Simulation numérique des courants et des distributions de porteurs dans les diélectriques contenant des impuretés

G. Ormancey, J.P. Bardet, G. Godefroy

► To cite this version:

G. Ormancey, J.P. Bardet, G. Godefroy. Simulation numérique des courants et des distributions de porteurs dans les diélectriques contenant des impuretés. *Revue de Physique Appliquée*, 1980, 15 (5), pp.927-935. 10.1051/rphysap:01980001505092700 . jpa-00244807

HAL Id: jpa-00244807

<https://hal.science/jpa-00244807>

Submitted on 1 Jan 1980

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
77.50

Simulation numérique des courants et des distributions de porteurs dans les diélectriques contenant des impuretés

G. Ormancey, J. P. Bardet et G. Godefroy

Laboratoire de Diélectriques, Equipe de Physique du Solide (*), Faculté des Sciences Mirande, 21100 Dijon, France

(Reçu le 5 octobre 1979, révisé le 21 décembre 1979, 4 février 1980, accepté le 14 février 1980)

Résumé. — Une méthode numérique permettant de résoudre les équations de transport dans les diélectriques est présentée. On étudie un modèle avec électrons, trous et impuretés. On discute les conditions aux limites, la recombinaison. On donne les caractéristiques $I = f(v)$, les distributions de potentiel et de porteurs pour un échantillon avec impuretés.

Abstract. — A numerical method is used to resolve transport equations in dielectrics. A model with electrons, holes and impurities is described. Boundary conditions and recombination are discussed. $I = f(v)$ characteristics, potential and carrier distributions on a sample with impurities are described.

1. Introduction. — Nous avons présenté précédemment une méthode de calcul numérique et des résultats concernant les courants dans un isolant à un seul type de porteurs. Dans ces travaux, destinés à mettre au point les programmes informatiques dans le cas d'hypothèses simples, nous avons supposé la conduction dans le diélectrique due aux seuls électrons (ou trous). Ces électrons peuvent être injectés par les électrodes [1] ou être liés à la présence de lacunes d'oxygène [2] dans le cas du rutile. Dans ces deux cas toutefois la concordance avec l'expérience n'était pas parfaite, ce qui nous a conduit à considérer un modèle de conduction utilisant les électrons injectés par les électrodes en équilibre avec des ions mobiles : les lacunes d'oxygène peuvent interagir avec les électrons par recombinaison thermique, et également participer au courant. La complexité liée à ces relations entre porteurs est nécessaire pour expliquer nos résultats expérimentaux tant sur le rutile que sur les distributions de potentiel [3] et les mesures de courant [4] dans le titanate de baryum.

Ce type de résultats a été interprété par G. Godefroy [5] ainsi que par M. Maitrot [6] par des déplacements ioniques avec différentes conditions aux limites. M. A. Lampert [7], R. Coelho [8], A. Rosenthal et A. Sapar [9] ... etc, utilisant l'approximation de N. F. Mott, considèrent au contraire une injection d'électrons ou de trous en présence d'impuretés

fixes dans le matériau. Cette théorie électronique permet d'interpréter clairement les résultats de mesures de courant ; par contre les déplacements ioniques sont nécessaires pour expliquer les distributions de potentiel obtenues expérimentalement.

Par ailleurs sont apparues dernièrement des méthodes de résolution numérique par itérations pour résoudre les équations de transport dans les semiconducteurs, méthodes développées par H. K. Gummel [10], R. Funck [11], M. Rfiser [12] ... etc pour l'étude des jonctions P.N. et des transistors.

A la suite de cette étude bibliographique, nous avons mis au point une méthode de calcul numérique direct, sans approximations, par itérations successives. Nous avons rendu compte de l'injection électronique en écrivant l'équilibre entre les électrons des électrodes et ceux de l'isolant. Nous avons considéré d'autre part des impuretés susceptibles de se déplacer dans le matériau et de se recombiner avec électrons et trous.

2. Modèle théorique. — 2.1 CHOIX DU MODÈLE. — Le modèle le plus général du matériau peut être décrit par un schéma de bandes comportant :

- une bande de conduction et une bande de valence,
- deux niveaux discrets d'impuretés.

Chaque niveau d'impureté correspond à deux particules mobiles selon que l'impureté a ou n'a pas capté d'électrons. Ces deux niveaux d'impureté, d'éner-

(*) Associé au C.N.R.S. n° 19.

gies W_1 et W_1' , correspondent, l'un à une particule neutre avant capture, négative après, l'autre à une particule positive avant capture, neutre après.

On peut ainsi représenter tous les cas, avec impuretés positives, neutres ou négatives.

Chaque particule mobile est définie par cinq paramètres :

- sa charge électrique : q ,
- sa mobilité : μ ,
- son niveau d'énergie : W ,
- le nombre total de places pour les électrons à ce niveau : N ,
- des coefficients de recombinaisons avec les autres particules : R .

Le nombre de ces paramètres peut paraître *a priori* trop élevé pour la confection d'un modèle comparable utilement à l'expérience. Toutefois, nous verrons au niveau des résultats des calculs effectués sur ce modèle, que pour chaque domaine d'utilisation, seul un nombre très réduit de paramètres a une influence sur le comportement de l'isolant. Le modèle complet est nécessaire seulement pour permettre une étude générale.

2.2 EQUATIONS. — Nous nous limitons à l'étude à une seule dimension d'un échantillon de longueur L , les deux autres dimensions sont considérées comme infinies.

Pour chaque porteur, nous définissons un courant i_c dû au champ électrique et à la diffusion. La somme de ces courants pour les différents porteurs et du courant de déplacement donne le courant total i , effectivement mesuré dans le circuit extérieur :

$$i = \sum i_c + \varepsilon \frac{\partial E}{\partial t}.$$

On peut noter que i_c et E dépendent de x et de t alors que i ne dépend que de t . Ceci constitue un bon test pour détecter les fautes éventuelles de programmation puisque i doit être indépendant de x quel que soit t .

Pour un porteur de concentration Q , de charge q , de coefficient de diffusion D , en supposant valable la relation d'Einstein $\mu = D |q| / kT$, nous écrivons le courant :

$$i_c = \frac{D}{kT} q^2 EQ - qD \frac{\partial Q}{\partial x}$$

et la conservation des charges

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = -\frac{1}{q} \frac{\partial i_c}{\partial x} + \theta \quad (q \neq 0)$$

avec θ terme dû à la génération et la recombinaison de particules. Pour une particule neutre nous écrivons la conservation :

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = D \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2} + \theta \quad (q = 0).$$

Soit finalement une expression valable quel que soit q :

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = -\frac{D}{kT} q \frac{\partial QE}{\partial x} + D \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2} + \theta. \quad (1)$$

Equation à laquelle il faut ajouter

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{1}{\varepsilon} \sum qQ \quad (2)$$

$$\frac{\partial V}{\partial x} = -E. \quad (3)$$

L'ensemble des équations (1), (2) et (3) constitue un système d'équations aux dérivées partielles qui peut théoriquement être résolu.

2.3 CONDITIONS AUX LIMITES. — Le système d'équations aux dérivées partielles doit être complété par des conditions aux limites. Les équations (2) et (3) sont deux équations du 1^{er} ordre en x . Elles doivent être accompagnées des deux conditions :

$$V = 0 \quad \text{pour } x = 0$$

$$V = V \quad \text{appliqué pour } x = L.$$

L'équation (1) est du premier ordre en t . Elle exige la connaissance de conditions initiales, densité Q_0 pour $t = t_0$ connue pour toutes les valeurs de x .

Ces valeurs Q_0 seront les résultats d'un calcul précédent, au temps t_0 . Pour une première étude, Q_0 au temps $t_0 = 0$ sera la densité de particules à l'équilibre, obtenue en faisant $dt = \infty$ ($\partial Q / \partial t = 0$).

En x , l'équation (1) est du second ordre. Il faut deux conditions aux limites en x .

Pour les impuretés, nous admettons un courant nul aux bords, exprimant le fait que les impuretés ne peuvent pas sortir de l'échantillon

$$i_c = 0 \quad \text{pour } x = 0$$

$$i_c = 0 \quad \text{pour } x = L.$$

Ces conditions, électrodes bloquantes, impliquent que le nombre total d'impuretés dans l'échantillon soit constant en fonction du temps t .

Pour les électrons, les conditions aux limites correspondent en $x = 0$ et $x = L$ à l'équilibre entre les électrons du métal de l'électrode et les électrons de l'isolant. Nous avons présenté en détail ces conditions dans notre étude sur l'isolant à un seul type de porteurs [1]. Nous donnerons seulement le résultat, s'exprimant par les courants en $x = 0$ et $x = L$ pour les électrons (pour un champ $E > 0$) :

en $x = L$

$$i_L = \frac{4 \pi m (kT)^2 e}{\hbar^3} \cdot \exp -\frac{\Delta W}{kT} - n_L e \frac{kT^{1/2}}{2 \pi m} + \mu n_L e E \cdot A + \mu kT \frac{\partial n_L}{\partial x} \cdot B$$

en $x = 0$

$$i_0 = \underbrace{-\frac{4\pi m(kT)^2 e}{\hbar^3} \cdot \exp -\frac{\Delta W}{kT} + n_0 e \frac{kT^{1/2}}{2\pi m}}_{\text{termes dus au flux thermique}} + \underbrace{\mu n_0 e E(1-A)}_{\text{termes de champ}} + \underbrace{\mu kT \frac{\partial n_0}{\partial x} \cdot (1-B)}_{\text{termes de diffusion}}$$

où

- ΔW est le travail de sortie du métal vers l'isolant,
- A et B deux paramètres fonction du champ E (A et B sont égaux à $1/2$ lorsque E est petit, égaux à 0 lorsque E est très supérieur à 10^6 V/m).

Aux faibles champs électriques ($E \ll 10^6$ V/m) ces conditions fixent pratiquement la concentration des électrons aux bords :

$$n_0 \simeq n_L \simeq 2 \cdot \frac{(2\pi m kT)^{3/2}}{\hbar^3} \cdot \exp -\frac{\Delta W}{kT}.$$

Aux champs élevés au contraire les conditions en 0 et L sont totalement dissymétriques.

2.4 RECOMBINAISON. — Il s'agit d'exprimer le terme de l'équation (1) représentant les sauts d'électrons d'un niveau énergétique à l'autre. On suppose dans ce calcul des échanges d'électrons entre bande de conduction, bande de valence et impuretés mais aucun saut d'électrons d'une impureté à l'autre

— entre bande de conduction et bande de valence :

$$\text{el}_{\text{cond.}} + \text{trou} \rightleftharpoons \text{el}_{\text{val.}} + \text{place libre cond.}$$

— pour chaque niveau d'impureté (particules correspondantes Q_1, Q_2)

$$\text{el}_{\text{cond.}} + Q_1 \rightleftharpoons Q_2 + \text{place libre cond.}$$

$$\text{trou} + Q_2 \rightleftharpoons Q_1 + \text{el}_{\text{val.}}.$$

Les concentrations de particules sont données à l'équilibre thermique :

$$n = N_c \exp \frac{W_F - W_c}{kT}$$

$$P = N_v \exp \frac{W_v - W_F}{kT}$$

$$Q_2 = \frac{N_t}{1 + \exp \frac{W_1 - W_F}{kT}}$$

$$Q_1 = \frac{N_t}{1 + \exp \frac{W_F - W_1}{kT}}$$

avec :

W_1 niveau d'énergie de l'impureté,

$N_t = Q_1 + Q_2$ la densité totale d'impureté (Q_1 impureté n'ayant pas d'électron, Q_2 impureté ayant piégé un électron).

Hors d'équilibre (en présence d'un champ, d'un gradient) les coefficients θ s'expriment en fonction des différentes vitesses des réactions :

— pour les électrons de la bande de conduction

$$\theta_{\text{el}} = R_{\text{el.trous}} \cdot [A_1 - n \cdot P] + R_{\text{el.Q}_1} \cdot [A_2 Q_2 - n Q_1]$$

— pour les trous de la bande de valence

$$\theta_{\text{trous}} = R_{\text{el.trous}} \cdot [A_1 - nP] + R_{\text{trous.Q}_2} [A_3 Q_1 - PQ_2]$$

— pour chaque niveau d'impureté

$$\theta_{Q_1} = -\theta_{Q_2} = R_{\text{el.Q}_1} [A_2 Q_2 - n Q_1] + R_{\text{trous.Q}_2} [PQ_2 - A_3 Q_1]$$

avec $R_{a,b}$ les constantes de recombinaisons et les constantes d'équilibre :

$$A_1 = N_c N_v \exp \frac{W_v - W_c}{kT}$$

$$A_2 = N_c \exp \cdot \frac{W_1 - W_c}{kT}$$

$$A_3 = N_v \exp \cdot \frac{W_v - W_1}{kT}.$$

2.5 TECHNIQUE DE CALCUL. — Nous n'entrerons pas dans le détail de cette résolution. Signalons simplement deux difficultés de ce travail :

— en premier lieu, les équations font apparaître souvent, du point de vue numérique, la différence, très faible, entre deux nombres très grands. Ce fait est inacceptable pour un ordinateur et on doit contourner cette difficulté, soit en modifiant les équations, soit même en introduisant des variables supplémentaires (charge électrique σ , nombre total d'impureté N_t , etc...);

— en second lieu les équations sont non linéaires à cause des termes de champ et de recombinaison θ . Ceci nécessite une méthode itérative : pour calculer les densités de porteurs Q à l'instant t à partir des valeurs Q_0 à l'instant t_0 , on indice en $Q^{(d)}$ une valeur courante de Q .

E et θ étant exprimés en fonction de $Q^{(d)}$, les équations permettent de trouver la valeur $Q^{(d+1)}$ à l'itération suivante. On choisit au départ $Q^{(d)} = Q_0$, et on calcule les valeurs de $Q^{(d)}$ pour des itérations

successives ($\delta = 1, 2, 3, \dots$, etc.), jusqu'à ce que $Q^{(\delta)}$ ne varie plus. On écrit alors $Q = Q^{(\delta)}$. L'ordinateur exprimant le résultat $Q^{(\delta)}$ avec 8 chiffres significatifs, Q est connu avec une erreur relative de 10^{-8} .

La non-linéarité étant levée par itération le système se ramène à une matrice *tridiagonale* : tous les termes de la matrice sont nuls sauf la première diagonale et deux droites situées de part et d'autre de celle-ci. Une telle matrice est facile à diagonaliser.

Cette technique peut être résumée par l'organigramme (Fig. 1) où l'indice i représente les valeurs de x , l'indice j les valeurs de t , et δ l'indice lié aux itérations successives.

Fig. 1. — Organigramme.

[Algorithm.]

3. Résultats obtenus. — Rappelons rapidement d'abord les résultats que nous avons publiés antérieurement [1, 2] concernant un isolant à un seul type de porteur : la caractéristique courant-tension $I = f(V)$ présente quatre régions en fonction du potentiel appliqué. Pour une tension croissante à partir de zéro, on trouve successivement, en coordonnées logarithmiques (Fig. 2) :

— une région linéaire de pente 1 (région ohmique)

$$I = KV,$$

— une région linéaire de pente 2 (région quadratique)

$$I = K' V^2,$$

Fig. 2. — Influence du travail de sortie : $\epsilon_r = 227$, $L = 10^{-2}$ m, $T = 300$ K. 1) $\Delta W = 1$ eV, 2) $\Delta W = 0,6$ eV, 3) $\Delta W = 0,5$ eV.

[Influence of extraction work : $\epsilon_r = 227$, $L = 10^{-2}$ m, $T = 300$ K. 1) $W = 1$ eV, 2) $W = 0.6$ eV, 3) $W = 0.5$ eV.]

— une nouvelle région de pente 1

$$I = K'' V,$$

— une saturation

$$I = \text{Cte}.$$

Les deux premières régions ne dépendent que de l'échantillon (longueur de l'échantillon et mobilité du porteur) :

$$I = 44 \frac{kT}{|q|} \frac{\epsilon \mu V}{L^3}$$

$$I = \frac{9}{8} \frac{\epsilon \mu V^2}{L^3}.$$

La région ohmique correspond à une charge injectée par les électrodes sensiblement symétrique par rapport à l'échantillon, la région quadratique correspondant à un déplacement de la charge injectée lorsque le champ appliqué est suffisant.

Au contraire les deux dernières régions, où la charge injectée est sensiblement uniforme au sein de l'échantillon, dépendent du contact métal-diélectrique (travail de sortie des électrons).

Cette étude à un type de porteur avait donné des résultats proches de l'expérience, avec toutefois des valeurs des potentiels de transition entre les différentes régions, et des distributions de potentiel expérimentales non retrouvées par le calcul. Ces différences entre théorie et expérience nous ont

conduits à l'étude d'un isolant avec impuretés. Nous nous bornerons pour cet échantillon avec impuretés à quelques résultats généraux, l'étude complète étant en cours.

Nous avons considéré un échantillon contenant des électrons en équilibre avec ceux des électrodes et un niveau d'impureté, les impuretés ne pouvant pas quitter le cristal (électrodes bloquantes), sans recombinaison.

3.1 IMPURETÉ NÉGATIVE. — Les électrons et les impuretés ayant une charge de même type subissent de la part du champ électrique des actions assez voisines, les différences étant dues aux conditions aux limites différentes.

Sans champ appliqué, on observe (Fig. 3 et 4 pour deux concentrations différentes en impuretés) que les densités des électrons et des impuretés varient de façons similaires en x . Le nombre d'électrons injectés est plus petit que dans le cas d'un échantillon contenant seulement des électrons. C'est la charge en un point donné (somme des concentrations en électrons et en impuretés négatives qui est égale à la concentration en électrons du cristal pur au même point.

Fig. 3. — Matériau contenant électrons et impuretés négatives : $N_i = 10^{14}/\text{m}^2$, $V_{\text{appl.}} = 0$, $\epsilon_r = 227$, $T = 300 \text{ K}$, $L = 1 \text{ cm}$. ■ impuretés, ● électrons, ○ rappel modèle à un porteur (électrons).

[Material with electrons and negative impurities : $N_i = 10^{14}/\text{m}^2$, $V_{\text{appl.}} = 0$, $\epsilon_r = 227$, $T = 300 \text{ K}$, $L = 1 \text{ cm}$. ■ impurities, ● electrons, ○ model with only one carrier (electrons).]

En présence d'un potentiel appliqué, les deux porteurs se comportent différemment à cause des conditions aux limites (Fig. 5) :

— le nombre d'électrons injectés augmente par rapport à l'échantillon en court-circuit, tendant à uniformiser la densité d'électrons dans l'échantillon ;

— les impuretés, en nombre fixe, se tassent contre l'électrode positive, leur densité étant très faible dans le reste de l'échantillon.

Fig. 4. — Matériau contenant électrons et impuretés négatives : $N_i = 10^{15}/\text{m}^2$, $V_{\text{appl.}} = 0$, $\epsilon_r = 227$, $T = 300 \text{ K}$, $L = 1 \text{ cm}$. ○ impuretés, ● électrons.

[Material with electrons and negative impurities : $N_i = 10^{15}/\text{m}^2$, $V_{\text{appl.}} = 0$, $\epsilon_r = 227$, $T = 300 \text{ K}$, $L = 1 \text{ cm}$. ○ impurities, ● electrons.]

Fig. 5. — Matériau contenant électrons et impuretés négatives : $N_i = 10^{15}/\text{m}^2$, $V_{\text{appl.}} = 10 \text{ V}$, $\epsilon_r = 227$, $T = 300 \text{ K}$, $L = 1 \text{ cm}$. ○ impuretés, ● électrons.

[Material with electrons and negative impurities : $N_i = 10^{15}/\text{m}^2$, $V_{\text{appl.}} = 10 \text{ V}$, $\epsilon_r = 227$, $T = 300 \text{ K}$, $L = 1 \text{ cm}$. ○ impurities, ● electrons.]

Les impuretés ont alors une influence très peu importante, la distribution des électrons est très proche de celle obtenue pour le modèle à un seul porteur. La distribution de potentiel (Fig. 6) est très peu modifiée par la présence des impuretés.

Les impuretés négatives ont donc pour effet de diminuer le nombre d'électrons injectés en l'absence de tension appliquée, sans changer la charge totale injectée. Sous potentiel appliqué, les impuretés n'ont pratiquement pas d'effet.

Fig. 6. — Matériau contenant électrons et impuretés négatives : $N_i = 10^{15}/\text{m}^2$, $V_{\text{appl.}} = 10 \text{ V}$, $\epsilon_r = 227$, $T = 300 \text{ K}$, $L = 1 \text{ cm}$. $\circ$ rappel modèle à un porteur (électrons), $\bullet$ distribution de potentiel.

[Material with electrons and negative impurities : $N_i = 10^{15}/\text{m}^2$, $V_{\text{appl.}} = 10 \text{ V}$, $\epsilon_r = 227$, $T = 300 \text{ K}$, $L = 1 \text{ cm}$. $\circ$ model with only one carrier (electrons), $\bullet$ potential distribution.]

3.2 IMPURETÉ POSITIVE. — Sans champ appliqué, la figure 7 montre une compensation entre électrons et impuretés positives. La distribution des impuretés est sensiblement uniforme dans l'échantillon, sauf au bord. La concentration d'électrons injectés est pratiquement égale à la concentration d'impuretés. Par rapport au modèle à un porteur, on a donc une augmentation considérable du nombre d'électrons injectés, mais une diminution de la charge effective en un point de l'échantillon (sauf aux bords).

Avec un champ appliqué, le comportement des porteurs est différent selon la valeur du nombre

Fig. 7. — Matériau contenant électrons et impuretés positives : $N_i = 1,3 \times 10^{13}/\text{m}^2$, $V_{\text{appl.}} = 0$, $\epsilon_r = 227$, $T = 300 \text{ K}$, $L = 1 \text{ cm}$. $\circ$ impuretés, $\bullet$ électrons.

[Material with electrons and positive impurities :

$$N_i = 1,3 \times 10^{13}/\text{m}^2,$$

$V_{\text{appl.}} = 0$, $\epsilon_r = 227$, $T = 300 \text{ K}$, $L = 1 \text{ cm}$. $\circ$ impurities, $\bullet$ electrons.]

total d'impuretés dans l'échantillon. Pour une concentration moyenne d'impuretés très inférieure à la densité d'électrons aux bords (Fig. 8), les impuretés se bloquent au voisinage de l'électrode négative, et comme pour l'impureté négative leur effet est très faible. La distribution des électrons, et la distribution de potentiel (Fig. 9) sont pratiquement celles du modèle à un porteur.

Au contraire, pour une concentration moyenne en impuretés plus grande que la densité d'électrons

Fig. 8. — Matériau contenant électrons et impuretés positives : $N_i = 1,3 \times 10^{13}/\text{m}^2$, $V_{\text{appl.}} = 10 \text{ V}$, $\epsilon_r = 227$, $T = 300 \text{ K}$, $L = 1 \text{ cm}$. $\circ$ impuretés, $\bullet$ électrons.

[Material with electrons and positive impurities :

$$N_i = 1,3 \times 10^{13}/\text{m}^2,$$

$V_{\text{appl.}} = 10 \text{ V}$, $\epsilon_r = 227$, $T = 300 \text{ K}$, $L = 1 \text{ cm}$. $\circ$ impurities, $\bullet$ electrons.]

Fig. 9. — Matériau contenant électrons et impuretés positives : $N_i = 1,3 \times 10^{13}/\text{m}^2$, $V_{\text{appl.}} = 10 \text{ V}$, $\epsilon_r = 227$, $T = 300 \text{ K}$, $L = 1 \text{ cm}$. $\circ$ modèle à un porteur (électrons), $\bullet$ distribution de potentiel.

[Material with electrons and positive impurities :

$$N_i = 1,3 \times 10^{13}/\text{m}^2,$$

$V_{\text{appl.}} = 10 \text{ V}$, $\epsilon_r = 227$, $T = 300 \text{ K}$, $L = 1 \text{ cm}$. $\circ$ model with only one carrier (electrons), $\bullet$ potential distribution.]

aux bords (Fig. 10), on conserve une neutralisation entre les deux porteurs de signes contraires dans toute la partie centrale de l'échantillon. Seule la charge aux deux bords est affectée sensiblement par la tension appliquée, avec appauvrissement en impuretés près de l'électrode positive. Sur la distribution de potentiel (Fig. 11), cela se traduit par une chute de potentiel importante à l'électrode positive (due à la présence majoritaire des électrons) et par un potentiel pratiquement constant dans le centre de l'échantillon.

Les impuretés positives augmentent la densité d'électrons injectés et diminuent la charge au sein de l'échantillon lorsqu'il n'y a pas de tension appliquée. Sous tension, les impuretés positives sont sans effet

Fig. 10. — Matériau contenant électrons et impuretés positives : $N_t = 10^{18}/m^2$, $V_{appl.} = 10$ V, $\epsilon_r = 227$, $T = 300$ K, $L = 1$ cm. — électrons, ----- impuretés.

[Material with electrons and positive impurities : $N_t = 10^{18}/m^2$, $V_{appl.} = 10$ V, $\epsilon_r = 227$, $T = 300$ K, $L = 1$ cm. — electrons, ----- impurities.]

Fig. 11. — Matériau contenant électrons et impuretés positives : $N_t = 10^{18}/m^2$, $V_{appl.} = 10$ V, $\epsilon_r = 227$, $T = 300$ K, $L = 1$ cm. — distribution de potentiel.

[Material with electrons and positive impurities : $N_t = 10^{18}/m^2$, $V_{appl.} = 10$ V, $\epsilon_r = 227$, $T = 300$ K, $L = 1$ cm. — potential distribution.]

lorsque leur concentration est faible, elles produisent des distorsions de la distribution de potentiel lorsque leur concentration dépasse la densité d'électrons aux bords.

3.3 CARACTÉRISTIQUES $I = f(V)$. — La figure 12 montre les caractéristiques $I = f(V)$ pour différentes sortes d'impuretés et la caractéristique pour un modèle à un seul porteur (référence).

Fig. 12. — Caractéristiques $I = f(V)$. ● rappel un porteur (électrons), ○ impuretés négatives et électrons, ■ impuretés positives et électrons, □ impuretés non bloquées aux électrodes, et électrons.

[Curves $I = f(V)$. ● model with only one carrier (electrons), ○ negative impurities and electrons, ■ positive impurities and electrons, □ ohmic electrodes.]

Les impuretés étant drainées vers les électrodes à champ élevé, toutes les caractéristiques rejoignent la référence lorsque v est grand.

A faible tension on trouve pour chaque courbe une région linéaire de pente 1 (ohmique). Mais ces droites sont décalées l'une par rapport à l'autre. Dans le modèle comportant des électrons et des impuretés négatives, celles-ci sont responsables d'une diminution du nombre d'électrons injectés. Les électrons participant seuls au courant à l'équilibre (électrodes bloquantes pour les impuretés), l'intensité est plus faible dans ce cas que pour le modèle à un porteur.

Dans le cas d'impuretés positives, les électrons injectés sont au contraire plus nombreux et le courant plus grand.

Les deux courbes rejoignent la courbe de référence lorsque la tension est suffisante pour entraîner

les impuretés vers le bord de l'échantillon. Cette jonction se fait dans la région quadratique, d'autant plus loin qu'il y a plus d'impuretés.

La courbe est légèrement différente pour un modèle comportant des électrons et des impuretés positives non bloquées aux électrodes en équilibre avec l'extérieur (lacune d'oxygène, par exemple, en équilibre avec l'oxygène extérieur). On observe une région ohmique comme précédemment. Mais les impuretés non bloquées participent au courant au même titre que les électrons. Si la concentration en impuretés est suffisante, le courant reste plus grand que celui observé pour les électrons, même à champ élevé. On ne rejoint pas la caractéristique de référence.

4. Discussion des résultats. — Nous discuterons peu les caractéristiques $I = f(V)$ qui ont déjà fait l'objet de nombreuses publications [1, 2, 7]. Il faut toutefois remarquer que ces différentes courbes avec régions ohmique et quadratique ont été obtenues ici sans supposer d'interaction entre les porteurs, en considérant seulement l'action du champ électrique et de la diffusion. Il n'est pas absolument nécessaire dans ces études d'injection électronique de considérer un piégeage de la charge injectée. La charge d'espace créée par les impuretés suffit à modifier le nombre d'électrons injectés pour donner les courbes $I = f(V)$ connues.

Dans nos travaux précédents nous avons envisagé des conductions électroniques en interaction avec les lacunes d'oxygène dans le rutile ou des ions OH dans le titanate de baryum. Nous voyons ici qu'il n'est pas toujours nécessaire d'envisager la recombinaison entre ces lacunes et les électrons. Bien des résultats peuvent être expliqués simplement par la présence de lacunes chargées et leur influence sur le champ électrique.

Nous discuterons davantage les distributions de potentiel en fonction de la distance x (Fig. 13).

Expérimentalement nous avons souvent obtenu des distributions de potentiel très anguleuses. Nous n'avons pu retrouver des distributions de ce type qu'en considérant des impuretés bloquantes aux électrodes. Ces impuretés que le champ entraîne près des bords y produisent une charge d'espace importante responsable des courbures observées sur les distributions de potentiel. Une chute de tension est observée à chaque électrode (Fig. 13) pour un modèle à deux impuretés de signe contraire. Pour des électrons et des impuretés positives on obtient une chute de potentiel importante à l'électrode positive due aux électrons injectés (les impuretés sont concentrées près de l'électrode négative).

Ce dernier résultat est très proche des courbes expérimentales que nous avons obtenues [3]. Par ailleurs on retrouve, comme dans nos expériences, un comportement intéressant de la distribution de potentiel lors d'un retournement de la tension appliquée. Les répartitions de potentiel avaient été

Fig. 13. — Distribution de potentiel : ○ impuretés positives $N_i = 10^{14}$, impuretés négatives $N_i = 10^{15}$; ● électrons, impuretés positives $N_i = 10^{14}$. Retournement de tension : ■ $t = 0$, △ $t = 10^{-2}$ s (état intermédiaire), □ $t = 24$ h (équilibre final).

[Potential distributions : ○ positive ($N_i = 10^{14}$) and negative ($N_i = 10^{15}$) impurities; ● electrons and positive impurities ($N_i = 10^{14}$). Change of the potential sign : ■ $t = 0$, △ $t = 10^{-2}$ s, □ $t = 24$ h (equilibrium).]

mesurées [3] par une technique de sonde vibrante sur des cristaux de titanate de baryum dopés avec des groupements OH. On observe expérimentalement une première évolution conduisant à un équilibre intermédiaire, avant d'atteindre l'équilibre final, évidemment symétrique, par rapport à l'échantillon, de celui obtenu avec une tension positive. Les résultats théoriques (Fig. 13) sont identiques aux résultats expérimentaux, montrant que le premier stade de l'évolution est dû au déplacement des électrons dont la mobilité est plus grande que celle des impuretés, tandis que la courbe finale est atteinte lorsque ces impuretés ont retrouvé leur nouvel équilibre.

Ces résultats obtenus dans le titanate de baryum avaient été interprétés par une conduction électronique avec déplacement d'une charge d'espace due à des ions OH. Ces ions OH^- placés dans le réseau au site O^- se comportent effectivement comme une impureté positive, ce qui correspond bien à notre calcul.

Ces résultats mettent en évidence l'intérêt de cette méthode de calcul. Elle permet de trouver non seule-

ment les caractéristiques $I = f(V)$, mais aussi toutes les distributions, de porteurs et de potentiel, à l'intérieur de l'échantillon. Toutes ces grandeurs peuvent évoluer en fonction du temps (régimes statique ou dynamique).

5. Conclusion. — Nous avons présenté un programme de calcul numérique permettant l'intégration des équations de transport dans le cas général. Les quelques résultats décrits ici montrent que les impuretés présentées dans l'échantillon ont une importance capitale lorsque la tension appliquée est nulle car elles modifient le nombre d'électrons injectés

et elles changent également la charge de l'échantillon dans le cas d'impuretés positives.

Avec une différence de potentiel appliquée, nous avons vu que l'influence des impuretés était souvent négligeable, ce qui explique que l'on ait pu retrouver expérimentalement un certain nombre de résultats obtenus avec le modèle à un seul porteur. Seuls les échantillons contenant une forte concentration d'impuretés positives ont conduit à des distributions de potentiel très éloignées de la droite, que nous avons trouvées expérimentalement [3] dans le cas d'échantillons de titanate de baryum dopés avec des groupements OH.

Bibliographie

- [1] ORMANCEY, G. et GODEFROY, G., *J. Physique* **35** (1974) 135.
- [2] BARDET, J. P., ORMANCEY, G. et GODEFROY, G., *J. Physique* **38** (1977) 345.
- [3] ORMANCEY, G., *J. Physique Colloq.* **33** (1972) C2 113.
- [4] COUSON, B., Thèse 3 cycle Dijon (1971).
- [5] GODEFROY, G., Thèse Paris (1963).
- [6] MAITROT, M., MICHEL, R., MADRU, R., *Revue Phys. Appl.* **6** (1971) 369.
- [7] LAMPERT, M. A., *Proc. I. RENSA* **50** (1962) 1781.
- [8] COELHO, R., *Rev. Gen. Elect.* **75** (1966) 759.
- [9] ROSENTHAL, A., SAPAR, A., *J. Appl. Phys.* **45** (1974) 2787.
- [10] GUMMEL, H. K., *I.E.E.E. Trans. Elect. Devices* **11** (1964) 455.
- [11] FUNCK, R., *Revue Techn. Thomson CSF* **3** (1971) 81.
- [12] REISER, M., *Comp. Meth. in Appl. Mecha. and Eng.* **1** (1972) 17.