé

En résumé, nous avons considéré plusieurs mécanismes de diffusion des électrons et des trous dans un cristal de Ge ou de Si : diffusion avec des phonons (acoustiques intravallées, optiques intravallées, intervalles, piézoélectriques acoustiques et polaires optiques), collisions avec des impuretés, processus de surface, recombinaison et excitation de paire électron-trou entre autres. À l'aide de la règle d'or de Fermi, nous avons estimé la probabilité de la majorité de ces processus. La figure 2.13 représente le taux auquel surviennent plusieurs de ces processus dans le germanium et le silicium en fonction de l'énergie de l'électron.

On voit que les collisions avec les impuretés ne sont importantes qu'à très faibles énergies. L'émission de phonons acoustique est importante à toutes les énergies, mais l'est moins que l'émission de la plupart des phonons intervalles lorsque l'électron a une énergie supérieure au seuil de ce processus. Pour les trous, que ce soit dans le Ge ou le Si, on omettrait les transitions intervalles, car on ne considère qu'une seule bande de valence. Autrement, l'émission de phonons acoustiques et optiques intravallées de même que les collisions avec les impuretés auraient un taux similaire. Certains paramètres tels que les potentiels de déformation et les masses sont différents et la valeur des taux serait différente, mais l'allure générale des courbes est très similaire.



(a) Pour le Ge



(b) Pour le Si

**Fig. 2.13.** Taux de diffusions des électrons en fonction de leur énergie. Pour les impuretés chargées, nous avons pris une concentration de  $10^{10}$  impuretés par  $\text{cm}^3$ . Pour les valeurs des potentiels de déformations, consultez le tableau 4.3 pour l'émission de phonons acoustiques intravallées et le tableau 4.5 pour les phonons IV. Pour les phonons optiques intravallées, nous utilisons  $D_{\text{op}} = 2,2 \times 10^8$  eV/cm et  $\hbar\omega_{\text{op}} = 61,2$  meV pour le Si et  $D_{\text{op}} = 5,5 \times 10^8$  eV/cm  $\hbar\omega_{\text{op}} = 37,04$  meV pour le Ge.

## Chapitre 3

---

### G4CMP

Nous avons parlé, au chapitre 1, de la matière sombre ainsi que de l'expérience de détection directe de SuperCDMS au Si et au Ge. Nous avons ensuite brièvement expliqué le fonctionnement des détecteurs cryogéniques de SuperCDMS. Au chapitre 2, nous avons rappelé certains des éléments essentiels de la physique du solide avant de plonger dans un long développement mathématique sur le transport des charges électriques dans les semi-conducteurs à basse température. Ce chapitre-ci traitera maintenant de la modélisation des détecteurs de SuperCDMS, en particulier le transport des paires électron-trou dans le Si et le Ge, d'où l'importance des deux chapitres précédents.

Les outils de simulations de SuperCDMS modélisant le détecteur portent le nom de G4CMP [69, 21], un raccourcissement de GEANT4 physique de la matière condensée (*GEANT4 Condensed Matter Physics*). GEANT4 est un outil de simulations par méthode de Monte-Carlo permettant de modéliser le passage des particules à travers la matière [4, 8, 9]. Outre le suivi de la trajectoire des particules, ce dernier inclut plusieurs fonctionnalités, comme la construction de géométrie de détecteurs, un grand choix de matériau et d'éléments, une liste complète des particules dites "stables" et une grande librairie de processus physiques pour des énergies allant d'environ 250 eV à quelques TeV. GEANT a été développé à l'origine dans les années 1970 pour suivre la trajectoire des particules dans les détecteurs du CERN. Aujourd'hui, sa dernière version, GEANT4, est utilisée non seulement pour la physique des particules, mais aussi par d'autres branches de la physique et même de l'ingénierie.

G4CMP se veut une adaptation de GEANT4 à la physique du solide et des basses énergies. G4CMP hérite donc beaucoup de son fonctionnement de GEANT4. La physique de la matière condensée n'est pas comprise dans GEANT4, car elle n'est pas nécessaire pour le type de détecteur au LHC et la physique des particules à haute énergie. Les deux outils sont écrits en C/C++. G4CMP est capable de modéliser les détecteurs SuperCDMS du dépôt

initial d'énergie dans le cristal, au déplacement des phonons et des électrons à travers le cristal, jusqu'au réchauffement du TES, en passant par la production de quasi-particules de Bogolioubov dans la fine couche d'aluminium supraconductrice. Bref, chacune des étapes, du début jusqu'à l'apparition du signal brut dans nos détecteurs, sont incluses. SuperCDMS utilise également d'autres logiciels de simulations maison pour modéliser les sources de radiation, la reconstruction du signal brut, etc. Ceux-ci dépassent toutefois le cadre de ce travail.

Ce chapitre se divise en trois sections. La première traite de l'équation de transport de Boltzmann (ETB), qui décrit la densité de charges électriques dans un système hors équilibre. La deuxième montre comment on peut résoudre cette équation par la méthode de Monte-Carlo en modélisant la trajectoire des charges. La troisième et dernière section décrit les processus physiques inclus dans G4CMP.

G4CMP est disponible sur GitHub : <https://github.com/kelseymh/G4CMP>

### 3.1. Équation de transport de Boltzmann

L'équation de transport de Boltzmann permet de décrire la distribution statistique des particules et leur transport dans un système thermodynamique qui n'est pas à l'équilibre. Les électrons et trous des détecteurs cryogéniques de SuperCDMS au Ge et au Si sont soumis à de gros champs électriques (généralement quelques V/cm à quelques dizaines de V/cm pour SuperCDMS) [6], ce qui constitue un bon exemple de système hors équilibre. Il faut donc avoir recours à cette équation pour décrire le mouvement des charges dans les détecteurs de SuperCDMS. Décrivons maintenant mathématiquement cette dernière.

Soit la distribution de probabilité spatiale et en impulsion en fonction du temps des charges électriques  $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ . Cette fonction représente la probabilité qu'une charge occupe un petit espace  $d^3\mathbf{r}$  à la position  $\mathbf{r}$  et qu'elle ait une quantité de mouvement  $\mathbf{k}$  dans une région  $d^3\mathbf{k}$  de l'espace des impulsions, le tout à un temps  $t$ . Pour une telle distribution, l'équation de transport de Boltzmann est [64, 113, 66, 87] :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}}. \quad (3.1.1)$$

Décortiquons un peu ce que représente cette équation. Le premier terme régit l'évolution temporelle de la densité électronique pour une valeur de  $\mathbf{k}$  et de  $\mathbf{r}$  donnée. Le deuxième terme décrit comment une charge électrique bouge dans l'espace d'une position à l'autre si elle a une vitesse  $\mathbf{v}(\mathbf{k})$ . Le troisième terme décrit l'accélération des charges sous l'effet d'une force de Lorentz  $\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$ . Il montre aussi comment leur quantité de mouvement varie. En définitive, le terme de l'autre côté de l'égalité symbolise les chocs subis par les particules dans un matériau. Il englobe tous les phénomènes décrits dans la section précédente (phonons

acoustiques, impuretés, diffusion interstitielle, etc.). Plus précisément, on a la forme suivante pour le terme de collisions :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int [f(\mathbf{k}')P(\mathbf{k}', \mathbf{k})(1 - f(\mathbf{k})) - f(\mathbf{k})P(\mathbf{k}, \mathbf{k}')(1 - f(\mathbf{k}'))] d\mathbf{k}'. \quad (3.1.2)$$

où le premier terme correspond aux collisions qui font passer les électrons de l'état  $\mathbf{k}'$  à  $\mathbf{k}$  alors que le deuxième terme correspond à l'inverse, soit la diffusion d'un électron de quantité de mouvement  $\mathbf{k}$  à  $\mathbf{k}'$ .

Pour un système à l'équilibre, la fonction  $f$  qui décrit le niveau d'occupation des états est tout simplement la distribution de Fermi-Dirac  $f_0$  [111, 40] :

$$f_0 = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/k_B T} + 1}. \quad (3.1.3)$$

Hors équilibre, il faut avoir recours à l'équation de transport de Boltzmann pour trouver cette dite fonction  $f$ . Dans les deux cas (équilibre et hors équilibre), cette dernière est utile, car elle nous permet de trouver toutes sortes de quantités thermodynamiques. En mécanique statistique, une quantité thermodynamique macroscopique du système  $A$ , tel que l'énergie ou l'entropie, est égale à la valeur moyenne de cette quantité [40] :

$$\bar{A} = \sum_{n=1}^N A_n(\mathbf{k}_n, \mathbf{r}_n, t) f(\mathbf{k}_n, \mathbf{r}_n, t) \rightarrow \int A(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{k} d\mathbf{r}. \quad (3.1.4)$$

où  $N$  est le nombre d'électrons dans le cristal et pourvu que  $N \rightarrow \infty$ . Il est à noter aussi que la fonction de distribution comporte la normalisation suivante :

$$\frac{2}{(2\pi)^3} \int f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{k} d\mathbf{r} = N. \quad (3.1.5)$$

où le facteur 2 vient de la dégénérescence du spin des électrons et le  $(2\pi)^3$  de la densité d'état lors du passage de la somme à l'intégrale dans la limite continue.

Toujours pour la situation hors équilibre, cette équation intégrale-différentielle à sept variables (trois pour la position, trois pour la quantité de mouvement et une pour le temps) est pratiquement impossible à résoudre de manière analytique. On peut la résoudre en ayant recours à plusieurs approximations, comme celle linéaire. Une autre manière de résoudre cette équation est d'utiliser un processus stochastique, soit la méthode de Monte-Carlo. Ce sera d'ailleurs le sujet de la prochaine section.

## 3.2. Modélisation du transport des porteurs de charges par méthode de Monte-Carlo

L'approche par méthode de Monte-Carlo est une manière numérique et stochastique, très populaire, de résoudre l'équation de transport de Boltzmann. L'idée générale de cette méthode est la suivante : on simule la trajectoire d'un seul électron à la fois, sachant qu'il est soumis à un champ électrique et/ou magnétique et que l'on connaît la probabilité qu'il subisse des collisions avec le réseau (phonons, impuretés, défauts, etc.). On répète le tout pour plusieurs électrons afin d'avoir un bon échantillon de trajectoires donnant une mesure pour estimer des quantités d'intérêt, comme la distribution de probabilité des charges électriques  $f$ , la vitesse de dérive, la mobilité, etc.

Pour notre problème, on commence par définir la géométrie et la physique de notre système. On spécifie, par exemple, les dimensions du cristal de Si et certaines de ses propriétés.

On «crée» une charge à laquelle on assigne ensuite une position et une quantité de mouvement initiale. Dans la plupart des simulations MC classiques, on choisit généralement une énergie et une vitesse nulle. Nous reviendrons sur ce choix dans la sous-section suivante.

Une fois la charge et ses conditions initiales établies, s'en suit une succession d'accélération et de collisions pour modéliser la trajectoire de la charge : accélérations de l'électron par le champ électrique (*free flight*), collision, accélération, collision, et ainsi de suite.

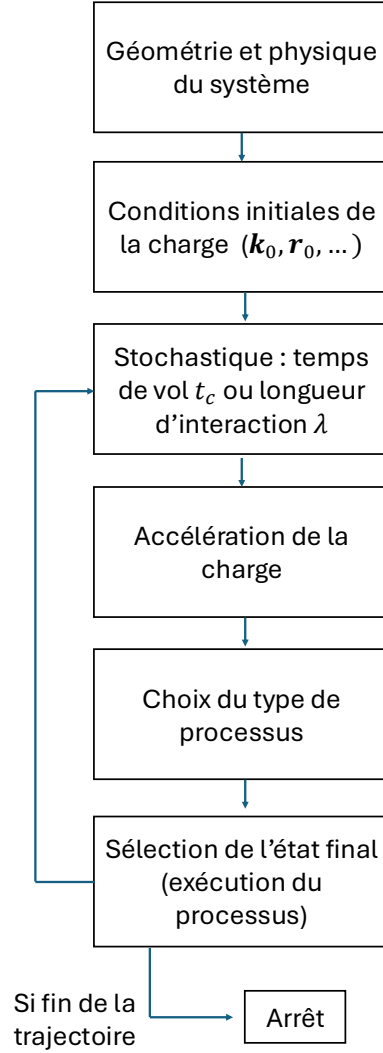
La partie accélération se calcule à partir des équations du tableau 2.2 et donc de la quantité de mouvement  $\mathbf{k}$  de la charge. Le champ électrique est généralement connu à chaque point de l'espace grâce à un mesh. On met à jour les quantités physiques de la charge au terme de cette accélération.

Le temps auquel surviennent les collisions est donné par les probabilités  $P(\mathbf{k})$  du chapitre précédent, auxquelles on ajoute des éléments aléatoires. Nous verrons comment dans quelques paragraphes.

À chaque collision, on choisit le type de processus et on applique les règles de diffusion du mécanisme. Par exemple, pour une émission de phonons acoustiques, on décide de l'énergie du phonon et on la soustrait de celle de l'électron ou du trou et on met à jour la quantité de mouvement et l'énergie du porteur de charge.

On répète cette succession d'accélération et de collisions jusqu'à un temps voulu, ou jusqu'à ce que la trajectoire de l'électron soit terminée. Bref, à la fin de chacune des itérations (accélération ou collision), nous mettons à jour la position, la quantité de mouvement et le temps de l'électron modélisé. Nous avons donc la position et la quantité de mouvement, mais aussi l'énergie, la vitesse et plein d'autres quantités sur la trajectoire de la charge à chaque

pas ou itération de notre simulation. La figure 3.1 illustre les étapes de la modélisation par méthode de Monte-Carlo.



**Fig. 3.1.** Schéma montrant les étapes d’une modélisation du transport de porteurs de charge par méthode de Monte-Carlo. La simulation suit la trajectoire d’une seule particule à la fois et s’arrête lorsque la charge est piégée ou absorbée

En simulant une grande quantité de trajectoires ( $N_{trajectoire}$ ), on finit par pouvoir trouver la valeur de la densité  $f$  en prenant la moyenne des positions et des quantités de mouvement en fonction du temps :

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \approx \frac{1}{N_{trajectoire}} \sum_{n=1}^{N_{trajectoire}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n(t)) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_n(t)).$$

Glissons maintenant un petit mot sur l’efficacité de cette méthode. Cette manière de résoudre l’équation est numériquement très couteuse et demande plusieurs approximations, comme nous l’avons vu dans le chapitre précédent. Nous avons approximé, par exemple, la forme des bandes de conduction et de valence, la masse des porteurs de charges, et autres facteurs dans les probabilités de diffusions des paires  $e/h$ . En contrepartie, avec la méthode Monte-Carlo, on gagne souvent en précision par rapport à la résolution analytique qui, elle, est souvent encore plus approximative. Notamment, avec la méthode MC, on peut connaître plein de statistiques détaillées, comme la distribution en énergie, angle, etc., pour la population d’électrons simulés. On peut également suivre la trajectoire de charge individuelle, ce qui est impossible avec une approche analytique.

### 3.2.1. Géométrie et physique du système

Définir la géométrie et la physique du système est la première étape de toute simulation de Monte-Carlo. Cela consiste à fixer certains paramètres, tels que le type de matériau, la température, les masses des porteurs de charges et les potentiels de déformation, mais aussi la relation de dispersion de la structure de bande. Certaines modélisations optent pour des bandes «analytiques», comme nous avons utilisé au chapitre précédent, alors que d’autres utilisent des méthodes numériques, tels que les pseudo-potentiels pour calculer  $E(\mathbf{k})$  plus précisément et remplissent des tables de valeur de cette relation de dispersion, pouvant ensuite être utilisées pendant la simulation [132].

Dans le cas de GEANT4 et G4CMP, il faut également définir la géométrie de ce qu’on simule. Il faut donner les dimensions, la position et le matériau de notre détecteur, que ce soit le volume du cristal de Ge de SuperCDMS ou les diverses composantes de ATLAS.

Pour G4CMP, c’est aussi à cette étape que nous définissons les propriétés des phonons, tels que des paramètres de désintégration anharmoniques ou de diffusions isotropes. Tous ces paramètres sont répertoriés dans un fichier d’input (format texte) où chaque ligne contient le nom du paramètre à définir ainsi que sa valeur et ses unités à côté. Le logiciel se charge ensuite de lire le fichier et d’en extraire les valeurs au début de la simulation. On peut également utiliser des paramètres de configuration (qu’on appelle des commandes macro) pour changer les valeurs numériques et éviter de le faire manuellement dans le fichier .txt à chaque fois. Il n’est alors plus nécessaire de recompiler le code pour chaque changement. Pour plus de détails, nous recommandons de lire la documentation du GitHub de G4CMP.

### 3.2.2. Conditions initiales

Au début de la simulation, on commence par choisir une quantité de mouvement  $\mathbf{k}_0$ , une vitesse  $\mathbf{v}_0$ , une énergie  $E_0$  et une position initiale  $\mathbf{r}_0$  pour l’électron ou le trou. Cela

correspond au temps zéro. Dans l'approche classique de MC, on pose généralement des valeurs nulles pour ces quantités. Ou encore, si on soumet les charges à des grands champs électriques, il faut choisir un peu plus judicieusement les conditions initiales. En effet, si l'énergie initiale du porteur de charge est trop petite, cela prendra un certain temps avant qu'il n'atteigne une vitesse d'«équilibre». Durant cette période initiale de grande accélération, le temps entre les collisions est beaucoup plus grand, ce qui augmente artificiellement sa mobilité dans la modélisation.

Dans G4CMP, on est moins confronté à ce genre de problème, car on ne dépasse que rarement des champs électriques de plus de quelques dizaines de V/cm. On peut bien évidemment soi-même définir les conditions initiales (nulles ou non nulles). Encore mieux, on peut calculer l'énergie cinétique des charges, leur direction et leur position à partir de l'énergie initiale déposée par la particule qui est entrée en collision avec le semi-conducteur. G4CMP utilise l'énergie déposée, le type de collision (électronique ou nucléaire), l'énergie de gap du matériau ainsi que le facteur Fano pour déterminer le nombre de phonons et le nombre de paires e/h ainsi que leurs conditions initiales. Voir la section 3.3.1 pour plus de détails.

### 3.2.3. Temps de vol entre les diffusions

On peut se demander, mais comment est-il possible de passer d'une équation intégrodifférentielle, qu'est l'équation de transport de Boltzmann, à un modèle numérique stochastique qu'est la méthode Monte-Carlo. Essayons d'expliquer ce passage. Tout d'abord, rappelons-nous que la probabilité par unité de temps qu'un électron de quantité de mouvement  $\mathbf{k}$  subisse une collision est :

$$P(\mathbf{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}' P(\mathbf{k}, \mathbf{k}'). \quad (3.2.1)$$

dont les unités sont en temps inverse. Cette équation ressemble fortement au deuxième terme de l'équation 3.1.2. L'électron ou le trou ne peut que sortir de l'état  $\mathbf{k}$ , mais pas y entrer, car il possède déjà cette impulsion, d'où le fait que seul le deuxième terme de 3.1.2 contribue dans la simulation des trajectoires et pas le premier. De plus,  $f \ll 1$ , encore plus à des températures cryogéniques, de sorte qu'on peut négliger le terme  $f(\mathbf{k})f(\mathbf{k}')$ . Au final, nous avons donc environ :

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} \approx f(\mathbf{k})P(\mathbf{k}). \quad (3.2.2)$$

On voit apparaître le lien entre le terme de collisions de l'équation de transport de Boltzmann et les taux de diffusions calculés dans la section précédente. Le deuxième terme de l'ETB décrit quant à lui l'accélération des charges par le champ électromagnétique.

Considérons maintenant la probabilité que l'électron subisse une collision dans le petit intervalle de temps  $dt$ , soit :

$$P(\mathbf{k}) dt. \quad (3.2.3)$$

Cela veut dire que la probabilité que l'électron ne subisse pas de collision dans un temps  $dt$  est simplement :

$$1 - P(\mathbf{k}) dt. \quad (3.2.4)$$

Ceci implique donc que la probabilité que l'électron ne collisionne pas entre  $t = 0$  et  $t + dt$  (appelons cela  $\mathcal{P}(t + dt)$ ) équivaut à la probabilité qu'il n'y ait pas eu de collisions entre le temps 0 et  $t$ , multipliée par la probabilité que la charge n'ait pas subi de collision entre  $t$  et  $t + dt$  :

$$\mathcal{P}(t + dt) = \mathcal{P}(t) (1 - P(\mathbf{k}) dt). \quad (3.2.5)$$

En soustrayant  $\mathcal{P}(t)$  des deux côtés de l'équation, en divisant par  $dt$  et en prenant la limite  $dt \rightarrow 0$ , on obtient :

$$\frac{d\mathcal{P}(t)}{dt} = -P(\mathbf{k}) \mathcal{P}(t). \quad (3.2.6)$$

qui est une équation différentielle dont la solution est une exponentielle :

$$\mathcal{P}(t) = \exp [-P(\mathbf{k}) t]. \quad (3.2.7)$$

Il est à noter que les probabilités de diffusion par unité de temps  $P(\mathbf{k})$  ne dépendent pas du passé de la particule, mais seulement de sa valeur actuelle de  $\mathbf{k}$ . C'est ce qu'on appelle une chaîne de Markov continue. Les électrons n'ont pas de «mémoire». C'est aussi pourquoi le développement mathématique précédent est valide. Bref, la probabilité que l'électron ou le trou fasse une collision dans un temps  $t$  est :

$$1 - \mathcal{P}(t) = 1 - \exp [-P(\mathbf{k}) t]. \quad (3.2.8)$$

Comme cette probabilité est une chaîne de Markov, elle ne s'applique pas seulement à la probabilité que la charge ne fasse sa première collision qu'à  $t$  si elle est partie au temps  $t = 0$ , mais représente aussi le temps entre deux collisions, car le système n'a pas de mémoire. Bref,

ce  $t$  représente le temps de vol. En effet, à chacune des collisions, le système « oublie » la dernière collision et seule sa quantité de mouvement actuelle est importante.

Finalement, on en déduit la densité de probabilité pour que la première collision ait lieu à l'instant  $t$  :

$$\mathcal{P}_{dens}(t) = \frac{d}{dt} (1 - \mathcal{P}(t)) = P(\mathbf{k}) \exp[-P(\mathbf{k}) t]. \quad (3.2.9)$$

Avec la densité de probabilité, on peut maintenant tirer un nombre aléatoire de cette distribution, ce qui correspond au temps de vol  $t_c$  (free flight) entre deux collisions. Soit un nombre aléatoire uniforme  $r$  compris entre 0 et 1, on tire un temps de vol aléatoire de notre distribution  $\mathcal{P}_{dens}(t)$ , sachant que cette densité est normalisée entre 0 et  $\infty$  :

$$r = \frac{\int_0^{t_c} \mathcal{P}_{dens}(t) dt}{\int_0^{\infty} \mathcal{P}_{dens}(t) dt}. \quad (3.2.10)$$

et le temps de vol  $t_c$  est alors :

$$t_c = -\frac{1}{P(\mathbf{k})} \ln(r - 1). \quad (3.2.11)$$

Mais comme  $r$  est compris entre 0 et 1, on peut réécrire de manière équivalente que  $1 - r \rightarrow r$ :

$$t_c = -\frac{1}{P(\mathbf{k})} \ln(r). \quad (3.2.12)$$

qui est l'expression utilisée par la quasi-totalité des modélisations par méthode de Monte-Carlo du transport des porteurs de charge. Nous utilisons une approche semi-classique, c'est-à-dire que les mécanismes de diffusions sont traités de manière quantique, mais les électrons se promènent de manière classique entre les collisions.

Pour finir, soulevons deux questionnements sur la forme de  $P(\mathbf{k})$  que vous avez probablement remarqués en lisant les dernières lignes. La première est qu'il existe plusieurs expressions différentes de  $P(\mathbf{k})$  qui dépendent du mécanisme considéré (phonons acoustiques intravallés ou intervallés, par exemple). Laquelle choisir? On prend la somme sur tous les mécanismes  $i$  considérés dans notre modélisation pour avoir une probabilité totale :

$$P(\mathbf{k}) = \sum_i P_i(\mathbf{k}). \quad (3.2.13)$$

Les  $i$  représentent les différents mécanismes soit émission de phonons intravallée acoustique, optique, diffusions IV, etc.

La deuxième remarque que nous voulons soulever est l'utilisation d'un  $P(\mathbf{k})$  qui ne dépend pas du temps, alors qu'il le devrait. En effet, comme l'électron est accéléré par le champ électromagnétique, sa quantité de mouvement change avec le temps lors de son temps de

vol et donc la probabilité qu'il subisse une collision change aussi. Il faudrait donc remplacer l'intérieur de l'exponentiel par une intégrale sur le temps de  $P(\mathbf{k}(t))$  pour être le plus exacte possible. Par le théorème fondamental du calcul intégral, on obtient :

$$\mathcal{P}(t) = \exp \left[ - \int_0^t dt' P(\mathbf{k}(t')) \right]. \quad (3.2.14)$$

Mais il est quasiment impossible de connaître l'expression exacte de  $P(\mathbf{k}(t'))$ , surtout quand l'accélération du porteur de charge est fortement anisotrope, comme dans un cristal de Ge et de Si. Pour s'en sortir, l'une des approches, dans la modélisation dite classique de Monte-Carlo, est le *self scattering* ou auto-diffusion. L'autre approche, celle que G4CMP utilise, est la méthode itérative de  $P(\mathbf{k})$  [95]. Ces deux approches seront discutées dans les prochaines sections.

### 3.2.3.1. Méthode d'auto-diffusion ou *self-scattering*.

Commençons par expliquer la méthode classique, soit l'utilisation d'un terme d'auto-diffusion. Les équations 3.2.7 et 3.2.12 sont valides si  $P(\mathbf{k})$  est une constante qui ne dépend pas du temps, ce qui n'est pas le cas. On contourne ce problème en posant une nouvelle quantité  $P_0$  qui, elle, est constante dans le temps, et qui est constituée de  $P(\mathbf{k})$  et d'un terme *placeholder* d'auto-diffusion ou *self-scattering* nommé  $P_{\text{self}}(t)$  [110] :

$$P_0 = P(\mathbf{k}(t)) + P_{\text{self}}(t). \quad (3.2.15)$$

Les deux termes à droite de l'égalité varient dans le temps, mais leur somme donne toujours une constante de sorte que le terme à gauche du égal soit aussi une constante. Il est à noter que le terme  $P_{\text{self}}(t)$ , dépend du temps et donc indirectement de l'énergie ou de la quantité de mouvement du porteur de charge. La figure 3.2 montre la relation entre ces trois termes.

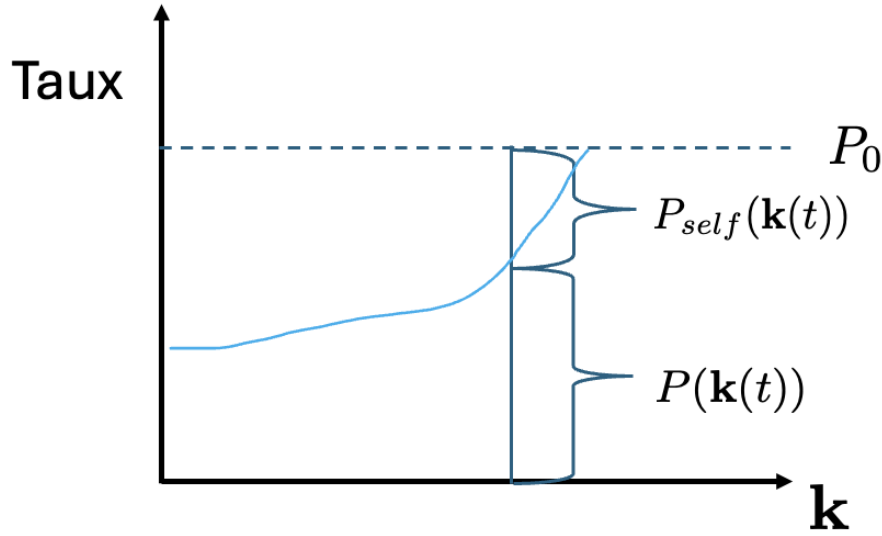
Les équations développées plus haut sont donc valides, pourvu qu'on remplace  $P(\mathbf{k}(t))$  par  $P_0$  et qu'on inclut le processus d'auto-diffusion dans les  $i$  mécanismes. Ce dernier ne représentant pas un processus physique, nous verrons comment le traiter dans un instant dans la modélisation. Ainsi, l'équation 3.2.7 devient :

$$\mathcal{P}(t) = \exp [-P_0 t]. \quad (3.2.16)$$

alors que celle pour trouver le temps de vol  $t_c$  devient :

$$t_c = -\frac{1}{P_0} \ln(r). \quad (3.2.17)$$

Nous reparlerons de comment choisir  $P_0$  dans la section sur le choix du processus.



**Fig. 3.2.** Représentation du taux total de diffusion constant  $P_0$ . La contribution du taux de diffusions physique  $P(\mathbf{k}(t))$  et du terme d'auto-diffusion  $P_{\text{self}}(t)$  varie en fonction de la quantité de mouvement  $\mathbf{k}$  et donc du temps.

Finissons cette section avec un petit mot sur l'efficacité de cette méthode. À première vue, on pourrait penser qu'en incluant plusieurs processus non physiques dans la méthode de Monte-Carlo, on ralentirait grandement la simulation. Dans les faits, on regagne beaucoup de temps, car d'avoir  $P_0$  constant nous permet de calculer très rapidement les temps de vol, ce qui sauve beaucoup de temps de calcul.

Pour ce qui est de la méthode itérative, voyons comment elle fonctionne dans la prochaine sous-section.

### 3.2.3.2. Méthode itérative de $P(\mathbf{k})$ .

L'approche de SuperCDMS est différente de la méthode dite classique de Monte-Carlo. Elle utilise plutôt la méthode itérative de  $P(\mathbf{k})$  qui consiste à recalculer à chaque itération les probabilités de diffusion, mais à les garder constantes entre les collisions. L'énergie des charges ne varie pas beaucoup entre les collisions, car celles-ci sont très fréquentes et le champ électrique relativement faible. Ce n'est donc pas une mauvaise approximation.

L'approche préconisée par G4CMP, et GEANT4, est différente non seulement via la manière de contourner la variation de  $P(\mathbf{k})$ , mais aussi car on s'intéresse à la distance parcourue entre les collisions plutôt qu'au temps entre celles-ci. Ceci se traduit de la manière

suivante. Pour chaque processus  $i$  (émissions de phonons, diffusions intervallées, ionisation d'impact, etc.), on calcule le libre parcours moyen  $\lambda_i$  de ce processus  $i$  selon la formule :

$$\lambda_i = \frac{v(\mathbf{k})}{P_i(\mathbf{k})}. \quad (3.2.18)$$

où  $v$  est la vitesse du porteur de charge. Celle-ci peut être extirpée de la quantité de mouvement selon l'équation du tableau 2.2.

Il est à noter que le raisonnement mathématique probabiliste de  $P_0$  tient toujours, même pour le libre parcours moyenne. La différence est qu'au lieu d'avoir la probabilité que la charge n'ait pas subi de collisions dans un temps  $t$ , on aura plutôt la probabilité qu'elle n'ait pas interagi sur une distance  $l$  :

$$P_0(l) = \exp(-l/\lambda). \quad (3.2.19)$$

Et on retrouve la longueur de vol (distance entre deux interactions) en tirant un nombre aléatoire de cette distribution de probabilité pour chaque processus  $i$  :

$$l_i = -\lambda_i \ln(r_i). \quad (3.2.20)$$

où ces  $l_i$  sont calculés pour chaque processus à chaque itération et  $r_i$  est un nombre aléatoire tiré d'une distribution plate entre 0 et 1. G4CMP choisit ensuite la longueur de vol ou d'interaction la plus petite parmi les  $i$  processus. L'électron est alors accéléré pendant une distance :  $\text{minimum}\{l_i\}$ , à la suite de quoi le processus ayant «remporté» la longueur d'interaction la plus courte est appliquée en respectant les règles de sélection de l'état final.

### 3.2.4. Accélération entre les collisions

Entre les collisions, on accélère l'électron et, à la fin du pas, on met à jour sa vitesse, sa position, sa quantité de mouvement et son énergie. Armé du temps de vol  $t_c$  et des équations de l'accélération du tableau 2.2 du chapitre 2, il devient facile de calculer ces nouvelles quantités. Prenons un exemple très simple, soit une bande sphérique parabolique et seulement un champ électrique uniforme et constant, pour illustrer comment est calculée la nouvelle quantité de mouvement. Pour une telle situation, l'expression du mouvement en fonction de la force électrique est :

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \mp e\mathbf{E}. \quad (3.2.21)$$

où le signe  $-$  est pour un électron et le signe  $+$  pour un trou. En intégrant par rapport à  $t$ , on obtient :

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_i \mp \frac{e\mathbf{E}}{\hbar} t_c. \quad (3.2.22)$$

où  $\mathbf{k}_i$  est le vecteur d'onde avant l'accélération. Une fois que l'on connaît la nouvelle quantité de mouvement, on peut calculer facilement l'énergie et la vitesse de la charge. La prochaine étape est de réaliser le processus physique gagnant, le tout en choisissant l'état final selon certaines règles.

### 3.2.5. Sélection du processus

Une fois l'accélération de la charge complétée, les informations de cette dernière sont recalculées et il faut choisir le mécanisme de diffusion qu'elle va accomplir, mais lequel choisir? Dans l'approche du *self-scattering*, on choisit à l'aide d'un autre nombre aléatoire  $r_2$  compris entre 0 et 1, différent de celui utilisé pour trouver  $t_c$ . On sélectionne le mécanisme  $l$  parmi les  $i$  mécanismes :

$$\frac{\sum_{i=1}^{l-1} P_i(\mathbf{k})}{P_0} \leq r_2 < \frac{\sum_{i=1}^l P_i(\mathbf{k})}{P_0}. \quad (3.2.23)$$

Le terme  $P_0$  inclut le processus non physique d'auto-diffusion. Prenons un exemple numérique fictif pour bien comprendre comment fonctionne cette équation. Considérons seulement trois processus : émissions de phonons acoustiques intravallées, diffusions IV et auto-diffusions. Pour une énergie donnée, on peut imaginer que le premier contribue à 70 % du taux total de diffusion, le deuxième processus à 20% et le troisième à 10%. Ainsi, si  $r_2$  est entre 0 et 0,70, c'est le premier mécanisme qui l'emporte alors que pour un  $r_2$  entre 0,70 et 0,90 c'est le deuxième processus qui est choisi. Si  $r_2 \geq 0,9$ , alors on choisit le troisième processus.

Vient alors le défi d'estimer la valeur de ce  $P_0$  pour s'assurer qu'il soit suffisamment grand pour que  $P(\mathbf{k}(t))$  ne soit pas plus grand que ce dernier, mais pas trop grand pour ne pas être trop coûteux en calculs numériques. En effet, si ce terme constant est trop grand, alors  $P_{\text{self}}$  aussi sera très grand et ce terme d'auto-diffusion sera choisi beaucoup plus souvent que les autres processus physiques lors de la simulation. À la suite d'un tel processus non physique, on ne change pas la valeur de l'impulsion ni de l'énergie de la charge. On choisit un nouveau temps de vol et on continue le *free flight* comme si aucun processus n'était survenu. À l'inverse, si le terme d'auto-diffusion est trop petit, on peut tomber sur le cas absurde où le terme d'auto-diffusion est négatif. Cela conduit à des résultats non physiques. Généralement, on estime généralement  $P_0$  comme étant un peu plus grand que  $P(\mathbf{k}(t))$  à une quantité de mouvement un peu plus élevée que celle attendue à la fin de la trajectoire de l'électron. En ayant cette valeur de  $P_0$  fixe, on peut calculer  $P(\mathbf{k}(t))$  et le soustraire à  $P_0$  pour avoir  $P_{\text{self}}$

Dans l'approche itérative de G4CMP, le processus est choisi quand on calcule la longueur d'interaction  $\lambda_i$  de chaque mécanisme de diffusion. Celui avec la longueur la plus petite l'emporte tout simplement.

### 3.2.6. Sélection de l'état final

Une fois le processus choisi, soit parce que c'était lui avec la longueur d'interaction la plus petite (pour G4CMP) ou par l'équation 3.2.23 (pour les modélisations classiques de MC), il faut exécuter le processus en question. Nous ne décrivons que la méthode adoptée par G4CMP car elle est un peu différente des autres modélisations par méthode de MC du transport des porteurs de charge. Il faut traiter chaque processus de manière séparée, car le choix de l'état final est fortement dépendant du type de diffusion.

#### 3.2.6.1. Émissions (et absorption) de phonons.

Pour les processus d'émissions de phonons (acoustiques intravallées, optique intravallées et diffusions intervallées), on commence par trouver l'angle d'émission du phonon par rapport à la direction du déplacement de l'électron ou du trou. Nous avons d'ailleurs choisi la direction de la charge comme l'axe polaire. On se sert des équations de distribution angulaire  $P(\mathbf{k}, \theta)$  développées dans le chapitre 2 pour trouver un angle aléatoire  $\theta_r$  parmi cette distribution par méthode directe [51] :

$$r_3 = \frac{\int_{\theta_{min}}^{\theta_r} P(\mathbf{k}, \theta) d\theta}{\int_{\theta_{min}}^{\theta_{max}} P(\mathbf{k}, \theta) d\theta}. \quad (3.2.24)$$

où  $r_3$  est un nombre aléatoire entre 0 et 1, différent de  $r_1$  et de  $r_2$ . Le terme au dénominateur est un facteur de normalisation. On isole ensuite  $\theta_r$ , qui va dépendre bien sûr de la distribution angulaire et donc du processus.

Si la forme de  $P(\mathbf{k}, \theta)$  n'est pas intégrable de manière analytique, on peut utiliser de manière alternative : la technique de rejet. On choisit une paire de points  $\theta, P(\theta)$  au hasard et, si la paire est à l'extérieur de la densité de probabilité, on la rejette. À l'inverse, si la paire est à l'intérieur de la distribution, on garde l'angle. Pour économiser du temps de calcul, on impose généralement une borne constante supérieure  $C \leq P(\theta)$ . De plus, on ne choisit que des angles compris dans le domaine de la fonction, comme par exemple, entre  $\theta_{min}$  et  $\theta_{max}$  pour l'émission de phonons acoustiques. Il existe une variante, appelée la technique combinée, qui choisit une fonction comme borne supérieure plutôt qu'une constante pour réduire le nombre de rejets et ainsi augmenter l'efficacité numérique de la méthode.

Une fois l'angle  $\theta_r$  trouvé, on cherche l'angle d'émission longitudinale  $\phi$  aussi avec la méthode directe. Toutefois, nous avons simplifié la dépendance angulaire de la masse, enlevant complètement celle en  $\phi$ . On tire donc l'angle aléatoire  $\phi_r$  d'une distribution constante :

$$\phi_r = 2\pi r_4. \quad (3.2.25)$$

où  $r_4$  est un nombre aléatoire entre 0 et 1 différent des trois autres nombres aléatoires  $r_1$ ,  $r_2$  et  $r_3$ .

La prochaine étape est de calculer l'énergie du phonon et de la charge électrique à partir des angles  $\phi_r$  et  $\theta_r$  et de la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement. On met ensuite à jour ces deux quantités pour le porteur de charge et on émet le phonon, ce qui crée une nouvelle particule à suivre dans la simulation.

#### Exemple : phonons intravallées acoustiques ellipsoïdal parabolique

Prenons un exemple concret : la diffusion de phonons acoustiques intravallées pour une bande ellipsoïdale parabolique. La distribution angulaire d'un tel cas est l'équation 2.3.72 avec  $\alpha = 0$  et le deuxième signe dans les symboles  $\pm$  pour l'émission :

$$P(\mathbf{k}^*, \theta) = \frac{D_{ac}^2 m_d^2}{2\hbar^2 \pi \rho u m_c} \left( 2k^* \cos \theta - 2\sqrt{m_c m_d} \frac{u}{\hbar} \right)^2 \sin \theta. \quad (3.2.26)$$

En remplaçant cette expression dans l'équation 3.2.24, avec  $\theta_{min} = 0$  et  $\theta_{max} = \arccos\left(\sqrt{m_c m_d} \frac{u}{k^* \hbar}\right)$

$$r_3 = \frac{(\cos \theta_{max} - \cos \theta_r)^3}{(1 - \cos \theta_{max})^3} + 1. \quad (3.2.27)$$

on isole  $\cos \theta_r$  et on trouve :

$$\cos \theta_r = \cos \theta_{max} + (1 - \cos \theta_{max}) (1 - r_3)^{1/3}. \quad (3.2.28)$$

qui est la forme présentement utilisée dans G4CMP pour trouver l'angle d'émission des phonons acoustiques intravallées. Il est possible de calculer la quantité de mouvement  $q$  du phonon acoustique à partir de son angle d'émission et de la quantité de mouvement de l'électron selon la formule 2.3.40, toujours avec  $\alpha = 0$  :

$$q^* = \left[ 2k^* \cos \theta_r - 2\sqrt{m_c m_d} \frac{u}{\hbar} \right]. \quad (3.2.29)$$

L'énergie du phonon est tout simplement  $E = \hbar u q$ . Pour des phonons optiques intravallées ou intervallées dont la relation de dispersion est constante, on peut oublier l'étape juste au-dessus et prendre une énergie constante parmi celles du tableau 2.4. Nous verrons comment choisir laquelle dans le prochain chapitre.

On soustrait ensuite cette quantité de mouvement et cette énergie de l'électron. Il est à rappeler que tout ceci se fait dans le référentiel de HV pour une bande ellipsoïdale. On revient finalement au référentiel du laboratoire ou du cristal avec une transformation inverse.

### 3.2.6.2. Diffusions avec des impuretés.

Dans le cas des impuretés, la procédure est semblable à celle des phonons, sauf qu'on extrait plutôt un angle de diffusion  $\theta_{kk'r}$  correspondant à l'angle entre la direction initiale de l'électron et sa direction après sa collision avec l'impureté. Le processus étant isotrope en  $\phi$ , on peut réutiliser l'expression 3.2.25 et changer la direction de l'impulsion de la charge sans en changer la norme, car il s'agit d'un processus élastique.

#### Exemple : diffusions avec des impuretés chargées

Pour des impuretés chargées, nous avons trouvé que la probabilité de diffusion est :

$$P(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\pi N_I e^4 \delta(E(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k}))}{8\hbar(\epsilon_r \epsilon_0)^2 V k^4 \sin^4(\theta_{kk'}/2)}. \quad (3.2.30)$$

On trouve l'angle  $\theta_{kk'r}$  par méthode directe :

$$\cos \theta_{kk'r} = \frac{1 - \cos \theta_{kk'min}}{1 - r_3 \left(1 - \frac{1}{2} [1 - \cos \theta_{kk'min}]\right)}. \quad (3.2.31)$$

### 3.2.6.3. Autres processus.

Les autres processus incluent : diffusions avec d'autres porteurs de charge, avec des plasmons, à la surface, ionisation d'impact et recombinaison de paires électron-trou. Pour certains d'entre eux, comme la recombinaison où la charge «disparaît» de la simulation, il est facile de connaître l'état final. Pour d'autres, il faudrait connaître la forme spécifique de  $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  de chacun d'eux pour déterminer les angles de diffusions. Cela dépasse le cadre de ce travail, car ces processus sont souvent peu nombreux dans nos détecteurs ou encore on a pour objectif de les améliorer dans le futur. Des ressources telles que Jacoboni [64] et Lundstrom [87] abordent en plus de détails ces mécanismes.

### 3.2.7. Simulation des bandes électroniques au complet.

Une des limites de modélisation par méthode de Monte-Carlo décrite plus haut est les approximations sur la relation de dispersion des bandes électroniques. Nous avons décrit ces dernières comme des paraboles avec un terme de correction non parabolique afin de simplifier et de diminuer le temps de calcul numérique de la simulation. Cette approximation est relativement bonne à des énergies de 1 eV et moins pour les charges. Nous avons également remplacé les trois bandes de valence anisotrope, dont deux bandes dégénérées, par un modèle mathématique simple : une seule bande sphérique de masse effective  $m^*$ .

Certaines simulations utilisent l’approche de la bande complète afin de tenir compte de la vraie structure de bande des cristaux. Dans cette approche, on découpe la première zone de Brillouin en cubes, chacun contenant une énergie et une quantité de mouvement calculé numériquement. On calcule aussi la densité d’état (DOS) de ces cubes. Plus ceux-ci sont petits, et donc nombreux, plus la méthode est précise. Lorsqu’on choisit l’état final après la diffusion, on choisit les cubes qui ont l’énergie et la quantité de mouvement finale voulue. On sélectionne ensuite au hasard, avec un poids associé au DOS, un des cubes finaux. Par la suite, on découpe ce cube en sous-régions, généralement six tétraèdres, et on choisit au hasard l’une de ces sous-régions, qui sera en fait l’état final de l’électron après diffusion. Pour plus de détails sur la méthode, voir Hess [22] et Lundstrom [87].

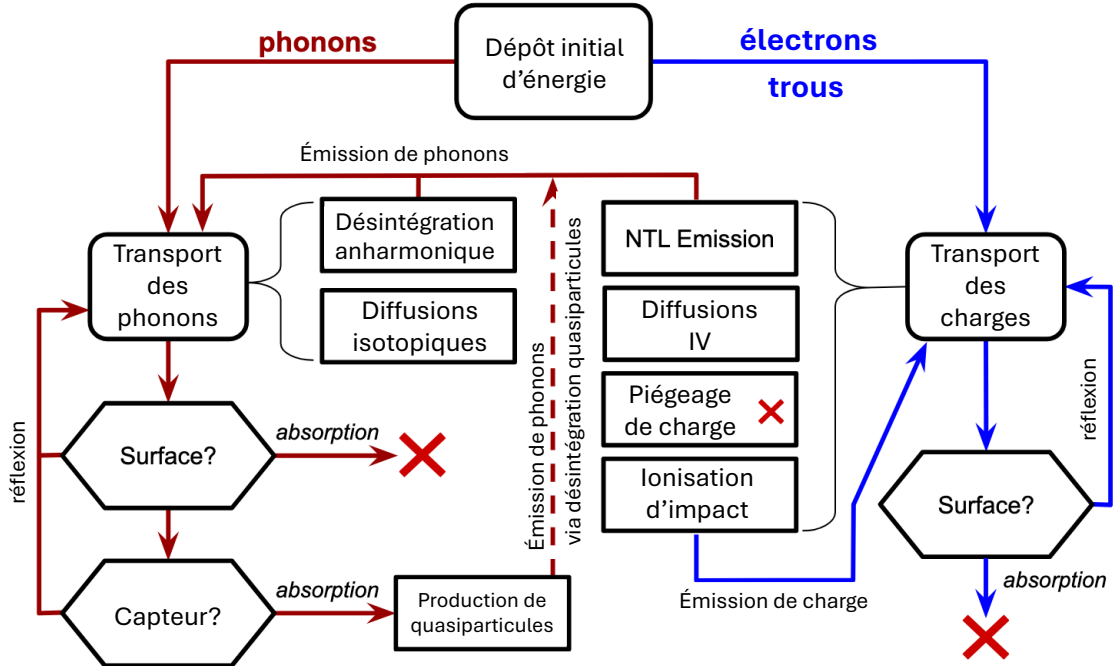
## 3.3. Processus physiques dans G4CMP

G4CMP modélise le transport des porteurs de charge par méthode de MC dans le Si et le Ge, mais aussi le transport des phonons. Le transport des électrons inclut l’accélération venant des champs électriques, l’émission de phonons acoustiques intravallées (ce que nous appelons phonons Neganov-Trofimov-Luke ou NTL [97, 86]), la diffusion intervallée, le *charge trapping*, la recombinaison de paires électron-trou, l’ionisation d’autres e/h et l’absorption et la réflexion de ces derniers aux surfaces. Le transport des phonons inclut, entre autres, leur transport anisotrope selon l’équation d’onde, la désintégration anharmonique, la diffusion isotrope, l’absorption et la réflexion aux surfaces ainsi que l’absorption par des paires de Cooper, menant à l’excitation de quasi-particules de Bogolioubov [146]. Il est possible d’inclure des capteurs aux surfaces du cristal de Ge et de Si pour détecter les phonons et les charges. Cela correspond essentiellement à la fine couche d’aluminium du détecteur de superCDMS et à des électrodes. La figure 3.3 résume ces divers mécanismes.

G4CMP est capable de reproduire plusieurs résultats expérimentaux, tels que la vitesse des dérives des électrons et des trous, les caustiques phononiques [56] ainsi que la position finale des charges aux surfaces des détecteurs de superCDMS [126, 94, 93]. Depuis quelques

années, G4CMP est également utilisé par la communauté d’informatique quantique pour comprendre les effets de la radiation sur les qubits [92, 137, 140]. G4CMP a aussi été utilisé pour modéliser le transport des phonons dans les télescopes MKID [134]. Les détecteurs de matière sombre, comme les qubits et les MKID se ressemblent au niveau électronique, des matériaux utilisés et de la température à laquelle ils sont opérés.

Cet outil de simulation est toutefois incomplet. Certains des mécanismes décrits plus haut ne sont que très sommairement implémentés et ne tiennent pas compte de toute la microphysique des détecteurs de SuperCDMS. Le but de cette thèse est de répertorier les divers processus présents et d’en améliorer plusieurs, notamment ceux du transport des charges, à l’aide d’un modèle physique plus complet. Dans cette section, nous allons d’abord décrire le fonctionnement de chacun des processus physiques dans G4CMP, ainsi que ses limites. Le chapitre 4 couvrira mes améliorations apportées.



**Fig. 3.3.** Schéma des processus inclus dans G4CMP et leurs relations entre eux pour le transport des phonons (à gauche) et des paires électron-trou (à droite). Lors d’un dépôt initial d’énergie, des charges et des phonons immédiats sont créés. Tiré de [69] et traduit en français.

### 3.3.1. Création de paires $e/h$ et de phonons

La première étape de la simulation consiste à créer les particules que nous voulons suivre : les charges et les phonons. À l’aide de paramètres de configuration (qu’on appelle des

commandes macro), on peut spécifier le nombre de particules, le type, leur position, leur direction, leur quantité de mouvement et leur énergie.

Autrement, il est possible de fournir l'énergie initiale déposée ainsi que le type de collision (électronique ou nucléaire), et G4CMP s'occupe du calcul de la fraction d'énergie utilisée pour produire des phonons, ainsi que celle servant à créer les paires e/h. Il est également possible de fournir la source d'énergie, par exemple, un élément radioactif ou un faisceau de neutrons, et sa position, sa direction, etc. SuperSim, un autre outil de simulation de SuperCDMS, est alors responsable de suivre les interactions et les dépôts d'énergie dans le cristal des particules venant de cette source.

Regardons maintenant comment sont produits les phonons et les porteurs de charges. Considérons une énergie de recul initiale  $E_R$  venant de la collision d'une particule avec le substrat de Si ou de Ge. Le nombre moyen de paires électrons-trous excitées  $\langle n_{eh}(E_R) \rangle$  dépend du degré d'ionisation  $Y$  et de l'énergie moyenne requise pour exciter une paire  $\varepsilon_{eh}$ :

$$\langle n_{eh}(E_R) \rangle = \begin{cases} 0, & Y E_R < \varepsilon_{\text{gap}}, \\ 1, & \varepsilon_{\text{gap}} < Y E_R < \varepsilon_{eh}, \\ \frac{Y E_R}{\varepsilon_{eh}}, & Y E_R > \varepsilon_{eh}. \end{cases} \quad (3.3.1)$$

où  $\varepsilon_{\text{gap}}$  est l'énergie de gap soit de 1,17 pour le Si et de 0,74 eV pour le Ge. À 0 K,  $\varepsilon_{eh} = 3,81$  eV pour le si, et 2,96 eV pour le Ge. Pour un recul électronique,  $Y = 1$ . Pour un recul nucléaire,  $Y \leq 1$  [83, 5]

Cela ne veut toutefois pas dire qu'aucun phonon n'est produit par une collision électronique, mais seulement que moins de phonons immédiats sont produits que pour une collision nucléaire de même énergie. En effet, il faut toujours environ  $\varepsilon_{eh}$  d'énergie pour créer une paire e/h alors que l'énergie de gap est beaucoup plus petite. La différence entre les deux va en phonons.

Il existe également des fluctuations autour de l'énergie moyenne. Certaines paires e/h demanderont plus d'énergie et produiront plus de phonons alors que d'autres en nécessiteront moins. On décrit ces fluctuations à l'aide du facteur de Fano [34]. Comme l'énergie de recul est fixe et ne peut être que distribuée en phonons ou en ionisation, cela impose des restrictions sur le nombre de phonons et de paires électrons-trous [72].

$$E_R = n_{eh}\varepsilon_{eh} + \hbar\omega n_{\text{phonon}}. \quad (3.3.2)$$

Concrètement, si plus d'énergie va en ionisation, alors moins d'énergie ira pour les phonons, et vice-versa. Cette dépendance mène vers le facteur Fano, qui donne une variance sur le nombre de paires électrons-trous plus petite qu'une distribution de Poisson. Le nombre de

charges produites suit une distribution inconnue, mais s'apparentant à une distribution de Poisson avec un facteur de Fano d'environ 0,15 pour le Si [3] et de 0,1057 pour le Ge.

On peut tirer profit de cette situation dichotomique pour reproduire ce phénomène de fluctuation à partir d'une distribution binomiale. G4CMP assigne une probabilité  $p$  de créer une paire électron-trou dans une fonction de probabilité binomiale et peut donc reproduire les fluctuations dans le nombre d'ionisations pour une même énergie déposée [3]. C'est ce vrai nombre de charges plutôt que le nombre moyen de paires e/h excitées qui seront créées dans la modélisation. On peut aussi demander explicitement à G4CMP de ne pas utiliser le facteur Fano en le désactivant au moyen d'une commande macro. Dans ce cas, la simulation produira  $\langle n_{eh} \rangle$  paires, arrondi vers le bas. Prenons un exemple numérique pour comprendre le tout. Imaginons un dépôt de 16 eV dans le Ge. Le nombre moyen de paires générées est donc :  $\langle n_{eh} \rangle = 16 \text{ eV} / 2,96 \text{ eV} \approx 5,6$  paires. Sans facteur de Fano, on produirait donc 5 charges et le restant de l'énergie irait en phonons ou en énergie cinétique. Toutefois, en tirant le vrai nombre de charges de la distribution binomiale en tenant compte du facteur de Fano, on obtient plutôt, par exemple, six charges au lieu de cinq.

Une fois le nombre de charges déterminé, on leur attribue une certaine énergie cinétique, avec une direction aléatoire. Dans G4CMP, nous donnons toute l'énergie restante ( $\varepsilon_{eh} - \varepsilon_{gap}$ ) en énergie cinétique aux charges, chacune emportant la même quantité  $K_{eh}$  :

$$K_{eh} = \frac{E_R}{n_{eh}} - \varepsilon_{gap}. \quad (3.3.3)$$

Ceci est un peu loin du vrai processus physique où des phonons sont nécessaires «lors» de la création de la paire e/h pour conserver la quantité de mouvement. En ne créant aucun phonon dans la simulation au début, on mise sur le fait que le porteur de charge, avec sa grande énergie cinétique, va irradier très rapidement des phonons (acoustiques intravallées, optique intravallées et IV) sur un temps très rapide. En effet, le temps typique d'émission de phonons sera de quelques ps à quelques ns. Dans le pire des cas, la charge prendra un temps de l'ordre de la  $\mu s$  pour traverser notre détecteur. Ceux-ci sont hauts de quelques cm et la vitesse de dérive des électrons de plusieurs dizaines de km/s. Les phonons prennent un temps de l'ordre de plusieurs ms à se rendre au TES et donner un signal. Ainsi, même si les phonons apparaissent avec un certain délai, cela devrait peu affecter la reconstruction de notre signal.

Pour finir, si le recul est nucléaire, on ajoute également l'émission de phonons immédiats lors de la création des paires e/h. L'énergie totale des phonons immédiats correspond à la partie qui n'a pas été utilisée pour l'ionisation, soit  $E_R(1 - Y)$ . Pour simplifier la simulation, car il est très difficile de prédire le vrai nombre de phonons immédiats et leur énergie

respective, on attribue à chaque phonon immédiat l'énergie de Debye. Cela correspond expérimentalement à environ 0,05558 eV pour le Si [127] et 0,03223 eV pour le Ge [74]. G4CMP utilise une énergie de Debye de 0,06203 eV pour le Si et de 0,00827 eV pour le Ge. Nous sommes en train de revoir le choix de la valeur de la fréquence de Debye dans G4CMP pour le Ge. Le dernier phonon emporte la différence d'énergie restante une fois les autres phonons avec énergie de Debye créés. On compte sur le fait que le taux de désintégration des phonons, à cette énergie, est très élevé, ce qui va rapidement donner une population de phonons de plus basses énergies. Voir la section 3.3.3.1 sur la désintégration anharmonique des phonons à ce sujet.

### 3.3.2. Transport des charges

Commençons par décrire le transport des électrons et des trous en premier. G4CMP n'inclut que les champs électriques et pas magnétiques pour le moment. Il est possible de fournir les valeurs de ce champ électrique en chacun des points de l'espace de notre cristal, sous la forme d'un mesh ou d'un quadrillé de potentiel électrique. Un programme, tel que COMSOL précalcule ensuite numériquement le champ électrique. On peut aussi spécifier la forme mathématique du champ électrique comme, par exemple, un champ constant dans une direction. Dans le cas de SuperCDMS, nous appliquons des champs électriques de quelques V/cm, relativement constants et allant de la surface du bas du détecteur vers le haut.

Les électrons et les trous sont accélérés selon les équations du tableau 2.2. Pour les trous, l'accélération est dans la même direction que le champ électrique, car la bande de valence est sphérique. Pour les électrons, l'accélération peut être dans une direction non parallèle au champ dû aux effets de la structure cristalline. Prenons un exemple numérique pour s'en convaincre. Imaginons que le champ électrique est purement en  $+z$  et que l'électron se trouve dans la vallée 0 [111] des bandes L du Ge. Son accélération pour un cas parabolique, mais une bande ellipsoïdale est :

$$\begin{aligned}
\vec{a} &= T_0^T \frac{1}{M} T_0 \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} \\
&= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{m_l} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_t} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{-1}{\sqrt{6}} & \frac{-1}{\sqrt{6}} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ qE \end{pmatrix} \\
&= \frac{qE}{3} \begin{pmatrix} \frac{1}{m_l} - \frac{1}{m_t} \\ \frac{1}{m_l} - \frac{1}{m_t} \\ \frac{1}{m_l} + \frac{2}{m_t} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{3.3.4}$$

L'accélération est donc oblique au champ électrique pour cet exemple. En fait, pour un champ électrique en  $+z$ , il y a quatre directions d'accélération possible pour les quatre vallées du Ge(100) (les anti-vallées donnent une accélération dans le même sens que leur vallée respective). Pour le Si(111), il y a trois directions d'accélération différentes. La figure 3.4 montre la position finale des électrons lorsqu'ils atteignent la surface du détecteur. On y distingue bien les quatre ou trois directions d'accélération possibles, qui se manifestent sous forme de quatre régions fortement concentrées en électrons pour le Ge et trois régions pour le Si. Cela est cohérent avec les résultats expérimentaux des positions finales des charges dans les détecteurs de SuperCDMS [126, 94, 93]. Les charges en dehors de ces régions sont dues aux diffusions IV. Les électrons, en changeant de vallées au cours de leur trajectoire, sont ensuite accélérés dans une autre direction.

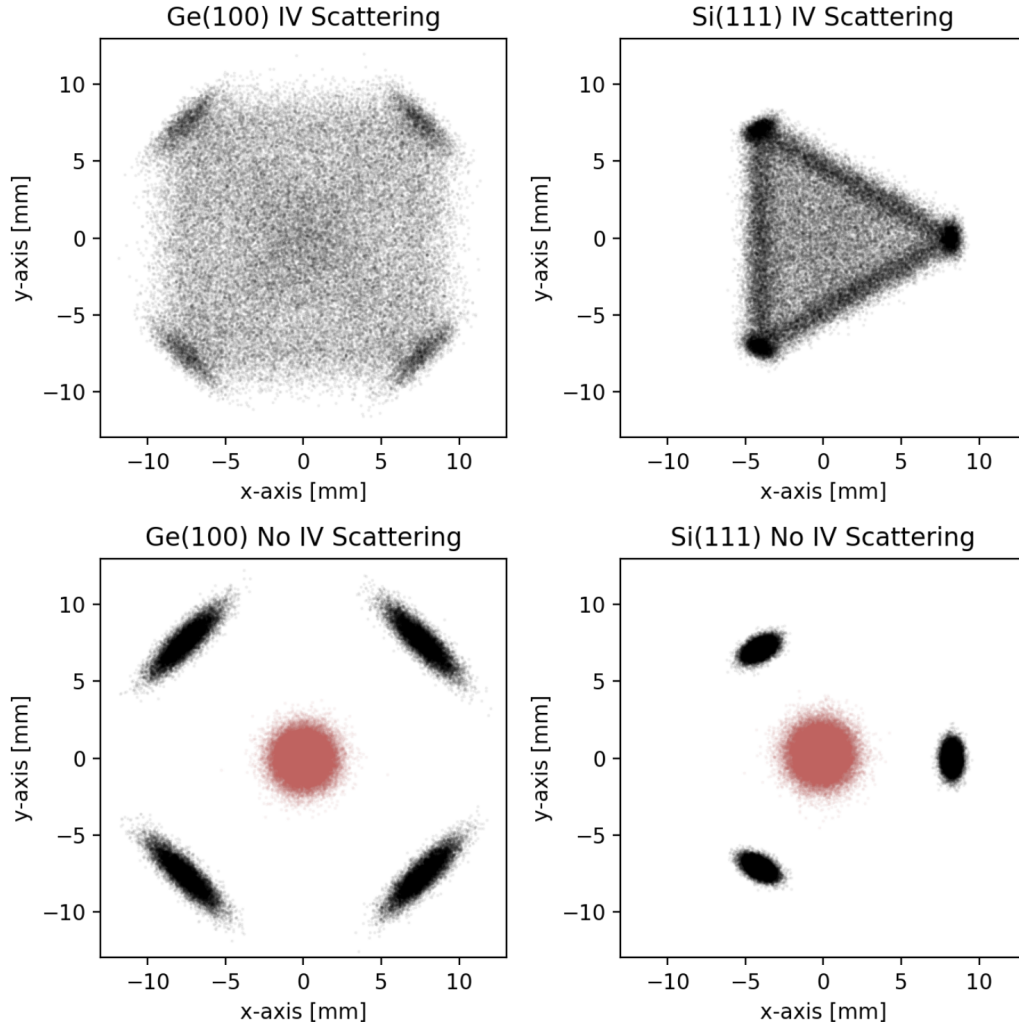
Si aucun champ  $\mathbf{E}$  n'est présent, les charges se déplacent de manière balistique en ligne droite entre les collisions.

### 3.3.2.1. Émission Luke-Neganov-Trofimov.

Les phonons Neganov-Trofimov-Luke (NTL) correspondent aux phonons émis par une charge électrique accélérée dans un métal, un semi-conducteur ou même un isolant. Lors de sa trajectoire, le porteur de charge est accéléré par la force électrique, mais ralentit en émettant des phonons. Techniquement, ces phonons NTL incluent les phonons acoustiques et optiques intravallées, les phonons intervallées ainsi que les phonons piézoélectriques et optiques polaires si le matériau est polaire (ce qui n'est pas le cas pour le Si et le Ge, rappelons-le). Par convention, dans G4CMP, les phonons NTL désignent plutôt seulement les phonons acoustiques intravallées. Cette erreur n'est pas si loin de la vérité, car la majorité des phonons émis par les paires  $e/h$  sont de ce type. Il est toutefois important de faire la distinction ici, car nous parlerons plus tard de phonons intervallées et le lecteur pourrait alors se demander pourquoi ceux-ci ne sont pas inclus dans les phonons NTL.

On remarque également que seule l'émission de phonons acoustiques est incluse dans la simulation, mais pas l'absorption, car le nombre d'occupation moyen des états de phonons acoustiques est bas à notre température. En effet, à 50 mK,  $N_q \approx 0$  car l'énergie des phonons acoustiques est beaucoup plus grande (quelques meV généralement) que l'énergie thermique  $K_B T$ .

Dans G4CMP, ce mécanisme de diffusion est déjà très complet et bien implémenté. Toutefois, il n'inclut malheureusement pas la non-parabolicité des bandes. Le but de cette thèse est d'améliorer le transport des porteurs de charge, notamment en modifiant le code de G4CMP pour inclure la non-parabolicité. Bref, dans le cas purement parabolique, le taux de diffusion pour les électrons est donc :



**Fig. 3.4.** Simulation de G4CMP du transport des électrons (noir) dans un cristal de Ge (100) (gauche) et de Si (111) (droite) de 1,67 cm de hauteur. Les figures du haut incluent le processus de diffusions IV alors que celle du bas ne l'inclut pas. Le transport des trous (rouge) ne permet pas de diffusions interbandes. Un champ électrique de 0,5 V/cm en  $+z$  est appliqué, accélérant les électrons dans des directions obliques dépendant de la vallée dans laquelle ils se trouvent. Tiré de [69]

$$P(\mathbf{k}^*) = \frac{D_{ac,e}^2 m_d^2}{12\pi \hbar^2 k^* \rho u m_c} \left( k^* - \sqrt{m_c m_d} \frac{u}{\hbar} \right)^3. \quad (3.3.5)$$

et pour les trous :

$$P(\mathbf{k}) = \frac{D_{ac,h}^2 m^*}{12\pi \hbar^2 k \rho u_l} \left( k - m^* \frac{u_l}{\hbar} \right)^3. \quad (3.3.6)$$

La distribution angulaire ( l'angle d'émission entre la charge et le phonon, dans le référentiel de HV) est, pour les électrons :

$$P(\mathbf{k}^*, \theta) = \frac{D_{ac,e}^2 m_d^2}{2\hbar^2 \pi \rho u m_c} \left( 2k^* \cos \theta - 2\sqrt{m_c m_d} \frac{u}{\hbar} \right)^2 \sin \theta. \quad (3.3.7)$$

et pour les trous (dans le référentiel du cristal) :

$$P(\mathbf{k}, \theta) = \frac{D_{ac,h}^2 m^*}{2\hbar^2 \pi \rho u_l} \left( 2k \cos \theta - 2m^* \frac{u_l}{\hbar} \right)^2 \sin \theta. \quad (3.3.8)$$

Il est d'ailleurs important de noter que G4CMP utilise la masse de conductivité  $m_c$  au lieu de  $m_d$  dans les constantes de  $P(\mathbf{k})$  et  $P(\mathbf{k}, \theta)$  pour les électrons, ce qui est, comme nous en avons discuté, un choix moins judicieux. En effet, cette masse de conductivité est beaucoup plus petite que la masse de densité d'état qui, elle, est déjà une approximation plus ou moins exacte de la dépendance angulaire de la masse des porteurs de charge. Sans oublier que la différence entre les  $m_l$  et  $m_t$ , surtout pour les bandes  $L$  du Ge, est assez grande. Nous reviendrons sur le choix de la masse dans le prochain chapitre. Pour ce qui est des trous, la masse est tout simplement la masse effective de la bande lourde (heavy hole).

### 3.3.2.2. Phonons optiques intravallées.

L'émission de phonons optiques intravallées survient lorsqu'un électron ou un trou émet un phonon optique avec une énergie de quelques dizaines de meV, mais avec peu de quantité de mouvement. Dans ce cas, la charge ne change pas de vallées. Ce processus n'est pas inclus actuellement dans G4CMP. En fait, les phonons optiques tout court ne sont pas modélisés dans l'outil de simulation, car ils se désintègrent en quelques ps en phonons acoustiques. Nous pourrions toutefois inclure ce processus, qui est un important mécanisme de freinage des charges, en émettant un phonon acoustique de haute énergie.

### 3.3.2.3. Diffusions intervallées.

Les diffusions intervallées surviennent lorsque les paires e/h émettent ou absorbent des phonons avec une quantité de mouvement suffisamment grande qu'ils changent de bandes ou de vallées. Lors de leur création, les électrons se font attribuer leur vallée initiale en regardant laquelle est la plus proche de leur quantité de mouvement  $\mathbf{k}$ .

Le modèle considéré actuellement par G4CMP est semi-empirique. On estime le taux  $P(\mathbf{k}^*)$  de ce mécanisme non pas avec l'expression 2.3.72, mais avec une loi semi-empirique qui dépend du champ électrique  $\mathbf{E}$  et de quelques constantes. Celles-ci furent trouvées à

partir du nombre de diffusions intervalées observées dans les détecteurs de matière sombre de EDELWEISS [75]. Ainsi, on considère un modèle linéaire :

$$P(\mathbf{E}) = b + m|\mathbf{E}|^\alpha. \quad (3.3.9)$$

où  $b = 1,5 \times 10^6$  Hz,  $m = 1,5$  Hz et  $\alpha = 4$  pour le Si. Nous utilisons également un modèle quadratique :

$$P(\mathbf{E}) = A (E_0^2 + |\mathbf{E}|^2)^{\alpha/2}. \quad (3.3.10)$$

où  $A = 6,72 \times 10^{-2}$  Hz,  $E_0 = 217$  V/m et  $\alpha = 3,24$  pour le Ge. Nous utilisons le modèle linéaire pour le Si et celui quadratique pour le Ge, car ils offrent une meilleure concordance avec les valeurs expérimentales de EDELWEISS [75].

En date d'aujourd'hui, G4CMP n'inclut pas non plus l'émission de phonons intervalées. Lorsque ce processus survient, on choisit une nouvelle vallée au hasard et on applique une transformation inverse de HV de cette nouvelle vallée sur la quantité de mouvement de l'électron. Cela revient essentiellement à tourner l'électron dans une nouvelle direction sans changer son énergie ni la grandeur de  $\mathbf{k}$ .

Remarquons deux problèmes que peut engendrer un tel modèle. Le premier est qu'il n'a pas d'énergie de seuil, alors que, physiquement parlant, ce processus a un seuil de quelques dizaines de meV (qui dépend du matériau et du type de phonons). Ce processus a un taux non nul, même lorsque l'énergie de la charge électrique est presque nulle. Il en résulte parfois des situations non voulues où l'énergie de l'électron est tellement basse qu'elle est en dessous du seuil de tous les autres taux de diffusions (Phonons NTL, ionisation, etc.). Le taux de diffusions de ces mécanismes est alors de zéro. Le processus IV remporte ainsi de facto le type de diffusion à chaque itération. L'électron change alors continuellement de direction et de vallées en parcourant une trop petite distance pour être accéléré suffisamment hors de cette situation. L'électron devient pris dans une boucle quasi infinie où il fait du sur-place. Cette situation est également possible, car on n'émet pas de phonons et donc on ne change pas l'énergie du porteur de charge. Nous voulons corriger ces deux problèmes dans le chapitre 4.

Le deuxième problème est que le taux ne dépend que du champ électrique et non pas de l'énergie de la charge. Ainsi, un électron avec une énergie de quelques eV aura la même probabilité de faire une diffusion IV qu'un électron avec une énergie cinétique de 0,1 meV, si le champ électrique est le même. Cela est contraire à la physique des diffusions IV. Nous avons vu que le taux de ce type de diffusion dépend fortement de l'énergie de l'électron (voir figure 2.13a). Nous proposerons une amélioration à ce problème dans le prochain chapitre.

Il est à noter que, actuellement, la simulation n'inclut pas de diffusions intervalées pour les trous, car on ne considère qu'une seule bande, la bande lourde. Nous voudrions toutefois rajouter d'autres bandes et donc la diffusion IV dans le futur.

Remarquons également que seules les bandes X pour le Si et seules les bandes L pour le Ge sont incluses. Il y a donc diffusions IV pour les électrons, mais seulement entre bandes de même énergie. Encore une fois, nous voudrions ajouter ces autres bandes, surtout dans le cas du Ge pour qui le minimum de la bande  $\Gamma$  est proche de celui de la bande L, augmentant le nombre de diffusions IV entre ces deux bandes. Pour le Si, comme le deuxième minimum a une énergie beaucoup plus grande (une différence de presque 1 eV), les diffusions IV entre bandes de différentes énergies sont moins importantes à considérer. N'oublions pas non plus que l'émission de phonons acoustiques et optiques intravallées et intervalées ralentissent beaucoup les charges. Elles atteignent donc plus difficilement l'énergie nécessaire pour aller dans les bandes supérieures lorsqu'elles se trouvent dans un champ électrique faible.

Il est à noter que ce modèle semi-empirique inclut non seulement les diffusions intervalées avec le réseau cristallin (ce qui inclurait l'émission de phonons normalement), mais aussi les diffusions avec les impuretés. Ces dernières sont élastiques et peuvent mener à un changement de bande dans certaines collisions.

#### 3.3.2.4. Charge Trapping.

Les porteurs de charge, en se déplaçant dans le substrat, sont susceptibles d'être piégés par une trappe. Dans G4CMP, nous ne considérons que des trappes peu profondes venant de donneurs ( $D^0$ ) et accepteurs ( $A^0$ ) hydrogéniques dans le volume du cristal de Ge et de Si. Ces états d'énergie dans la bande interdite peuvent accueillir électron  $e^-$  comme trou  $h^+$  selon le type de trappe :



Lorsque la charge est capturée, elle est retirée de la simulation, car elle arrête de se propager et d'émettre des phonons NTL. Comme ce sont des trappes peu profondes, on n'émet pas non plus de phonons lorsqu'une charge est capturée. On ne considère pas non plus de recombinaison (dans le volume du moins) des charges. Nous reparlerons toutefois de la recombinaison aux surfaces dans la sous-sections 3.3.2.6

Dans la modélisation, le taux auquel surviennent ces processus est décrit par un taux constant qui est par défaut zéro. Le taux est différent pour la capture d'électrons et de trous. Il faut manuellement les spécifier lors du lancement de la simulation. SuperCDMS trouve généralement ces taux fixes en comparant les données de calibration du détecteur à

ceux de la simulation. Nous travaillons à inclure un taux de capture qui incorpore mieux la microphysique du détecteur qu'un taux fixe. Lorsqu'une charge est piégée, elle n'émet plus de phonons NTL ce qui réduit l'énergie totale de phonons reçue. On obtient alors des événements avec une énergie entre les pics correspondant au nombre discret de paires électrons/trous dans le spectre d'énergie (voir figure 1.10).

### 3.3.2.5. Ionisation d'impact.

Les ionisations d'impact concernent les électrons et les trous qui, lorsqu'ils ont suffisamment d'énergie, peuvent exciter un porteur de charge. On ne considère pas les excitations de la bande de valence vers la bande de conduction, car ce processus requiert trop d'énergie pour les champs électriques auquel SuperCDMS opère. On considère plutôt les excitations de charges prises dans des trappes peu profondes dites hydrogéniques, celle décrite à la section précédente. À des températures cryogéniques, une assez grande population de ces charges piégées existe, car elles sont souvent incapable d'en sortir thermiquement.

Les électrons, comme les trous peuvent ioniser une impureté négative ( $D^-$ ) comme positive ( $A^+$ ), ce qui donne quatre possibilités différentes:

$$\begin{aligned} e^- D^- &\rightarrow e^- e^- D^0 & \text{ou} & & e^- A^+ &\rightarrow e^- h^+ A^0 \\ h^+ D^- &\rightarrow h^+ e^- D^0 & \text{ou} & & h^+ A^+ &\rightarrow h^+ h^+ A^0. \end{aligned} \tag{3.3.12}$$

Lorsqu'une nouvelle charge est excitée de cette manière, on crée une nouvelle trajectoire pour celle-ci dans la simulation et on suit son parcours à partir de l'endroit où elle est apparue. Ces charges extra émettent elles aussi des phonons NTL, mais, comme elles ne font pas partie des charges produites lors de la collision initiale, cela mène à une énergie collectée supérieure à celle attendue pour le nombre de paires e/h initiales. Cela correspond aux événements entre les pics dans le spectre d'énergie.

On associe à ces quatre possibilités un taux de probabilité fixe, différent pour chaque processus évalué en comparant la simulation aux données expérimentales. Il est difficile, d'évaluer ces quatre paramètres car il faut une mesure précise de la distribution de la position des charges supplémentaires générées de sorte qu'on remplace parfois le tout par un seul paramètre. On retombe sur les deux mêmes problèmes qu'avec les diffusions IV : le taux d'ionisation constant n'a pas de seuil alors qu'il faut une énergie minimale de quelques dizaines de meV pour exciter ces charges. De plus, le taux d'ionisation ne dépend pas de l'énergie du porteur de charge. C'est une situation que nous aimerons également corriger dans le futur.

### 3.3.2.6. Surfaces.

Lorsqu'une charge arrive à une surface dans G4CMP, elle est immédiatement absorbée. Nous supposons qu'il existe des trappes aux surfaces à cause des défauts et des liaisons pendantes venant de l'arrêt du potentiel périodique du réseau cristallin. Dans G4CMP, ces charges tombent ainsi dans une de ces trappes et émettent toute leur énergie cinétique  $K'$  sous forme de phonons (par paquet de phonons avec énergie de Debye). Immédiatement après, elles se recombinent et émettent d'autres phonons, soit la moitié de l'énergie du gap par charge. La charge est ensuite enlevée de la simulation, sa trajectoire finie.

$$E_{\text{phonon}} = K' + \frac{\varepsilon_{\text{gap}}}{2}. \quad (3.3.13)$$

Cette supposition vient du fait qu'il est impossible de prédire la position de la trappe entre la bande de conduction et de valence. Par simplicité, électrons, comme trous, émettent la moitié du gap en énergie lorsqu'ils se recombinent. À noter qu'il n'y a pas de délai pour la recombinaison dans la simulation alors que dans un véritable détecteur, il y a un temps d'attente entre la charge qui est piégée et l'arrivée d'une charge de signe opposé, pourvu que la première charge piégée n'ait pas été réémise thermiquement dans le cristal. Cela arrive rarement à 52 mK.

Il est à noter que GEANT4 ne permet pas l'interaction entre les particules simulées, chaque trajectoire est indépendante l'une de l'autre. C'est pour cette raison que nous supposons que l'électron ou le trou, lorsqu'il arrive à une surface, se recombine immédiatement, sans savoir si un autre électron ou trou n'est présent pour la recombinaison. On ne peut simuler la densité des autres charges en temps réel, seulement la trajectoire d'une seule particule à la fois.

Nous travaillons également sur la possibilité d'inclure de la réflexion aux surfaces. Plus précisément, la charge subirait une réflexion spéculaire ou diffuse et retournerait dans le cristal.

### 3.3.3. Transport des phonons

Le transport des phonons est assez différent de celui des électrons étant donné que les phonons sont neutres et ne sont pas accélérés par le champ électrique. Ceux-ci se diffusent plutôt en obéissant à l'équation d'onde anisotrope [143] :

$$\rho\omega^2 e_i = C_{ijml} q_j q_m e_l. \quad (3.3.14)$$

où  $\rho$  est la densité du cristal,  $\omega$  la fréquence angulaire du phonon,  $\mathbf{e}$  la polarisation  $\mathbf{q}$  le vecteur d'onde et  $C_{ijml}$  le tenseur d'élasticité. La somme sur les  $j, m$  et  $l$  est implicite.

Pour un vecteur d'onde  $\mathbf{q}$  donné, il existe trois valeurs propres  $\omega$  et trois vecteurs propres de polarisation. En réalité, cela représente les trois formes (acoustiques) de vibrations atomiques : longitudinales, transversales rapides et transversales lentes. La direction de propagation du phonon n'est pas parallèle à sa quantité de mouvement  $\mathbf{q}$  à cause de l'anisotropie du tenseur d'élasticité. En fait, la direction et la vitesse de propagation du phonon sont données par sa vitesse de groupe  $\mathbf{v}_g$  :

$$\mathbf{v}_g = \nabla \omega(\vec{k}). \quad (3.3.15)$$

L'équation d'onde n'est pas résolue en temps réel par G4CMP. On implémente plutôt une table de valeurs qui associe un  $\mathbf{q}$  à  $\mathbf{v}_g$  et de laquelle on peut tirer, par interpolation, la vitesse de groupe. Nous suivons la trajectoire de chaque phonon du début jusqu'à la fin. À chaque pas, l'énergie, la quantité de mouvement et la direction du phonon sont recalculées et mises à jour. La distance entre les pas dépend du taux de diffusions anharmoniques et isotropes, sujet de la prochaine sous-section.

Cette méthode reproduit très bien la caustique phononique de plusieurs matériaux [56], qu'on peut mesurer expérimentalement avec des bolomètres.

G4CMP n'inclut présentement que la simulation des phonons acoustiques, les phonons optiques se désintégrant en phonons acoustiques en quelques ps [113]. Nous travaillons pour inclure les phonons optiques dans le futur. La simulation n'inclut pas non plus les phonons thermiques, leur population étant petite autour de 50 mK et leur énergie insuffisante pour briser des paires de Cooper et donc engendrer des signaux électriques dans le TES.

### 3.3.3.1. Désintégration anharmonique.

Une désintégration anharmonique est la désintégration d'un phonon en deux phonons d'énergie plus faible et de modes potentiellement différents. Ce processus arrive à un taux qui dépend de l'énergie du phonon (ou plutôt de sa fréquence  $\nu$ ) à la cinquième puissance :

$$\Gamma_{\text{anh}} = A\nu^5. \quad (3.3.16)$$

où  $A$  est une constante de désintégration anharmonique propre au matériau. Elle est de  $7,41 \times 10^{-51} \text{s}^4$  pour le Si et de  $6,43 \times 10^{-55} \text{s}^4$  pour le Ge. [130].

En date de ce travail, G4CMP n'inclut que deux diffusions anharmoniques, soit  $L \rightarrow L'T$  et  $L \rightarrow TT$ , c'est-à-dire une désintégration du mode longitudinal en un phonon transverse et un longitudinal ou en deux phonons transverses. L'énergie est conservée dans ces processus, mais pas nécessairement la quantité de mouvement, car il y a échange avec le réseau cristallin. On sélectionne l'énergie des deux phonons après conversion anharmonique d'une densité de

probabilité [69]. On ne modélise que ces deux mécanismes, car ce sont les plus importants, les autres étant négligeables [131].

### 3.3.3.2. Diffusion isotopique.

Les diffusions isotopiques sont des diffusions de phonons avec les isotopes du réseau cristallin, qui ont une masse différente que la masse atomique moyenne. Ce type de diffusion ne change pas l'énergie et la norme de la quantité de mouvement du phonon. C'est une diffusion élastique qui change la polarisation et la direction du phonon. Ils surviennent à un taux de [131] :

$$\Gamma_{\text{iso}} = B\nu^4. \quad (3.3.17)$$

où  $B$  est une constante de diffusion isotope. Elle est de  $2,43 \times 10^{-42} s^3$  pour le Si et de  $3,67 \times 10^{-41} s^3$  pour le Ge [130].

Le choix du nouveau mode de polarisation, après collisions, se fait en respectant la proportion relative de chaque mode dans le cristal (voir tableau 2.3). Ce processus, combiné à la désintégration anharmonique, implique des distances entre les interactions de quelques microns quand le phonon a une fréquence de quelques THz. Après quelques diffusions anharmoniques, le libre parcours moyen se rapproche plutôt de quelques cm, soit la taille de nos détecteurs de matière sombre.

### 3.3.3.3. Surfaces et quasiparticules de Bogolioubov.

Lorsqu'un phonon du substrat arrive à une surface dans la simulation, il peut se passer deux choses qui dépendent de la nature de la surface. Si celle-ci n'est pas un capteur (e.g. interface avec le vide), le phonon est automatiquement réfléchi dans le substrat. Si la surface est un capteur (e.g. fine couche d'aluminium supraconductrice pour SuperCDMS), il s'ensuit une chaîne de production de quasiparticules de Bogolioubov, de désintégrations de celles-ci et de productions d'autres phonons. G4CMP utilise un modèle «aggrégé» de Kaplan pour modéliser le tout. Tous ces processus se produisent «immédiatement» au moyen d'une chaîne itérative. On ne suit donc pas la trajectoire des quasiparticules et des phonons dans le capteur, mais des efforts sont en cours pour inclure le transport en 2D des QPs.

Il existe une faible probabilité que le phonon, en arrivant à l'interface avec la couche supraconductrice, ne pénètre pas le capteur. On peut définir ce paramètre au début de la simulation (zéro par défaut). Si le phonon traverse cet interface, il peut alors se passer trois phénomènes qui dépendent de l'énergie du phonon :

- Le phonon traverse la couche de métal supraconductrice sans être absorbée et est réfléchi dans le cristal (aucune quasiparticule produite).
- Le phonon n'a pas assez d'énergie pour briser une paire de Cooper ( $2\Delta$ ). Il est alors directement absorbé par le TES avec une très faible probabilité ou réfléchi dans le cristal.
- Le phonon a une énergie suffisante pour briser une paire de Cooper et est absorbé. Une ou des quasiparticules sont produites.

Ici,  $\Delta$  est l'énergie de gap du matériau supraconducteur soit  $180 \mu\text{eV}$  pour les couches minces d'aluminium de SuperCDMS SNOLAB. Prenons le premier point en premier. Il existe une certaine probabilité  $P_{\text{escape}}$  que le phonon entre dans le capteur, le traverse, et en ressorte sans être absorbé [79] :

$$P_{\text{escape}}(E_{\text{ph}}) = \exp\left(-\frac{2 \cdot 2d}{\lambda(E_{\text{ph}})}\right). \quad (3.3.18)$$

où  $E_{\text{ph}}$  est l'énergie du phonon,  $d$  l'épaisseur de la fine couche. Un des facteurs 2 dans l'exponentiel provient du fait que le phonon doit parcourir, au minimum, 2 fois l'épaisseur du capteur avant de ressortir. L'autre facteur de 2 vient de l'intégrale sur les angles d'incidence du phonon initial. Le libre parcours moyen  $\lambda(E_{\text{ph}})$  est donné par :

$$\lambda(E_{\text{ph}}) = \frac{u\tau}{1 + \delta\tau \cdot (E_{\text{ph}}/\Delta - 2)}. \quad (3.3.19)$$

où  $u$  est la vitesse du son,  $\tau$  la durée de vie du phonon et  $\delta\tau$  la pente de la relation  $\tau(E_{\text{ph}})$ . Si le phonon est, au contraire, absorbé et son énergie plus grande que  $2\Delta$ , il brise une paire de Cooper, créant deux QPs. La première emporte une énergie  $E_{\text{qp}}$  et la deuxième le reste soit  $E_{\text{ph}} - E_{\text{qp}}$ . La portion d'énergie est déterminée par une boucle de rejet-acceptation :

$$f(E_{\text{qp}} | E_{\text{ph}}) = \frac{E_{\text{qp}}(E_{\text{ph}} - E_{\text{qp}}) + \Delta^2}{\sqrt{(E_{\text{qp}}^2 - \Delta^2)[(E_{\text{ph}} - E_{\text{qp}})^2 - \Delta^2]}}. \quad (3.3.20)$$

Les QPs avec une énergie inférieure à  $3\Delta$  sont immédiatement absorbés et retirés de la simulation. Celles avec une énergie supérieure à cette borne, se diffuse en émettant des phonons, perdant de l'énergie :  $E'_{\text{qp}} = E_{\text{qp}} - E_{\text{ph}}$ . L'énergie du phonon émis  $E_{\text{ph}}$  est aussi déterminé au moyen d'une boucle d'acceptation-rejet :

$$f(E_{\text{ph}} | E_{\text{qp}}) = \frac{E_{\text{ph}}(E_{\text{qp}} - E_{\text{ph}})^2 \left(E_{\text{ph}} - \frac{\Delta^2}{E_{\text{qp}}}\right)}{\sqrt{E_{\text{ph}}^2 - \Delta^2}}. \quad (3.3.21)$$

La QP a dès lors une énergie  $E'_{\text{qp}}$  et une autre boucle de rejet-acceptation pour trouver l'énergie du prochain phonon émis a lieu. Le premier phonon émis repasse au travers du

processus : il peut être réfléchi dans le substrat s'il n'interagit pas avec le capteur, être absorbée directement par le TES si son énergie est trop basse ou briser une paire de Cooper. On continue ce processus itératif jusqu'à ce que plus aucune QPs ne reste. G4CMP retourne ensuite l'énergie totale récoltée par les QPS et les phonons.

## Chapitre 4

---

# Amélioration du transport des porteurs de charge dans G4CMP

Ce chapitre traite des améliorations que j'ai apportées à la modélisation du transport des porteurs de charge dans G4CMP. Ces changements se trouvent sur la branche G4CMP-404, qui sera déployée dans les prochaines semaines sur la branche principale, soit G4CMP-V09-09-02 en date de l'écriture de cette thèse. Avant ces modifications, l'outil de simulation comprenait l'émission de phonons acoustiques, un modèle semi-empirique de diffusion IV qui ne prend pas en compte l'émission de phonons, le *charge trapping* et l'ionisation d'impact provenant de pièges peu profonds, ainsi qu'un modèle simple de recombinaison des paires  $e/h$  à la surface. Les bandes de valence et de conduction étaient représentées par des ellipses ou des sphères dites paraboliques.

Dans la première section, nous argumenterons quant à l'importance de la simulation et de son amélioration constante. Nous aborderons dans la deuxième section l'inclusion de la non-parabolicité sur la cinématique des porteurs de charge. Ensuite, nous traiterons de l'amélioration du processus d'émissions de phonons acoustiques intravallées. Puis, nous transformerons le modèle de diffusions intervallées en un modèle se basant sur des taux de diffusions venant de la règle d'or de Fermi plutôt que d'une loi semi-empirique. Nous expliquerons aussi comment nous avons ajouté l'émission de phonons à ce processus et comment choisir l'état final. Il fut également nécessaire de revoir les distribution angulaires de l'angle d'émission du phonon, autant pour le cas acoustique intravallée (qui n'incluait que le cas parabolique) que pour le cas IV (pour lequel il n'y avait tout simplement pas de distribution angulaire). Nous avons dû développer ces distributions angulaires dans le cadre de ce travail. Par la suite, nous comparerons les données de la simulation après ces changements aux données expérimentales de l'énergie totale de phonon attendue, à la vitesse de dérive et à la position finale des charges aux surfaces du détecteur. Finalement, nous concluons avec un

résumé des limites de ces améliorations et comment encore plus peaufiner notre modélisation du transport des charges.

## 4.1. Importance de la simulation

Il est important de se demander dans quel but nous voulons améliorer notre outil de simulation, plus particulièrement la modélisation du transport des charges. La première raison est parce que le transport des charges a un effet direct sur le nombre, l'énergie, la position et la direction des phonons émis. Ce sont ces derniers, de par leur énergie et leur temps d'arrivée au TES qui vont déterminer la forme du signal enregistré par nos détecteurs. Bref, une meilleure modélisation des charges donne une meilleure modélisation de la population des phonons et donc de la reconstruction de notre signal.

À noter que l'effet du transport des charges est assez minime sur la population des phonons, mais toutefois présent. Ce sont surtout les désintégrations anharmoniques et diffusions isotopiques des phonons qui déterminent leur temps d'arrivée au TES ainsi que leur énergie lorsqu'ils sont absorbés. Les charges créent toutefois la population initiale de phonons qui elle, affectera le transport des phonons par la suite. En ajoutant, par exemple, l'émission de phonons IV, nous avons ajouté une grande population de phonons avec quelques dizaines de meV dans la simulation, chose qui n'était pas présente avant.

Les paires électron/trou traversent nos détecteurs en moins de  $1\ \mu\text{s}$ . Ils émettent tous leurs phonons NTL durant cette période alors que nos signaux mesurent des dépôts d'énergie (venant des phonons) sur un temps beaucoup plus long. La plupart des phonons arrivent dans les premières dizaines de  $\mu\text{s}$ , mais un nombre non négligeable de phonons atteignent notre TES après  $1000\ \mu\text{s}$  affectant la forme de la queue du signal.

Finalement, la modélisation est toujours utile pour mieux comprendre la physique de notre détecteur et pour l'analyse de nos données. L'avantage de la simulation est que l'on peut isoler des processus séparément et regarder leur effet sur la microphysique. En enlevant temporairement, par exemple, les diffusions IV, on ne verrait plus de densité d'électrons aux surfaces en dehors des régions d'accélération permises.

On peut aussi se servir de la modélisation pour informer certaines de nos coupures ou notre calibration. Par exemple, un sous-groupe de SuperCDMS a récemment utilisé les données de la simulation sur le transport des porteurs de charge et un algorithme d'apprentissage machine pour dégager un ensemble de coupures que l'on peut apporter à nos vraies données pour éliminer les événements proches des surfaces. Cela aurait été impossible sans la simulation, car notre détecteur ne mesure pas la trajectoire des charges électriques. Il est donc très important de nous assurer de la fiabilité physique de la modélisation pour toutes ces raisons.

## 4.2. Non-parabolicité de la structure de bande

Les bandes de conduction et de valence peuvent être approximées par un développement en série de Taylor autour de leur extremum et dans lequel on garde seulement le deuxième terme, donnant lieu à une description parabolique de ces bandes. Au fur et à mesure qu'on s'éloigne de ce minimum, la forme parabolique devient de moins en moins exacte pour décrire mathématiquement ces bandes. On peut avoir recours au calcul numérique (e.g. DFT) pour estimer la bande électronique [48, 45, 44]. Ou encore, on peut rajouter un terme non parabolique  $\alpha$  dans notre relation de dispersion :

$$E(\mathbf{k})(1 + \alpha E(\mathbf{k})) = E_0 + \frac{\hbar^2}{2} \mathbf{k}^T [\mathbf{m}^{*-1}] \mathbf{k}. \quad (4.2.1)$$

Nous choisissons cette approche, car elle se veut un équilibre entre rapidité de calcul et exactitude de la structure de bande. À titre d'exemple, la simulation de la trajectoire d'une seule paire électron-trou soumise à 5 V/cm ainsi que de la trajectoire de tous les phonons prend environ deux minutes. Comme nous devons souvent opérer à des champs électriques dix fois plus gros et devons simuler des centaines/milliers paires e/h à la fois, certaines tâches prennent déjà des journées entières à exécuter. Nous ne voulons pas davantage allonger ce temps avec une approche trop calculatoire de la structure électronique.

Bref, jusqu'à tout récemment, G4CMP utilisait une cinématique et des équations purement paraboliques. Nous remédions à ce problème en changeant l'accélération des charges, la vitesse de groupe, la quantité de mouvement et la relation de dispersion pour inclure la non-parabolicité de bandes. Le tableau 4.1 montre les changements apportés sous une forme synthétisée pour les électrons et les trous. À noter qu'il manque encore le terme de correction négatif dans l'expression de l'accélération. Ce dernier sera rajouté sous peu. Autrement, tous les autres changements sont déjà dans la branche G4CMP-404.

Outre ces équations, plusieurs autres changements furent nécessaires dans G4CMP. Notamment, il existe plusieurs fonctions convertissant les quantités entre elles, telle que la quantité de mouvement  $\langle \mathbf{p} \rangle$  vers l'énergie ou vice-versa. Cela est utile, car nous évite de revenir à la quasi-quantité de mouvement  $\mathbf{k}$  à chaque fois pour trouver une autre quantité, sauvant plusieurs étapes et beaucoup de temps de calcul. Il faut également s'assurer que les fonctions qui sont l'inverse l'une de l'autre nous permettent de retomber sur la valeur de départ en appliquant une transformation et son inverse. L'autre défi est les nombreux changements de référentiels, l'utilisation de matrices, de même que l'anisotropie de la bande électronique dont il faut tenir compte. À titre d'exemple, voici la fonction *MapEkintoP*, qui donne une quantité de mouvement  $\langle \mathbf{p} \rangle$  à partir l'énergie cinétique de l'électron et de la direction unitaire  $\langle \hat{p} \rangle$  (voir annexe E) :

| Quantités                                                               | $e^-/h^+$ | Ancienne version                                     | Nouvelle version                                                                                                                                                                                                                                            |
|-------------------------------------------------------------------------|-----------|------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Énergie $E(\mathbf{k})$                                                 | $h^+$     | $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$                           | $\frac{-1 + \sqrt{1 + 4\alpha \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}}}{2\alpha}$                                                                                                                                                                                          |
|                                                                         | $e^-$     | $\frac{\hbar^2 k^{*2}}{2m_c}$                        | $\frac{-1 + \sqrt{1 + 4\alpha \frac{\hbar^2 k^{*2}}{2m_c}}}{2\alpha}$                                                                                                                                                                                       |
| $\langle \mathbf{p} \rangle = \frac{m}{\hbar} \nabla_k E(\mathbf{k})$   | $h^+$     | $\hbar \mathbf{k}$                                   | $\frac{1}{1 + 2\alpha E(\mathbf{k})} \hbar \mathbf{k}$                                                                                                                                                                                                      |
|                                                                         | $e^-$     | $T_i^T \frac{m_c}{M} T_i \hbar \mathbf{k}$           | $\frac{1}{1 + 2\alpha E(\mathbf{k})} T_i^T \frac{m_c}{M} T_i \hbar \mathbf{k}$                                                                                                                                                                              |
| $\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(\mathbf{k})$   | $h^+$     | $\frac{\hbar \mathbf{k}}{m^*}$                       | $\frac{m^*}{1 + 2\alpha E(\mathbf{k})} \hbar \mathbf{k}$                                                                                                                                                                                                    |
|                                                                         | $e^-$     | $T_i^T \frac{1}{M} T_i \hbar \mathbf{k}$             | $\frac{1}{1 + 2\alpha E(\mathbf{k})} T_i^T \frac{1}{M} T_i \hbar \mathbf{k}$                                                                                                                                                                                |
| $\mathbf{a}_{tot} = \frac{1}{m} \frac{d\langle \mathbf{p} \rangle}{dt}$ | $h^+$     | $\frac{\hbar}{m^*} \frac{d\mathbf{k}}{dt}$           | $\frac{1}{1 + 2\alpha E(\mathbf{k})} \frac{\hbar}{m^*} \frac{d\mathbf{k}}{dt}$                                                                                                                                                                              |
|                                                                         | $e^-$     | $T_i^T \frac{1}{M} T_i \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt}$ | $\frac{1}{1 + 2\alpha E(k)} T_i^T \frac{1}{M} T_i \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} - \frac{2\alpha}{[1 + 2\alpha E(\mathbf{k})]^3} \hbar \mathbf{k}^T T_i^T \frac{1}{M} T_i \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} \left( T_i^T \frac{1}{M} T_i \hbar \mathbf{k} \right)$ |

**Tableau 4.1.** Comparaison des équations de cinématique pour les électrons et les trous dans G4CMP avant et après les changements décrits dans le texte.

$$\langle \mathbf{p} \rangle = |\langle \mathbf{p} \rangle| \langle \hat{p} \rangle \quad , \quad |\langle \mathbf{p} \rangle| = \sqrt{\frac{\frac{m_c^2}{2\alpha} \left[ 1 - \frac{1}{(1+2\alpha E)^2} \right]}{M(T_i \langle \hat{p} \rangle)^2}}. \quad (4.2.2)$$

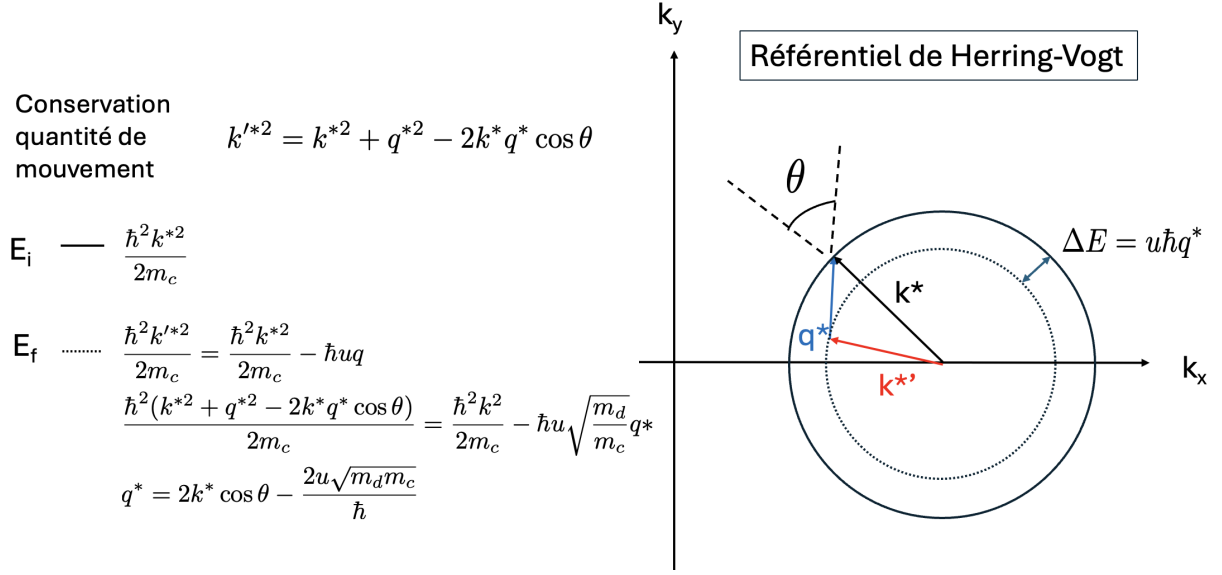
Ainsi que la fonction *MapPtoEkin* retournant l'énergie cinétique à partir de  $\langle \mathbf{p} \rangle$  de l'électron :

$$\frac{\sqrt{\frac{1}{1 - \frac{2\alpha}{m_c^2} M(T_i \langle \mathbf{p} \rangle)^2} - 1}}{2\alpha} = E. \quad (4.2.3)$$

### 4.3. Phonons acoustiques intravallées

Rappelons les éléments clés de l'émission de phonons acoustiques intravallées dans la simulation lorsque ce processus est choisi. En premier, on tire un angle d'émission aléatoire  $\theta_r$  de la

distribution angulaire  $P(\mathbf{k}^*, \theta)$  selon l'équation 3.2.28. Cet angle est celui entre la direction du porteur de charge et le phonon. Par conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement dans le référentiel de Herring-Vogt (HV), on calcule la cinématique après diffusions de la charge et du phonon. L'énergie du phonon dans le référentiel de Herring-Vogt est :  $E_{ph} = \hbar u q^*$ . La figure 4.1 montre cette étape pour le cas simple parabolique ellipsoïdale. On retransforme finalement les énergies et impulsions dans le référentiel du cristal avec une transformation inverse de Herring-Vogt.



**Fig. 4.1.** Schéma de l'émission de phonons acoustiques dans le référentiel de Herring-Vogt et calcul de l'énergie du phonon par conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement.

Dans les prochaines sections, nous parlerons des changements apportés à ce processus, soit l'inclusion de la non-parabolicité dans les équations du taux de diffusions, de la distribution angulaire et de l'énergie des phonons émis. Nous avons également corrigé certains détails, comme le choix de quelques paramètres et le référentiel dans lequel l'énergie du phonon était calculée pour que ce soit dans celui du cristal et non de Herring-Vogt.

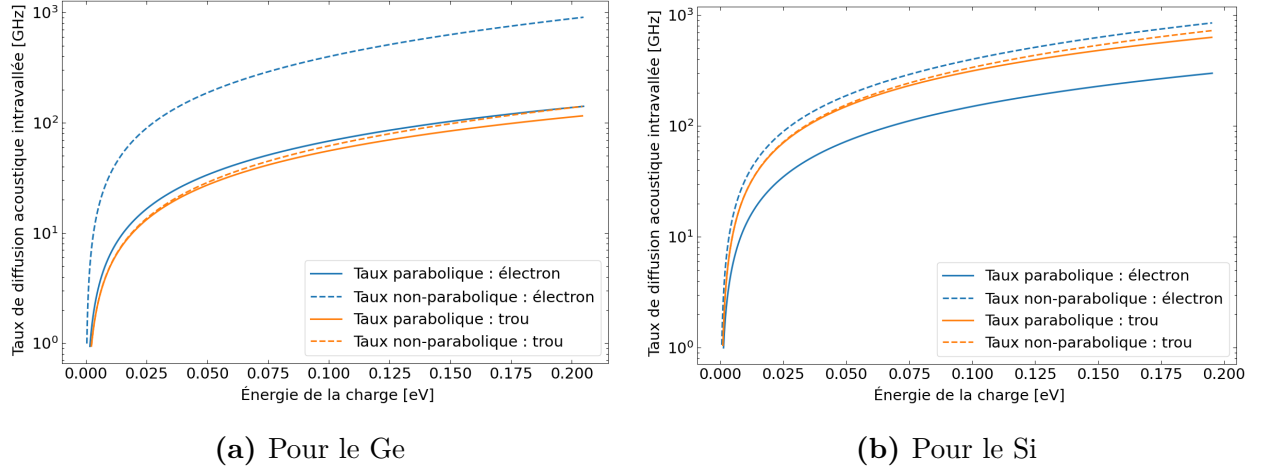
#### 4.3.1. Non-parabolicité

L'amélioration la plus importante apportée dans le cadre de ce travail à l'émission de phonons acoustiques intravallées est sans nul doute l'ajout de la non-parabolicité aux équations du taux de diffusions, de la distribution angulaire et de la quantité de mouvement du phonon  $q^*$ . Le tableau 4.2 montre les formules avant nos changements et après ceux-ci. Il est à noter que ces équations incluent aussi des modifications au niveau du choix de la masse et de la vitesse du son. Nous reparlerons de cette décision à la section 4.3.2. Nous trouvons

toutefois important de les inclure, car ils ont un impact non négligeable sur les trois quantités mentionnées ci-haut. La distribution angulaire non parabolique n'est pas encore totalement incluse, mais devrait l'être sous peu.

#### 4.3.1.1. Taux de diffusions.

Afin de mieux visualiser les modifications apportées au taux de diffusions, nous avons mis en graphique, à la figure 4.2, les équations du tableau 4.2.



**Fig. 4.2.** Comparaison du taux de diffusion acoustique intravallée en a) pour le Ge et en b) pour le Si avant (lignes pleines) et après les changements du tableau 4.2. Les courbes pour l'électron incluent aussi un changement de masse et de vitesse du son alors que la courbe pour les trous seulement l'inclusion de la non-parabolicité.

Glissons un mot sur les trous en premier, car la différence entre les courbes ne concerne que la non-parabolicité de la bande de valence. En effet, nous n'avons pas changé les masses ni la vitesse du son des équations des trous pour des raisons que nous expliquerons à la section 4.3.2. Le taux non parabolique est plus grand que celui parabolique pour toute énergie. On voit les effets de la non-parabolicité à partir de quelques dizaines de meV seulement. À 200 meV, le taux de diffusion dans le Si pour le cas parabolique est d'environ  $600 \text{ ns}^{-1}$  contre  $700 \text{ ns}^{-1}$  pour le cas non parabolique. Dans le germanium, la différence est de moins de  $100 \text{ ns}^{-1}$ .

En ce qui concerne les électrons, la différence est plus marquée en raison du changement de la masse et de la vitesse du son à certains endroits. À 200 meV, le taux de diffusion dans le Ge pour le cas parabolique est d'environ  $150 \text{ ns}^{-1}$  contre  $900 \text{ ns}^{-1}$  pour le cas non parabolique. Dans le silicium, la différence est plutôt de  $200 \text{ ns}^{-1}$  à  $850 \text{ ns}^{-1}$ .

Nous avons substitué la vitesse du son longitudinale par une moyenne pondérée selon le niveau d'occupation des branches de phonons. Comme la vitesse transverse est beaucoup

| Quantités                 | $e^-/h^+$ | Ancienne version                                                                                             | Nouvelle version                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
|---------------------------|-----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $P(\mathbf{k}^*)$         | $h^+$     | $\frac{D_{ac,h}^2 m^*}{12\pi\hbar^2 k \rho u_l} q_{\max}^{*3}$                                               | $\frac{D_{ac,h}^2 m^*}{12\pi\hbar^2 k \rho u_l} q_{\max}^3 \left[ 1 + 2\alpha E(\mathbf{k}) - \frac{3}{2}\alpha\hbar u q_{\max} \right]$                                                                                                                                                                  |
|                           | $e^-$     | $\frac{D_{ac,e}^2 m_c}{12\pi\hbar^2 k^* \rho u_l} q_{\max}^{*3}$                                             | $\frac{D_{ac,e}^2 m_d^2}{12\pi\hbar^2 k^* \rho u m_c} q_{\max}^{*3} \left[ 1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*) - \frac{3}{2}\alpha\hbar u_l q_{\max}^* \left( \frac{m_d}{m_c} \right)^{1/2} \right]$                                                                                                              |
| $q_{\max} / q_{\max}^*$   | $h^+$     | $2k^* - 2m^* \frac{u_l}{\hbar}$                                                                              | $\frac{1}{1 - 2\alpha m^* u^2} [2k - 2m^* \frac{u_l}{\hbar} (1 + 2\alpha E(\mathbf{k}))]$                                                                                                                                                                                                                 |
|                           | $e^-$     | $2k^* - 2m_c \frac{u_l}{\hbar}$                                                                              | $\frac{1}{1 - 2\alpha m_d u^2} [2k^* - 2\sqrt{m_c m_d} \frac{u}{\hbar} (1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*))]$                                                                                                                                                                                                    |
| $P(\mathbf{k}^*, \theta)$ | $h^+$     | $\frac{D_{ac,h}^2 m^*}{2\pi\hbar^2 \rho u_l} \sin \theta \times (2k \cos \theta - 2m^* \frac{u_l}{\hbar})^2$ | $\frac{D_{ac,h}^2 m^*}{2\pi\hbar^2 \rho u_l} \frac{\sin \theta}{(1 - 2\alpha m^* u_l^2)^2} (2k \cos \theta - 2m^* \frac{u_l}{\hbar})^2 \times \{(1 + 2\alpha E)(1 + 2\alpha m^* u_l^2) - 4k \cos \theta \alpha u_l \hbar\}$                                                                               |
|                           | $e^-$     | $\frac{D_{ac,e}^2 m_c}{2\pi\hbar^2 \rho u_l} \sin \theta \times (2k^* \cos \theta - 2m_c \frac{u}{\hbar})^2$ | $\frac{D_{ac,e}^2 m_d^2}{2\pi\hbar^2 \rho u_l m_c} \frac{\sin \theta}{(1 - 2\alpha m_d u^2)^2} \times \left( 2k^* \cos \theta - 2\sqrt{m_c m_d} \frac{u_l}{\hbar} \right)^2 \times \left\{ (1 + 2\alpha E)(1 + 2\alpha m_d u^2) - \frac{4k^* \cos \theta \alpha u \hbar \sqrt{m_d}}{\sqrt{m_c}} \right\}$ |
| $q^*$                     | $h^+$     | $2k \cos \theta - 2m^* \frac{u_l}{\hbar}$                                                                    | $\frac{1}{1 - 2\alpha m^* u_l^2} \times \left[ 2k \cos \theta - 2m^* \frac{u_l}{\hbar} (1 + 2\alpha E(\mathbf{k})) \right]$                                                                                                                                                                               |
|                           | $e^-$     | $2k^* \cos \theta - 2m_c \frac{u_l}{\hbar}$                                                                  | $\frac{1}{1 - 2\alpha m_d u^2} \times \left[ 2k^* \cos \theta - 2\sqrt{m_c m_d} \frac{u}{\hbar} (1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)) \right]$                                                                                                                                                                    |

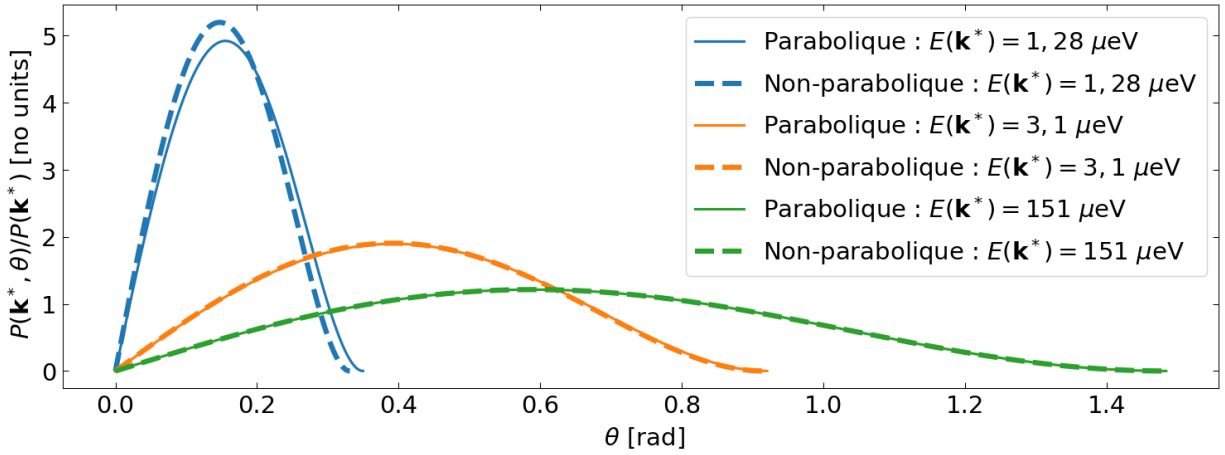
**Tableau 4.2.** Comparaison des équations du taux de diffusions acoustiques intravallées, de sa distribution angulaire et de la quantité de mouvement du phonon émis avant et après nos modifications. Outre l'ajout de la non-parabolicité, nous avons également changé certaines masses et la vitesse du son pour les électrons.

plus petite que la longitudinale et qu'on divise par la vitesse des phonons dans le taux de

diffusion, cela augmente le taux de diffusion. La masse de densité étant plus grande que la masse de conductivité, cela augmente également notre taux. Tout ceci, c'est sans compter les effets non paraboliques des bandes de conduction qui augmentent aussi ce dernier. Bref, ces trois raisons expliquent la grande différence entre les deux courbes.

#### 4.3.1.2. Distribution angulaire.

La figure 4.3 illustre la distribution angulaire entre les phonons et les électrons lors d'une diffusion intravallée acoustique avant et après nos modifications afin de voir l'effet de la non-parabolicité. Encore une fois, les équations incluent aussi des changements au niveau du choix de la masse et de la vitesse du son, mais ceux-ci sont négligeables dans le cadre de la distribution angulaire, car nous devons la normaliser en divisant par  $P(\mathbf{k})$ .



**Fig. 4.3.** Comparaison de la distribution angulaire entre les phonons et les électrons lors de diffusions intravallées acoustiques dans le Ge pour différentes énergies lorsqu'on inclut la non-parabolicité.

À ma connaissance, la forme non parabolique et ellipsoïdale de la distribution angulaire n'apparaît nulle part dans la littérature au long, du moins pour l'angle d'émission entre le phonon et la charge. Nous l'avons développé dans le cadre de cette thèse. L'émission de phonons acoustiques intravallées étant le processus le plus effectué par les porteurs de charge, il nous apparaissait impératif d'en développer la forme. Nous avons eu recours à plusieurs approximations, notamment sur la dépendance angulaire de la masse, du potentiel de déformation et sur la vitesse du son où l'on prenait leur moyenne constante et isotrope pour simplifier les calculs. Cela nous permet d'avoir une forme de  $P(\mathbf{k}, \theta)$  relativement simple et analytique, utile pour économiser du temps de calcul dans la modélisation.

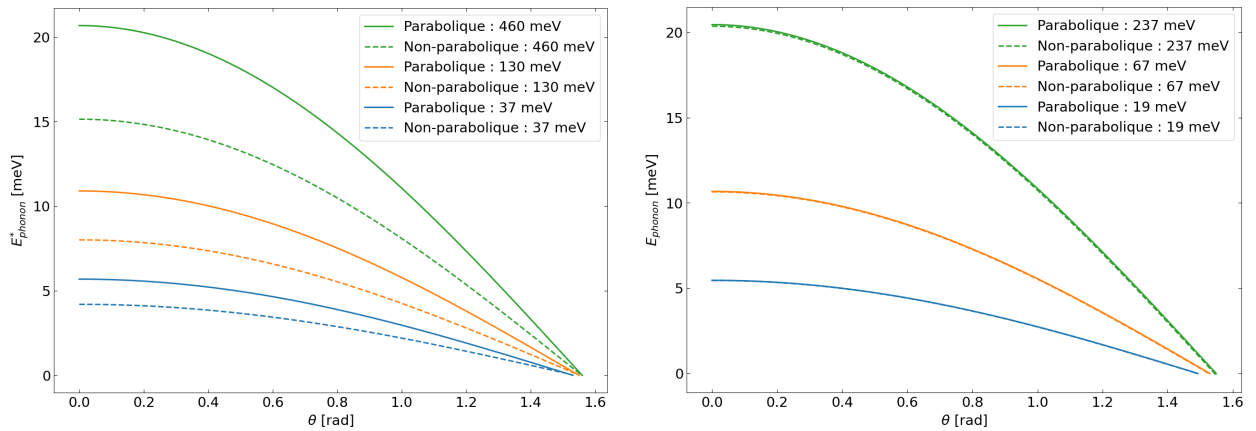
La différence entre l'ancienne version de  $P(\mathbf{k}, \theta)$  et la nouvelle est très petite. Même à partir de quelques  $\mu\text{eV}$ , les deux distributions sont essentiellement les mêmes. Par contre,

proche du seuil d'émission de phonons acoustiques, la différence est un peu plus marquée. Près de ces faibles énergies, il faut tenir compte de la forme non parabolique. Autrement, nous tombions sur plusieurs problèmes dans notre simulation, tels que des énergies de phonons négatives en raison d'un angle d'émission trop grand lorsque nous tirions un angle aléatoire de la distribution parabolique.

Comme mentionné plus haut, cette distribution angulaire n'est pas encore totalement implémentée, mais le sera sous peu. Il nous reste à calculer l'expression de l'expression pour tirer un angle aléatoire  $\theta_r$  de cette distribution non parabolique. Entre-temps, on utilise la forme parabolique et on retire un angle jusqu'à ce que le phonon ait une énergie positive. Cela ne devrait affecter que très peu les résultats présentés à la section sur la comparaison de la simulation aux données expérimentales. En effet, la différence entre les deux cas n'est marquée que proche du seuil d'émission. Autrement, les deux ont une forme très quasiment identique.

#### 4.3.1.3. Énergie des phonons.

Le dernier ajustement majeur aux équations de la cinématique de la diffusion charge-phonon acoustique intravallée est la quantité de mouvement des phonons et, par conséquent, leur énergie  $E_{\text{phonon}} = u\hbar q$ . Nous montrons l'énergie des phonons en fonction de l'angle d'émission dans le Si à la figure 4.4 pour la version antérieure et pour la nouvelle version de nos équations.



(a) Pour le Si. Différentes énergies de l'électron dans le référentiel de Herring-Vogt.

(b) Pour le Si. Différentes énergies du trou dans le référentiel du cristal.

**Fig. 4.4.** Comparaison de l'énergie des phonons acoustiques intravallées émis en fonction de l'angle d'émission pour différentes énergies de la charge. Nous comparons le cas parabolique au non-parabolique (incluant les changements de masse).

À noter que l'énergie des phonons pour les trous est déjà dans le référentiel du cristal, soit la «vraie» énergie du phonon. Pour les électrons, c'est l'énergie dans le référentiel de Herring-Vogt où le choix de la masse et de la vitesse du son a un grand impact sur la différence d'énergie. Toutefois, en revenant dans le référentiel du cristal, cette différence s'estompe presque entièrement comme nous le verrons à la section 4.3.3. Nous avons décidé de montrer l'énergie dans le référentiel de Herring-Vogt pour pouvoir mieux comparer avec le graphique de droite sur les trous et, car l'énergie du phonon dans le référentiel du cristal varie grandement dépendamment de la direction de déplacement de l'électron. Nous aurons la chance d'en reparler aussi dans la section 4.3.3.

### 4.3.2. Choix des paramètres

L'émission de phonons acoustiques intravallées dépend de plusieurs paramètres, tels que la vitesse du son, la masse de la charge, le potentiel de déformation, etc. Certains de ceux-ci sont fortement anisotropes, mais nous avons remplacé leur dépendance angulaire par une seule valeur constante moyenne. Ici, nous discuterons des limites de ces choix, comment nous avons choisi la valeur de ces paramètres et comment nous pourrions les améliorer.

#### 4.3.2.1. Choix des masses.

Lors du développement mathématique des équations du taux de diffusion, nous fûmes confrontés à la complexité de la dépendance angulaire de la masse dans l'équation 2.3.25. Afin de simplifier grandement les calculs, nous avons réduit ce que nous appelons  $m_q = [m_l \cos^2 \theta_{q*v} + m_t \sin^2 \theta_{q*v}]^{1/2}$  à  $m_d$  comme c'est fait dans la littérature [66, 64]. Dans un monde idéal, on garderait la dépendance angulaire pour tous nos calculs. Cela est envisageable, mais nous devons d'abord vérifier que le gain sur la précision de la trajectoire des charges est suffisant par rapport à l'effort déployé et au temps de calculs numériques supplémentaire que cela engendrerait.

Jusqu'à présent, SuperCDMS utilisait plutôt  $m_q \approx m_c$  dans son outil de simulation. Ces deux choix ( $m_d$  ou  $m_c$ ) restent très approximatifs, surtout pour le Ge dont la différence entre  $m_l$  et  $m_t$  est grande. Toutefois, nous optons pour la masse de densité d'état, car c'est celle qui est utilisée au travers de la littérature. Cela nous permet, entre autres, de nous assurer que nos autres paramètres, tels que le potentiel de déformation acoustique intravallée soient cohérent avec les valeurs de la littérature.

La grande variation du potentiel de déformation dans la prochaine section a probablement un plus grand impact que la masse sur le transport des charges dans notre outil de simulation et peut «contrebalancer» notre choix de masse dans le taux de diffusions. Le choix de masse

n'affecte aussi que peu l'énergie des phonons (dans le référentiel du cristal) et la distribution angulaire, comme nous le verrons dans les prochaines sous-sections.

#### 4.3.2.2. Choix du potentiel de déformation.

Lors du développement mathématique du chapitre 2, nous avons remplacé l'expression exacte du tenseur du potentiel de déformation acoustique intravallée par une seule constante, soit  $D_{ac}$ . Cette dernière est en fait une moyenne sur les composantes transverses et longitudinales de ce tenseur et nous évite de devoir traiter séparément les différentes directions de propagation de l'électron et d'émission du phonon.

Nous avons compilé dans le tableau 4.3 une liste complète des principales valeurs de  $D_{ac}$  au fil des dernières décennies. Les méthodes pour estimer ce paramètre sont très diversifiées, allant d'un fit d'une modélisation par méthode de MC de la vitesse de dérive, à une approche plus théorique, comme l'utilisation de pseudopotentiels et de DFT.

| Substrat | $e^-/h^+$ | $D_{ac}$ dans<br>G4CMP<br>(eV) | $D_{ac}$ dans la littérature (eV)                                                                                                                         |
|----------|-----------|--------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Si       | $h^+$     | 5                              | $2,2^a$ ; $3,1^b$ ; $3,94^c$ ; $4,4^d$ ; $4,67^e$ ; $5,0^{f,g}$ ; $5,39^h$ ; $5,44^h$<br>; $5,48^i$ ; $6,2^j$ ; $6,74^k$ ; $7,12^l$ ; $8,98^m$ ; $9,54^m$ |
|          | $e^-$     | 9                              | $7,8^n$ ; $8,2^{d,i}$ ; $8,55^o$ ; $9,0^a$ ; $9,5^f$ ; $9,52^o$ ; $9,7^h$                                                                                 |
| Ge       | $h^+$     | 3,4                            | $3,4^r$ ; $3,6^b$ ; $4,6^g$ ; $6,49^h$                                                                                                                    |
|          | $e^-$     | 11                             | $8,84^h$ ; $10,29^p$ ; $11^{g,q}$ ; $11,71^q$ ; $11,75^m$                                                                                                 |

<sup>a</sup>Référence [101]; <sup>b</sup>Référence [129]; <sup>c</sup>Référence [141]; <sup>d</sup>Référence [144]; <sup>e</sup>Référence [41];  
<sup>f</sup>Référence [87]; <sup>g</sup>Référence [66]; <sup>h</sup>Référence [36]; <sup>i</sup>Référence [81]; <sup>j</sup>Référence [30];  
<sup>k</sup>Référence [1]; <sup>l</sup>Référence [37]; <sup>m</sup>Référence [19]; <sup>n</sup>Référence [145]; <sup>o</sup>Référence [142];  
<sup>p</sup>Référence [136]; <sup>q</sup>Référence [96]; <sup>q</sup>Référence [23];

**Tableau 4.3.** Valeurs du potentiel de déformation acoustique intravallées pour les électrons et les trous dans le Si et le Ge. Nous comparons la valeur actuelle dans G4CMP à celles de la littérature.

On remarque qu'il y a une grande plage de valeurs possibles pour cette constante, tant pour le Si, le Ge, les électrons que pour les trous. Comme le carré de  $D_{ac}$  apparaît dans les

formules du taux de diffusion, cela peut engendrer une encore plus grande variation dans le nombre d'émissions de phonons acoustiques intravallées.

Afin de trouver la valeur de cette constante pour nos détecteurs, nous suggérons d'ajuster le potentiel de déformation, ainsi que d'autres paramètres, comme la masse  $m_q$  à des résultats expérimentaux, tels que la vitesse de dérive et la position finale des charges aux surfaces de notre substrat. Nous reparlerons de cette approche à la section 4.5.

#### 4.3.2.3. Choix de la vitesse du son.

Initialement, nous utilisons la vitesse du son longitudinale dans la cinématique du mécanisme d'émission de phonons acoustiques intravallées. Pour les trous, dont la bande de valence est sphérique et à  $\Gamma$ , cela est logique. En effet, si on retourne à l'équation 2.3.14, on a le terme  $|D_{ij}q_j\zeta_i|^2$ . Dans le cas de la bande sphérique à  $\Gamma$  pour un semi-conducteur cubique, le potentiel de déformation  $D_{ij}$  est diagonal avec des termes égaux et peut donc être remplacé par un scalaire [81]. Il reste alors le produit scalaire entre la quantité de mouvement du phonon et sa polarisation (ou direction du mouvement) :  $\mathbf{q} \cdot \zeta$  qui est nulle pour des phonons transverses, car le mouvement des atomes est perpendiculaire à la direction de propagation. Pour les phonons athermiques, seuls les phonons longitudinaux sont émis par les trous et donc on garde la vitesse du son longitudinale dans les équations.

Par contre, pour les électrons qui ont une bande ellipsoïdale à  $X$  ou à  $L$ , le potentiel de déformation est un tenseur d'ordre 2 avec des composantes hors diagonales et pas égales entre elles de sorte que l'émission de phonons transverses est possible pour ces bandes, car le produit matriciel  $|D_{ij}q_j\zeta_i|^2$  n'est plus nécessairement nul. Dû à la complexité de ce potentiel de déformation, nous l'avons approximé par une seule constante  $D_{ac}$  et avons combiné les taux d'émissions de phonons transverses et longitudinaux en un seul taux moyen. En faisant cela, nous avons aussi pris une moyenne sur la vitesse du son comme c'est suggéré dans la littérature. Normalement, on prend la moyenne comme étant :  $u = \frac{1}{3}(u_l + 2u_t)$  car il y a une branche longitudinale et deux branches transverses. SuperCDMS a décidé d'utiliser plutôt la densité d'état des phonons dans chacun des modes pour savoir quelle est la proportion de phonons acoustiques dans chacune de ces branches, offrant une vitesse pondérée sur l'occupation des modes. Le tableau 2.3 montre ces valeurs pour le Ge et le Si. Les deux approches donnent une vitesse du son légèrement différente l'une de l'autre, car la population de phonons transverse est d'environ 90% dans le Si et le Ge ce qui affecte aussi légèrement le taux de diffusion acoustique intravallée.

### 4.3.3. Transformations de Herring-Vogt de l'énergie du phonon

Nous apportons une correction au référentiel dans lequel l'énergie du phonon est calculée dans le processus de diffusions électron-phonon intravallée acoustique. Après avoir calculé la quantité de mouvement du phonon émis dans le référentiel de Herring-Vogt,  $q^*$ , il faut, par une transformation inverse de Herring-Vogt, convertir cette quantité dans le référentiel du cristal. Jusqu'à tout récemment, cela n'était pas le cas, donnant lieu à des valeurs de  $E_{\text{phonon}}$  très différentes de celles attendues.

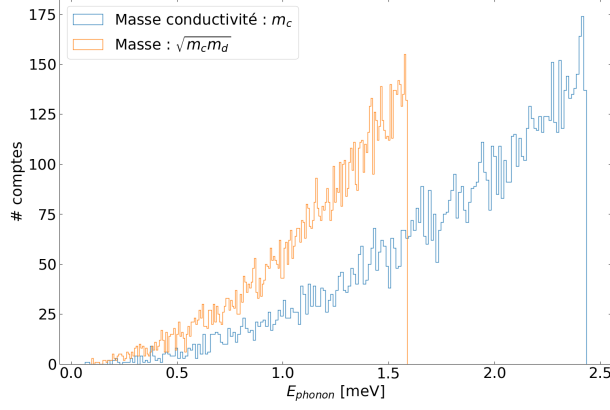
Comparons le spectre en énergie des phonons émis dans le référentiel de Herring-Vogt par un électron de 40 meV dans le Ge à celui dans le référentiel du cristal, comme c'est fait à la figure 4.5. On remarque une différence de plusieurs meV, et ce, peu importe le choix de masses, entre la figure 4.5a et 4.5b ou 4.5c. L'énergie du phonon dans le cristal dépend bien sûr de l'énergie de l'électron, mais aussi de sa quantité de mouvement  $\mathbf{k}$  d'où la différence de spectre entre 4.5b et 4.5c.

La figure 4.5a montre également que l'énergie des phonons dans le référentiel de Herring-Vogt dépend fortement des paramètres, tels que la masse utilisée pour la transformation Herring-Vogt. Ceci n'est normalement pas un problème, car, en revenant dans le référentiel du cristal, cette masse s'«annule» lors de la transformation inverse. Dans les faits, il y a encore un léger décalage, même dans le référentiel du cristal, comme on peut le voir aux figures 4.5b et 4.5c. Ce décalage vient de l'approximation isotrope de la masse angulaire  $m_q$  qui est une simplification de la transformation exacte de Herring-Vogt. Le choix des masses n'affecte donc que très peu le spectre en énergie des phonons émis. Toutefois, le choix de masse a un impact sur le taux de diffusion et donc sur le pouvoir d'arrêt de ce processus.

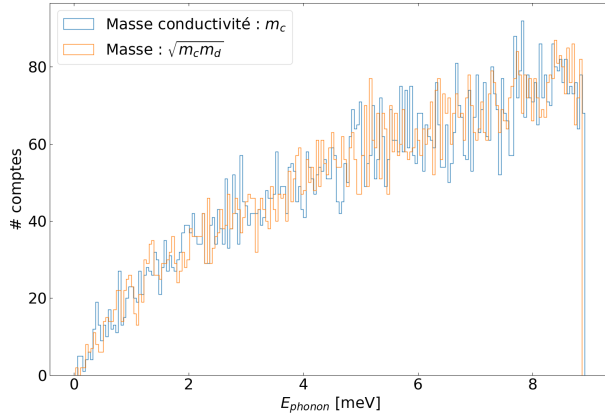
## 4.4. Diffusions intervallées

La diffusion intervallée est sans nul doute le processus ayant reçu le plus d'amélioration. Initialement, ce processus n'incluait pas d'émission de phonons. Les électrons étaient tout simplement tournés dans une nouvelle direction «aléatoire» lors de la sélection de l'état final. Leurs quantités de mouvement ne changeaient pas de grandeur, seulement de direction. Or, le vrai mécanisme physique nécessite l'émission de phonons énergétique de quelques meV. De plus, le taux de diffusion était basé sur une loi semi-empirique ajustée aux nombres de diffusions IV observées dans les détecteurs d'Edelweiss.

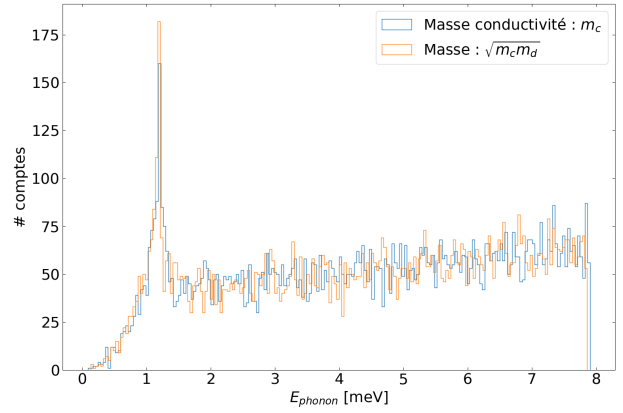
Parmi les changements, nous parlerons, en premier, du remplacement de l'équation du taux de diffusions et de la distribution angulaire par celle développée au chapitre 2 à l'aide de la règle d'or de Fermi. En deuxième, nous examinerons le choix de certains paramètres dans nos équations. En troisième, nous élaborerons sur la sélection de l'état final, incluant



(a) Référentiel de Herring-Vogt



(b) Référentiel du cristal, si l'électron est proche du minimum de la bande.



(c) Référentiel du cristal, si l'électron est loin du minimum de la bande.

**Fig. 4.5.** Spectre d'émission de l'énergie des phonons acoustiques dans le Ge pour différentes moyennes de la masse angulaire. L'électron a une énergie de 40 meV. Un angle aléatoire a été tiré 10 000 fois de la distribution angulaire et l'énergie du phonon est ensuite calculée.

l'émission d'un phonon IV. En dernier, nous analyserons l'importance du choix des matrices de rotation des différentes vallées.

À noter que dans notre outil de modélisation, seuls les électrons sont capables de diffusions IV, car nous n'incluons qu'une seule bande de valence pour les trous : la bande anisotrope *heavy hole*. On formalise mathématiquement cette dernière, normalement dégénérée, comme une seule bande sphérique de masse effective  $m^*$ . Les trous sont alors confinés dans une seule vallée à  $\Gamma$ . Il n'y a pas de diffusions intervalles ou interbandes possibles.

#### 4.4.1. Taux de diffusions à partir de principes premiers

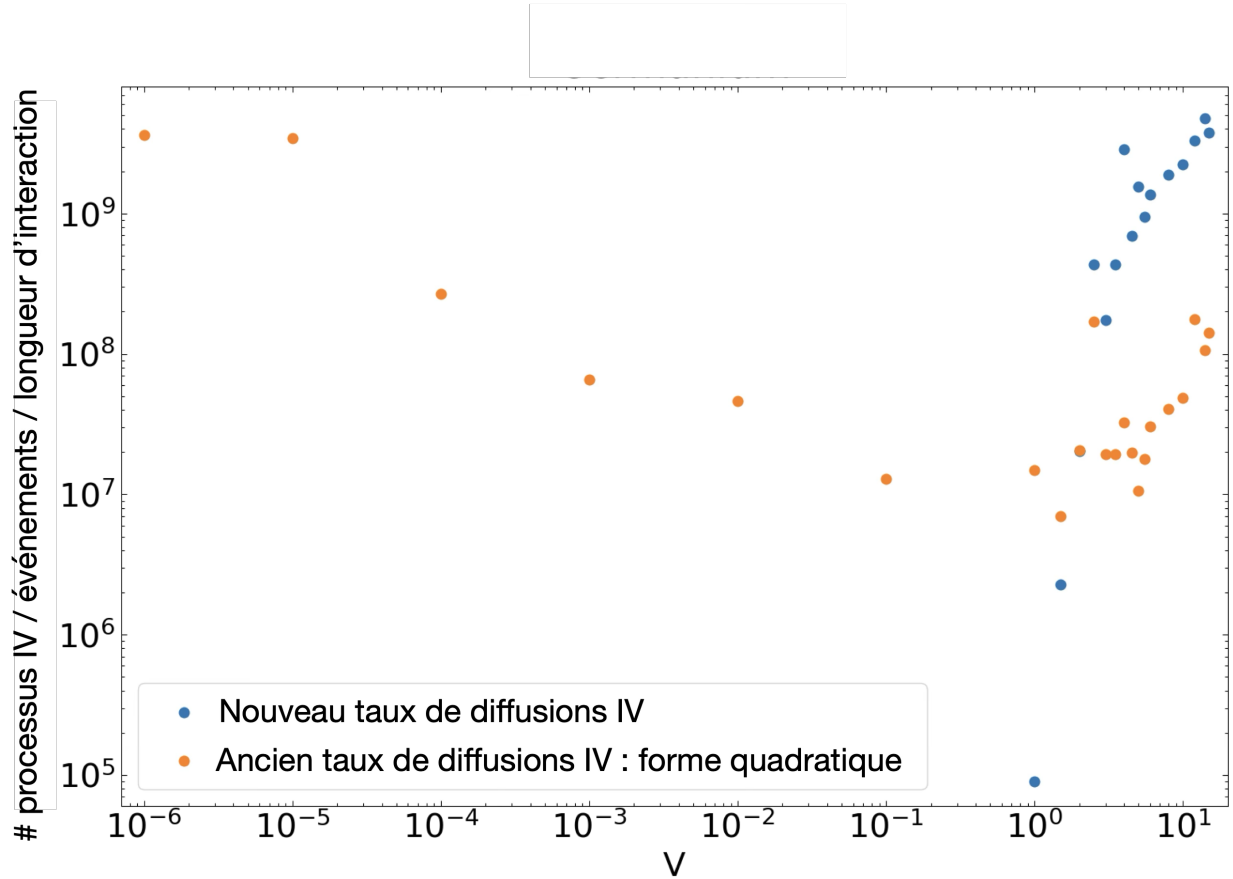
Nous voulons comparer l'effet d'avoir changé le taux semi-empirique, qui dépend du champ électrique à un taux obtenu par la règle d'or de Fermi. Le tableau 4.4 montre les équations mathématiques de ces deux taux. Remarquons que seul le taux de diffusion inclut la non-parabolicité des bandes. L'effet de  $\alpha$  est assez petit, d'autant que ce processus est beaucoup moins fréquent que l'émission de phonons acoustiques intravallées, qu'on peut négliger cette correction.

| Quantités                 | Ancienne version                                        | Ordre | Nouvelle version                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
|---------------------------|---------------------------------------------------------|-------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $P(\mathbf{k}^*)$         | $P(\mathbf{E}) = b + m \mathbf{E} ^\alpha$              | 0     | $\frac{Z_{iv} D_{iv}^2 m_d^{3/2}}{2^{1/2} \pi \rho \hbar^3 \omega_{iv}} [E(\mathbf{k}^*) - \hbar \omega_{iv}]^{1/2}$ $\times (1 + \alpha [E(\mathbf{k}^*) - \hbar \omega_{iv}])^{1/2}$ $\times [1 + 2\alpha [E(\mathbf{k}^*) - \hbar \omega_{iv}]]$                                                                                      |
|                           | $P(\mathbf{E}) = A (E_0^2 +  \mathbf{E} ^2)^{\alpha/2}$ | 1     | $\frac{D_{iv}^2 m_d^{5/2}}{16 \pi \rho \hbar^2 k^* m_c^{3/2}}$ $\times [1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*) - 2\alpha (\hbar \omega_{iv})]$ $\times (q_{max}^{*4} - q_{min}^{*4})$ <p>éq. 2.3.82 pour <math>q_{max}^{*4}</math> et <math>q_{min}^{*4}</math></p>                                                                                 |
| $P(\mathbf{k}^*, \theta)$ | -                                                       | 0     | $\frac{D_{iv}^2 m_d^{3/2}}{2 \pi \rho \hbar^2 \omega_{iv} m_c^{1/2}} k^* \left( 2 \cos \theta^2 - 2 m_c \frac{\omega_{iv}}{\hbar k^{*2}} \right)$ $\times \frac{\sin \theta}{\left  \sqrt{\cos \theta^2 - 2 m_c \frac{\omega_{op}}{\hbar k^{*2}}} \right }$                                                                              |
|                           |                                                         | 1     | $\frac{Z_{iv} D_{iv}^2 m_d^{5/2}}{2 \pi \rho \hbar^2 \omega_{iv} m_c^{3/2}} k^{*3} \sin \theta$ $\frac{8 \cos \theta^4 - 8 \cos^2 \theta \left( \frac{2 m_c \omega_{iv}}{\hbar k^{*2}} \right) + \left( \frac{2 m_c \omega_{iv}}{\hbar k^{*2}} \right)^2}{\left  \sqrt{\cos \theta^2 - 2 m_c \frac{\omega_{iv}}{\hbar k^{*2}}} \right }$ |

**Tableau 4.4.** Comparaison des équations du taux de diffusions intervallées et de la distribution angulaire avant et après nos modifications. Seulement pour les électrons.

Afin de bien illustrer l'impact de cette amélioration, on compare le nombre de diffusions IV par événement par longueur d'interaction dans la simulation entre les deux taux de diffusions. On modélise 48 électrons avec une énergie cinétique initiale de  $1 \times 10^{-5}$  eV partant du centre

d'un cristal en Ge de 1,67 cm de hauteur. On répète la situation pour des voltages allant de  $1 \times 10^{-6}$  V à 15 V. Puis, on enregistre chaque processus de diffusions intervallées au cours du parcours de l'électron et on compile le tout à la figure 4.6



**Fig. 4.6.** Nombre de diffusions IV par événement par longueur d'interaction pour l'ancien taux de diffusions IV (quadratique en orange) et le nouveau taux (principes premiers en bleu) en fonction du voltage. Nous avons généré 48 événements : un seul électron avec une énergie cinétique de  $1 \times 10^{-5}$  eV, au centre d'un cristal de Ge de 1,67 cm de hauteur.

À la lecture de ce graphique, on dégage deux constants majeurs : le nombre de diffusions IV est plus élevé pour l'approche principe premier pour un voltage  $> 1$  V et, le nombre de diffusions augmente drastiquement pour le cas semi-empirique au fur et à mesure que la différence de potentiel s'approche de 0. Rappelons-nous tout d'abord que nous utilisons la forme quadratique du taux semi-empirique pour le Ge.

Comment expliquer la si grande différence entre les deux approches? Commençons par le nombre de diffusions aux très petits voltages ( $< 0,1$  V). Le nouveau modèle donne un résultat conforme à ce que nous attendons, c'est-à-dire que le nombre de diffusions IV est quasiment nul lorsque le champ électrique est insuffisant pour accélérer les charges au-dessus

de l'énergie de seuil d'émission. Dans l'approche semi-empirique, au contraire, le nombre de diffusions IV augmente considérablement en dessous de 0,1 V. Une explication logique existe à ce comportement inattendu. À d'aussi faibles champs électriques, les électrons émettent toute leur énergie cinétique sous forme de phonons NTL (généralement acoustiques intravallées) et n'en regagnent pas suffisant pour être au-dessus du seuil d'émission des autres processus. Toutefois, le modèle semi-empirique ne dépend que du champ électrique et non de l'énergie de l'électron. Il n'y a donc pas de seuil pour ce processus et il n'est jamais zéro dans la simulation, même lorsque le champ électrique est presque nul. Il en résulte une situation étrange où le seul processus avec un taux non nul dans la modélisation est la diffusion IV. Selon le fonctionnement de G4CMP, ce dernier l'emporte donc toujours dans le choix stochastique du prochain processus. Comme, en plus, il ne change pas l'énergie de l'électron, celui-ci est pris dans une boucle à répétition de diffusions IV changeant constamment sa direction de propagation, mais pas son impulsion. Bref, l'électron fait presque du sur-place jusqu'à ce que, par chance, l'électron atteigne une surface et soit retiré de la simulation.

Pour la deuxième grande différence, celle concernant le nombre de diffusions à des voltages supérieurs à 1V, il est difficile de savoir laquelle des deux méthodes est la plus exacte. L'approche semi-empirique, pour le Ge, est basée sur le nombre de processus intervallées dans les détecteurs au germanium ultrapur d'Edelweiss, analysé à partir d'une modélisation par méthode de Monte-Carlo du transport de charge. Les cristaux de Ge d'Edelweiss comportent environ le même nombre d'impuretés que les détecteurs de SuperCDMS [99, 107, 106]. Le nombre de diffusions IV, par les impuretés comme par le réseau cristallin, devrait donc être proche dans les deux expériences.

Pour le Si, l'approche semi-empirique se base plutôt sur l'analyse de la position finale des charges aux surfaces de nos cristaux de Si [75]. On analyse la densité de charge aux différentes régions à la surface du substrat en fonction du champ électrique. On reste toutefois confronté au même problème à petite différence de potentiel : un trop grand nombre de collisions IV.

L'approche principe premier est basée sur une approche analytique. Toutefois, comme nous en reparlerons dans la section 4.5, il est possible d'ajuster plusieurs paramètres de notre modélisation afin que celle-ci reproduise des résultats expérimentaux, tels que la vitesse de dérive et la position finale des charges aux surfaces de nos détecteurs. Parmi ces paramètres, on retrouve le potentiel de déformations de la diffusion IV et l'énergie des phonons IV pour notre nouveau modèle du processus de diffusions IV. Il ne faut pas oublier que la modification des paramètres des autres processus affecte indirectement le nombre de diffusions IV enregistrées dans notre simulation. En effet, en accroissant le taux de diffusions électron-phonon acoustiques intravallées (en choisissant un potentiel de déformation plus grand, par exemple), on diminue la probabilité d'une collision IV, car le processus adverse

remporte plus souvent la sélection dans G4CMP. Bref, l’ajustement des paramètres des taux de diffusions demande une optimisation très complexe de plusieurs constantes avec de fortes dépendances entre elles.

#### 4.4.2. Choix des paramètres

Les équations du taux et de la distribution angulaire du processus de diffusions IV contiennent plusieurs paramètres, tels que l’énergie des phonons IV, le potentiel de déformation pour lesquels on retrouve une certaine plage de valeurs dans la littérature. Ces deux paramètres ont des valeurs différentes pour chaque branche de phonon. Nous verrons qu’il existe une grande variabilité de valeur dans la littérature. Nous reparlerons de comment choisir la bonne valeur pour chaque paramètre à la section 4.5. Notamment, nous pouvons comparer les données de notre simulation à de véritables données expérimentales et ajuster nos paramètres en conséquence pour nous assurer de la fidélité de notre modèle. À noter que, comme pour la diffusion acoustique intravallée, le choix de la masse est important aussi pour les diffusions IV, comme mentionné à la section 4.3.2.1 pour savoir pourquoi.

##### 4.4.2.1. Choix des potentiels de déformation.

Le tenseur du potentiel de déformation électron-phonon IV dépend du mode de phonons émis et de sa direction d’émission. De la même manière que pour le cas du potentiel de déformation acoustique intravallée, il est d’usage de remplacer ce tenseur d’ordre 2 par une seule constante scalaire  $D_{iv}$ , mais différente pour chaque mode de phonons. Le tableau 4.5 contient les valeurs des potentiels de déformations IV utilisées dans G4CMP de même que la plage de valeurs que l’on retrouve dans la littérature. Ces derniers sont généralement calculés à partir de la DFT, ou de fit d’une modélisation par méthode de MC du transport des charges à certaines quantités, telles que la mobilité et la vitesse de dérive des charges. On observe une grande variation entre les différentes références et, comme l’on retrouve un facteur  $D_{iv}^2$  dans les équations du taux de diffusions, le bon choix de cette constante est important pour bien modéliser ce processus.

##### 4.4.2.2. Choix des énergies des phonons.

Les phonons IV ont une relation de dispersion environ constante et différente pour chaque branche. On peut estimer la valeur de leur énergie proche de la première zone de Brillouin encore une fois par les mêmes méthodes qu’on calcule le potentiel de déformation. Le tableau 4.5 contient les valeurs de  $E_{phonon} = \hbar\omega_{iv}$  utilisées dans G4CMP de même que la plage de valeurs que l’on retrouve dans la littérature. On observe une grande variabilité dans les

plages d'énergies. L'effet de la variabilité est moins important que celle de  $D_{iv}^2$  sur le taux de diffusion, car on divise par  $\hbar\omega_{iv}$ , soit à la puissance un et non deux.

| Substrat | Mode      | $\hbar\omega_{iv}$ dans<br>G4CMP<br>(eV) | $\hbar\omega_{iv}$ dans la<br>littérature (eV)                                                                                                                                                               | $D_{iv}$ dans<br>G4CMP<br>(eV/Å) | $D_{iv}$ dans la<br>littérature<br>(eV/Å)                                                                                                  |
|----------|-----------|------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Si       | TA<br>(g) | 12                                       | 11,4 <sup>a</sup> ; 12 <sup>b,c</sup> ; 12.33 <sup>d</sup>                                                                                                                                                   | 0,5                              | 0,14 <sup>d</sup> ; 0,5 <sup>b,c</sup> ;<br>0,55 <sup>a</sup>                                                                              |
|          | LA<br>(g) | 18,4                                     | 18,4 <sup>c</sup> ; 18,5 <sup>b</sup> ; 18,8 <sup>a</sup> ;<br>21,53 <sup>d</sup> ; 22,7 <sup>b</sup>                                                                                                        | 0,8                              | 0,04 <sup>d</sup> ; 0,55 <sup>a</sup> ;<br>0,8 <sup>b,c</sup>                                                                              |
|          | LO<br>(g) | 61,8                                     | 60 <sup>e</sup> ; 60,30 <sup>d</sup> ; 61,06 <sup>f</sup> ;<br>61,16 <sup>f</sup> ; 61,2 <sup>b</sup> ; 61,6 <sup>e</sup> ;<br>62 <sup>h</sup> ; 62,33 <sup>d</sup> ; 63 <sup>i</sup> ;<br>63,2 <sup>a</sup> | 11.0                             | 0,5 <sup>f</sup> ; 3 <sup>h</sup> ; 3,32 <sup>f</sup> ;<br>3,4 <sup>a</sup> ; 3,86 <sup>f</sup> ; 4,73 <sup>e</sup><br>; 11 <sup>b,c</sup> |
|          | TA<br>(f) | 18,9                                     | 18,9 <sup>c</sup> ; 19 <sup>b</sup> ; 20,43 <sup>d</sup> ;<br>21,9 <sup>a</sup> ;                                                                                                                            | 0,3                              | 0,06 <sup>d</sup> ; 0,3 <sup>b,c</sup> ;<br>0,55 <sup>a</sup> ;                                                                            |
|          | LA<br>(f) | 47,2                                     | 43 <sup>h</sup> ; 45 <sup>i</sup> ; 46,3 <sup>a</sup> ;<br>46,66 <sup>d</sup> ; 46,67 <sup>f</sup> ; 47 <sup>g</sup> ;<br>47,3 <sup>e</sup> ; 47,4 <sup>b</sup> ; 47,73 <sup>b</sup> ;                       | 2,0                              | 1,36 <sup>d</sup> ; 1,83 <sup>f</sup> ;<br>2,0 <sup>c,g</sup> ; 2,51 <sup>e</sup> ;<br>3,4 <sup>a</sup>                                    |
|          | TO<br>(f) | 58,8                                     | 54 <sup>h</sup> ; 56,4 <sup>f</sup> ; 57 <sup>i</sup> ; 57,2 <sup>e</sup><br>; 57,69 <sup>e</sup> ; 57,96 <sup>d</sup> ; 59 <sup>b</sup>                                                                     | 2,0                              | 2,0 <sup>c</sup> ; 3,52 <sup>d</sup> ;<br>3,55 <sup>f</sup> ; 4 <sup>h</sup> ; 4,44 <sup>e</sup>                                           |
| Ge       | LA,<br>LO | 27,6                                     | 23,95 <sup>j</sup> ; 27,6 <sup>c</sup> ; 33,87 <sup>k</sup>                                                                                                                                                  | 3,0                              | 3,0 <sup>c</sup> ; 4,3 <sup>k</sup> ; 5,26 <sup>j</sup>                                                                                    |
|          | TA        | 10,3                                     | 10,3 <sup>c</sup> ; 14,51 <sup>k</sup>                                                                                                                                                                       | 0,2                              | 0,2 <sup>c</sup> ; 4,03 <sup>k</sup>                                                                                                       |

<sup>a</sup>Référence [12]; <sup>b</sup>Référence [50]; <sup>c</sup>Référence [66]; <sup>d</sup>Référence [144]; <sup>e</sup>Référence [98];  
<sup>f</sup>Référence [81]; <sup>g</sup>Référence [87]; <sup>h</sup>Référence [101]; <sup>i</sup>Référence [145]; <sup>j</sup>Référence [38];  
<sup>k</sup>Référence [22];

**Tableau 4.5.** Valeurs du potentiel de déformation et de l'énergie du phonon IV associé pour le Si et le Ge dans la littérature.

### 4.4.3. Sélection de l'état final et émission de phonons

#### 4.4.3.1. Ancien modèle.

Dans l'ancien modèle, la sélection de l'état final après diffusions IV était relativement simple. On appliquait une transformation de Herring-Vogt sur la quantité de mouvement  $\mathbf{k}$  de l'électron. On assignait ensuite une nouvelle vallée aléatoire à l'électron autre que celle actuelle. Finalement, on appliquait la transformation inverse de Herring-Vogt, mais à partir des matrices de rotation de cette nouvelle vallée. Les matrices de masses s'annulaient, laissant essentiellement la transformation totale suivante :

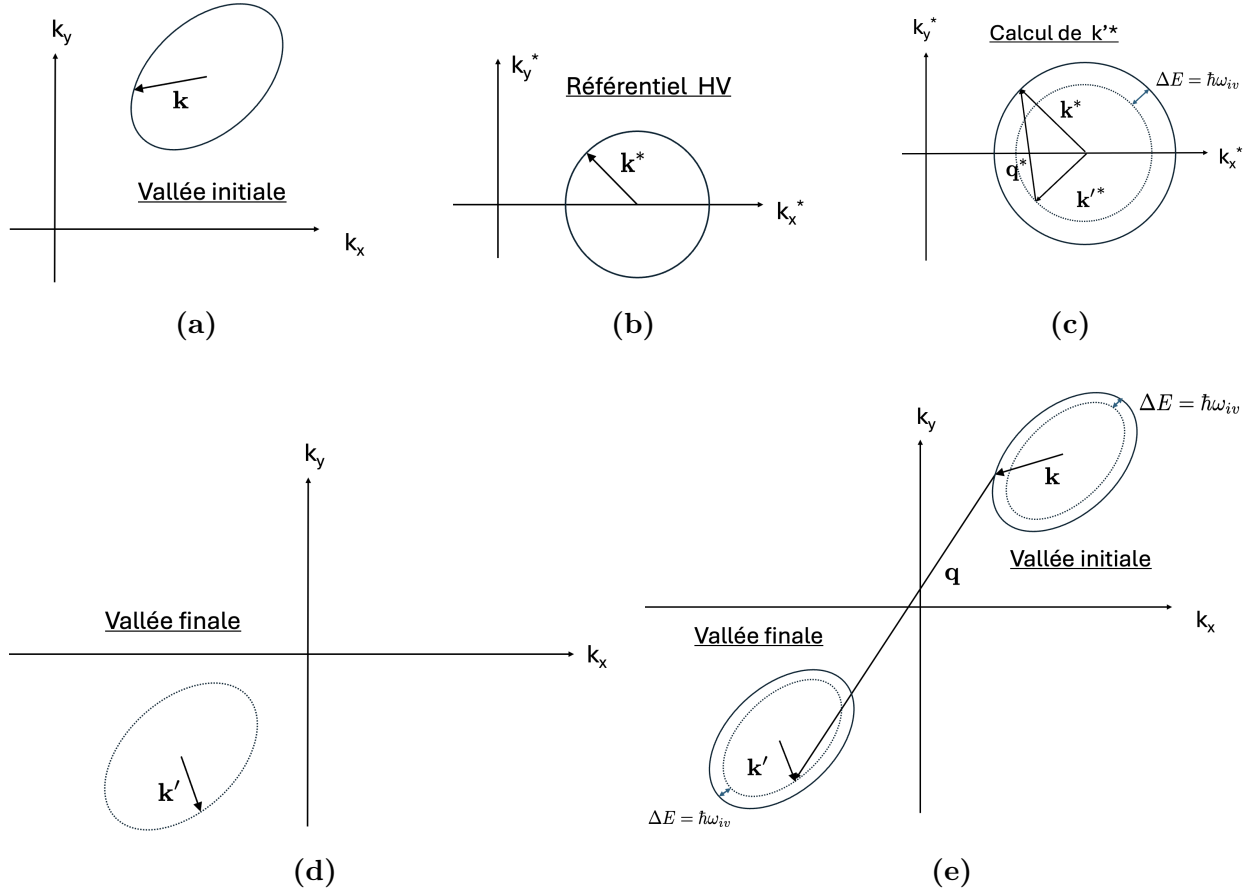
$$\mathbf{k}' = T_f^T T_i \mathbf{k}. \quad (4.4.1)$$

où  $T_f^T$  est la matrice de rotation permettant de sortir du référentiel de Herring-Vogt de la nouvelle vallée finale alors que  $T_i$  est celle allant dans le référentiel de Herring-Vogt de la vallée initiale.

Comme ce sont des matrices de rotation, la norme de l'impulsion restait inchangée à la suite de la multiplication matricielle. Outre l'absence d'émission de phonons, cette sélection de l'état final comporte un autre problème. Il n'existe qu'un nombre limité de vallées et donc de matrices de rotations et donc d'angles de rotation possibles : 7 pour le Ge, car on exclut la vallée actuelle et 5 pour le Si. En fait, avant l'ajout des anti-vallées, dont nous allons reparler dans la section 4.4.4.1, ce nombre était même de 3 rotations possibles pour le Ge et de 2 pour le Si. Bref, à la suite d'une diffusion IV, l'électron était réorienté dans seulement 5 ou 7 directions à la fin du processus, alors que normalement, la direction finale est un spectre de probabilité continue. Au final, cela n'était pas si grave sur la reconstruction exacte de la trajectoire de la particule, car l'émission de phonons acoustiques intravallées participe déjà à une certaine randomisation de la trajectoire. Le nombre de rotations possibles dépend bien sûr de la direction du champ électrique et l'orientation du cristal. Ici, nous avons présumé un champ électrique purement en  $z$  et du Ge(100) et du Si(111).

#### 4.4.3.2. Nouveau modèle.

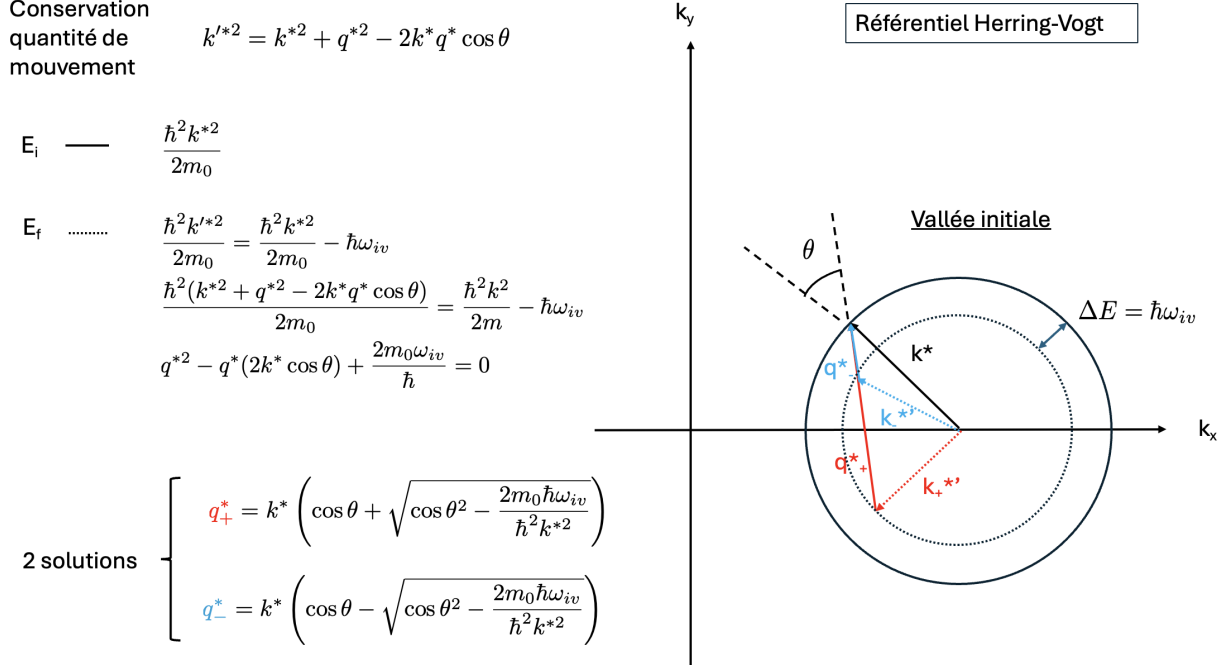
Nous proposons un nouveau modèle de sélection de l'état final après diffusion IV qui inclut l'émission de phonons IV. On commence par transformer la quantité initiale de l'électron vers le référentiel de Herring-Vogt. On tire un angle aléatoire d'émission  $\theta_r$  de la distribution angulaire  $P(\mathbf{k}, \theta)$ . On calcule  $q$  dans le référentiel de Herring-Vogt à partir de la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement. L'énergie du phonon est donnée par une valeur



**Fig. 4.7.** Étapes de la sélection de l'état final de l'électron lors d'une diffusion IV. En a), on considère la quantité de mouvement initiale de l'électron dans le référentiel du cristal  $\mathbf{k}$ . En b), transformation de Herring-Vogt du vecteur d'onde :  $\mathbf{k}^*$ . En c), calcul de la quantité de mouvement après émission du phonon :  $\mathbf{k}'^*$ . En d), transformation inverse de Herring-Vogt de la nouvelle vallée vers le référentiel du cristal. En e), calcul de la quantité de mouvement du phonon dans le référentiel du cristal :  $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ .

fixe selon la branche de phonons choisie. Un poids est accordé à chaque mode selon leur contribution au taux total de diffusions IV. Ainsi, si la branche LA a contribué, par exemple, à 17% du taux total de diffusions IV, elle a 17% de chance d'être sélectionnée. On soustrait ensuite cette énergie et cette impulsion à celles de l'électron, toujours dans le référentiel de Herring-Vogt. Puis, on choisit une nouvelle vallée complètement au hasard s'il s'agit du Ge. Si on est dans le Si, on prend une vallée au hasard autre que l'anti-vallée si le processus est de type f alors qu'on sélectionne l'anti-vallée pour un processus g. On ressort l'électron du référentiel de Herring-Vogt en appliquant une transformation inverse, mais cette fois-ci à partir des matrices de rotation de la nouvelle vallée. On préserve ainsi l'énergie et la quantité de mouvement du référentiel de Herring-Vogt qui est la même pour toutes les bandes

similaires. Finalement, on trouve la véritable valeur de  $q$  dans le référentiel du cristal grâce à  $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$  où les deux vecteurs d'ondes de l'électron sont dans deux vallées différentes. La figure 4.7 montre ces étapes de manière imagée.



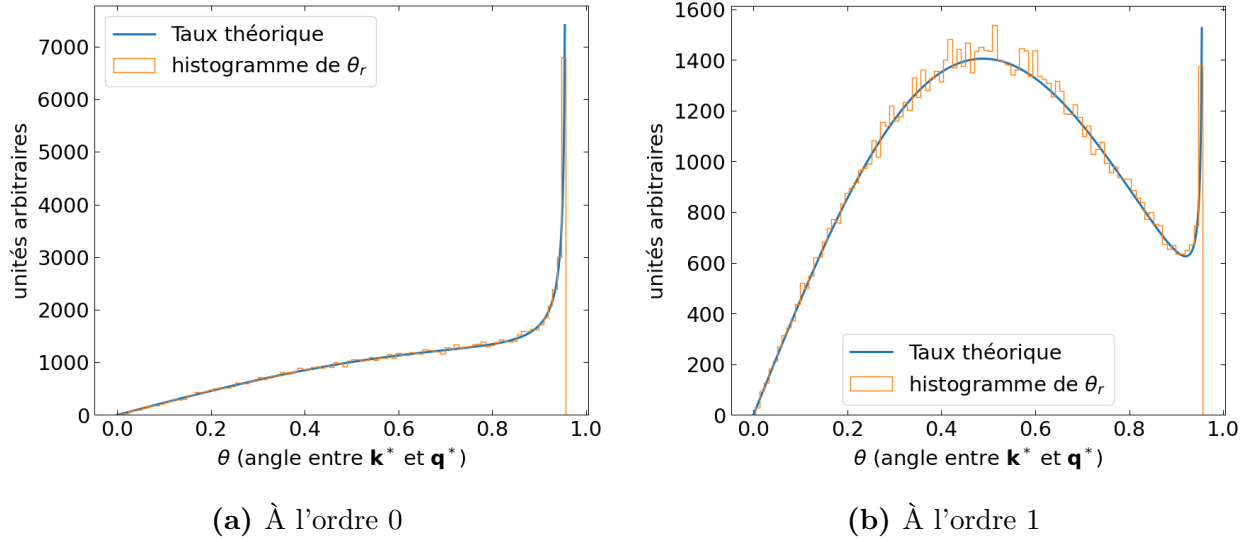
**Fig. 4.8.** Schéma de l'émission de phonons intervalles dans le référentiel de Herring-Vogt et calcul de la quantité de mouvement du phonon par conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement.

Essayons d'expliciter un peu plus l'étape du calcul de l'énergie et de la quantité de mouvement de l'électron dans le référentiel de Herring-Vogt de la vallée initiale (figure 4.7c). La figure 4.8 montre le calcul pour le cas simple d'une bande parabolique. Avant d'aller plus en détails, notons que cet ajout est innovateur et n'est pas fait ailleurs dans la littérature à ma connaissance. La plupart des références sur le transport des charges par méthode de MC [87, 64, 66] recommandent de choisir de manière aléatoire  $\mathbf{k}^*$ . Nous proposons une méthode pour calculer cette quantité basée sur la conservation de la quantité de mouvement de l'énergie de l'électron et du phonon dans le référentiel de Herring-Vogt. L'angle d'émission est tiré à partir d'une distribution angulaire  $P(\mathbf{k}^*, \theta)$  qui fut développée spécifiquement dans le cadre de ce travail.

En retournant à la figure 4.8, on remarque qu'il existe 2 solutions possibles pour  $\mathbf{q}$ . Cela correspond essentiellement au fait que pour un angle  $\theta$ , il existe deux vecteurs  $\mathbf{k}'^*$  de même norme qui traversent la surface d'énergie constante (une sphère ou un ellipsoïde dans notre cas). Pour déterminer si l'un des deux états finaux est plus probable, on pourrait avoir

recours à la densité d'état électronique et assigner un poids probabilistique à chacun. Par simplicité, on choisit l'un des deux avec la même probabilité, soit 50/50.

Il reste une dernière difficulté à éclipser, soit comment déterminer l'angle  $\theta$ . Cela se fait bien évidemment avec la distribution angulaire. La forme est bien différente selon de s'il s'agit d'un processus d'ordre 0 ou 1. La figure 4.9 illustre la distribution angulaire dans le Ge pour ces deux ordres, pour un électron ayant une énergie de 31 meV.



**Fig. 4.9.** Distribution angulaire parabolique de l'émission de phonons IV dans le Ge pour un électron de 31 meV et un phonon de 10 meV. Nous avons également superposé l'histogramme de 100 000 angles aléatoires tirés d'une telle distribution. Nous avons divisé l'histogramme par un facteur constant afin de mieux comparer les deux distributions.

Le plus gros défi a été de trouver la formule pour tirer un angle aléatoire de ces distributions angulaires. En se servant de la méthode directe à l'équation 3.2.24, on intègre  $P(\mathbf{k}, \theta)$  de  $\theta_{min}$  à  $\theta_r$  et on divise par  $P(\mathbf{k})$ . Puis on isole  $\theta_r$  en fonction d'un nombre aléatoire  $r$  compris entre 0 et 1.

À l'ordre 0, cela correspond à une équation polynomiale d'ordre 4 bicarrée, ce qui se résout facilement pour donner :

$$\cos^2 \theta_r = \frac{v}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{v^2 + 4(1-v)(r^2 - 2r + 1)}, \quad v = \frac{2m_c E_{\text{phonon}}}{\hbar^2 k_*^2}. \quad (4.4.2)$$

À l'ordre 1, on obtient plutôt un polynôme d'ordre 8 bicarré. Cela nous permet de retomber sur une équation de degré 4 par changement de variable. Par une autre substitution, on élimine ensuite le terme de degré 3 de cette équation et on résout par la méthode de Ferrari-Descartes-Lagrange :

$$\begin{aligned}
u &= \frac{-3b^4 + 256e a^3 - 64d b a^2 + 16c b^2 a}{256a^4} \\
y_2 &= \frac{v^2}{8} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{v^4}{16} - 4u} \\
\cos^2 \theta_r &= \sqrt{y_2} + \frac{v}{2}.
\end{aligned} \tag{4.4.3}$$

avec :

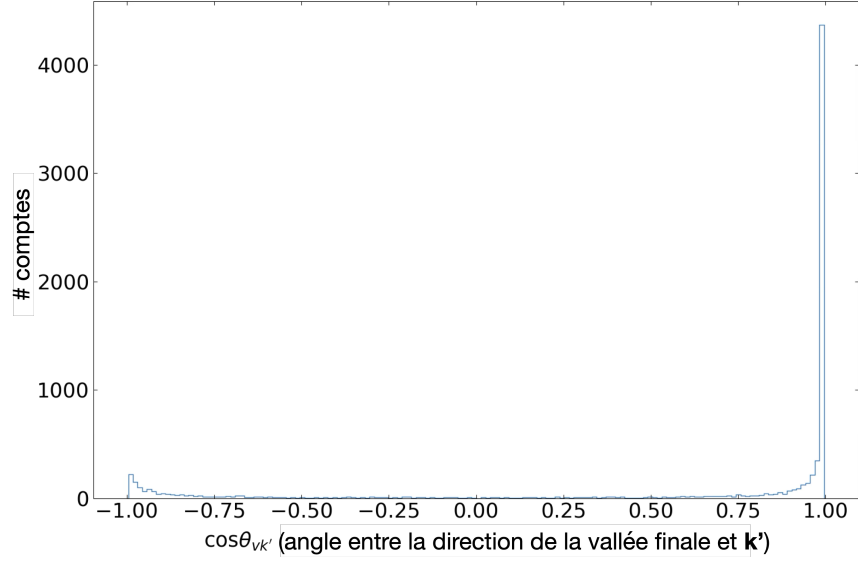
$$a = 4, \quad b = -8v, \quad c = 5v^2, \quad d = -v^3, \quad e = -(r-1)^2(2-v)^2(1-v). \tag{4.4.4}$$

Afin de vérifier l'exactitude de ces équations, nous avons tiré 100 000 angles aléatoires pour l'ordre 0 et 1 pour un électron de 31 meV et un phonon de 10 meV. Nous avons rapporté l'histogramme de  $\theta_r$  (divisé par une constante pour mieux comparer au taux théorique) dans la figure 4.9. La concordance est parfaite à 31 meV autant pour l'ordre 0 que 1. À d'autres énergies d'électrons et de phonons, nous avons aussi obtenu une excellente concordance.

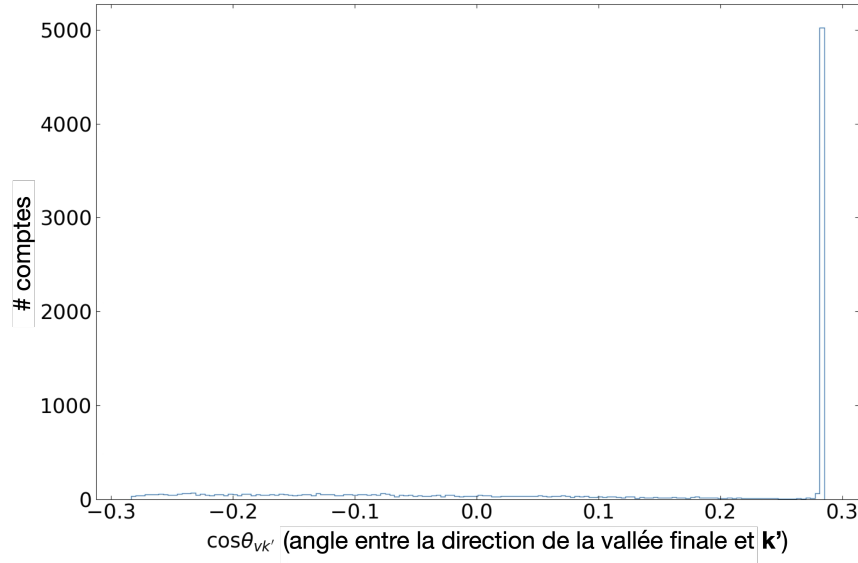
Il nous reste une dernière vérification à faire. Nous devons nous assurer que l'état final se retrouve bel et bien dans sa nouvelle vallée. On s'intéresse à l'angle entre la vallée finale, e.g (1,1,1) pour la vallée 0 du Ge, et la direction de l'électron après diffusion  $\mathbf{k}'$ . On répète les étapes de sélection de l'état final décrites plus hauts 100 000 fois pour un électron de 149 meV dans le Ge et le Si et on transpose l'histogramme du cosinus de l'angle entre la vallée finale et le vecteur d'onde final de l'électron à la figure 4.10.

La figure 4.10a du haut se concentre sur des électrons qui, initialement, avaient un vecteur d'onde pointant fortement dans la même direction que la vallée. Ainsi, le pic à 1 signifie qu'après notre processus, l'électron se retrouve bel et bien dans la vallée finale voulue. Le plus petit pic à -1 indique un électron ayant plutôt fini dans l'anti-vallée de sa vallée finale. On peut corriger ce détail en multipliant par -1 la quantité de mouvement finale pour «redresser» l'électron dans la bonne vallée.

Le graphique 4.10b du bas concerne des électrons dont le vecteur d'onde initial ne pointait pas dans la même direction que la vallée initiale (environ perpendiculaire). Dans une telle situation, l'électron doit aussi finir loin de sa vallée finale comme c'est illustré par le pic à 0,3. En d'autres mots, si l'électron est loin de sa bande initiale (à cause de la force électrique, par exemple), il finira loin aussi de sa vallée finale. Nous verrons pourquoi mathématiquement dans la prochaine sous-section. C'est en bonne partie à cause des matrices de rotation et des transformations de Herring-Vogt. Au final, nous sommes satisfaits du comportement de l'algorithme. Les électrons finissent dans la vallée assignée dans la vaste majorité des cas.



(a) Pour le Ge et  $\mathbf{k}$  pointant fortement dans la même direction que la vallée initiale



(b) Pour le Si et  $\mathbf{k}$  pointant environ perpendiculairement à la direction de la vallée initiale

**Fig. 4.10.** Histogramme du cosinus de l'angle entre la vallée finale et le vecteur d'onde final de l'électron après le processus de sélection de l'état final du nouveau modèle de diffusions IV.

#### 4.4.4. Matrice de rotations

En développant le nouveau modèle de diffusions IV, nous sommes tombés sur deux problèmes concernant les matrices de rotation utilisées pour les transformations de Herring-Vogt. Le

premier est qu'il manquait de matrices pour les anti-vallées. Le deuxième concernait la précision numérique des éléments de la matrice. Ceux-ci étaient trop arrondis pour le Ge. Nous reparlerons de ces deux difficultés dans les sous-sections suivantes. Ensuite, nous proposons une nouvelle convention, basée sur les indices de Miller, pour déterminer nos matrices de rotation, ce qui permettra de résoudre nos deux problèmes avec une seule solution.

#### 4.4.4.1. Matrices de rotation des anti-vallées.

Les anciennes matrices de rotation utilisées pour le Si étaient :

$$[100] \rightarrow T_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.4.5)$$

$$[010] \rightarrow T_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.4.6)$$

$$[001] \rightarrow T_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.4.7)$$

La première matrice est exactement la même que de notre nouveau modèle. Les deux autres matrices correspondent à une rotation de  $120^\circ$  autour de l'axe  $\mathbf{u} = (-1, -1, -1)$  pour  $T_1$  et autour de  $\mathbf{u} = (1, 1, 1)$  pour  $T_2$ . Selon notre convention, on veut que les matrices de rotations tournent un vecteur pointant dans la direction de la vallée vers  $(1, 0, 0)$ . Les deux autres matrices accomplissent aussi cette tâche.  $T_1$  apporte  $(0, 1, 0)$  vers  $(1, 0, 0)$  et  $T_2$  apporte  $(0, 0, 1)$  vers  $(1, 0, 0)$ .

Le Si comporte 6 vallées, qu'on appelle souvent 3 vallées et 3 anti-vallées pour décrire les vallées dans des directions antiparallèles. Plus précisément, il manquait 3 matrices, pour les trois anti-vallées :  $[\bar{1}00]$ ,  $[0\bar{1}0]$  et  $[00\bar{1}]$ . Heureusement, les transformations  $T_i^T \frac{1}{M} T_i$  et  $T_i^T M T_i$  qui sont utilisés à profusion dans notre simulation sont les mêmes pour une vallée et son anti-vallée. L'accélération des charges et les diffusions électron-phonon acoustique intravallée n'étaient donc pas trop affectés par ce manque. Initialement, on palliait même à cette absence d'anti-vallées par la multiplication de la quantité de mouvement de l'électron par -1 dans 50% du temps lors de diffusions IV. Nous avons fini par ajouter les 3 matrices manquantes, qu'on peut retrouver aux équations 2.2.32.

Le Ge possède 4 vallées ou 8 «demi-vallées». Ce que nous appelons vallées et anti-vallées est en fait une seule et même vallée, mais séparée par les limites de la zone Brillouin. Malheureusement, notre simulation ne permet pas encore de représenter des vecteurs d'ondes en dehors de la zone de Brillouin, comme la combinaison linéaire d'un vecteur du réseau réciproque  $\mathbf{G}$  et d'un autre vecteur. Nous considérons donc les 8 «demi-vallées» comme 4 vallées et 4 anti-vallées séparées. Initialement, seules les vallées dans l'hémisphère des  $k_z$  positif étaient considérées, mais nous avons ajouté les 4 autres de l'autre hémisphère. On retrouve toutes les matrices aux équations 2.2.36.

#### 4.4.4.2. Précision des éléments de matrice.

Les anciennes matrices étaient calculées à partir des angles de Euler. En spécifiant les trois angles  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$ , on construisait nos matrices de rotation. Le désavantage avec cette méthode est qu'il faut calculer ces angles au long pour retrouver nos matrices de rotations des transformations de Herring-Vogt.

L'autre désavantage concerne les matrices pour le Ge. Nous utilisons des angles décimaux, qui étaient arrondis à la quatrième décimale. Cela se traduisait par une erreur, à la sixième décimale dans les éléments de matrice. À priori, cela peut sembler anodin, mais, comme ces dernières sont souvent utilisées des millions de fois et plus dans la simulation d'un seul événement, cela engendre une propagation de l'erreur non négligeable à la fin. Plutôt que de recalculer les angles en ajoutant des chiffres après la décimale, nous préférons exprimer nos matrices en termes de fraction exacte. C'est ce que nous présentons à la prochaine sous-section.

#### 4.4.4.3. Convention matrices de rotation.

Nous avons résolu nos deux problèmes énumérés plus haut, soit l'ajout de matrices pour les anti-vallées et la précision numérique des éléments de matrice en revoyant la convention de nos matrices de rotation. Il existe une infinité de matrices qui transforme un vecteur en trois dimensions vers un autre. Voyons comment choisir la bonne matrice.

On commence par écrire une matrice de rotation générale  $T$  qui tourne le vecteur unitaire pointant dans la direction de la vallée  $(v_x, v_y, v_z)$  vers la direction  $(1,0,0)$  ou l'axe des  $k_x$  :

$$T \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_x & v_y & v_z \\ a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.4.8)$$

où  $a, b, c, d, e$  et  $f$  sont des constantes à trouver. On sait que la transposée d'une matrice de rotation est son inverse et que la rotation inverse doit faire l'action inverse, soit d'emmener le vecteur  $(1,0,0)$  vers la direction de la vallée. Bref,

$$T^T \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix}. \quad (4.4.9)$$

On comprend maintenant pourquoi la première ligne de la matrice  $T$  doit être la direction de la vallée soit  $(v_x, v_y, v_z)$ . En fait, chacune des lignes d'une matrice de rotation représente la direction des axes du système de coordonnées après la rotation en presumant que ces axes étaient, avant la rotation, les directions  $(1,0,0)$ ,  $(0,1,0)$  et  $(0,0,1)$ .

Étudions ensuite le fait qu'une matrice de rotation, multipliée par son inverse, redonne l'identité :

$$\begin{aligned} I = T^{-1}T = T^T T &= \begin{pmatrix} v_x & a & d \\ v_y & b & e \\ v_z & c & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x & v_y & v_z \\ a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} v_x^2 + (a^2 + d^2) & v_x v_y + (ab + de) & v_x v_z + (ac + df) \\ v_x v_y + (ab + de) & v_y^2 + (b^2 + e^2) & v_y v_z + (bc + ef) \\ v_x v_z + (ac + df) & v_y v_z + (bc + ef) & v_z^2 + (c^2 + f^2) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.4.10)$$

De cette propriété, nous pouvons dégager les 6 équations suivantes :

$$\begin{aligned} v_x^2 + a^2 + d^2 &= 1 & v_x v_y + (ab + de) &= 0 \\ v_y^2 + b^2 + e^2 &= 1 & v_x v_z + (ac + df) &= 0 \\ v_z^2 + c^2 + f^2 &= 1 & v_y v_z + (bc + ef) &= 0. \end{aligned} \quad (4.4.11)$$

Regardons maintenant la double transformation de Herring-Vogt,  $T_i^T \frac{1}{M} T_i$  :

$$\begin{aligned}
& \begin{pmatrix} v_x & a & d \\ v_y & b & e \\ v_z & c & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{m_L} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_T} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_T} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x & v_y & v_z \\ a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \frac{1}{m_L}v_x^2 + \frac{1}{m_T}(a^2 + d^2) & \frac{1}{m_L}v_xv_y + \frac{1}{m_T}(ab + de) & \frac{1}{m_L}v_xv_z + \frac{1}{m_T}(ac + df) \\ \frac{1}{m_L}v_xv_y + \frac{1}{m_T}(ab + de) & \frac{1}{m_L}v_y^2 + \frac{1}{m_T}(b^2 + e^2) & \frac{1}{m_L}v_yv_z + \frac{1}{m_T}(bc + ef) \\ \frac{1}{m_L}v_xv_z + \frac{1}{m_T}(ac + df) & \frac{1}{m_L}v_yv_z + \frac{1}{m_T}(bc + ef) & \frac{1}{m_L}v_z^2 + \frac{1}{m_T}(c^2 + f^2) \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \frac{1}{m_L}v_x^2 + \frac{1}{m_T}(1 - v_x^2) & \frac{1}{m_L}v_xv_y + \frac{1}{m_T}(-v_xv_y) & \frac{1}{m_L}v_xv_z + \frac{1}{m_T}(-v_xv_z) \\ \frac{1}{m_L}v_xv_y + \frac{1}{m_T}(-v_xv_y) & \frac{1}{m_L}v_y^2 + \frac{1}{m_T}(1 - v_y^2) & \frac{1}{m_L}v_yv_z + \frac{1}{m_T}(-v_yv_z) \\ \frac{1}{m_L}v_xv_z + \frac{1}{m_T}(-v_xv_z) & \frac{1}{m_L}v_yv_z + \frac{1}{m_T}(-v_yv_z) & \frac{1}{m_L}v_z^2 + \frac{1}{m_T}(1 - v_z^2) \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \frac{1}{m_L}v_x^2 + \frac{1}{m_T}(1 - v_x^2) & v_xv_y(\frac{1}{m_L} - \frac{1}{m_T}) & v_xv_z(\frac{1}{m_L} - \frac{1}{m_T}) \\ v_xv_y(\frac{1}{m_L} - \frac{1}{m_T}) & \frac{1}{m_L}v_y^2 + \frac{1}{m_T}(1 - v_y^2) & v_yv_z(\frac{1}{m_L} - \frac{1}{m_T}) \\ v_xv_z(\frac{1}{m_L} - \frac{1}{m_T}) & v_yv_z(\frac{1}{m_L} - \frac{1}{m_T}) & \frac{1}{m_L}v_z^2 + \frac{1}{m_T}(1 - v_z^2) \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{4.4.12}$$

où on a utilisé les équations 4.4.11 pour passer de la deuxième à la troisième ligne. On remarque que la dernière ligne ne dépend que des masses  $m_l$  et  $m_t$ , qui sont des constantes, et des composantes du vecteur unitaire de la direction de la vallée. La transformation ne dépend donc plus des autres constantes  $a, b, c, d, d, e$  ou  $f$ . Cela implique que cette double transformation de Herring-Vogt n'est pas affectée par la matrice de rotation pourvu qu'elle remplisse la condition d'emmener le vecteur unitaire de la direction de la vallée vers (1,0,0). La transformation  $T_i^T \frac{1}{M} T_i$  est utilisée constamment dans notre modélisation, que ce soit dans l'expression de la bande de conduction, du calcul de l'accélération, de la quantité de mouvement, etc. Pour ce qui est des taux de diffusions et de distribution angulaire, les transformations de Herring-Vogt et de son inverse s'«annulent» entre elles pourvu qu'il n'y ait pas de changement de vallées d'impliqué. La physique n'est donc pas affectée, sauf pour les diffusions IV où nous appliquons une transformation inverse de Herring-Vogt d'une vallée différente de la transformation initiale. Heureusement, comme nous avons assumé que ce processus est isotrope en  $\phi$ , le choix de la matrice de rotation n'a pas d'impact là non plus.

Ajoutons que les vallées et les anti-vallées donnent la même transformation et donc que l'accélération due au champ électrique sera dans la même direction. En effet, comme tous les termes de la dernière ligne comprennent une combinaison en paire de  $v_i v_j$  et que, dans le cas d'une anti-vallée, seul un signe moins apparaît devant les  $v_i$  ou  $v_j$ , alors les deux signes moins vont s'annuler à tous les coups.

Comme la convention n'affecte pas le transport des électrons dans les cristaux de Ge et de Si, on choisit une convention simple nous permettant de trouver les matrices de rotations de toutes les vallées à partir des composantes  $v_x, v_y$  et  $v_z$  et donc sans arrondissement. Prenons

que l'axe  $y$ , après rotation, soit dans le plan  $XY$ , c'est-à-dire que  $c = 0$ . Demandons aussi que l'axe des  $z$ , après rotation, pointe vers les  $z$  positifs, soit  $f > 0$ . On veut également que les trois axes, après rotation, soient encore unitaires :

$$v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 = 1 \quad a^2 + b^2 = 1 \quad d^2 + e^2 + f^2 = 1. \quad (4.4.13)$$

et qu'ils soient orthogonaux entre eux :

$$ad + be = 0 \quad av_x + bv_y = 0 \quad dv_x + ev_y + fv_z = 0. \quad (4.4.14)$$

Finalement, on requiert un système de type main-droite :

$$(v_x, v_y, v_z) \times (a, b, 0) = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ v_x & v_y & v_z \\ a & b & 0 \end{vmatrix} = \begin{pmatrix} d \\ e \\ f \end{pmatrix}. \quad (4.4.15)$$

ou encore :

$$d = v_z b \quad e = v_z a \quad f = v_x b - v_y a. \quad (4.4.16)$$

En présumant, bien sûr que les  $v_x$ ,  $v_y$  et  $v_z$  ne sont pas 0. Nous verrons ce cas particulier dans un instant. Pour le moment, considérons qu'aucune des composantes  $v_i$  n'est nulle. On peut calculer, en combinant les équations plus hautes, la valeur de  $f$ .

$$\begin{aligned} f^2 &= 1 - d^2 - e^2 \\ f^2 &= 1 - v_z^2(b^2 + a^2) \\ f &= \sqrt{1 - v_z^2}. \end{aligned} \quad (4.4.17)$$

où on garde seulement la racine positive, car on veut que  $f > 0$ . On peut ensuite calculer  $b$  à partir de  $f$  et des autres équations plus haut :

$$\begin{aligned}
f &= v_x b - v_y a \\
f &= v_x b + v_y \frac{b v_y}{v_x} \\
f &= b \left( v_x + \frac{v_y^2}{v_x} \right) \\
f &= b \frac{1}{v_x} (v_x^2 + v_y^2) \\
\frac{f v_x}{(v_x^2 + v_y^2)} &= b \\
\frac{f v_x}{(1 - v_z^2)} &= b \\
\frac{f v_x}{f^2} &= b \\
\frac{v_x}{f} &= b.
\end{aligned} \tag{4.4.18}$$

Finalement, on peut calculer  $a$  :

$$\begin{aligned}
a &= - \frac{b v_y}{v_x} \\
a &= - \frac{v_x v_y}{f v_x} \\
a &= - \frac{v_y}{f}.
\end{aligned} \tag{4.4.19}$$

Les constantes  $d$  et  $e$  sont tout simplement calculées à partir des équations 4.4.16 maintenant que l'on connaît  $a$ ,  $b$  et  $f$ .

Regardons maintenant le cas où certaines des composantes de  $v$  sont nulles. Comme le vecteur  $v$  ne peut être nul, il faut absolument qu'au moins une des composantes soit différente de 0.

- Si  $v_z=0$ , les équations plus hautes sont encore valides.  $d$  et  $e$  sont nuls et  $f = 1$ . Pour les autres constantes,  $a = -v_y$  et  $b = v_x$ , peu importe si  $v_x$  ou  $v_y$  est égal à 0.
- Si  $v_x=0$  et que  $v_y$  est non nul, la formule pour  $f$  tient encore et se simplifie même en  $f = v_y$ . On se retrouve avec  $a = \frac{-f}{v_y}$  ou encore  $-1$  si c'est une vallée et  $+1$  si c'est une anti-vallée. On doit aussi avoir  $b = 0$
- Si  $v_y=0$  et que  $v_x$  est non nul, la démarche est similaire. On se retrouve avec  $f = v_x$ ,  $b = \frac{f}{v_x}$  et  $a = 0$ .
- Si  $v_x$  et  $v_y$  sont égaux à 0, alors la convention de départ  $f > 0$  ne tient plus, car  $f = 0$  et on ajuste manuellement les valeurs pour retrouver une matrice de rotation de 90 degrés autour de l'axe  $y$  ce qui donne :  $f = 0$ ,  $b = 1$ ,  $d = -v_z b$  et le reste vaut 0. On

choisit ces valeurs, car ce cas correspond à une vallée avec une direction purement en  $\pm z$ . La rotation la plus facile pour apporter ce vecteur vers  $(1,0,0)$  est au moyen de la rotation décrite plus tôt dans ce paragraphe.

Cette convention n'est pas anodine, car elle permet de retrouver les matrices de rotation du Ge, non arrondis, utilisées auparavant par SuperCDMS. Elles ont aussi l'avantage, pour le Si, de correspondre aux matrices de rotation de 90 degrés autour des trois axes et dans les deux sens possibles.

Glissons finalement un dernier mot sur le fait que notre nouvel algorithme de diffusions redonne souvent des  $\mathbf{k}'$  qui pointent dans la direction de la vallée ou de l'anti-vallée finale. Considérons la transformation inverse pour sortir  $\mathbf{k}^*$  du référentiel de Herring-Vogt :

$$\begin{pmatrix} k'_x \\ k'_y \\ k'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_x & a & d \\ v_y & b & e \\ v_z & 0 & f \end{pmatrix} \sqrt{M} \begin{pmatrix} k_x^{*'} \\ k_y^{*'} \\ k_z^{*'} \end{pmatrix}. \quad (4.4.20)$$

Pour le Ge, on a donc :

$$\begin{pmatrix} k'_x \\ k'_y \\ k'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_x \sqrt{m_l} k_x^{*'} - \frac{v_y}{\sqrt{1-v_z^2}} \sqrt{m_t} k_y^{*'} - \frac{v_z v_x}{\sqrt{1-v_z^2}} \sqrt{m_t} k_z^{*'} \\ v_y \sqrt{m_l} k_x^{*'} - \frac{v_x}{\sqrt{1-v_z^2}} \sqrt{m_t} k_y^{*'} - \frac{v_z v_y}{\sqrt{1-v_z^2}} \sqrt{m_t} k_z^{*'} \\ v_z \sqrt{m_l} k_x^{*'} - \sqrt{1-v_z^2} \sqrt{m_t} k_z^{*'} \end{pmatrix} \approx \sqrt{m_l} k_x^{*'} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix}. \quad (4.4.21)$$

où on peut utiliser le  $\approx$  car  $\sqrt{m_l} \gg \sqrt{m_t}$ , pourvu que  $k_x^{*'}$  ne soit pas proche de zéro ou beaucoup plus petit que  $k_y^{*'}$  et  $k_z^{*'}$ . Si  $k_x^{*'}$  est positif, alors  $k'_x$  aussi et l'électron pointe vers sa nouvelle vallée finale. Alors que si  $k_x^{*'}$  négatif, la position finale sera dans l'anti-vallée.

Pour le Si, prenons la vallée 1 comme exemple :

$$\begin{pmatrix} k'_x \\ k'_y \\ k'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \sqrt{M} \begin{pmatrix} k_x^{*'} \\ k_y^{*'} \\ k_z^{*'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sqrt{m_t} k_y^{*'} \\ \sqrt{m_l} k_x^{*'} \\ \sqrt{m_t} k_z^{*'} \end{pmatrix} \approx \sqrt{m_l} k_x^{*'} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.4.22)$$

et avec les mêmes suppositions que pour le germanium, on arrive aux mêmes résultats. Ça serait pareil pour la vallée 0 et 2 du Si.

## 4.5. Comparaison avec les données expérimentales

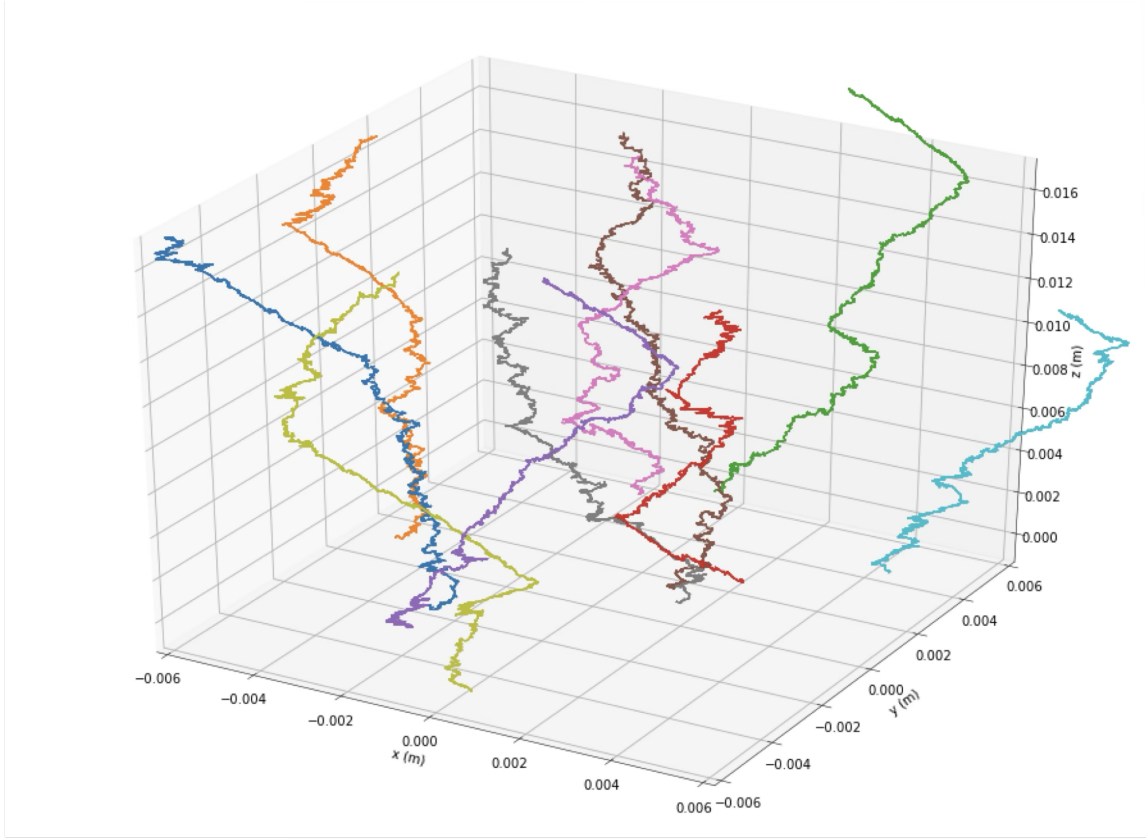
Après tous ces changements, il est important de vérifier que ceux-ci ont bel et bien amélioré la modélisation du transport des porteurs de charge. On peut s'en assurer en comparant les données de la simulation à de véritables données expérimentales. Nous sommes

toutefois limités dans le nombre de comparaisons que nous pouvons faire. Les détecteurs de SuperCDMS ne détectent que l'énergie totale des phonons sous la forme d'un signal électrique avec une certaine amplitude. Ces détecteurs ne mesurent pas la trajectoire des charges. En fait, la simulation est une de nos seules manières de reconstruire le parcours des charges à travers nos substrats. Il existe cependant trois critères que nous pouvons vérifier : la conservation de l'énergie, la vitesse de dérive des charges et la position finale des charges aux surfaces du cristal. Nous traiterons ces trois cas dans cet ordre dans les paragraphes qui suivent. Mais avant, regardons la trajectoire de 10 électrons créés au centre d'un cristal de Ge(100) avec une énergie d'environ 1,5 eV à la figure 4.11. Le champ électrique est en  $-z$  et les électrons se déplacent vers le haut en  $+z$  avec un certain angle. Ce graphique inclut les améliorations discutées dans les sections précédentes et permet de nous donner une idée de ce à quoi ressemble la trajectoire des charges. On y voit notamment l'accélération oblique et le changement de vallées lorsque l'accélération change brusquement de direction. Les phonons acoustiques contribuent aux légères déviations le long de la ligne d'accélération. À noter également que plusieurs des paramètres, tels que les potentiels de déformation et l'énergie des phonons IV n'ont pas encore été ajustés pour cette section, d'où la disparité entre certaines des valeurs expérimentales et la simulation.

#### 4.5.1. Conservation de l'énergie

Au chapitre 2, nous nous étions assuré que la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement était respectée lors des processus de diffusions des charges. Cela se traduisait dans l'intérieur de la fonction delta dirac lors du calcul des taux de diffusion. On veut s'assurer que la modélisation aussi respecte la conservation de l'énergie, dans la mesure du possible.

Ainsi, même avant tous les changements proposés dans ce chapitre-ci, l'énergie totale des phonons rapportée par G4CMP ( $\sum E_{phonon}$ ) lors d'un événement était en accord avec celle attendue  $E_{expected}$  jusqu'à 0,01% pour des voltages non nuls. L'énergie totale des phonons inclut les phonons NTL de même que les phonons immédiats lors de la collision initiale ainsi que ceux émis si une recombinaison a lieu à la surface. Malgré toutes les approximations imbriquées dans notre modélisation, il est possible d'avoir une aussi bonne conservation de l'énergie, car la simulation emploie des équations cohérentes entre elles. On entend par là que, même si les relations de dispersions sont approximatives, que ce soit pour les phonons ou la structure de bande, cela affecte l'énergie des phonons individuels, mais pas l'énergie totale des phonons émis. En effet, la charge finit par irradier son énergie cinétique restante à la surface.



**Fig. 4.11.** Modélisation de la trajectoire de 10 électrons dans G4CMP. Les électrons furent créés au centre d'un cristal de Ge(100) avec une énergie cinétique de 1,5 eV. Le champ électrique pointe vers  $-z$ .

Afin de vérifier que tous ces nouveaux changements préservent encore la conservation de l'énergie dans notre simulation, nous modélisons 200 événements avec les mêmes conditions initiales et comparons l'énergie attendue à celle que rapporte G4CMP. Nous utilisons les valeurs de  $\alpha$  de la littérature, soit  $\alpha = 0,65 \text{ eV}^{-1}$  pour la bande  $L$  du germanium [66] et  $\alpha = 0,5 \text{ eV}^{-1}$  pour la bande  $X$  du silicium. Dans un premier temps, nous déposons 3,9 eV d'énergie au centre du cristal sous forme d'un recul électronique (pas de phonons immédiats). Nous appliquons une différence de potentiel allant de 0 à 4 V. On ne considère pas le facteur de Fano, de sorte qu'une seule paire électron-trou est créée pour ce dépôt. De plus, on exclue les processus : trappes de charges et ionisation d'impact, car il est difficile de connaître l'énergie attendue lorsque l'électron ou le trou arrête subitement sa trajectoire ou excite une nouvelle charge en plein vol. Le nombre de phonons NTL n'est alors plus donné par  $n_{eh} \cdot e \cdot V$ . En déposant 3,9 eV, l'énergie cinétique initiale de chaque porteur de charge est donc de 1,38 eV pour le Si et de 1,58 eV pour le Ge. Dans cette situation, l'énergie attendue est :

$$E_{expected} = E_R + n_e h \cdot e \cdot V = \begin{cases} 3,9 \text{ eV}, & V = 0, \\ 7,9 \text{ eV}, & V = 4V \end{cases} \quad (4.5.1)$$

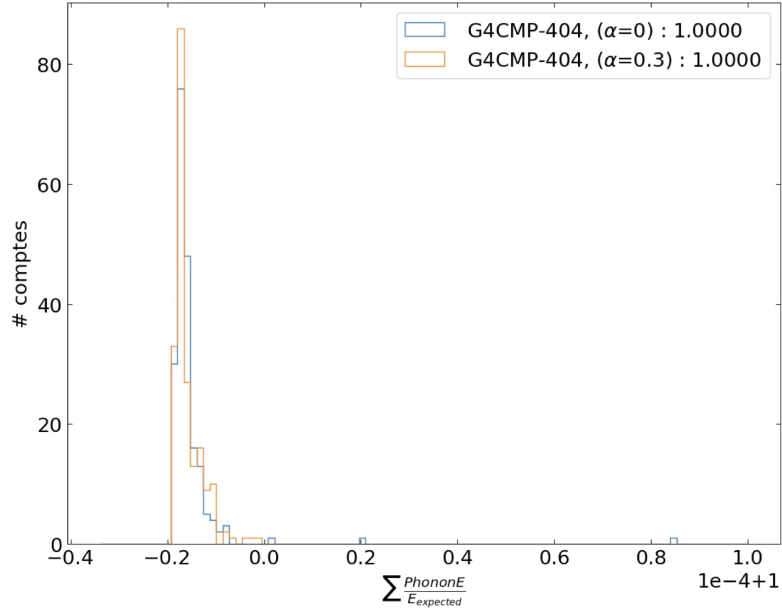
On met en graphique l'énergie rapportée par G4CMP pour le Ge, divisée par celle attendue pour ces 200 événements à la sous-figure 4.12a et à la sous-figure 4.12b pour le silicium. Nous avons également inclus le cas où  $\alpha = 0$  à titre de comparaison avec la cinématique parabolique. De même, pour le silicium, nous avons inclus l'ancien modèle IV, celui semi-empirique, pour montrer que la conservation de l'énergie reste au même niveau de précision après tous ces changements.

### 4.5.2. Vitesse de dérive

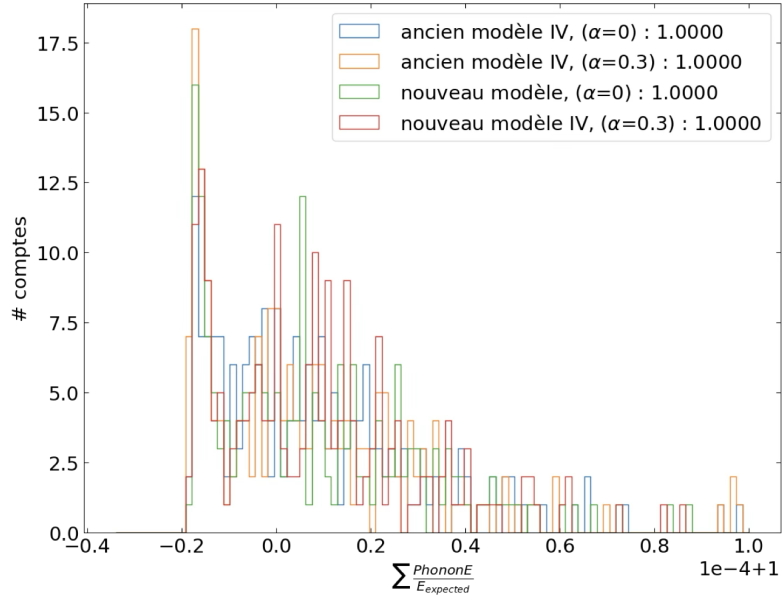
Dans un deuxième temps, nous pouvons regarder si notre outil de simulation reproduit la vitesse de dérive des électrons et des trous dans le Ge et le Si. La figure 4.13 illustre la vitesse de dérive en fonction du champ électrique pour le Ge seulement, pour les électrons et les trous.

Les données expérimentales proviennent de [105]. Les valeurs de la simulation sont prises en modélisant la trajectoire de 48 électrons dans un cristal de Ge. Ces charges sont générées avec une énergie initiale de  $1 \times 10^{-5}$  eV et allant dans une direction aléatoire. On répète pour différents champs allant de 0,5 V/cm à 5 V/cm et purement en  $-z$ . L'énergie de départ n'a que très peu d'effet sur les résultats aux voltages qui nous intéressent, pourvu qu'elle soit de moins que quelques eV. On calcule ensuite la vitesse de dérive moyenne des 48 électrons en divisant la distance parcourue en  $z$  seulement par le temps que cela a pris.

On remarque un accord approximatif entre les courbes expérimentales et de la simulation, autant pour les électrons que pour les trous. L'écart est d'environ quelques km/s selon le champ électrique pour les électrons alors que l'accord est vraiment meilleur pour la courbe des trous. Toutefois, cela n'est pas inquiétant, car nous n'avons pas encore ajusté nos différents paramètres (potentiel de déformation, masses, etc.). Nous envisageons de procéder à cette opération sous peu, en affinant ces constantes pour que notre modélisation reproduise adéquatement la vitesse de dérive, ainsi que la position finale des charges aux surfaces de nos détecteurs (voir section 4.5.3). Toutefois, cela dépasse le cadre de ce travail. À titre d'exemple, une légère modification du potentiel de déformation acoustique de quelques eV entraîne une variation de la vitesse de dérive de plusieurs km/s à des champs électrique plus faibles que 5 V/cm. Ceci n'est que pour un seul paramètre. Nous sommes donc sûrs que l'ajustement de tous ces paramètres nous permettra un meilleur accord avec les données expérimentales de la vitesse de dérive.



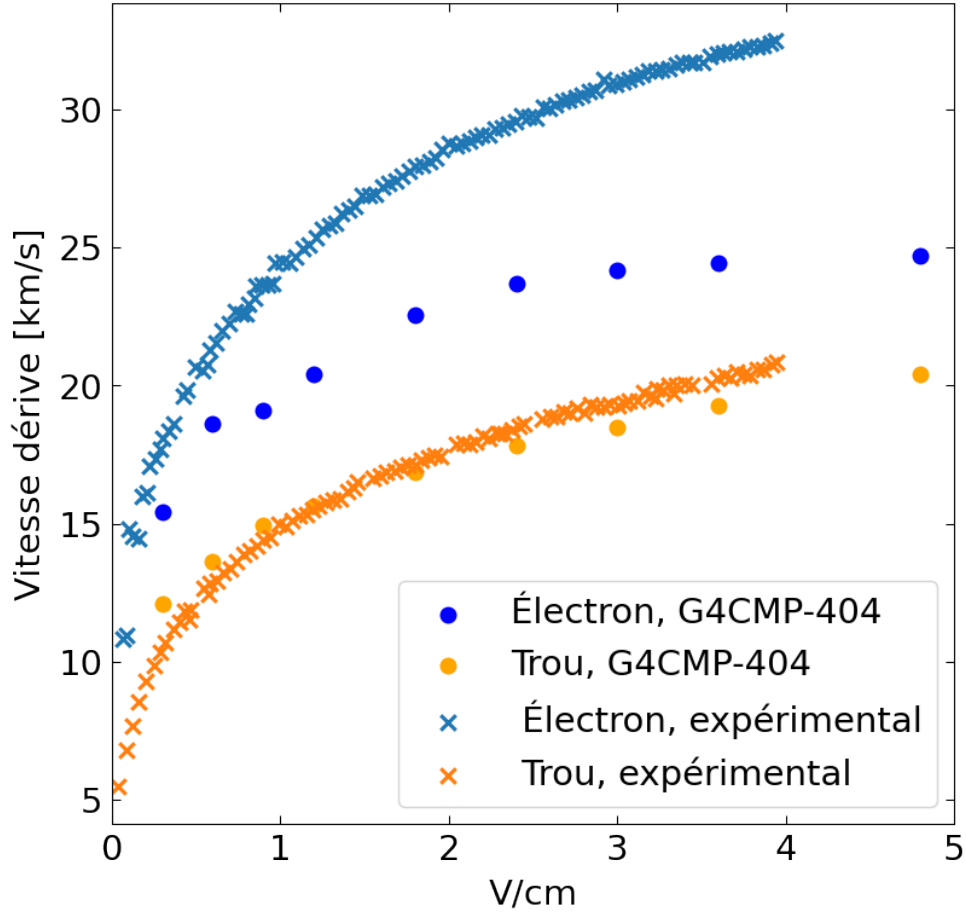
(a) Pour le Ge.



(b) Pour le Si.

**Fig. 4.12.** Histogramme de l'énergie totale des phonons de 200 paires électrons-trous créées par un dépôt initial de 3,9 eV dans le centre du cristal dans G4CMP-404. On normalise par l'énergie attendue. Le pic représente le décalage par rapport à 1 soit un écart de 0,01% entre la simulation et la valeur attendue.

À noter que la dernière fois que G4CMP a vérifié de manière officielle la concordance entre la vitesse de dérive date de plusieurs années [21]. À l'époque, un choix (aujourd'hui



**Fig. 4.13.** Comparaison de la vitesse de dérive en fonction du champ électrique des électrons et des trous dans le Ge. Les croix représentent les données expérimentales tirées de [105] alors que les points représentent la simulation (modèle amélioré).

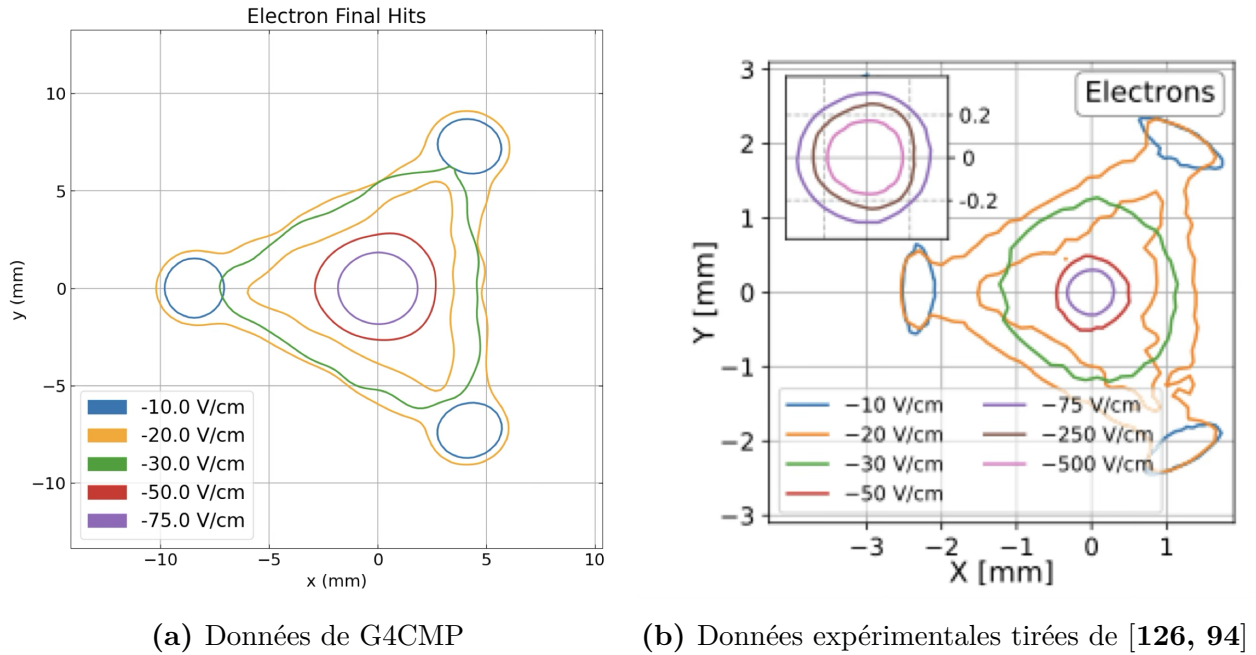
désuet) de la constante de déformation de potentiel acoustique nous avait permis d'avoir un excellent accord avec la vitesse de dérive des électrons et des trous dans le Ge.

#### 4.5.3. Positions finales des électrons à la surface du détecteur

Une troisième vérification que nous pouvons faire de notre modélisation pour s'assurer qu'elle s'accorde aux données expérimentales est de regarder la position des charges lorsqu'elles arrivent à la surface du cristal/détecteur. Prenons en exemple des paires électrons-trous créées au centre d'un substrat de Si ou de Ge et un champ électrique en  $-z$ . Les électrons seront accélérés en  $+z$  avec une certaine obliquité (voir figure 4.11) qui dépend de l'orientation du cristal. Les trous sont plutôt accélérés vers le bas en  $-z$  généralement en ligne droite à cause de la bande de valence sphérique. On s'intéresse à la position de ces charges une fois qu'elles atteignent le dessus du cristal pour les électrons et le dessous pour les trous.

On observe un motif aux surfaces qui dépend du champ électrique, du type de charge et du cristal.

Il est impossible, avec les détecteurs actuels de SuperCDMS, de mesurer cette densité de charges aux extrémités du cristal, car ceux-ci ne mesurent que le signal des phonons. Néanmoins, un sous-groupe de SuperCDMS a mesuré la densité de charge à la surface d'un cristal ultrapur de Ge [93] et de Si [126, 94] à l'aide d'électrodes. Les cristaux mesuraient 1cm x 1cm x 4 mm et étaient opérés à des températures de 500 mK ou 5 K et soumis à des champs électriques allant d'environ 1 V/cm à 500 V/cm. À l'aide d'un miroir MEMS, un laser de 650 nm était concentré sur une des surfaces du cristal. Des paires électrons-trous étaient alors créées et accélérées vers l'autre extrémité du substrat. Sur l'autre face non illuminée étaient branchées les électrodes pour collecter les charges ayant traversé le cristal d'un bout à l'autre. La figure 4.14 compare ces résultats expérimentaux à ceux de la simulation (seulement pour les électrons) dans le Si(111). Les contours représentent une densité de 50% des charges électriques.



**Fig. 4.14.** Densité des électrons à la surface du cristal de Si(111) pour différents champs électriques en  $-z$ . Les contours englobent 50% des charges électriques. Le cristal utilisé dans G4CMP mesure 1,67 cm de hauteur contre 4mm de hauteur pour celui de la figure de droite.

On remarque premièrement une différence quant à la position finale en X-Y des charges. Cette différence s'explique par la différence d'épaisseur des cristaux. La figure de gauche

utilise un cristal de Si de 1,67 cm de haut, car c'est la géométrie du détecteur iZip7 de SuperCDMS. Celle de droite utilise un cristal d'une hauteur de 4 mm.

Deuxièmement, la simulation ne reproduit que grossièrement le motif des données expérimentales. Les 3 régions au sommet du triangle dû aux 3 directions d'accélération possible sont présentes à -10 V/cm. À -15 V/cm, on observe les événements le long des arêtes du triangle dû aux diffusions IV. À des champs électriques plus élevés, le nombre de diffusions IV augmente encore plus et l'accélération concentre les charges dans une région circulaire au centre du cristal. Cela est vrai autant dans la simulation que dans les données expérimentales.

Encore une fois, il y a place à une grande amélioration en ajustant nos diverses paramètres. Il s'agit de la prochaine étape de ce grand projet d'amélioration du transport des porteurs de charge.

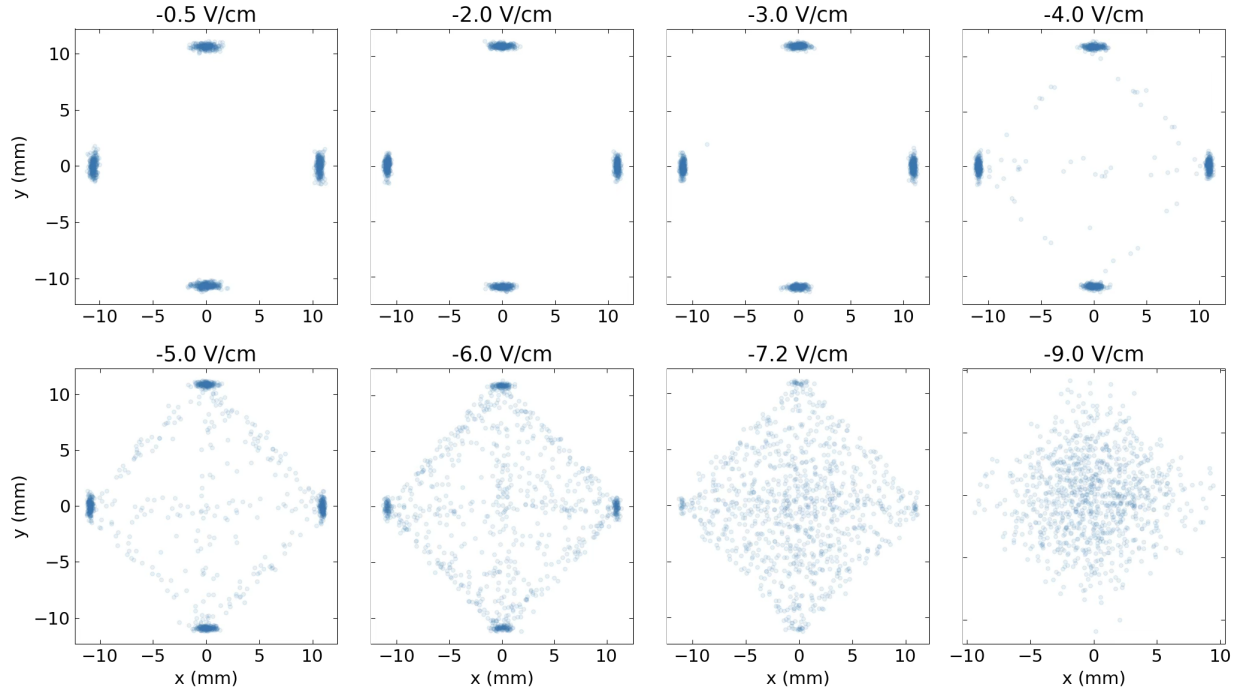
La figure 4.15 montre quant à elle la position finale des électrons dans le Ge(100). La figure du haut montre les données expérimentales de la densité de charge à la surface alors que celle du bas montre les données de la modélisation. Encore une fois, il y a une forte différence quant à la taille en XY du motif entre la simulation et les données expérimentales en raison de la hauteur du cristal de Ge.

Également, la modélisation reproduit grossièrement le motif expérimental de la densité de charge en fonction du champ électrique. On observe un *pattern* similaire dans les deux cas, mais ceux de G4CMP se produisent à un voltage plus élevé. En effet, à 5 V/cm, le graphique du haut rapporte une seule région circulaire au centre du cristal, alors que, dans celle du bas, on distingue encore les 4 régions plus denses dues à l'accélération dans ces 4 directions. Toujours à 5 V/cm, on remarque aussi plusieurs événements entre ces 4 régions dues aux diffusions IV dans la simulation. Ce n'est qu'à partir de 9 V/cm seulement, soit presque le double du champ électrique des données expérimentales, que le motif de la simulation est similaire à celui expérimental.

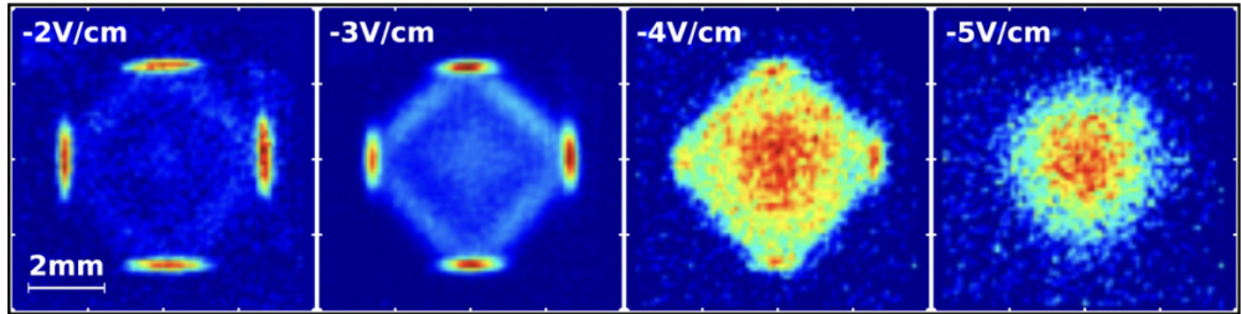
L'ancien modèle de G4CMP reproduisait également, de manière approximative, la densité de charges aux surfaces, mais était trop incomplet. Il manquait notamment l'émission de phonons, un taux qui dépend de l'énergie de l'électron et un seuil d'émission. Avec l'ajout de ces caractéristiques, la diffusion IV devient un mécanisme d'arrêt des électrons fort efficace. Cela a un impact considérable sur la vitesse de dérive et de la position des charges aux surfaces. L'ancien modèle n'aurait donc pas pu reproduire en même temps ces deux quantités expérimentales. La thèse de Langroudy [77], récemment parue, contient des graphiques de la position des charges aux surfaces en fonction du voltage, et ce, pour l'ancien modèle. La thèse contient également une bonne discussion sur l'importance d'ajouter un nouveau modèle

de diffusion IV, entre autre, pour mieux reproduire les données expérimentales de densité de charge avec G4CMP.

Nous n'avons pas inclus la densité des trous aux surfaces dans notre analyse ici, mais leur patron de densité est tout simplement un cercle, peu importe le voltage. Le rayon du cercle rétrécit au fur et à mesure que le champ électrique augmente.



(a) Données de G4CMP



(b) Données expérimentales tirées de [93]

**Fig. 4.15.** Densité des électrons à la surface du cristal du Ge(100) pour différents champs électriques en  $-z$ . Le cristal utilisé dans G4CMP mesure 1,67 cm de hauteur contre 4mm de hauteur pour celui de la figure de droite.

## 4.6. Limites du modèle et autres améliorations possibles

Malgré une amélioration substantielle du transport des porteurs de charge dans le Ge et le Si de G4CMP, il reste encore plusieurs tâches à accomplir si on veut modéliser le plus exactement possible la microphysique de nos détecteurs. Nous commencerons par discuter des limites de notre approche. Puis, nous étayerons dans cette dernière section des suggestions pour peaufiner davantage notre outil de simulation.

### 4.6.1. Limites du modèle

Les trois principales limites de notre modélisation par méthode de MC sont : les approximations analytiques (e.g. de la structure de bande), le nombre et la complexité des processus physiques inclus et les conditions de l'approche semi-classique.

Parmi nos approximations analytiques, nous avons principalement la structure de bande, la masse angulaire  $m_q \approx m_d$  et les tenseurs des potentiels de déformation qu'on a remplacés par une constante. Il est possible de retourner à nos équations et de les redériver en gardant la forme exacte ou presque exact de ces quantités physiques. Cela demande un certain coût en temps, autant pour redériver tous les équations trouver le moyen de les implémenter dans G4CMP que dans l'exécution de la simulation en elle-même. Nous pensons que notre approche, qui suit de près les autres méthodes par MC de la littérature, est un équilibre entre exactitude et rapidité. Au travers de ce travail, nous avons fait une priorité de bien documenter chaque fois qu'une approximation ou une estimation était faite. Ainsi, si nous voulons revoir dans le futur ces approximations et les corriger avec une approche plus complète, il nous sera facile de le faire. Par exemple, on pourrait vouloir inclure toutes les composantes du tenseur du potentiel de déformation.

Le deuxième problème de notre outil de modélisation est le nombre limité de processus qu'il inclut et la complexité de leur implémentation. Au terme de ce travail, nous avons nettement amélioré la façon dont certains processus sont mis en œuvre, notamment les diffusions  $\sim IV$  et acoustique intravallées. Il reste toutefois encore plusieurs processus physiques qui ne sont pas présents ou qui sont trop simplement modélisés dans G4CMP. Nous allons maintenant énumérer les points à améliorer et expliquer comment y parvenir dans les prochaines sous-sections.

La troisième limite de G4CMP concerne les conditions dans lesquelles l'approche semi-classique s'applique. Nous avons mis une limite inférieure approximative d'environ  $10^{-15}$ s au temps entre les diffusions. Cela garantit que les champs électromagnétiques varient sur une longueur plus grande que l'étalement des paquets d'ondes des électrons de Bloch. Nous approchons de cette limite lorsque le champ électrique est de plusieurs dizaines de V/cm soit proche du maximum auquel nous opérons nos détecteurs. À ces voltages, les électrons

acquièrent une énergie de quelques eV et, à ces énergies, les taux de diffusions (acoustiques, IV, etc.) sont environ de  $10^{15}$  Hz. Néanmoins, nous ne sommes pas trop inquiets, car plusieurs modélisations par MC du transport des charges ont montré que, même à des champs électriques encore plus grands, leur simulation reproduisait les données expérimentales de la vitesse de dérive du Si et du Ge [12, 66].

### 4.6.2. Ajustement des paramètres

En améliorant la modélisation du transport des porteurs de charge, nous avons ignoré temporairement le choix de certains paramètres, tels que le potentiel de déformation et l'énergie des phonons IV. Nous avons gardé les valeurs déjà présentes dans G4CMP ou avons ajouté de nouvelles valeurs en nous basant sur celle de la littérature sans plus d'attention. Comme nous avons vu dans ce chapitre, il y a place à beaucoup d'optimisation de ces paramètres pour s'assurer que notre modélisation reproduise mieux certaines observations expérimentales. Cela dépasse toutefois le cadre de ce travail. Il faudrait optimiser plus de 10 paramètres en même temps si on compte de tous les potentiels de déformation et des énergies de phonons. Nous avons néanmoins montré que nous obtenions grossièrement les résultats attendus. Une telle vérification n'a pas été faite depuis quelques années [21, 69] et mériterait qu'on la refasse plus régulièrement. Une optimisation de cette envergure n'a jamais été réalisée dans G4CMP et mériterait aussi qu'on la refasse chaque fois qu'on ajoute des processus en plus ou qu'on modifie grandement l'un des processus déjà existants.

### 4.6.3. Phonons optiques intravallées

La diffusion de phonons optiques intravallées n'est pas incluse dans G4CMP. Premièrement, car les phonons optiques ne sont pas inclus dans G4CMP (leur transport et processus physiques), mais aussi parce que ce processus est fortement supprimé dans le Si, car il est seulement accessible à l'ordre 1. Pour le Ge, ce processus peut tout de même devenir important, surtout lorsque la charge dépasse l'énergie de seuil de ce processus. Il serait donc judicieux d'ajouter ce mécanisme à G4CMP. En attendant l'ajout des phonons optiques dans notre outil de simulation, on peut contourner ce problème en émettant des phonons acoustiques avec la même énergie que les phonons optiques. On mise sur le fait que les phonons optiques vont rapidement se désintégrer en 2 phonons acoustiques de toute manière (quelques ps [113]).

La démarche est très similaire à celle pour les diffusions intervallées, à la différence que l'électron ou le trou ne change pas de vallées à la fin du processus. On peut donc réutiliser la même méthode de sélection de l'état final, mais en omettant l'étape de l'attribution de la nouvelle vallée. On s'assure ainsi, en revenant du référentiel du cristal, d'avoir des phonons

avec une faible quantité de mouvement, mais une énergie de quelques dizaines de meV. L'implémentation de ce mécanisme de diffusion à la simulation est prévue pour bientôt.

#### 4.6.4. Diffusion avec des impuretés

Les collisions avec les impuretés étaient «incluses» de manière indirecte dans l'ancien modèle de diffusions intervallées. Ce dernier, comme nous l'avons déjà décrit, consistait en des collisions élastiques, suivi d'un changement abrupt de la direction du mouvement de la charge. En remodelant au complet les diffusions IV dans notre outil de simulation, nous avons également retiré indirectement les collisions avec les impuretés de notre modélisation. Il serait judicieux de réintégrer ce processus, mais de manière séparée et avec son propre taux de diffusions tel que dérivé au chapitre 2. Ce processus n'est important qu'à de faible énergie où les autres mécanismes de diffusions sont aussi beaucoup moins probables. Il permet une certaine randomisation de la trajectoire des charges en changeant non seulement leur direction de propagation, mais leurs vallées si l'angle d'impact assez grand. Une nouvelle vallée engendre une direction d'accélération différente, ce qui contribue davantage à la randomisation de la trajectoire des charges. Le nouveau modèle de diffusions IV accomplit cela, mais seulement si la charge a assez d'énergie, alors que les collisions avec les impuretés surviennent surtout à des énergies sous le seuil d'émissions de phonons IV. Il y a donc un angle mort dans les processus à très faibles énergies qu'il faut combler en ajoutant ce processus de manière séparée.

Intuitivement, cela ne devrait pas être trop complexe. On connaît déjà le taux de diffusion. Je propose de sélectionner l'état final en générant un angle aléatoire de diffusion parmi la distribution angulaire. On tourne ensuite la quantité de mouvement  $\mathbf{k}$  de la valeur de cet angle.

#### 4.6.5. Surfaces

Notre modélisation actuelle du transport des porteurs de charge n'inclut que très peu de physique des surfaces. Seul le processus de recombinaison fait partie de nos mécanismes de diffusions possibles aux interfaces et il se décline de manière assez simple. La charge, lorsqu'elle arrive à une surface, irradie instantanément toute son énergie cinétique sous forme de phonons avec fréquence de Debye. Elle est ensuite éliminée de la simulation et émet la moitié de l'énergie du gap sous forme de phonons avec fréquence de Debye.

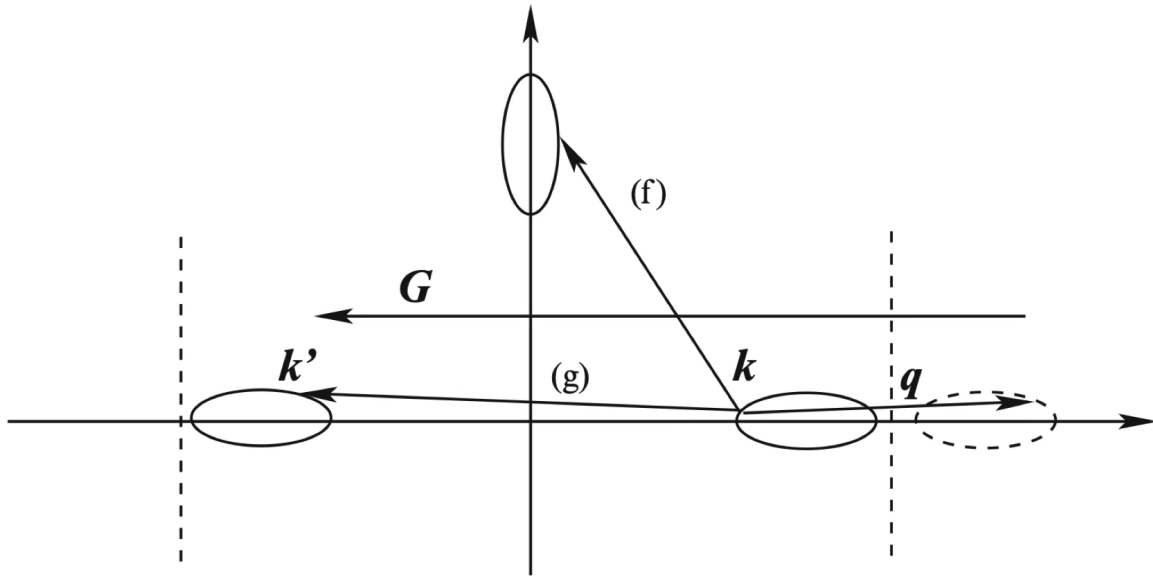
Les développeurs de G4CMP travaillent présentement sur l'ajout d'un certain délai entre l'arrivée à la surface de la charge et sa recombinaison. D'autant plus, qu'à nos températures cryogéniques, ce temps peut être long, car la charge prise dans une trappe aux surfaces n'est

pas réémise thermiquement rapidement dans le cristal et que la population de charge de signe opposée est faible.

Nous envisageons également l'ajout de réflexion de la charge électrique aux surfaces. Le type (diffuse ou spéculaire) dépendrait de l'interface (polie ou non) et de l'énergie du porteur de charge. Cela pourrait mener d'ailleurs à l'émission de phonons de surface.

#### 4.6.6. Processus Umklapp

Notons aussi l'ajout de processus Umklapp. Comme nous opérons à faible température, faible dépôt initial d'énergie et faible champ électrique, les charges n'ont généralement pas assez de quantité de mouvement pour sortir de la première zone de Brillouin ou encore pour émettre des phonons avec une valeur de  $q$  de l'ordre de  $\pi/a$ . Nous devrions toutefois retrouver plusieurs processus Umklapp dans la diffusion IV du Si, où les vallées sont proches des limites de la zone de Brillouin. Il est alors plus facile pour l'électron d'utiliser un processus Umklapp pour se rendre dans son anti-vallée, comme le montre la figure 4.16. Bref, nous considérons fortement l'ajout de processus Umklapp dans les prochaines années.



**Fig. 4.16.** Diffusion IV dans le Si pour un processus de type g (normal) et de type f (Umklapp). Tiré de [63]

#### 4.6.7. Ajout d'autres vallées

En date de la rédaction de cette thèse, G4CMP n'inclut que les bandes  $X$  pour les électrons du Si et les bandes  $L$  pour les électrons du Ge. Dans les conditions auxquelles opère SuperCDMS (température cryogénique, faible dépôt d'énergie initiale et faible champ électrique), la plupart des électrons de conduction ne peuplent presque exclusivement la première bande de conduction. Les minimums des autres bandes sont relativement éloignés, surtout pour le Si (environ 1 eV d'écart). Les électrons dans SuperCDMS ont donc rarement assez d'énergie cinétique pour transitionner vers une bande de conduction supérieure. On le remarque notamment dans la position finale des électrons aux surfaces de nos cristaux (voir figure 4.15 et 4.15) où seules 4 régions plus denses sont présentes dans le Ge (100) et 3 dans le Si (111) à bas voltage. Ces régions viennent des 4 ou 3 directions d'accélération possibles pour les différentes vallées  $L$  ou  $X$ . Si une population importante d'électrons était dans les bandes de conduction supérieures, elles seraient accélérées dans d'autres directions et on observerait des régions avec une forte concentration de charges autres que les 3 ou 4 visibles. De plus, les autres taux de diffusions deviennent très grands lorsque les électrons atteignent une énergie suffisamment grande pour transitionner vers une bande supérieure de sorte que ce type de diffusions IV est peu fréquent.

À haut voltage, il est difficile de distinguer les différentes régions, car l'accélération concentre les électrons dans un cercle au centre du cristal, peu importe la vallée. On peut toutefois supposer qu'il y a une partie maintenant non négligeable des électrons dans les bandes supérieures. Leur inclusion dans la simulation nous permettrait donc de mieux reproduire le parcours des électrons à haut voltage, car ces bandes supérieures ont des paramètres (masses, potentiel de déformation, etc.) différents de la première bande de conduction.

Pour les trous, nous ne mathématisons qu'une seule bande de valence, sphérique : la bande *heavy hole* avec une seule masse effective scalaire. L'ajout des deux autres bandes de valences à  $\Gamma$ , surtout l'autre bande dégénérée *light hole*, est une priorité pour nous. Par le fait même, nous en profiterions pour mathématiser le caractère fortement anisotrope de ces 3 bandes dans G4CMP. Avec l'ajout de ces autres vallées, les transitions interbandes seraient possibles pour les trous.

#### 4.6.8. Relation de dispersion des phonons

La relation de dispersion des phonons relie la quantité de mouvement d'un phonon à son énergie. Dans G4CMP, il existe une table de valeur expérimentale pour le Si et le Ge pour les phonons acoustiques qui nous permet d'associer rapidement par interpolation chaque valeur de  $\mathbf{q}$  à une énergie.

Nous voulons plutôt parler des relations de dispersions de phonons que nous avons utilisées au chapitre 2 pour nos calculs de taux de diffusions. Pour les phonons acoustiques, nous avons utilisé une équation purement linéaire  $E_{\text{phonon}} = u\hbar q$  et pour les phonons optiques et IV, une relation purement constante  $E_{\text{phonon}} = \hbar\omega_0$ . Dans les faits, les relations de dispersion sont un peu plus complexes. Nous proposons de les décrire par une formule quadratique, inspiré de Pop [108] :

$$\omega = \omega_0 + uq + cq^2. \quad (4.6.1)$$

Avec les paramètres pour le Si, par exemple, donnés par :

**Tableau 4.6.** Coefficients de la relation de dispersion quadratique pour chaque branche de phonons du Si. Tiré de [108]

| Mode de phonon | $\omega_0$ ( $10^{13}$ rad/s) | $u$ ( $10^5$ cm/s) | $c$ ( $10^{-3}$ cm <sup>2</sup> /s) |
|----------------|-------------------------------|--------------------|-------------------------------------|
| LA             | 0.00                          | 9.01               | −2.00                               |
| TA             | 0.00                          | 5.23               | −2.26                               |
| LO             | 9.88                          | 0.00               | −1.60                               |
| TO             | 10.20                         | −2.57              | 1.12                                |

#### 4.6.9. Relativité restreinte

Initialement, les équations d'énergie et de quantité de mouvement de G4CMP incluait la relativité restreinte, avec des bandes purement paraboliques. Nous avons fait ce choix pour être cohérent avec la manière de fonctionner de GEANT4, qui inclut la relativité restreinte dans ses calculs, et de qui G4CMP hérite plusieurs de ses fonctions et classes.

Les effets de la relativité restreinte sont très petits aux énergies qui nous intéressent. En effet, même en appliquant un champ électrique de plusieurs dizaines de V/cm sur du silicium ou du germanium, la vitesse des électrons et des trous ne restera qu'une fraction de la vitesse de la lumière, soit environ 50 km/s. Comparativement à la vitesse de la lumière qui est 300 000 km/s, le facteur  $\gamma$ , qui inclut le rapport  $v^2/c^2$ , est donc essentiellement 1.

Nous pensions que, même si les effets relativistes sont petits, ils peuvent facilement s'accumuler dans un programme de simulation qui calcule l'énergie à chaque itération (pour SuperCDMS, il n'est pas rare de dépasser les millions de pas). En effet, une petite erreur

de l'ordre  $10^{-8}$  eV sur l'énergie, lorsque répétée 1 million de fois, peut donner une erreur d'environ 0,01 eV ce qui peut devenir important à notre échelle.

Ainsi, en relativité restreinte, l'énergie cinétique de l'électron est donnée par [55]:

$$K = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2} - m c^2. \quad (4.6.2)$$

Dans le cas des électrons dans un semi-conducteur, sa masse varie en fonction de sa direction. Il devient plus compliqué de trouver une expression exacte, mais on peut tout de même remplacer la masse par une valeur scalaire moyenne, tel que la masse de conductivité.

$$K = \sqrt{m_c^2 c^4 + (T_i^T m_c [\mathbf{m}^{*-1}] T_i \hbar k)^2 c^2} - m_c c^2. \quad (4.6.3)$$

Montrons qu'on peut retrouver l'expression «classique» de l'énergie d'un électron dans un cristal lorsque la quantité de mouvement, et donc la vitesse, de l'électron est petite. Cette approximation est généralement vraie pour des électrons et les trous dans nos détecteurs de matière sombre, car nous n'appliquons jamais de champ électrique de plus de quelques dizaines de V/cm.

$$\begin{aligned} K &= m_c c^2 \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 k^{*2}}{m_c^2 c^2}} - m_c c^2 \\ &\approx m_c c^2 \left( 1 + \frac{\hbar^2 k^{*2}}{2 m_c^2 c^2} \right) - m_c c^2 \\ &= \frac{\hbar^2 k^{*2}}{2 m_c}. \end{aligned} \quad (4.6.4)$$

où nous avons utilisé l'approximation du binôme de Newton. On peut maintenant combiner les effets de la relativité restreinte avec ceux de la non-parabolicité. On remplace ainsi l'expression 4.6.3 dans l'équation 2.2.42 :

$$E(\mathbf{k}^*) = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4\alpha K}}{2\alpha}. \quad (4.6.5)$$

Les effets de la non-parabolicité sont beaucoup plus importants que ceux de la relativité restreinte sur la relation entre l'énergie de l'électron et de sa quantité de mouvement. Nous avons donc temporairement retiré la relativité restreinte de nos équations pour simplifier l'implémentation de la non-parabolicité. Nous avons également vérifié, au préalable, que l'enlèvement de la relativité restreinte de nos équations, mais en gardant des bandes paraboliques, n'a presque aucun impact sur l'énergie totale des phonons et donc sur la conservation de l'énergie. Comme cela demanderait un gros travail mathématique pour réintroduire la relativité, et que ses effets sont petits, nous préférons laisser cela à plus tard.

## 4.7. Conclusion

En résumé, nous avons amélioré plusieurs processus de l'ancien modèle de G4CMP. Nous avons inclus la non-parabolicité des bandes dans nos équations, autant pour la cinématique des charges-phonons que dans les taux de diffusions et les distributions angulaires. Nous avons ajouté un nouveau modèle de diffusions IV basé sur des principes premiers qui inclut dorénavant l'émission de phonons. Nous avons également justifié le changement de plusieurs paramètres, tel que la vitesse du son, le choix de la masse et des potentiels de déformation. L'ancien modèle était déjà très robuste, car il permettait de reproduire relativement bien plusieurs résultats expérimentaux, tels que l'énergie totale des phonons attendue, la vitesse de dérive et la densité des charges aux surfaces lorsqu'on applique un champ électrique au cristal. Nous avons montré que le nouveau modèle permet également de reproduire ces résultats, mais dans une meilleure mesure, car il est possible, par l'ajustement de plusieurs paramètres, d'avoir un accord encore meilleur avec les observations expérimentales. Les nouveaux changements permettent aussi de mieux modéliser la microphysique du transport des charges. Par exemple, en incluant l'émission de phonons IV, la population de phonons athermiques NTL sera très différente, ce qui a un impact sur la forme des signaux. Bref, nous étions déjà confiants en la fiabilité et la précision de l'ancien modèle, mais nous le sommes encore plus avec toutes ces nouvelles améliorations.

Glissons maintenant un mot sur l'importance de cet outil. Dans les détecteurs de SuperCDMS, l'information mesurée ne provient pas directement des charges électriques, mais des phonons NTL qu'elles émettent lors de leur déplacement. La trajectoire des électrons et des trous, leurs diffusions, leurs changements de vallée et leurs interactions avec le réseau cristallin déterminent le nombre, l'énergie, la direction et le temps d'arrivée des phonons au TES, et donc la forme finale du signal. Une modélisation réaliste du transport des charges est donc indispensable pour reconstruire correctement les dépôts d'énergie. G4CMP permet aussi d'explorer une physique inaccessible expérimentalement. En omettant certains processus ou en modifiant ceux existants, on peut voir les effets individuels de ceux-ci sur nos données. De plus, la simulation nous donne accès à des quantités internes, telles que la vitesse, la quantité de mouvement, l'énergie des charges à chaque instant, ce que les détecteurs ne peuvent pas mesurer directement. Au-delà de l'interprétation des données, G4CMP joue un rôle clé dans la conception des détecteurs, l'optimisation des géométries, la calibration et le développement de coupures d'analyse. Bref, G4CMP est un outil indispensable pour SuperCDMS, mais aussi pour les autres expériences de détection de la matière sombre qui ont un détecteur avec un fonctionnement similaire, tel que EDELWEISS et CRESST.

# Conclusion

---

En résumé, nous avons, au premier chapitre, survolé la littérature sur les indices de l'existence de la matière sombre. Entre autres, nous avons abordé la vitesse de rotation des galaxies, l'amas du boulet et comment le spectre de puissance du rayonnement fossile nous permet d'extraire la densité de la matière sombre dans l'univers. Puis, nous avons passé rapidement sur quelques-uns des candidats à la matière sombre suggérée au fil des années. Par la suite, nous avons parlé du fonctionnement des détecteurs directs de matière sombre de SuperCDMS.

Au deuxième chapitre, nous avons vu en détail le transport des porteurs de charges dans les semi-conducteurs, en particulier le germanium et le silicium. Nous avons commencé par un rappel du théorème de Bloch et de la structure de bande, ce qui nous a menés au développement des équations de la quantité de mouvement, de la vitesse, de l'énergie de l'accélération des électrons et des trous. Le développement mathématique de ces formules a nécessité l'utilisation de transformation de Herring-Vogt et de la non-parabolicité des bandes de conduction et de valence. La plupart des références traitant du transport par méthode de MC n'incluent pas les matrices de rotations dans leur transformation de HV. C'est pourquoi nous avons pris le temps de mettre chacune d'elles tout au long de nos dérivations. Nous avons considéré le modèle semi-classique du transport des porteurs de charge. Dans ce dernier, les collisions sont traitées de manière quantique alors que l'accélération des charges entre les collisions est plutôt traitée de manière «classique».

Ensuite, nous avons décrit plusieurs des processus de diffusions que peuvent subir une charge dans un semi-conducteur : émission et absorption de phonons (acoustiques ou optiques et intravallées ou intervallées), collisions avec des impuretés neutres ou chargées, interaction avec les autres charges et les plasmons, recombinaison et ionisation d'impact, piégeage de charges et certains processus à la surface tel que la réflexion. Nous avons estimé lesquels surviennent souvent dans nos détecteurs (émission de phonons NTL) et lesquels sont moins importants (e.g. interaction coulombienne avec les autres électrons/trous). Nous avons calculé, à l'aide de la règle d'or de Fermi, les taux de diffusions des processus les plus fréquents. Dans le cadre de ce travail, nous avons développé une forme «analytique» de la distribution angulaire entre les phonons et les électrons/trous, une première pour le cas

non parabolique de l'émission acoustique intravallée et pour l'émission optique intravallée et intervallée.

Au troisième chapitre, nous avons expliqué que l'équation de transport de Boltzmann décrit le transport des particules dans un système hors équilibre, tel qu'un cristal de Si ou de Ge soumis à des champs électriques, la situation des détecteurs de matière sombre de Super-CDMS. Cette équation est difficile à résoudre analytiquement. Heureusement, il est possible d'utiliser l'approche par méthode de Monte-Carlo pour résoudre l'équation de Boltzmann et ainsi modéliser le transport des charges. Après avoir expliqué comment fonctionne cette approche stochastique, nous avons parlé de G4CMP, un outil de simulation hérité de GEANT4, mais qui inclut la physique du solide, tel que le transport des charges et des phonons dans des cristaux cryogéniques. Finalement, nous avons expliqué en détail chacun des processus inclus dans cet outil, autant pour le transport des paires  $e/h$  que des phonons.

Au quatrième chapitre, nous avons mentionné que l'outil de simulation G4CMP, avant même toutes nos améliorations, était déjà robuste pour modéliser le transport des porteurs de charges dans le Si et le Ge à des températures de quelques dizaines de mK. Ce dernier incluait notamment l'accélération des charges, en particulier l'accélération oblique des électrons, qui dépend de la vallée dans laquelle l'électron se trouve. Notre simulation comportait aussi l'émission de phonons acoustiques intravallées et un modèle simple de diffusions IV basé sur un taux semi-empirique, de même qu'une implémentation rudimentaire des processus suivants : ionisation d'impact, piégeage des charges et recombinaison des paires  $e/h$  aux surfaces.

Nous avons grandement amélioré la simulation en tenant compte de la non-parabolicité des bandes dans la cinématique des charges. Cela se décline autant dans les équations de l'énergie, de la quantité de mouvement de la vitesse, de l'accélération que des taux de diffusions, des distributions angulaires et des énergies des phonons émis.

Nous en avons aussi profité pour changer quelques paramètres des taux de diffusions et des distributions angulaires. En effet, nous avons remplacé dans ces équations la vitesse du son, qui était celle longitudinale pour les électrons et les trous, par une vitesse du son moyenne pour les électrons. On prend la moyenne sur  $u$  car on combine l'émission des phonons acoustiques intravallées longitudinales et transverses en une seule équation moyenne. Nous avons également changé ce que nous appelons  $m_q \approx m_d$  comme c'est fait dans la littérature afin de pouvoir comparer le choix de nos potentiels de déformation à ceux de la littérature. Nous avons montré que ces valeurs varient énormément et ont un effet très important sur les taux de diffusions beaucoup plus importants que l'effet du changement des autres paramètres. Nous nous sommes aussi assurés que l'énergie des phonons acoustiques était calculée dans le

bon référentiel. En faisant cela, nous avons montré que le choix des masses et de la vitesse du son n'a que très peu d'effet sur l'énergie des phonons émis.

Nous avons montré que le taux de diffusions acoustiques intravallées a varié beaucoup à la suite de l'inclusion de la non-parabolicité et du changement des autres paramètres, mais pas la distribution angulaire.

De plus, nous avons remplacé l'ancien modèle de diffusions IV qui n'incluait pas l'émission de phonons par un modèle basé sur des principes premiers. Entre autres, nous avons remplacé le taux de diffusions, qui était une loi semi-empirique dépendante du champ électrique et sans seuil d'émission, par le taux théorique calculé à l'aide de la règle d'or de Fermi. Cela a permis de régler un problème récurrent de G4CMP à des voltages nuls. À 0 V, les charges, en l'absence d'accélération, émettaient toute leur énergie cinétique sous forme de phonons NTL jusqu'à tomber sous le seuil de tous les processus, sauf les diffusions IV. Il en résultait un changement constant de la direction de la quantité de mouvement, mais pas de sa norme, prolongeant inutilement la simulation.

De plus, nous avons développé un algorithme de sélection de l'état final de l'électron après diffusions intervallée. On détermine en premier le mode de phonons émis à partir de la contribution de chaque mode au taux total de diffusions IV. On sélectionne ensuite un angle aléatoire de la distribution angulaire dont l'ordre dépend du mode ayant remporté l'étape précédente. Puis, on calcule l'énergie de l'électron et du phonon après diffusion dans le référentiel de HV par conservation de ces deux quantités. On choisit une nouvelle vallée finale au hasard pour le Ge et selon le type de diffusions IV (f ou g) pour le Si. Finalement, on applique une transformation inverse pour trouver l'énergie finale de l'électron et du phonon. Nous avons montré que ce nouvel algorithme produisait des électrons dans la vallée finale voulue.

De plus, nous ajoutons des anti-vallées et avons adopté une nouvelle convention basée sur les directions cristallographiques, garantissant une meilleure précision numérique.

Afin de vérifier la fiabilité de cette amélioration, nous avons comparé les données de la simulation à trois observations expérimentales : l'énergie totale des phonons émis, la vitesse de dérive et la position finale des charges aux surfaces. Dans le premier cas, nous avons obtenu une différence entre l'énergie totale des phonons attendus et celle de G4CMP de 0,01 %. Pour la deuxième quantité, nous avons remarqué un bon accord entre les courbes de la vitesse de dérive de la simulation et celle expérimentale pour le Ge autant pour les électrons que les trous. Pour la dernière observation, l'accord quant à la densité des charges aux extrémités du cristal était moindre. On reproduit le motif expérimental, mais à des voltages légèrement différents. On note toutefois qu'il y a de la place à un travail d'optimisation des paramètres, tels que les potentiels de déformation et l'énergie des phonons IV, ce qui

devrait nous permettre d'obtenir un meilleur accord entre la modélisation et les valeurs expérimentales.

Nous avons ensuite abordé les limites de notre modèle, telles que les nombreuses approximations analytiques que nous avons faites : aux bandes de conduction et de valence, à la masse angulaire, aux potentiels de déformations, etc. Un des autres problèmes est le nombre restreint de processus et la complexité de leur implémentation actuelle dans G4CMP. Nous avons proposé plusieurs pistes de solutions : l'ajustement des paramètres, l'ajout d'émission de phonons optiques intravallées, de collisions avec des impuretés et des bandes de conduction supérieures. Nous pouvons également ajouter des processus de surfaces, comme la réflexion des charges, des processus Umklapp, une meilleure relation de dispersion des phonons et les effets de la relativité restreinte. De même, nous pourrions considérer l'anisotropie des bandes de valence pour les trous plutôt qu'une seule bande sphérique.

Parmi ces nombreuses pistes d'améliorations, certaines sont déjà en cours d'implémentation alors que d'autres le seront probablement sous peu. J'aimerais probablement m'attaquer aux bandes de valence des trous à la suite de mon doctorat. Le travail d'amélioration d'une modélisation est sans fin. Il y a aura toujours un nouveau processus à ajouter, une approximation à revoir, un paramètre à ajuster. L'important est d'être conscient des limites actuelles de notre modèle actuel.

## Bibliographie

---



# Références

---

- [1] Sadao Adachi, *Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors*, vol. 16, 2005.
- [2] N. Aghanim et al., *Planck 2018 results*, Astronomy & Astrophysics **641** (2020), A6, <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201833910>.
- [3] R. Agnese et al., *First Dark Matter Constraints from a SuperCDMS Single-Charge Sensitive Detector*, Phys. Rev. Lett. **121** (2018), 051301, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.121.051301>.
- [4] S. Agostinelli et al., *Geant4—a simulation toolkit*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment **506** (2003), no. 3, 250–303, <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900203013688>.
- [5] M. F. Albakry et al., *First Measurement of the Nuclear-Recoil Ionization Yield in Silicon at 100 eV*, Phys. Rev. Lett. **131** (2023), 091801, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.131.091801>.
- [6] M. F. Albakry et al., *Light dark matter constraints from SuperCDMS HVeV detectors operated underground with an anticoincidence event selection*, Phys. Rev. D **111** (2025), 012006, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.111.012006>.
- [7] M.F. Albakry et al., *Multi-channel, multi-template event reconstruction for SuperCDMS data using machine learning*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment **1087** (2026), 171437, <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900226001634>.
- [8] J. Allison et al., *Geant4 developments and applications*, IEEE Transactions on Nuclear Science **53** (2006), no. 1, 270–278.
- [9] J. Allison et al., *Recent developments in Geant4*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment **835** (2016), 186–225, <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900216306957>.
- [10] V. Anastassopoulos et al., *New CAST limit on the axion–photon interaction*, Nature Physics **13** (2017), no. 6, 584–590, <https://doi.org/10.1038/nphys4109>.
- [11] N. W. Ashcroft et N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Holt-Saunders, 1976.
- [12] V. Aubry-Fortuna, P. Dollfus, et S. Galdin-Retailleau, *Electron effective mobility in strained-Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> MOS devices using Monte Carlo simulation*, Solid-State Electronics **49** (2005), no. 8, 1320–1329, <http://dx.doi.org/10.1016/j.sse.2005.06.013>.
- [13] K. G. Begeman, *HI rotation curves of spiral galaxies. I. NGC 3198.*, Journal of Applied Physics **223** (1989), 47–60.

- [14] C. L. Bennett et al., *Seven-year Wilkinson Microwave Anisotropy Probe (WMAP) observations: sky maps, systematic errors, and basic results*, The Astrophysical Journal Supplement Series **208** (2013), no. 2, 20, <http://dx.doi.org/10.1088/0067-0049/208/2/20>.
- [15] Anton G. Bergmann, Vahe Petrosian, et Roger Lynds, *Gravitational Lens Models of Arcs in Clusters*, Astrophysical Journal **350** (1990), 23.
- [16] Gianfranco Bertone et Dan Hooper, *History of dark matter*, Rev. Mod. Phys. **90** (2018), 045002, <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.90.045002>.
- [17] G.L. Bir et G.E. Pikus, *Symmetry and Strain-induced Effects in Semiconductors*, Wiley, 1974.
- [18] Joseph L. Birman, Melvin Lax, et Rodney Loudon, *Intervalley-Scattering Selection Rules in III-V Semiconductors*, Phys. Rev. **145** (1966), 620–622, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.145.620>.
- [19] A. Blacha, H. Presting, et M. Cardona, *Deformation Potentials of  $k = 0$  States of Tetrahedral Semiconductors*, physica status solidi (b) **126** (1984), no. 1, 11–36, <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/pssb.2221260102>.
- [20] Felix Bloch, *Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern*, Zeitschrift für Physik **52** (1929), no. 7, 555–600, <https://doi.org/10.1007/BF01339455>.
- [21] D. Brandt et al., *Semiconductor phonon and charge transport Monte Carlo simulation using Geant4*, 2014, <https://arxiv.org/abs/1403.4984>.
- [22] J. Bude, *Scattering Mechanisms for Semiconductor Transport Calculations*, Springer US, Boston, MA, 1991, [https://doi.org/10.1007/978-1-4615-4026-7\\_2](https://doi.org/10.1007/978-1-4615-4026-7_2).
- [23] B. Cabrera et al., *Oblique propagation of electrons in crystals of germanium and silicon at sub-kelvin temperature in low electric fields*, 2010, <https://arxiv.org/abs/1004.1233>.
- [24] Wenshan Cai et Vladimir Shalaev, *Optical metamaterials*, 2010 ed., Springer, New York, NY, December 2009 (en).
- [25] C. Canali et al., *Measurements of the Average Energy Per Electron-Hole Pair Generation in Silicon between 5-320 K*, IEEE Transactions on Nuclear Science **19** (1972), no. 4, 9–19.
- [26] R. Clausius, *XVI. On a mechanical theorem applicable to heat*, The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science **40** (1870), no. 265, 122–127, <https://doi.org/10.1080/14786447008640370>.
- [27] SuperCDMS Collaboration et al., *A Strategy for Low-Mass Dark Matter Searches with Cryogenic Detectors in the SuperCDMS SNOLAB Facility*, 2023, [arXiv:2203.08463](https://arxiv.org/abs/2203.08463).
- [28] E. Conwell et V. F. Weisskopf, *Theory of Impurity Scattering in Semiconductors*, Phys. Rev. **77** (1950), 388–390, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.77.388>.
- [29] Esther M. Conwell, *High field transport in semiconductors*, Academic Press, New York, 1967, Solid state physics, Supplement 9.
- [30] Jim Dewey et M. A. Osman, *Monte Carlo study of hole transport in silicon*, Journal of Applied Physics **74** (1993), no. 5, 3219–3223, <https://doi.org/10.1063/1.354595>.
- [31] W. R. Dodge et al., *Measurement of the Mean Energy Required to Create an Electron-Hole Pair in Silicon Between 6 and 77°K*, Phys. Rev. Lett. **17** (1966), 653–655, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.17.653>.

- [32] F. E. Emery et T. A. Rabson, *Average Energy Expended Per Ionized Electron-Hole Pair in Silicon and Germanium as a Function of Temperature*, Phys. Rev. **140** (1965), A2089–A2093, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.140.A2089>.
- [33] NASA/CXC/CfA/M.Markevitch et al.; NASA/STScI; Magellan/U.Arizona/D.Clowe et al.; NASA/STScI; ESO WFI; Magellan/U.Arizona/D.Clowe et al., *NASA Finds Direct Proof of Dark Matter*, [En ligne; accédé le 14 juin 2021], [https://www.nasa.gov/mission\\_pages/chandra/multimedia/photos06-096.html](https://www.nasa.gov/mission_pages/chandra/multimedia/photos06-096.html).
- [34] U. Fano, *Ionization Yield of Radiations. II. The Fluctuations of the Number of Ions*, Phys. Rev. **72** (1947), 26–29, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.72.26>.
- [35] D. K. Ferry, *First-order optical and intervalley scattering in semiconductors*, Phys. Rev. B **14** (1976), 1605–1609, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.14.1605>.
- [36] M. V. Fischetti et S. E. Laux, *Band structure, deformation potentials, and carrier mobility in strained Si, Ge, and SiGe alloys*, Journal of Applied Physics **80** (1996), no. 4, 2234–2252, <https://doi.org/10.1063/1.363052>.
- [37] M. V. Fischetti et al., *Six-band  $kp$  calculation of the hole mobility in silicon inversion layers: Dependence on surface orientation, strain, and silicon thickness*, Journal of Applied Physics **94** (2003), no. 2, 1079–1095, <https://doi.org/10.1063/1.1585120>.
- [38] Massimo Fischetti, *Monte Carlo simulation of transport in technologically significant semiconductors of the diamond and zinc-blende structure – Part I: Homogeneous transport*, Electron Devices, IEEE Transactions on **38** (1991), 634 – 649.
- [39] D. J. Fixsen, *The temperature of the cosmic microwave background*, The Astrophysical Journal **707** (2009), no. 2, 916–920, <http://dx.doi.org/10.1088/0004-637X/707/2/916>.
- [40] G. Fontaine, *Compléments de mécanique statistique*, vol. Notes de cours de PHY 3214, Université de Montréal, 2017.
- [41] P. Friedel, M. S. Hybertsen, et M. Schlüter, *Local empirical pseudopotential approach to the optical properties of Si/Ge superlattices*, Phys. Rev. B **39** (1989), 7974–7977, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.39.7974>.
- [42] Katherine Garrett et Gintaras Duda, *Dark Matter: A Primer*, Advances in Astronomy **2011** (2011), 1–22, <http://dx.doi.org/10.1155/2011/968283>.
- [43] E M Gershenzon et al., *H-like impurity centers and molecular complexes created by them in semiconductors*, Soviet Physics Uspekhi **23** (1980), no. 10, 684, <https://doi.org/10.1070/PU1980v023n10ABEH005041>.
- [44] P Giannozzi et al., *Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO*, Journal of Physics: Condensed Matter **29** (2017), no. 46, 465901, <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa8f79>.
- [45] Paolo Giannozzi et al., *QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials*, Journal of Physics: Condensed Matter **21** (2009), no. 39, 395502, <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>.
- [46] Steven M. Girvin et Kun Yang, *Modern Condensed Matter Physics*, Cambridge University Press, 2019.
- [47] Martin A. Green, *Intrinsic concentration, effective densities of states, and effective mass in silicon*, Journal of Applied Physics **67** (1990), no. 6, 2944–2954, <https://doi.org/10.1063/1.345414>.

- [48] J. Hafner et G. Kresse, The Vienna AB-Initio Simulation Program VASP: An Efficient and Versatile Tool for Studying the Structural, Dynamic, and Electronic Properties of Materials, 69–82, Springer US, Boston, MA, 1997, pp. 69–82, [https://doi.org/10.1007/978-1-4615-5943-6\\_10](https://doi.org/10.1007/978-1-4615-5943-6_10).
- [49] David Halliday, Robert Resnick, et Jearl Walker, *Fundamentals of physics extended*, John Wiley & Sons, Nashville, TN, July 2013.
- [50] Chihiro Hamaguchi, Electron—Phonon Interaction and Electron Transport, 183–259, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2001, pp. 183–259, [https://doi.org/10.1007/978-3-662-04656-2\\_6](https://doi.org/10.1007/978-3-662-04656-2_6).
- [51] J. M. Hammersley et D. C. Handscomb, Random, Pseudorandom, and Quasirandom Numbers, 25–42, Springer Netherlands, Dordrecht, 1964, pp. 25–42, [https://doi.org/10.1007/978-94-009-5819-7\\_3](https://doi.org/10.1007/978-94-009-5819-7_3).
- [52] Walter A. Harrison, *Scattering of Electrons by Lattice Vibrations in Nonpolar Crystals*, Phys. Rev. **104** (1956), 1281–1290, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.104.1281>.
- [53] James B. Hartle, *Gravity: An Introduction to Einstein’s General Relativity*, Cambridge University Press, 2021.
- [54] A. Hartstein, T.H. Ning, et A.B. Fowler, *Electron scattering in silicon inversion layers by oxide and surface roughness*, Surface Science **58** (1976), no. 1, 178–181, <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/003960287690131X>.
- [55] Thomas M. Helliwell, *Special Relativity*, University Science Books, Sausalito, Calif., 2010.
- [56] I. Hernandez et al., *Modeling athermal phonons in novel materials using the G4CMP simulation toolkit*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment **1073** (2025), 170172, <http://dx.doi.org/10.1016/j.nima.2024.170172>.
- [57] Conyers Herring et Erich Vogt, *Transport and Deformation-Potential Theory for Many-Valley Semiconductors with Anisotropic Scattering*, Phys. Rev. **101** (1956), 944–961, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.101.944>.
- [58] Sharon Ann Holgate, *Understanding solid state physics*, 2 ed., CRC Press, London, England, April 2021 (en).
- [59] Ziqing Hong et al., *Single electron-hole pair sensitive silicon detector with surface event discrimination*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment **963** (2020), 163757, <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900220302989>.
- [60] Harald Ibach et Hans Lüth, *Solid-state physics*, 4 ed., Springer, Berlin, Germany, November 2009 (en).
- [61] Informationeso.org, *New Hubble image of galaxy cluster Abell 1689*, <https://esahubble.org/news/heic1317/>.
- [62] C. Jacoboni et al., *Electron drift velocity and diffusivity in germanium*, Phys. Rev. B **24** (1981), 1014–1026, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.24.1014>.
- [63] Carlo Jacoboni, *Theory of Electron Transport in Semiconductors: A Pathway from Elementary Physics to Nonequilibrium Green Functions*, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2010, [https://doi.org/10.1007/978-3-642-10586-9\\_9](https://doi.org/10.1007/978-3-642-10586-9_9).
- [64] Carlo Jacoboni et Paolo Lugli, *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation*, Springer Vienna, Vienna, 1989.

- [65] Carlo Jacoboni et Lino Reggiani, *Bulk hot-electron properties of cubic semiconductors*, Advances in Physics **28** (1979), 493–553, <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:119593326>.
- [66] Carlo Jacoboni et Lino Reggiani, *The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials*, Rev. Mod. Phys. **55** (1983), 645–705, <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.55.645>.
- [67] N. Jarosik et al., *Seven-year Wilkinson Microwave Anisotropy Probe (WMAP) observations: sky maps, systematic errors, and basic results*, The Astrophysical Journal Supplement Series **192** (2011), no. 2, 14, <http://dx.doi.org/10.1088/0067-0049/192/2/14>.
- [68] Lawrence L. Kazmerski, *Electrical Properties of Polycrystalline Semiconductor Thin Films*, Tech. Report SERI/TP-32-206, Solar Energy Research Institute, Golden, Colorado, 1979, Chapitre 3 de *Properties of Polycrystalline and Amorphous Thin Films and Devices*, Academic Press, <https://docs.nrel.gov/docs/legosti/old/206.pdf>.
- [69] M.H. Kelsey et al., *G4CMP: Condensed matter physics simulation using the Geant4 toolkit*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment **1055** (2023), 168473, <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900223004631>.
- [70] R. Khatiwada et al., *Axion Dark Matter eXperiment: Detailed Design and Operations*, 2020, [arXiv:2010.00169](https://arxiv.org/abs/2010.00169).
- [71] Charles Kittel, *Introduction to solid state physics*, 8 ed., John Wiley & Sons, Nashville, TN, October 2004 (en).
- [72] G. F. Knoll, *Radiation Detection and Measurement*, Wiley, 2010.
- [73] J. F. Koch et T. E. Murray, *Electron Scattering at a Rough Surface*, Phys. Rev. **186** (1969), 722–727, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.186.722>.
- [74] S. K. Kor, P. K. Mishra, et S. K. Pandey, *Study of effective Debye temperature for germanium*, Journal of Applied Physics **45** (1974), no. 3, 1482–1483, <https://doi.org/10.1063/1.1663444>.
- [75] Noah Kurinsky, *The low-mass limit : dark matter detectors with eV-scale energy resolution*, Thèse de doctorat, 2018.
- [76] Peter T. Landsberg, *Recombination in semiconductors*, Nature **275** (2003), 270–271, <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:4198035>.
- [77] Iman Atae Langroudy, *Electron transportation simulation in Geant4 condensed matter physics simulation*, thèse de doctorat, Texas A&M University, printemps 2026.
- [78] P. Lechner et al., *Pair creation energy and Fano factor of silicon in the energy range of soft X-rays*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment **377** (1996), no. 2, 206 – 208, Proceedings of the Seventh European Symposium on Semiconductor, <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900296002136>.
- [79] Steven W. Leman, *Invited Review Article: Physics and Monte Carlo techniques as relevant to cryogenic, phonon, and ionization readout of Cryogenic Dark Matter Search radiation detectors*, Review of Scientific Instruments **83** (2012), no. 9, 091101, <https://doi.org/10.1063/1.4747490>.
- [80] Richard Leonelli, *Mécanique quantique 2*, Université de Montréal, 2022.

- [81] Zhen Li, Patrizio Graziosi, et Neophytos Neophytou, *Deformation potential extraction and computationally efficient mobility calculations in silicon from first principles*, Phys. Rev. B **104** (2021), 195201, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.104.195201>.
- [82] Lin Lin et al., *Work Function: Fundamentals, Measurement, Calculation, Engineering, and Applications*, Phys. Rev. Appl. **19** (2023), 037001, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevApplied.19.037001>.
- [83] J. Lindhard, *On the properties of a gas of charged particles*, Kgl. Danske Videnskab. Selskab Mat.-fys. Medd. **28** (1954), no. 8.
- [84] J. Lindhard et al., *Integral equations governing radiation effects. (Notes on atomic collisions, III)*, Kgl. Danske Videnskab. Selskab Mat. Fys. Medd. **33** (1963), no. 10.
- [85] B. G. Lowe et R. A. Sareen, *A measurement of the electron-hole pair creation energy and the Fano factor in silicon for 5.9 keV X-rays and their temperature dependence in the range 80–270K*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment **576** (2007), no. 2, 367 – 370, <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S016890020700527X>.
- [86] P. N. Luke, *Voltage-assisted calorimetric ionization detector*, Journal of Applied Physics **64** (1988), no. 12, 6858–6860, <https://doi.org/10.1063/1.341976>.
- [87] Mark Lundstrom, *Fundamentals of Carrier Transport*, 2 ed., Cambridge University Press, 2000.
- [88] Hans Lüth, *Electronic Surface States*, 253–335, Springer International Publishing, "CHAM", 2015, pp. 253–335, [https://doi.org/10.1007/978-3-319-10756-1\\_6](https://doi.org/10.1007/978-3-319-10756-1_6).
- [89] O. Madelung, U. Rössler, et M. Schulz, *Germanium (Ge), band structure: Datasheet from Landolt-Börnstein - Group III Condensed Matter · Volume 41A1β: “Group IV Elements, IV-IV and III-V Compounds. Part b - Electronic, Transport, Optical and Other Properties*, 2002 Springer-Verlag Berlin Heidelberg, [https://materials.springer.com/lb/docs/sm\\_lbs\\_978-3-540-31356-4\\_480](https://materials.springer.com/lb/docs/sm_lbs_978-3-540-31356-4_480).
- [90] O. Madelung, U. Rössler, et M. Schulz, *Silicon (Si), band structure: Datasheet from Landolt-Börnstein - Group III Condensed Matter · Volume 41A1β: “Group IV Elements, IV-IV and III-V Compounds. Part b - Electronic, Transport, Optical and Other Properties*, 2002 Springer-Verlag Berlin Heidelberg, [https://materials.springer.com/lb/docs/sm\\_lbs\\_978-3-540-31356-4\\_432](https://materials.springer.com/lb/docs/sm_lbs_978-3-540-31356-4_432).
- [91] Michael P Marder, *Condensed Matter Physics*, 2 ed., Wiley-Blackwell, oct 2010.
- [92] Matt McEwen et al., *Resolving catastrophic error bursts from cosmic rays in large arrays of superconducting qubits*, Nature Physics **18** (2022), no. 1, 107–111, <https://doi.org/10.1038/s41567-021-01432-8>.
- [93] R. A. Moffatt et al., *Imaging the oblique propagation of electrons in germanium crystals at low temperature and low electric field*, Applied Physics Letters **108** (2016), no. 2, 022104, <https://doi.org/10.1063/1.4939753>.
- [94] R. A. Moffatt et al., *Spatial imaging of charge transport in silicon at low temperature*, Applied Physics Letters **114** (2019), no. 3, 032104, <https://doi.org/10.1063/1.5049691>.
- [95] C. Moglestue, *Monte Carlo Simulation of Semiconductor Devices*, Chapman & Hall, Ltée, Royaume-Uni, 1993.
- [96] F. Murphy-Armando et S. Fahy, *First-principles calculation of carrier-phonon scattering in n-type  $Si_{1-x}Ge_x$  alloys*, Phys. Rev. B **78** (2008), 035202, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.035202>.

- [97] B.S. Neganov et V.N. Trofimov, *Colorimetric method measuring ionizing radiation*, Otkryt. Izobret. **146** (1985), 215.
- [98] S. V. Obukhov et V. G. Tyuterev, *Ab initio calculation of the deformation potentials for intervalley phonons in silicon*, Physics of the Solid State **51** (2009), no. 6, 1110–1113, <https://doi.org/10.1134/S1063783409060031>.
- [99] E. Olivieri et al., *Transport Anisotropy and Impurity Scattering in Ge at Millikelvin Temperatures: Experimental Study*, J. Low Temp. Phys. **167** (2012), no. 5-6, 1137–1142.
- [100] J. H. Oort, *The force exerted by the stellar system in the direction perpendicular to the galactic plane and some related problems*, bain **6** (1932), 249.
- [101] G. Ottaviani et al., *Hole drift velocity in silicon*, Phys. Rev. B **12** (1975), 3318–3329, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.12.3318>.
- [102] J. F. Palmier, *Impurity Ionization in n-Type Germanium*, Phys. Rev. B **6** (1972), 4557–4571, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.6.4557>.
- [103] R. H. Pehl et al., *Accurate determination of the ionization energy in semiconductor detectors*, Nuclear Instruments and Methods **59** (1968), no. 1, 45 – 55, <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0029554X6890342X>.
- [104] A. A. Penzias et R. W. Wilson, *A Measurement of Excess Antenna Temperature at 4080 Mc/s.*, Astrophysical Journal **142** (1965), 419–421.
- [105] A. Phipps et al., *Optically Induced Measurement of Electron and Hole Drift Velocities in a Germanium  $\langle 100 \rangle$  CDMS Detector at 50 mK*, J. Low Temp. Phys. **167** (2012), no. 5-6, 1112–1118.
- [106] F. Ponce et al., *Modeling of Impact Ionization and Charge Trapping in SuperCDMS HVeV Detectors*, J. Low. Temp. Phys. **199** (2020), no. 3-4, 598–605, [arXiv:1912.11549](https://arxiv.org/abs/1912.11549).
- [107] F. Ponce et al., *Measuring the impact ionization and charge trapping probabilities in SuperCDMS HVeV phonon sensing detectors*, Phys. Rev. D **101** (2020), 031101, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.101.031101>.
- [108] Eric Pop, *Monte Carlo transport and heat generation in semiconductors*, Annual Review of Heat Transfer **17** (2014).
- [109] J.M. Purswani et D. Gall, *Electron scattering at single crystal Cu surfaces*, Thin Solid Films **516** (2007), no. 2, 465–469, <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S004060900701262X>.
- [110] H.D. Rees, *Calculation of distribution functions by exploiting the stability of the steady state*, Journal of Physics and Chemistry of Solids **30** (1969), no. 3, 643–655, <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022369769900183>.
- [111] F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*, McGraw-Hill, 1965.
- [112] R. Ren et al., *Design and characterization of a phonon-mediated cryogenic particle detector with an eV-scale threshold and 100 keV-scale dynamic range*, Phys. Rev. D **104** (2021), 032010, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.104.032010>.
- [113] Brian K. Ridley, *Quantum Processes in Semiconductors*, Oxford University Press, 2013, <https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780199677214.001.0001>.
- [114] J. W. Rohlf, *Modern Physics from  $\alpha$  to  $Z^0$* , Wiley, 1994.
- [115] R. K. Romani et al., *Thermal detection of single e-h pairs in a biased silicon crystal detector*, Applied Physics Letters **112** (2018), no. 4, 043501, <https://doi.org/10.1063/1.5010699>.

- [116] V. C. Rubin, Jr. Ford, W. K., et N. Thonnard, *Rotational properties of 21 SC galaxies with a large range of luminosities and radii, from NGC 4605 ( $R=4\text{kpc}$ ) to UGC 2885 ( $R=122\text{kpc}$ )., Astrophysical Journal* **238** (1980), 471–487.
- [117] Vera C. Rubin et Jr. Ford, W. Kent, *Rotation of the Andromeda Nebula from a Spectroscopic Survey of Emission Regions*, Astrophysical Journal **159** (1970), 379.
- [118] R. D. Ryan, *Precision Measurements of the Ionization Energy and Its Temperature Variation in High Purity Silicon Radiation Detectors*, IEEE Transactions on Nuclear Science **20** (1973), no. 1, 473–480.
- [119] Sourav Sadhukhan et al., *Chapter 4 - Evolution of high efficiency passivated emitter and rear contact (PERC) solar cells*, Sustainable Developments by Artificial Intelligence and Machine Learning for Renewable Energies (Krishna Kumar et al., eds.), Elsevier, 2022, pp. 63–129.
- [120] F. Scholze et al., *Determination of the electron-hole pair creation energy for semiconductors from the spectral responsivity of photodiodes*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment **439** (2000), no. 2, 208 – 215, <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900299009377>.
- [121] N. Sclar, *Neutral Impurity Scattering in Semiconductors*, Phys. Rev. **104** (1956), 1559–1561, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.104.1559>.
- [122] K. Seeger, *Semiconductor Physics: An Introduction*, Springer, 2004.
- [123] W. Shockley et W. T. Read, *Statistics of the Recombinations of Holes and Electrons*, Physical Review **87** (1952), no. 5, 835–842.
- [124] Sergey Smirnov, *Physical Modeling of Electron Transport in Strained Silicon and Silicon-Germanium*, thèse de doctorat, Technischen Universität Wien, Décembre 2003.
- [125] R.A. Smith, *Semiconductors*, Cambridge University Press, 1964.
- [126] C. Stanford et al., *High-field spatial imaging of charge transport in silicon at low temperature*, AIP Advances **10** (2020), no. 2, 025316, <https://doi.org/10.1063/1.5131171>.
- [127] G. R. Stewart, *Measurement of low-temperature specific heat*, Review of Scientific Instruments **54** (1983), no. 1, 1–11, <https://doi.org/10.1063/1.1137207>.
- [128] Kyle M. Sundqvist, *Carrier Transport and Related Effects in Detectors of the Cryogenic Dark Matter Search*, thèse de doctorat, University of California, printemps 2012.
- [129] K Takeda, A Taguchi, et M Sakata, *Valence-band parameters and hole mobility of Ge-Si alloys-theory*, Journal of Physics C: Solid State Physics **16** (1983), no. 12, 2237, <https://doi.org/10.1088/0022-3719/16/12/013>.
- [130] S. Tamura, J. A. Shields, et J. P. Wolfe, *Lattice dynamics and elastic phonon scattering in silicon*, Phys. Rev. B **44** (1991), 3001–3011, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.44.3001>.
- [131] Shin-ichiro Tamura, *Quasidiffusive propagation of phonons in silicon: Monte Carlo calculations*, Phys. Rev. B **48** (1993), 13502–13507, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.48.13502>.
- [132] J. Y. Tang et Karl Hess, *Impact ionization of electrons in silicon (steady state)*, Journal of Applied Physics **54** (1983), no. 9, 5139–5144, <https://doi.org/10.1063/1.332737>.
- [133] A. N. Taylor et al., *Gravitational Lens Magnification and the Mass of Abell 1689*, The Astrophysical Journal **501** (1998), no. 2, 539–553, <http://dx.doi.org/10.1086/305827>.
- [134] Gerhard Ulbricht, Mario De Lucia, et Eoin Baldwin, *Applications for microwave kinetic induction detectors in advanced instrumentation*, Applied Sciences **11** (2021), no. 6, <https://www.mdpi.com/2076-3417/11/6/2671>.

- [135] F. Della Valle et al., *New PVLAS model independent limit for the axion coupling to  $\gamma\gamma$  for axion masses above 1meV*, 2014, [arXiv:1410.4081](#).
- [136] Chris G. Van de Walle, *Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory*, Phys. Rev. B **39** (1989), 1871–1883, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.39.1871>.
- [137] Antti P. Vepsäläinen et al., *Impact of ionizing radiation on superconducting qubit coherence*, Nature **584** (2020), no. 7822, 551–556, <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2619-8>.
- [138] D. Walsh, R. F. Carswell, et R. J. Weymann, *0957+561 A, B: twin quasistellar objects or gravitational lens?*, Nature **279** (1979), 381–384.
- [139] W.-Z. Wei et D.-M. Mei, *Average energy expended per e-h pair for germanium-based dark matter experiments*, Journal of Instrumentation **12** (2017), no. 04, P04022, <https://doi.org/10.1088/1748-0221/12/04/P04022>.
- [140] C. D. Wilen et al., *Correlated charge noise and relaxation errors in superconducting qubits*, Nature **594** (2021), no. 7863, 369–373, <https://doi.org/10.1038/s41586-021-03557-5>.
- [141] J.D. Wiley, *Valence-band deformation potentials for the III–V compounds*, Solid State Communications **8** (1970), no. 22, 1865–1868, <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0038109870903364>.
- [142] Patrick Williams et Angela Dyson, *Improved Calculation of Acoustic Deformation Potentials from First Principles*, 2025, <https://arxiv.org/abs/2502.08538>.
- [143] James P. Wolfe, *Imaging Phonons: Acoustic Wave Propagation in Solids*, Cambridge University Press, 1998.
- [144] Qiao-Lin Yang et al., *Uncovering the important role of transverse acoustic phonons in the carrier-phonon scattering in silicon*, Phys. Rev. B **109** (2024), 125203, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.109.125203>.
- [145] Decai Yu, Yu Zhang, et Feng Liu, *First-principles study of electronic properties of biaxially strained silicon: Effects on charge carrier mobility*, Phys. Rev. B **78** (2008), 245204, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.245204>.
- [146] A. Zagoskin, *Quantum Theory of Many-Body Systems: Techniques and Applications*, Springer New York, 2012.
- [147] F. Zwicky, *Spectral displacement of extra galactic nebulae*, Helv. Phys. Acta. **6** (1933), 110–127.
- [148] F. Zwicky, *On the Masses of Nebulae and of Clusters of Nebulae*, Astrophysical Journal **86** (1937), 217.
- [149] P.A. Zyla et al., *Review of Particle Physics*, PTEP **2020** (2020), no. 8, 083C01.



# Annexe A

---

## Théorème de la masse effective

On repart de l'équation 2.2.15, mais on tient compte des  $n$  bandes de sorte qu'on a plutôt :

$$\hat{H}_{\mathbf{k}} \mathbf{q} u_{n,\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}) + \sum_i \frac{\hbar^2}{m_0} q_i (\mathbf{k} - i\nabla)_i u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) \mathbf{q} u_{n,\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}) + \sum_i \frac{\partial E}{\partial k_i} q_i u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (\text{A.0.1})$$

On multiplie par  $u_{n',\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})$  de chaque côté et on intègre sur l'ensemble du domaine spatial et on simplifie le terme  $\mathbf{q}$  :

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{r}^3 u_{n',\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \hat{H}_{\mathbf{k}} u_{n,\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}) - \int d\mathbf{r}^3 u_{n',\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) E_n(\mathbf{k}) u_{n,\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}) &= \int d\mathbf{r}^3 u_{n',\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \frac{\hbar^2}{m_0} (\mathbf{k} - i\nabla) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ &\quad - \int d\mathbf{r}^3 \sum_i \frac{\partial E}{\partial k_i} u_{n',\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (\text{A.0.2})$$

Le deuxième terme à droite est nul par orthogonalité des états  $u_{n',\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})$ . On se sert de  $u_{n',\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \hat{H}_{\mathbf{k}} = u_{n',\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) E_{n'}(\mathbf{k})$  :

$$(E_{n'}(\mathbf{k}) - E_n(\mathbf{k})) \int d\mathbf{r}^3 u_{n',\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{n,\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}^3 u_{n',\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \frac{\hbar^2}{m_0} (\mathbf{k} - i\nabla) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (\text{A.0.3})$$

Réécrivons l'équation plus haut dans la notation *braket* grâce à la substitution  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n',\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) = |n', \mathbf{k}\rangle$

$$(E_{n'}(\mathbf{k}) - E_n(\mathbf{k})) \langle n', \mathbf{k} | n, \mathbf{k} \rangle^{(1)} = \langle n', \mathbf{k} | \frac{\hbar^2}{m_0} (\mathbf{k} - i\nabla) | n, \mathbf{k} \rangle. \quad (\text{A.0.4})$$

On ajoute maintenant la projection  $\sum_{n'} |n', \mathbf{k}\rangle$  de chaque côté de l'égalité. Ces états forment une base complète de sorte que  $\sum_{n'} |n', \mathbf{k}\rangle \langle n', \mathbf{k}| = 1$  :

$$(E_{n'}(\mathbf{k}) - E_n(\mathbf{k}))|n, \mathbf{k}\rangle^{(1)} = \sum_{n' \neq n} \langle n', \mathbf{k} | \frac{\hbar^2}{m_0} (-i\nabla) |n, \mathbf{k}\rangle |n', \mathbf{k}\rangle. \quad (\text{A.0.5})$$

ou encore :

$$|n, \mathbf{k}\rangle^{(1)} = \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n', \mathbf{k} | \frac{\hbar^2}{m_0} (\mathbf{k} - i\nabla) |n, \mathbf{k}\rangle}{(E_{n'}(\mathbf{k}) - E_n(\mathbf{k}))} |n', \mathbf{k}\rangle. \quad (\text{A.0.6})$$

Revenons maintenant à l'ordre 2 en  $\mathbf{q}$  :

$$\begin{aligned} & \hat{H}_{\mathbf{k}} q^2 u_{n,\mathbf{k}}^{(2)}(\mathbf{r}) + \sum_{i,j} \frac{\hbar^2}{m_0} q_i q_j (\mathbf{k} - i\nabla)_i u_{n,\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_0} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ &= E_n(\mathbf{k}) q^2 u_{n,\mathbf{k}}^{(2)}(\mathbf{r}) + \sum_{i,j} \frac{\partial E_n}{\partial k_i} q_i q_j u_{n,\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial E_n}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (\text{A.0.7})$$

En multipliant par  $u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})$  de chaque côté et en intégrant sur l'ensemble du domaine, le premier terme à gauche et à droit de l'égalité s'annulent entre eux et il reste :

$$\begin{aligned} & \int d\mathbf{r}^3 u_{n,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \sum_{i,j} \frac{\hbar^2}{m_0} q_i q_j (\mathbf{k} - i\nabla)_i u_{n,\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}^3 u_{n,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \frac{\hbar^2 q^2}{2m_0} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ &= \int d\mathbf{r}^3 u_{n,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \sum_{i,j} \frac{\partial E_n}{\partial k_i} q_i q_j u_{n,\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}^3 u_{n,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial E_n}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (\text{A.0.8})$$

Par orthogonalité des états, on a ensuite :

$$\int d\mathbf{r}^3 u_{n,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \sum_{i,j} \frac{\hbar^2}{m_0} q_i q_j (\mathbf{k} - i\nabla)_i u_{n,\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_0} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial E_n}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j. \quad (\text{A.0.9})$$

On peut réécrire l'expression précédente en remplaçant  $u_{n,\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r})$  par l'équation A.0.6 et en substituant  $n' \lim n$  :

$$\frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j = \frac{\hbar^2}{2m} q^2 + \sum_{n' \neq n} \frac{\left| \int d\mathbf{r}^3 u_{n,\mathbf{k}}^* \frac{\hbar^2}{m} \mathbf{q} \cdot (-i\nabla + \mathbf{k}) u_{n',\mathbf{k}} \right|^2}{E_n - E_{n'}}. \quad (\text{A.0.10})$$

En remplaçant encore une fois  $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n',\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) = |n', \mathbf{k}\rangle$  :

$$\frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j = \frac{\hbar^2}{2m} q^2 + \sum_{n' \neq n} \frac{\left| \langle n', \mathbf{k} | \frac{\hbar^2}{m} \mathbf{q} \cdot (-i\nabla) |n', \mathbf{k}\rangle \right|^2}{E_n - E_{n'}}. \quad (\text{A.0.11})$$

on simplifie les  $q_i$  et les  $q_j$  :

$$\frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} = \frac{\hbar^2}{m} \delta_{ij} + \left( \frac{\hbar^2}{m} \right)^2 \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n, \mathbf{k} | -i \nabla_i | n', \mathbf{k} \rangle \langle n', \mathbf{k} | -i \nabla_j | n, \mathbf{k} \rangle + \langle n, \mathbf{k} | -i \nabla_j | n', \mathbf{k} \rangle \langle n', \mathbf{k} | -i \nabla_i | n, \mathbf{k} \rangle}{E_n - E_{n'}}.$$

(A.0.12)



## Annexe B

---

### Théorème d'Ehrenfest d'un électron en présence d'un champ électromagnétique extérieur et d'un potentiel périodique.

Dans le cas d'un électron plongé dans un champ électromagnétique, la quantité de mouvement devient plutôt  $\mathbf{p} = m_0\mathbf{v} + e\mathbf{A}$ . Pour se simplifier la vie, faisons nos calculs avec seulement la composante  $x$  de la quantité de mouvement. Nous partons du théorème d'Ehrenfest qui stipule que :

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle m_0v_x \rangle &= \left\langle \frac{dm_0v_x}{dt} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [m_0v_x, H] \rangle \\ &= \left\langle \frac{d}{dt} (p_x - eA_x) \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [m_0v_x, H] \rangle \\ &= \left\langle \frac{d}{dt} (p_x) \right\rangle + \left\langle \frac{d}{dt} (-eA_x) \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [m_0v_x, H] \rangle \\ &= \left\langle \frac{d}{dt} (-eA_x) \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [m_0v_x, H] \rangle.\end{aligned}\tag{B.0.1}$$

où le premier terme est nul, car l'opérateur quantité de mouvement ne dépend pas du temps. Le terme à gauche de l'égalité n'est pas nul, car il s'agit ici de la dérivée par rapport au temps de la valeur moyenne de la vitesse, qui, elle, varie dans le temps. Calculons maintenant les deux termes restants individuellement. Commençons par le premier :

$$\begin{aligned}\left\langle \frac{d}{dt} (-eA_x) \right\rangle &= -e \left\langle \frac{\partial A_x}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial A_x}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial A_x}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial t} + \frac{\partial A_x}{\partial t} \right\rangle \\ &= -e \left\langle \frac{\partial A_x}{\partial x} v_x + \frac{\partial A_x}{\partial y} v_y + \frac{\partial A_x}{\partial z} v_z + \frac{\partial A_x}{\partial t} \right\rangle.\end{aligned}\tag{B.0.2}$$

et le deuxième terme donne :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{i\hbar} \langle [m_0 v_x, H] \rangle &= \left\langle \left[ -\frac{\partial}{\partial x}, H \right] \right\rangle \\
&= \left\langle -\frac{\partial}{\partial x} H \right\rangle + \left\langle H \frac{\partial}{\partial x} \right\rangle \\
&= - \int d^3\mathbf{r} \Phi^* \frac{\partial}{\partial x} (H\Phi) + \int d^3\mathbf{r} \Phi^* H \frac{\partial}{\partial x} \Phi \\
&= - \int d^3\mathbf{r} \Phi^* \left( \frac{\partial H}{\partial x} \right) \Phi - \int d^3\mathbf{r} \Phi^* H \frac{\partial}{\partial x} \Phi + \int d^3\mathbf{r} \Phi^* H \frac{\partial}{\partial x} \Phi \\
&= \left\langle \frac{-\partial H}{\partial x} \right\rangle \\
&= \left\langle \frac{-\partial}{\partial x} \left( \frac{(p^2 - 2q\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r},t) + q^2 A(\mathbf{r},t)^2)}{2m_0} + U(\mathbf{r}) + qV(\mathbf{r},t) \right) \right\rangle \\
&= - \left\langle \frac{\partial}{\partial x} \frac{p^2}{2m_0} \right\rangle + \frac{q}{m_0} \left\langle \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r},t) \right\rangle - \frac{q^2}{2m_0} \left\langle \frac{\partial A(\mathbf{r},t)^2}{\partial x} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial x} \right\rangle \\
&\quad - q \left\langle \frac{\partial V(\mathbf{r},t)}{\partial x} \right\rangle \\
&= \frac{q}{m_0} \left\langle p_x \frac{\partial A_x}{\partial x} + p_y \frac{\partial A_y}{\partial x} + p_z \frac{\partial A_z}{\partial x} \right\rangle - \frac{q^2}{m_0} \left\langle A_x \frac{\partial A_x}{\partial x} + A_y \frac{\partial A_y}{\partial x} + A_z \frac{\partial A_z}{\partial x} \right\rangle \\
&\quad - \left\langle \frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial x} \right\rangle - q \left\langle \frac{\partial V(\mathbf{r},t)}{\partial x} \right\rangle \\
&= q \left\langle v_x \frac{\partial A_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial A_y}{\partial x} + v_z \frac{\partial A_z}{\partial x} \right\rangle + \frac{q^2}{m_0} \left\langle A_x \frac{\partial A_x}{\partial x} + A_y \frac{\partial A_y}{\partial x} + A_z \frac{\partial A_z}{\partial x} \right\rangle \\
&\quad - \frac{q^2}{m_0} \left\langle A_x \frac{\partial A_x}{\partial x} + A_y \frac{\partial A_y}{\partial x} + A_z \frac{\partial A_z}{\partial x} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial x} \right\rangle - q \left\langle \frac{\partial V(\mathbf{r},t)}{\partial x} \right\rangle \\
&= q \left\langle v_x \frac{\partial A_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial A_y}{\partial x} + v_z \frac{\partial A_z}{\partial x} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial x} \right\rangle - q \left\langle \frac{\partial V(\mathbf{r},t)}{\partial x} \right\rangle.
\end{aligned} \tag{B.0.3}$$

où nous avons utilisé le fait que  $p_i = m_0 v_i + eA_i$  pour obtenir ce résultat. Il ne nous reste plus qu'à tout remettre ensemble :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \langle m_0 v_x \rangle &= e \left\langle v_y \left( \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) + v_z \left( \frac{\partial A_z}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial x} \right) \right\rangle - e \left\langle \frac{\partial V(\mathbf{r}, t)}{\partial x} + \frac{\partial A_x}{\partial t} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial x} \right\rangle \\
&= e \langle v_y B_z - v_z B_y \rangle + e \langle E_x \rangle - \left\langle \frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial x} \right\rangle \\
&= e \langle [\mathbf{v} \times \mathbf{B}]_x + E_x \rangle + \langle [F_U]_x \rangle \\
&= \langle \mathbf{F}_{\text{ext}} \rangle_x + \langle \mathbf{F}_U \rangle_x \\
&= \langle \mathbf{F}_{\text{totale}} \rangle_x.
\end{aligned}
\tag{B.0.4}$$

ou encore, en 3 dimensions :

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle m_0 \mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{F}_{\text{ext}} \rangle + \langle \mathbf{F}_U \rangle = \langle \mathbf{F}_{\text{totale}} \rangle.
\tag{B.0.5}$$



## Annexe C

---

### Résolution de $|f'(q_0^*)|$ pour le cas non parabolique de l'émission de phonons acoustiques intravallées

Repartons de l'équation 2.3.47 :

$$|f'(q_0^*)| = \frac{\frac{4\alpha\hbar^2}{2m_c} (2q_0^* \pm 2k^* \cos \theta)}{4\alpha \sqrt{1 + \frac{4\alpha\hbar^2}{2m_c} (k^{*2} + q_0^{*2} \pm 2k^* q_0^* \cos \theta)}} \mp \hbar u \sqrt{\frac{m_d}{m_c}}. \quad (\text{C.0.1})$$

Commençons par développer l'intérieur de la racine au dénominateur en premier en remplaçant  $q_0$  :

$$\begin{aligned} & 1 + \frac{4\alpha\hbar^2}{2m_c} \left( k^{*2} + q_0^{*2} \pm 2k^* q_0^* \cos \theta \right) \\ &= 1 + \frac{4\alpha\hbar^2}{2m_c} \left( k^{*2} + \left\{ \frac{1}{1 - 2\alpha m_d u^2} \left[ \mp 2k^* \cos \theta \pm 2\sqrt{m_c m_d} \frac{u}{\hbar} [1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)] \right] \right\}^2 \right. \\ & \quad \left. \pm 2k^* \cos \theta \left\{ \frac{1}{1 - 2\alpha m_d u^2} \left[ \mp 2k^* \cos \theta \pm 2\sqrt{m_c m_d} \frac{u}{\hbar} [1 + 2\alpha E(\mathbf{k}^*)] \right] \right\} \right). \end{aligned} \quad (\text{C.0.2})$$

Simplifions un peu certains termes :

$$\begin{aligned}
&= \left(1 + 2\alpha E\right)^2 \left[1 + \frac{8\alpha m_d u^2}{(1 - 2\alpha m_d u^2)^2}\right] + \left(1 + 2\alpha E\right) \left[\frac{-16k^* \cos \theta \alpha u \hbar}{(1 - 2\alpha m_d u^2)^2} \sqrt{\frac{m_d}{m_c}} + \frac{8k^* \cos \theta \alpha u \hbar}{(1 - 2\alpha m_d u^2)} \sqrt{\frac{m_d}{m_c}}\right] \\
&\quad + \left[\frac{8k^{*2} \cos^2 \theta \alpha \hbar^2}{m_c (1 - 2\alpha m_d u^2)^2} - \frac{8k^{*2} \cos^2 \theta \alpha \hbar^2}{m_c (1 - 2\alpha m_d u^2)}\right].
\end{aligned} \tag{C.0.3}$$

Encore un peu de simplification :

$$\begin{aligned}
&= \left(1 + 2\alpha E\right)^2 \left[\frac{1 + 2\alpha m_d u^2}{(1 - 2\alpha m_d u^2)}\right]^2 - 2 \left(1 + 2\alpha E\right) \left[\frac{1 + 2\alpha m_d u^2}{(1 - 2\alpha m_d u^2)}\right] \left(\frac{4k^* \cos \theta \alpha u \hbar \sqrt{m_d}}{\sqrt{m_c} (1 - 2\alpha m_d u^2)}\right) \\
&\quad + \left(\frac{16k^{*2} \cos^2 \theta \alpha^2 u^2 \hbar^2 m_d}{m_c (1 - 2\alpha m_d u^2)^2}\right).
\end{aligned} \tag{C.0.4}$$

Ce qui donne le carré de la somme de deux termes :

$$= \left( \left(1 + 2\alpha E\right) \left[\frac{1 + 2\alpha m_d u^2}{(1 - 2\alpha m_d u^2)}\right] - \frac{4k^* \cos \theta \alpha u \hbar \sqrt{m_d}}{\sqrt{m_c} (1 - 2\alpha m_d u^2)} \right)^2. \tag{C.0.5}$$

On remplace cette expression dans la racine carré et les deux vont s'annuler, de sorte qu'il nous reste :

$$\begin{aligned}
|f'(q_0^*)| &= \frac{\frac{\hbar^2}{2m_c} (2q_0^* \pm 2k^* \cos \theta)}{(1 + 2\alpha E) \left[\frac{1 + 2\alpha m_d u^2}{(1 - 2\alpha m_d u^2)}\right] - \frac{4k^* \cos \theta \alpha u \hbar \sqrt{m_d}}{\sqrt{m_c} (1 - 2\alpha m_d u^2)}} \mp \hbar u \sqrt{\frac{m_d}{m_c}} \\
&= \frac{\frac{\hbar^2}{m_c} \left( \frac{1}{1 - 2\alpha m_d u^2} \left\{ \mp 2k^* \cos \theta \pm 2\sqrt{m_c m_d} \frac{u}{\hbar} (1 + 2\alpha E) \right\} \pm k^* \cos \theta \right)}{(1 + 2\alpha E) \left[\frac{1 + 2\alpha m_d u^2}{(1 - 2\alpha m_d u^2)}\right] - \frac{4k^* \cos \theta \alpha u \hbar \sqrt{m_d}}{\sqrt{m_c} (1 - 2\alpha m_d u^2)}} \mp \hbar u \sqrt{\frac{m_d}{m_c}} \\
&= \frac{\frac{\hbar^2}{m_c} \left( \mp 2k^* \cos \theta \pm 2\sqrt{m_c m_d} \frac{u}{\hbar} (1 + 2\alpha E) \pm k^* \cos \theta (1 - 2\alpha m_d u^2) \right)}{(1 + 2\alpha E) [1 + 2\alpha m_d u^2] - \frac{4k^* \cos \theta \alpha u \hbar \sqrt{m_d}}{\sqrt{m_c}}} \mp \hbar u \sqrt{\frac{m_d}{m_c}}.
\end{aligned} \tag{C.0.6}$$

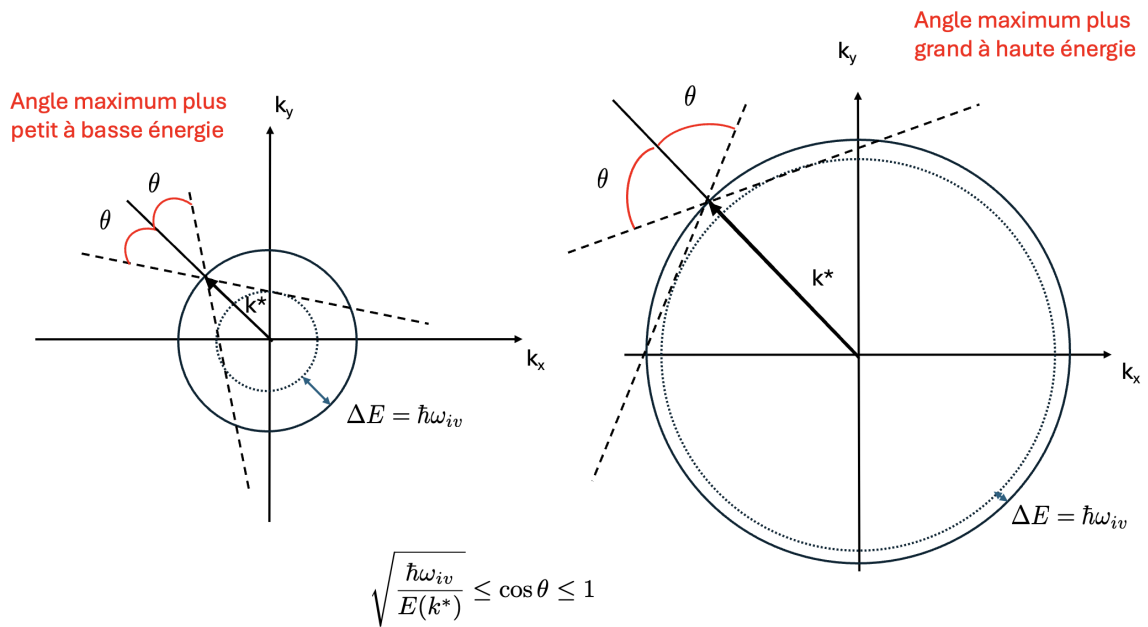
On met sur un dénominateur commun et on additionne les fractions ensemble :

$$\begin{aligned}
|f'(q_0^*)| &= \frac{\frac{\hbar^2}{m_c} \left( \mp 2k^* \cos \theta \pm 2\sqrt{m_c m_d} \frac{u}{\hbar} (1 + 2\alpha E) \pm k^* \cos \theta (1 - 2\alpha m_d u^2) \right)}{(1 + 2\alpha E) [1 + 2\alpha m_d u^2] - \frac{4k^* \cos \theta \alpha u \hbar \sqrt{m_d}}{\sqrt{m_c}}} \\
&\quad + \frac{\mp \hbar u \sqrt{\frac{m_d}{m_c}} \left( (1 + 2\alpha E) [1 + 2\alpha m_d u^2] - \frac{4k^* \cos \theta \alpha u \hbar \sqrt{m_d}}{\sqrt{m_c}} \right)}{(1 + 2\alpha E) [1 + 2\alpha m_d u^2] - \frac{4k^* \cos \theta \alpha u \hbar \sqrt{m_d}}{\sqrt{m_c}}} \\
&= \frac{\frac{\hbar^2}{m_c} \left( \mp 2k^* \cos \theta \pm 2\sqrt{m_c m_d} \frac{u}{\hbar} (1 + 2\alpha E) \pm k^* \cos \theta \mp 2\alpha m_d u^2 k^* \cos \theta \right)}{(1 + 2\alpha E) [1 + 2\alpha m_d u^2] - \frac{4k^* \cos \theta \alpha u \hbar \sqrt{m_d}}{\sqrt{m_c}}} \\
&\quad + \frac{\frac{\hbar^2}{m_c} \left( \mp (1 + 2\alpha E) \sqrt{m_c m_d} \frac{u}{\hbar} \mp (1 + 2\alpha E) \frac{u^3}{\hbar} \sqrt{m_c m_d} 2\alpha m_d \pm u^2 m_d \alpha 4k^* \cos \theta \right)}{(1 + 2\alpha E) [1 + 2\alpha m_d u^2] - \frac{4k^* \cos \theta \alpha u \hbar \sqrt{m_d}}{\sqrt{m_c}}} \\
&= \frac{\frac{\hbar^2}{m_c} \left( \mp k^* \cos \theta (1 - 2\alpha m_d u^2) \pm \sqrt{m_c m_d} \frac{u}{\hbar} (1 + 2\alpha E) (1 - 2m_d \alpha u^2) \right)}{(1 + 2\alpha E) [1 + 2\alpha m_d u^2] - \frac{4k^* \cos \theta \alpha u \hbar \sqrt{m_d}}{\sqrt{m_c}}} \\
&= \frac{\frac{\hbar^2}{2m_c} q_0^* \left( 1 - 2m_d \alpha u^2 \right)^2}{(1 + 2\alpha E) [1 + 2\alpha m_d u^2] - \frac{4k^* \cos \theta \alpha u \hbar \sqrt{m_d}}{\sqrt{m_c}}}.
\end{aligned} \tag{C.0.7}$$

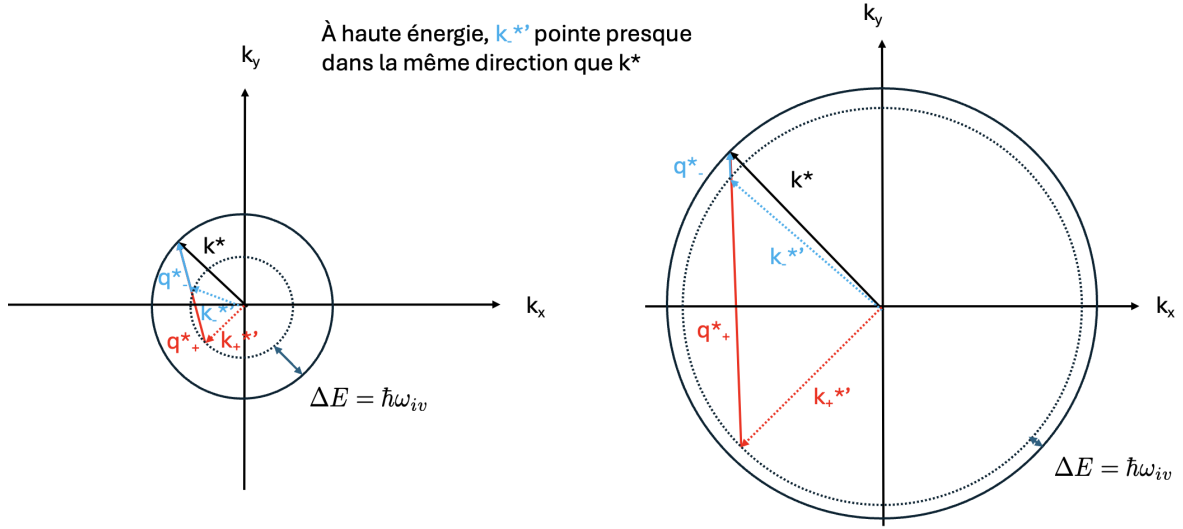


## Annexe D

### Schéma supplémentaires de la diffusions IV : angle d'émission maximal et direction de $k'^*$



**Fig. D.1.** Schéma de l'angle maximal d'émission par un électron lors de diffusions IV. L'angle maximal augmente avec l'énergie.



**Fig. D.2.** Schéma de la sélection de l'état final  $\mathbf{k}'^*$  lors de diffusions intervalées en fonction de l'énergie de l'électron. Pour des plus grandes énergies, une des solutions finales pointerait presque dans la même direction que  $\mathbf{k}$ .

## Annexe E

---

**Exemple de calcul pour trouver les fonctions de conversion de l'énergie  $E(\mathbf{k}^*)$  vers la quantité de mouvement  $\langle \mathbf{p} \rangle$  et vice-versa.**

Fonction *MapPtoEkin* :

$$\begin{aligned}\sqrt{M}T_i\langle \mathbf{p} \rangle &= \frac{1}{(1 + 2\alpha E(k))} \frac{m_c}{\sqrt{M}} T_i \hbar \vec{k} \\ &= \frac{1}{(1 + 2\alpha E(k))} \sqrt{m_c} \hbar \vec{k}^* \\ (\sqrt{M}T_i\langle \mathbf{p} \rangle)^2 &= \frac{1}{(1 + 2\alpha E(k))^2} m_c (\hbar \vec{k}^*)^2 \\ M(T_i\langle \mathbf{p} \rangle)^2 &= \frac{1}{(1 + 2\alpha E(k))^2} \frac{m_c^2}{2\alpha} [(1 + 2\alpha E)^2 - 1] \\ \Delta P &= \frac{m_c^2}{2\alpha} \left[ 1 - \frac{1}{(1 + 2\alpha E)^2} \right] \\ 1 - \frac{2\alpha}{m_c^2} \Delta P &= \frac{1}{(1 + 2\alpha E)^2} \\ \frac{\sqrt{\frac{1}{1 - \frac{2\alpha}{m_c^2} \Delta P}} - 1}{2\alpha} &= E.\end{aligned}\tag{E.0.1}$$

Fonction *MapEkinToP* :

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{p} \rangle &= |\langle \mathbf{p} \rangle| \hat{p} \\
\sqrt{M} T_i \langle \mathbf{p} \rangle &= |\langle \mathbf{p} \rangle| \sqrt{M} T_i \hat{p} \\
\frac{1}{(1 + 2\alpha E(k))} \frac{m_c}{\sqrt{M}} T_i \hbar \vec{k} &= |\langle \mathbf{p} \rangle| \sqrt{M} T_i \hat{p} \\
\frac{1}{(1 + 2\alpha E(k))} \sqrt{m_c} \hbar \vec{k}^* &= |\langle \mathbf{p} \rangle| \sqrt{M} T_i \hat{p} \\
\frac{1}{(1 + 2\alpha E(k))^2} m_c (\hbar \vec{k}^*)^2 &= |\langle \mathbf{p} \rangle|^2 (\sqrt{M} T_i \hat{p})^2 \\
\frac{1}{(1 + 2\alpha E(k))^2} \frac{m_c^2}{2\alpha} [(1 + 2\alpha E)^2 - 1] &= |\langle \mathbf{p} \rangle|^2 M (T_i \hat{p})^2 \\
\frac{m_c^2}{2\alpha} \left[ 1 - \frac{1}{(1 + 2\alpha E)^2} \right] &= |\langle \mathbf{p} \rangle|^2 \Delta P \\
\sqrt{\frac{\frac{m_c^2}{2\alpha} \left[ 1 - \frac{1}{(1 + 2\alpha E)^2} \right]}{\Delta P}} &= |\langle \mathbf{p} \rangle|.
\end{aligned} \tag{E.0.2}$$

# Annexe F

---

## Autres réalisations

Cet ouvrage est le produit final d'un long travail, mais elle ne montre pas nécessairement l'ensemble des autres réalisations que j'ai accompli tout au long de mon doctorat et qui ont mené ultimement à cet aboutissement final qu'est cette thèse. J'aimerais énumérer ici quelques uns de mes autres accomplissements.

Premièrement, j'ai participé à plusieurs congrès. À l'ACP de 2021, j'ai présenté sur l'éventuelle prise de mesure à l'UdeM du degré d'ionisation du Si à des énergies de recul nucléaire allant de quelques dizaines de eV à quelques centaines. Le tout n'a finalement pas encore abouti en raison des problèmes avec des scintillateurs liquides, mais d'autres élèves ont pris la relève entre temps car je me suis finalement orienté vers le volet simulation de SuperCDMS. À VIEWS 2024, nous avons présenté le module G4CMP et avons créé à la suite de ces conférences un groupe de discussion G4CMP hors-SuperCDMS qui se réunit de manière semi-hebdomadaire. Ce groupe est principalement composé de physiciens du domaine de l'informatique quantique. J'inclurais aussi les nombreuses réunions de collaboration annuelle de SuperCDMS où j'ai échangé autour de la simulation et présenté certaines améliorations à mes collègues de SuperCDMS qui ne sont pas nécessairement dans la branche de la modélisation.

Deuxièmement, j'ai participé à la rédaction d'articles, notamment celui de 2023 sur l'outil G4CMP [69] et celui sur le degré d'ionisation du Si [5]. Ce dernier était une prolongation du travail fait lors de mon mémoire où j'ai travaillé sur la calibration et l'analyse des PMTs de l'expérience IMPACT. De manière indirecte, j'ai aussi participé à la rédaction de d'autres articles de SuperCDMS car ils ont utilisé la simulation G4CMP pour analyser leurs données. Je pense notamment à l'article paru récemment sur la reconstruction NxM [7] qui n'utilisait pas encore toutes mes modifications apportés à G4CMP, mais quelques unes.

Troisièmement, tout au long de mon doctorat, j'ai présenté énormément de présentations techniques sur mon progrès, généralement de manière hebdomadaire ou bi-hebdomadaire.

Celles-ci montraient où j'en étais rendu, quel progrès j'avais fait, ce qui causait problème (les bug par exemple), les prochaines étapes, etc. Celles-ci sont majoritairement compilées sur le site *confluence* de SuperCDMS et ne sont donc malheureusement pas accessibles au public. Je rajouterais qu'on peut aussi voir mon progrès dans le système de billets *JIRA* de SuperCDMS où j'ai commenté, découvert de nouveaux bugs, réglés plusieurs de ceux-ci, etc. Malheureusement, cette page aussi n'est pas accessible au public.

Finalement, je rajouterais que j'ai contribué au code de G4CMP et que l'on peut voir mes traces sur le *GitHub* de G4CMP, qui lui est public. Les changements apportés sur Github sont souvent concentrés sur quelques semaines et espacés de quelques semaines/mois. En effet, ma démarche était souvent de développer théoriquement les mathématiques en premier, ce qui prenait du temps. Ensuite, je modifiais les équations théoriques du code par après. Puis, je réglais les bugs, faisais quelques vérifications et poussais mes changements sur GitHub.