Simulation de la cinétique des transitions électroniques entre les niveaux énergétiques d'un semiconducteur doté d'impuretés

J. Brini, G. Kamarinos, P. Viktorovitch

► To cite this version:

J. Brini, G. Kamarinos, P. Viktorovitch. Simulation de la cinétique des transitions électroniques entre les niveaux énergétiques d'un semiconducteur doté d'impuretés. *Revue de Physique Appliquée*, 1974, 9 (2), pp.451-454. 10.1051/rphysap:0197400902045100 . jpa-00243801

HAL Id: jpa-00243801

<https://hal.science/jpa-00243801>

Submitted on 1 Jan 1974

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Classification
 Physics Abstracts
 8.110 — 8.160 — 8.240

SIMULATION DE LA CINÉTIQUE DES TRANSITIONS ÉLECTRONIQUES ENTRE LES NIVEAUX ÉNERGÉTIQUES D'UN SEMICONDUCTEUR DOTÉ D'IMPURETÉS

J. BRINI, G. KAMARINOS et P. VIKTOROVITCH

Ecole Nationale Supérieure d'Electronique et de Radioélectricité,
 23, rue des Martyrs, 38031 Grenoble-Cedex, France

(Reçu le 16 août 1973)

Résumé. — Nous simulons la cinétique des interactions entre électrons libres, trous libres et impuretés dans un semiconducteur dont l'état stationnaire peut être hors de l'équilibre thermodynamique. L'identité formelle des équations de Shockley-Read avec des équations de cinétique chimique nous permet d'utiliser un ordinateur original destiné à simuler des réseaux de réactions chimiques (en neurobiologie par exemple). Nous obtenons la confirmation en régime dynamique de résultats, déduits d'expériences de photoconductivité, concernant les propriétés de piégeage des niveaux d'impuretés. La simulation nous conduit à dégager une méthode permettant de déterminer les caractéristiques des impuretés (niveau énergétique, densité, coefficients d'émission et de captation des électrons et des trous). Nous mettons également en évidence la possibilité de prévoir le comportement de milieux dotés de plusieurs niveaux d'impuretés.

Abstract. — We simulate the kinetics of interactions between free electrons, free holes and impurities in a semiconductor not necessarily in thermal equilibrium. The formal identity between Shockley-Read's and the chemical kinetic reaction equations allows us to use a special purpose computer originally designed to simulate systems of chemical reactions (for instance in neurobiology). We confirm the trapping properties of deep level impurities which were first deduced from decaying photoconductivity experiments. We evolve a method of determining the characteristics of impurities (energy level, density, probability of emission and capture of electrons and holes). We also show the feasibility of predicting the behaviour of semiconductors containing several impurities.

1. Introduction. — Les impuretés ou défauts introduisant des niveaux énergétiques localisés dans la bande interdite d'un semiconducteur jouent un rôle fondamental dans les processus de recombinaison des électrons et des trous [1]. En particulier, la présence d'impuretés à niveaux profonds et entraînant des durées de vie différentes pour les électrons et les trous peut conduire à l'apparition de phénomènes de résistance négative lors de l'injection de porteurs dans le milieu [2], [3], [4]. Ces effets constituent, à l'heure actuelle, l'un des principaux points de recherche sur les phénomènes d'injection en raison de l'importance des dispositifs à relaxation dans les systèmes électroniques. Il est donc d'un intérêt primordial de déterminer les caractéristiques de ces impuretés (niveaux énergétiques, densité, coefficients de captation et d'émission des électrons et des trous).

A cet effet, nous simulons sur un ordinateur la cinétique des interactions entre électrons libres (de densité n), trous libres (de densité p) et impuretés (de densité N_r), dans un semiconducteur.

Nous admettons que cette cinétique est décrite par les équations de Shockley-Read.

Si les impuretés introduisent un niveau unique E_r , on peut écrire :

$$\begin{cases} \frac{dn}{dt} = -C_n p_r n + \gamma_n n_r + g_n ; & (1) \\ \frac{dp}{dt} = -C_p n_r p + \gamma_p p_r + g_p ; & (2) \\ n_r = p - n ; & (3) \\ N_r = n_r + p_r . & (4) \end{cases}$$

g_n et g_p sont les taux de création (ou de disparition) des électrons et des trous libres. Les notations utilisées sont celles de Baron et Mayer [5].

Nous utilisons un ordinateur original [6] réalisé dans le laboratoire en vue de résoudre des problèmes de cinétique chimique en neurobiologie. En effet, on peut démontrer que les équations de Shockley-Read s'identifient à des équations de cinétique chimique [7]. Le principe du ordinateur repose sur l'analogie « bit-unité de matière » dans le cas de la biologie, sur l'ana-

logie « bit-collection de particules » dans le cas étudié.

Les unités ainsi définies sont accumulées dans des compteurs-décompteurs jouant le rôle de sommateurs-intégrateurs et transférées à l'aide de multiplieurs de taux jouant le rôle de multiplicateurs.

Le calculateur ainsi réalisé est l'équivalent d'une machine analogique dont la définition serait d'un dix millième de la grandeur maximale affichable. Par conséquent, les variables à traiter ne doivent pas dépasser une dynamique de 10^4 et la précision maximale est de 10^{-4} . De telles performances ne sont pas atteintes actuellement par les calculateurs analogiques classiques. La précision sur le temps permet d'observer l'évolution des variables unité par unité.

Le calculateur permet de visualiser aisément sur un oscilloscope l'évolution temporelle des variables grâce à un retour périodique aux conditions initiales choisies. Il est clair que, pour t tendant vers l'infini, on obtient un état final qui nous donne les valeurs stationnaires des variables. Ces valeurs pourraient être obtenues par un calcul sur ordinateur.

Par contre, l'exploration du régime transitoire nécessiterait un calcul extrêmement lourd pour un ordinateur classique en raison du caractère non linéaire des équations.

2. Conditions de calcul et analyse des résultats. — Imposant initialement un écart $\Delta n_i = \Delta p_i$ ($\Delta n_{r_i} = 0$) des densités d'électrons libres et de trous libres par rapport au régime stationnaire (correspondant ou non à l'équilibre thermodynamique), nous étudions l'évolution temporelle des trois variables : n , n_r et p .

On appelle : n_0, n_{r0}, p_0, p_{r0} , les densités à l'équilibre thermodynamique, n_s, n_{rs}, p_s, p_{rs} , les densités en régime stationnaire (hors de l'équilibre).

FIG. 1. — Echelles : n et p : $2 \times 10^{21} \text{ m}^{-3}$ par division, n_r : 10^{21} m^{-3} par division, temps : $2 \times 10^{-6} \text{ s}$ par division.

La figure 1 donne la forme des oscillogrammes typiques obtenus dans les trois cas suivants :

a) $C_n p_{r0} > C_p n_{r0}$. Dans ce cas, nous voyons que le niveau d'impureté se comporte comme un piège à électrons [4]. En effet, la décroissance de l'excès d'électrons est plus rapide que celle de l'excès de trous et le taux d'occupation en électrons du niveau d'impureté passe par un extrémum $n_{rs} + \Delta n_{rm}$ qui est un maximum.

b) $C_n p_{r0} < C_p n_{r0}$. Le niveau d'impureté, à l'inverse du cas précédent, se comporte comme un piège à trous ($n_{rs} + \Delta n_{rm}$ est un minimum).

c) Dans le cas où $C_n p_{r0} = C_p n_{r0}$, le niveau d'impureté se comporte comme un centre de recombinaison idéal. Le taux d'occupation reste invariant et les décroissances des deux excès Δn et Δp sont identiques.

Les oscillogrammes nous ont permis d'observer que l'instant t_m du passage par un extrémum du taux d'occupation du niveau d'impureté correspond à une rupture de pente des deux courbes d'évolution de n et p . C'est cette rupture de pente qu'on observe expérimentalement lors de la décroissance de la photoconductivité d'un barreau de semiconducteur après une brève illumination [1], [4]. Nous allons plus particulièrement nous intéresser aux variations de Δn_{rm} en fonction du rapport C_p/C_n et de g_n et g_p .

2.1 CAS OU LE RÉGIME STATIONNAIRE CORRESPOND À L'ÉQUILIBRE THERMODYNAMIQUE ($g_n = g_p = 0$). — Sur la figure 2, nous avons tracé, pour une valeur donnée de Δn_i , les variations de Δn_{rm} en fonction de C_p/C_n . On constate bien que, pour la valeur correspondant à $C_p n_{r0} = C_n p_{r0}$, Δn_{rm} change de signe. Dans les cas limites où C_p ou C_n tend vers 0 (C_n ou C_p tend vers l'infini), la limite de Δn_{rm} est définie par Δn_i et l'une des deux équations cinétiques qui se réduit à une pseudo-loi d'action de masse entre le niveau d'impureté et la bande de valence ou la bande de conduction. Physiquement, ces cas correspondent à l'impossibilité de la recombinaison par le biais de ce centre des paires injectées initialement.

FIG. 2.

Remarques. — 1) Le rapport C_p/C_n est bien le paramètre unique caractérisant la cinétique du phénomène ; en effet, lorsque $g_n = g_p = 0$, multiplier C_n et C_p par une même constante, revient à dilater l'échelle des temps.

2) Pour une valeur donnée du rapport C_p/C_n , Δn_{rm} est une fonction monotone de Δn_i et tend, pour des valeurs très grandes et positives de Δn_i , vers une limite finie correspondant à $C_p n_r = C_n p_r$.

2.2 CAS OU L'ÉTAT STATIONNAIRE EST DISTINCT DE L'ÉQUILIBRE THERMODYNAMIQUE ($g_n \neq 0$, $g_p \neq 0$). — Dans

ce cas, on est en présence d'une transition entretenue entre les divers niveaux considérés (bande de valence, bande de conduction, niveau d'impureté). Nous nous limiterons à la situation où $g_n = g_p = g$, ce qui correspond à une transition directe entre bande de valence et bande de conduction. Cette situation se rencontre chaque fois qu'en régime stationnaire le semiconducteur est le siège de courants de diffusion d'électrons et de trous.

Les figures 3 et 4, montrent que les propriétés de piégeage des centres sont accrues pour des valeurs négatives de g et réduites au contraire pour des valeurs positives de g .

La figure 3 représentant l'évolution de n_{rs} en fonction de g pour diverses valeurs de C_p/C_n montre en effet que les quantités $C_p n_{rs}$ et $C_n p_{rs}$ divergent l'une de l'autre pour $g < 0$. Pour $g > 0$ et très grand, les valeurs limites sont telles que, dans tous les cas, on a : $C_p n_{rs} = C_n p_{rs}$.

FIG. 3.

FIG. 4.

La figure 4 confirme, en régime dynamique, les résultats obtenus en régime stationnaire : en effet, Δn_{rm} tend vers 0 pour $g > 0$ et croît en valeur absolue pour $g < 0$. Pour $C_p n_{r0} = C_n p_{r0}$, on a $\Delta n_{rm} = 0$ pour tout g .

Remarque. — Pour g non nul, C_p/C_n n'est plus un paramètre unique. Les trois grandeurs g , C_n et C_p sont définies à une constante multiplicative près. Nous avons choisi de maintenir C_p constant et égal à $10^{-15} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$.

3. Conclusion. — Les résultats de la simulation sont en bon accord avec les expériences de photoconductivité effectuées sur des barreaux de germanium sièges du phénomène de magnétoconcentration [4], [8]. La magnétoconcentration provoque un appauvrissement stationnaire en porteurs libres dans le volume du semiconducteur ($g < 0$).

FIG. 5. — Mise en évidence d'une rupture de pente dans la décroissance de photoconductivité. Le barreau de germanium utilisé ($\rho \sim 50 \Omega \cdot \text{cm}$ à 300 K) est doté de centres accepteurs profonds ($N_r \simeq 10^{21} \text{ m}^{-3}$, $E_r - E_v \simeq 0,48 \text{ eV}$). Pendant l'expérience [4], [8], il était le siège de l'effet de magnétoconcentration ($B_z = 0,8 \text{ T}$, $E_x = 12 \text{ V/cm}$, $T = 300 \text{ K}$). Echelles : 200 mV/div., 50 $\mu\text{s/div.}$

Nous avons observé la décroissance de la photoconductivité du milieu après une brève illumination de ce dernier. Cette décroissance présente une rupture de pente d'autant plus importante que l'appauvrissement est plus intense. Ce comportement s'interprète aisément à la lumière des résultats de notre simulation. Celle-ci montre en effet :

- que $|\Delta n_{rm}|$ est fonction croissante de l'appauvrissement (voir Fig. 4),
- que la rupture de pente est d'autant plus importante que Δn_{rm} est plus grand.

4. Perspectives. — Nous nous proposons de déterminer les caractéristiques des centres d'impuretés en confrontant les résultats expérimentaux avec ceux de la simulation :

— Dans un premier temps, des mesures de conductivité et d'effet Hall donnent les variations de n_0 et p_0 en fonction de la température (après un choix judicieux des lois des mobilités). Le calculateur

permet alors, par approches successives, de déterminer N_r et E_r de manière à obtenir les mêmes lois de variation de n_0 et p_0 en fonction de la température.

— Confrontant ensuite les expériences de photoconductivité et la simulation en régime dynamique, on peut remonter aux coefficients cinétiques C_n et C_p réels.

Il est bien connu que la simulation ne se borne pas seulement à la vérification d'un modèle ou à la confrontation avec l'expérience réelle, mais qu'elle peut également s'avérer indispensable à la prévision du comportement de systèmes plus complexes. C'est pourquoi nous nous proposons de généraliser la simulation au cas de plusieurs niveaux d'impuretés : nous pourrions ainsi non seulement confirmer l'existence de plusieurs ruptures de pente dans l'évolution temporelle de n et de p (que nous avons mis en évidence lors d'expériences de photoconductivité), mais

encore prévoir d'autres comportements plus complexes (par exemple : photoconductivité négative).

FIG. 6. — Mise en évidence de trois ruptures de pente dans la décroissance de photoconductivité sur un barreau de germanium de haute résistivité en régime de magnétoconcentration ($E_x = 10$ V/cm, $B_z = 0,8$ T, $T = 270$ K). Echelles : 200 mV/div., 100 μ s/div.

Bibliographie

- [1] VAPAILLE, A., *Physique des dispositifs à semiconducteurs* 1 (Masson & Cie ed.) 1970.
- [2] ASHLEY, K. L., MILNES, A. G., *J. Appl. Phys.* **35** (1964) 369.
- [3] MAYER, J. W., BARON, R., MARSH, O. J., *Appl. Phys. Lett.* **6** (1965) 38.
- [4] VIKTOROVITCH, P., KAMARINOS, G., *Phys. Stat. Sol. (a)* **16** (1973) 219.
- [5] BARON, R., MAYER, J. W., *Semiconductors and semimetals* Vol. 6 : Injection Phenomena, Chap. 4, Willardson & Beer (Acad. Press ed.) 1970.
- [6] BRINI, J., HERAULT, J., *C. R. Hebd. Séan. Acad. Sci. (Paris)* **D 275** (1972) 2167.
- [7] VIKTOROVITCH, P., KAMARINOS, G., *C. R. Hebd. Séan. Acad. Sci. (Paris)* **277B** (1973) 305.
- [8] CHOVET, A., KAMARINOS, G., *Revue Phys. Appl.* **6** (1971) 345.