

50376
1973
N° d'ordre 371
43

50376
1973
43

THESE

présentée à

L'UNIVERSITÉ DES SCIENCES
ET DES TECHNIQUES DE LILLE

pour obtenir le titre de

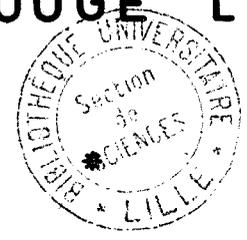
DOCTEUR DE SPÉCIALITÉ

par

Monique VINDEVOGHEL – VILLAEYS

*

ABSORPTION PRÉSENTÉE PAR LE
SILICIUM DANS LE DOMAINE DES
ONDES MILLIMÉTRIQUES ET DE
L'INFRA-ROUGE LOINTAIN



Soutenue le 12 mars 1973 devant la Commission d'examen

Membres du Jury

- | | |
|---------------|-------------------|
| M. WERTHEIMER | <i>Président</i> |
| M. LEROY | <i>Rapporteur</i> |
| M. CONSTANT | <i>Examineur</i> |
| M. RACZY | <i>Examineur</i> |

DOYENS HONORAIRES De l'Ancienne Faculté des Sciences

M. H. LEFEBVRE, PARREAU

PROFESSEURS HONORAIRES des Anciennes Facultés de Droit et
Sciences Economiques, des Sciences et des Lettres

. ARNOULT, Mme BEAUJEU, MM. BEGHIN, BROCHARD, CAU, CHAPPELON, CHAUDRON, CORDONNIER, EHEUVELS, DEHORNE, DEHORS, FAUVEL, FLEURY, P. GERMAIN, HEIM DE BALSAC, HOCQUETTE, AMPE DE FERIET, KOURGANOFF, LAMOTTE, LELONG, Mme LELONG, LIEBAERT, MARTINOT-LAGARDE, AZET, MICHEL, NORMANT, PARISELLE, PASCAL, PAUTHENIER, PEREZ, ROIG, ROSEAU, ROUBINE, QUELLE, WIEMAN, ZAMANSKI.

PRESIDENT de l'UNIVERSITE
DES SCIENCES ET TECHNIQUES DE LILLE

. DEFRETIN René

Professeur de Biologie Marine,
Directeur de l'Institut de
Biologie Maritime et Régionale de
Wimereux

PROFESSEURS TITULAIRES

M. BACCHUS Pierre	Astronomie
M. BEAUFILS Jean-Pierre	Chimie Générale
M. BECART Maurice	Physique
M. BIAYS Pierre	Géographie
M. BLOCH Vincent	Psychophysiologie
M. BONNEMAN Pierre	Chimie et Physico-Chimie Industrielle
M. BONTE Antoine	Géologie Appliquée
M. BOUGHON Pierre	Mathématiques
M. BOURIQUET Robert	Biologie Végétale
M. CAPET Marcel-Francis	Institut de Préparation aux Affaires
M. CELET Paul	Géologie
M. CONSTANT Eugène	Physique Industrielle-Electronique
M. CORSIN Pierre	Paléobotanique
M. DECUYPER Marcel	Mathématiques Générales
M. DEFRETIN René	Biologie Marine
M. DELATTRE Charles	Géologie Générale
M. DURCHON Maurice	Zoologie Générale et Appliquée
M. FAURE Robert	Mécanique
M. FOURET René	Physique
M. GABILLARD Robert	Radio-Electricité-Electronique
M. GEHU Jean-Marie	Institut Agricole
M. GLACET Charles	Chimie Organique
M. GONTIER Gérard	Mécanique
M. GUILLAUME Jean	Biologie Végétale
M. HEUBEL Joseph	Chimie Minérale
M. JOLY Robert	Biologie (Amiens)
Mme LENOBLE Jacqueline	Physique Expérimentale
M. LOMEARD Jacques	Sociologie

PROFESSEURS TITULAIRES (suite)

M. MONTARIOL Frédéric	Chimie Appliquée
M. MONTREUIL Jean	Chimie Biologique
M. POUZET Pierre	Informatique
Mme SCHWARTZ Marie-Hélène	Analyse Supérieure
M. TILLIEU Jacques	Physique Théorique
M. TRIDOT Gabriel	Chimie
M. VAILLANT Jean	Mathématiques
M. VIDAL Pierre	Automatique
M. VIVIER Emile	Biologie Animale
M. WERTHEIMER Raymond	Physique
M. ZEYTOUNIAN Radyadour	Mathématiques

PROFESSEURS A TITRE PERSONNEL

M. BOUISSET Simon	Physiologie Animale
M. DELHAYE Michel	Chimie
M. FLATRES Pierre	Géographie
M. LEBRUN André	Electronique
M. LINDER Robert	Botanique
M. LUCQUIN Michel	Chimie Physique
M. PARREAU Michel	Mathématiques Appliquées
M. PRUDHOMME Rémy	Droit et Sciences Economiques
M. SCHILTZ René	Physique

PROFESSEURS SANS CHAIRE

M. BELLET Jean	Physique
M. BILLARD Jean	Physique
M. BODARD Marcel	Botanique
M. BOILLET Pierre	Physique
M. DERCOURT Jean-Michel	Géologie
M. DEVRAINNE Pierre	Chimie Minérale
M. GOUDMAND Pierre	Chimie Physique
M. GRUSON Laurent	Mathématiques
M. GUILBAULT Pierre	Biologie
M. LACOSTE Louis	Biologie
M. LANDAIS Jean	Chimie
M. LEHMANN Daniel	Mathématiques
Mme LEHMANN Josiane	Mathématiques
M. LOUCHEUX Claude	Chimie
M. MAES Serge	Physique
Mle MARQUET Simone	Mathématiques
M. MONTEL Marc	Physique
M. MONTUELLE Bernard	I.U.T. Lille
M. PANET Marius	I.E.E.A.
M. PROUVOST Jean	Minéralogie

MAITRES DE CONFERENCES (et chargés de fonctions)

M. ADAM Michel	Economie Politique
M. ANDRE Charles	Sciences Economiques
M. ANGRAND Jean-Pierre	Géographie
M. ANTOINE Philippe	Mathématiques
M. AUBIN Thierry	Mathématiques
M. BART André	Biologie

MAITRES DE CONFERENCES (et chargés de fonctions) suite

M. BEGUIN Paul	Mécanique des Fluides
M. BKOUCHE Rudolphe	Mathématiques
M. BOILLY Bénoni	Biologie
M. BONNEMAIN Jean-Louis	Biologie Végétale
M. BONNOT Ernest	Biologie Végétale
M. BOSCO Denis	Mathématiques
M. BRIDOUX Michel	Chimie
M. BRUYELLE Pierre	Géographie et Aménagement Spatial
M. CAPURON Alfred	Biologie Animale
M. CARREZ Christian	I.E.E.A.
M. CORDONNIER Vincent	Informatique
M. CORTOIS Jean	Physique
M. COULON Jean	I.E.E.A.
M. DEBOURSE Jean-Pierre	Sciences Economiques et Sociales
M. DEBRABANT Pierre	Sciences Appliquées
M. DELAUNAY Jean-Claude	Sciences Economiques et Sociales
M. DEPREZ Gilbert	Physique (I.U.T.)
M. DERIEUX Jean-Claude	Biologie (I.U.T.)
M. DOUKHAN Jean-Claude	Physique
M. DRIEUX Baudouin	I.E.E.A.
M. DYMENT Arthur	Mathématiques
M. ESCAIG Bertrand	Physique
Mme EVRARD Micheline	Chimie (I.U.T.)
M. FONTAINE Jacques André	Génie Electrique
M. FONTAINE Jacques Marie	I.U.T. Lille
M. FOURNET Bernard	I.U.T. Lille
M. FROELICH Daniel	Sciences Appliquées
M. GAMBLIN André	Géographie
M. GOBLOT Rémi	Mathématiques
M. GOSSELIN Gabriel	Sociologie
M. GRANELLE Jean-Jacques	Sciences Economiques
M. GUILLAUME Henri	Sciences Economiques et Sociales
M. HERMAN Maurice	Physique
M. JOURNAL Gérard	Sciences Appliquées
Mle KOSMANN Yvette	Mathématiques
M. KREMBEL Jean	Chimie
M. LABLACHE COMBIER Alain	Chimie
M. LAURENT François	Automatique
M. LAVAGNE Pierre	Sciences Economiques et Sociales
Mle LEGRAND Denise	Mathématiques
Mle LEGRAND Solange	Mathématiques
M. LENTACKER Firmin	Géographie et Aménagement Spatial
M. LEROY Jean-Marie	E.N.S.C.L.
M. LEROY Yves	Electronique
M. LHENAFF René	Géographie
M. LOCQUENEUX Robert	Physique
M. LOUAGE Francis	Sciences Appliquées
M. LOUCHET Pierre	C.U.E.E.P.
M. MAHIEU Jean-Marie	Physique (I.U.T.)
Mme MAILLET Monique	Sciences Economiques
M. MAIZIERES Christian	I.E.E.A.
M. MALAUSSENA Jean-Louis	Sciences Economiques et Sociales
M. MERIAUX Emile	Sciences de la Terre
M. MESSELYN Jean	Physique
M. MIGEON Michel	Chimie (Sciences Appliquées)
M. NICOLE Jacques	Chimie (E.N.S.C.L.)
M. PAQUET Jacques	Sciences Appliquées
M. PARSY Fernand	Mathématiques
M. PECQUE Marcel	Chimie
M. PERROT Pierre	Chimie

MAITRES DE CONFERENCES (et chargés de fonctions) suite

M. PERTUZON Emile	Biologie
M. PONSOLLE Louis	Chimie (Valenciennes)
M. POVY Jean-Claude	Sciences Appliquées
M. RACZY Ladislas	Physique
Mme RENVERSEZ Françoise	Sciences Economiques et Sociales
M. ROUSSEAU Jean-Paul	Physiologie Animale
M. ROY Jean-Claude	Biologie
M. SALMER Georges	Radio Electricité Electronique
M. SEGUIER Guy	Electronique
M. SIMON Michel	Psychologie
M. SLIWA Henri	Chimie
M. SMET Pierre	Physique
M. SOMME Jean	Géographie
Mle SPIK Geneviève	Chimie Biologique
M. THERY Pierre	Calais
M. TOULOTTE Jean-Marc	Sciences Appliquées
M. TREANTON Jean-René	Sciences Economiques et Sociales
M. VANDORPE Bernard	Chimie Physique
M. VILETTE Michel	Génie Mécanique
M. WERNER Georges	Informatique (I.U.T.)
M. WATERLOT Michel	Géologie
Mme ZINN JUSTIN Nicole	Mathématiques

A MES PARENTS

A MON MARI

A MES ENFANTS

Ce travail a été effectué au Centre de Recherches sur les Propriétés Hyperfréquences des Milieux Condensés, de l'Université des Sciences et Techniques de Lille.

Monsieur le Professeur WERTHEIMER a contribué pour une grande part à ma formation scientifique et m'a initiée aux problèmes de la recherche. Il me fait l'honneur de présider mon Jury ; qu'il en soit remercié.

J'exprime toute ma gratitude à Monsieur le Professeur CONSTANT qui m'a proposé le sujet de ce travail et dont les conseils m'ont été très précieux.

Je remercie particulièrement Monsieur le Professeur LEROY dont la compétence et l'amicale collaboration ont été des éléments essentiels pour mener à bien cette étude.

Monsieur le Professeur RACZY a bien voulu juger mon travail ; je lui en suis reconnaissante.

Mes remerciements s'adressent également aux membres de l'équipe "Diélectriques", avec lesquels j'ai pu avoir de nombreux et fructueux entretiens.

Monsieur TREMOUILLE et Mademoiselle DELACROIX m'ont apporté une aide efficace pour l'exploitation numérique de mes résultats expérimentaux. Je les en remercie.

Ma reconnaissance s'adresse à tout le personnel des ateliers de Mécanique, d'Electronique et de Polycopie.

Enfin mes remerciements les plus chaleureux vont à Madame BLONDEL qui n'a pas hésité à accorder son temps et sa compétence à la dactylographie de ce travail.

L'ensemble de notre étude a bénéficié du soutien de la Direction des Recherches et Moyens d'Essais (D.R.M.E.) et je remercie vivement le Commandant BLAIZOT pour l'intérêt constant qu'il a bien voulu apporter à mon travail.

Les mesures ont été effectuées sur des échantillons réalisés par L.T.T. et mes remerciements vont à Messieurs CHIRON, LAGORSSE, FORTERRE et SEGUIN pour l'aide qu'ils ont apportée.

E R R A T A

- page 34 lire:

I°) Cas des absorptions telles que le produit $\alpha h \gg I$.

- page 36 lire:

La relation II-10 se réduit à la relation II-8 lorsque $\alpha h \gg I$. Elle peut donc être considérée comme valable dans les deux cas étudiés précédemment ($\alpha h \gg I$ et faible résolution en fréquence de l'appareillage).

- pages 35 et 36 lire :

$$\sigma' = \frac{\xi_0 n c}{h} \text{Log} \frac{(I-R)^2 + \sqrt{(I-R)^4 + 4 R^2 T^2}}{2 T}$$

- page 60, équation III-9 lire :

$$+ W_3 E^{-3/2} \left[\text{Log}(b+I) - \frac{b}{b+I} \right]$$

- page 69, équation III-13 lire :

$$+ W_3 E^{-3/2} \left[\text{Log}(b+I) - \frac{b}{b+I} \right]$$

S O M M A I R E

--0000000--

INTRODUCTION

CHAPITRE I THEORIE DES PHENOMENES DE TRANSPORT DANS UN SEMI-CONDUCTEUR

I.1. Equation de Boltzmann

I.2. Théorie de Kubo

CHAPITRE II RELATIONS ENTRE LA CONDUCTIVITE ET LES GRANDEURS ACCESSIBLES A LA MESURE

II.1. Définitions

II.2. Description de l'appareillage utilisé

II.3. Coefficient de transmission, coefficient de propagation

II.4. Détermination de la conductivité $\sigma(\omega)$

CHAPITRE III RESULTATS EXPERIMENTAUX ET INTERPRETATION

III.1. Etude en fonction de l'orientation des axes
cristallographiques

III.2. Etude en fonction de la fréquence de l'onde
électromagnétique

III.3. Etude en fonction de la température

CONCLUSION

INTRODUCTION

--0000000--

Depuis une dizaine d'années, un grand nombre de travaux sur le silicium ont été effectués et ont permis d'aboutir à une connaissance approfondie de sa structure de bande et de ses propriétés semi-conductrices. Les progrès effectués dans ce domaine ont ainsi rendu possible la conception et la réalisation d'une grande quantité de composants industriels.

L'un des principaux domaines de recherche abordé est le comportement des porteurs libres au sein du matériau et nous pouvons citer à ce sujet des études de mobilité de Hall {21}, {22}, de mobilité de conductivité {9}, {23}, {24}, des expériences de résonance cyclotron {27}, des mesures d'absorption ou de réflexion en gamme optique ou infra-rouge proche {25}, {26}, des études de propriétés diélectriques, de la gamme des radiofréquences à celle des ondes centimétriques {11}, {12}, {17}, {18}, {19}, {20}.

Cependant, à notre connaissance, aucune étude détaillée n'a été faite dans la gamme millimétrique et en infra-rouge lointain. C'est pourtant dans cette gamme de fréquences que, pour les concentrations d'impuretés plus utilisés pratiquement, se passent les phénomènes de relaxation par porteurs libres. Il est en effet bien connu {14} que le temps de relaxation moyen dans le silicium est de l'ordre de 10^{-13} seconde ce qui correspond à des fréquences de l'ordre de 1500 GHz.

L'étude en gamme infra-rouge lointain doit donc nous permettre d'étudier directement les phénomènes de transport de charges dans le silicium et de déterminer les mécanismes de retour à l'équilibre du système considéré.

Nous nous proposons d'exposer ici un travail relatif à l'absorption par porteurs libres dans le silicium de type P et type N.

Cette étude est réalisée à température variable (77°K à 350°K) dans une très large gamme de fréquences correspondant à des longueurs d'ondes comprises entre 4 millimètres et 40 microns.

Dans une première partie, nous rappelons les données théoriques concernant les phénomènes de transport de charges.

Deux méthodes de traitement sont envisagées :

- l'une classique, consiste en l'utilisation de l'équation de transport de Boltzmann ;
- l'autre, plus rarement utilisée fait appel à la notion de fonction de corrélation ; elle est basée sur l'emploi de la théorie des phénomènes irréversibles de Kubo dont les résultats peuvent être adaptés à notre problème.

Nous discutons des avantages et inconvénients présentés respectivement par les deux méthodes.

Dans une deuxième partie, nous établissons les relations existant entre grandeurs mesurées (coefficient de transmission d'une lame semi-conductrice) et paramètres d'absorption ou de dispersion du matériau (caractérisé par sa permittivité, son indice ou sa conductivité complexe).

Nous décrivons les techniques expérimentales mises en oeuvre pour effectuer ces déterminations.

La troisième partie est consacrée à l'exposé et à l'interprétation de nos résultats expérimentaux.

Les études sont effectuées en fonction des paramètres suivants :

- direction des axes cristallographiques
- nature des impuretés
- fréquence de l'onde électromagnétique
- température

A la lumière des résultats obtenus et des interprétations effectuées, nous montrons en particulier comment il est possible :

- d'une part de déterminer par une méthode originale le temps de relaxation moyen de la vitesse des porteurs*
- d'autre part, de mettre en évidence les différents mécanismes de collision existants au sein du cristal et d'en étudier l'importance relative.*

\$\$\$

C H A P I T R E I

THEORIE DES PHENOMENES DE TRANSPORT DANS UN SEMI-CONDUCTEUR

-o-o-o-o-o-o-o-o-o-o-o-o-

L'équation de transport de Boltzmann est une des méthodes les plus utilisées dans l'étude de la dynamique des porteurs de charges. Cette méthode comporte cependant des restrictions et nécessite la connaissance préalable de certains mécanismes. A cet égard la théorie de Kubo, des processus irréversibles, est beaucoup plus puissante : aucune hypothèse n'est nécessaire pour déterminer à partir des données expérimentales les diverses grandeurs caractéristiques du système telles que les temps de corrélation et la masse effective des porteurs.

Dans ce premier chapitre, nous exposerons successivement ces deux théories que nous nous proposons d'utiliser au cours de ce travail et nous en montrerons les imperfections et les limites.

I.1. EQUATION DE BOLTZMANN

I.1.1. Etablissement de l'équation

Considérons au sein d'un cristal un ensemble d'électrons indépendants repérés par leur position $\vec{r}(t)$ et leur vecteur d'onde $\vec{k}(t)$, le couple de valeurs (\vec{r}, \vec{k}) définit un état dans l'espace des phases Γ .

Désignons par $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ la densité de probabilité pour qu'à l'instant t l'électron se trouve dans l'état (\vec{r}, \vec{k}) .

La valeur moyenne de toute valeur X caractéristique du système sera donc égale à :

$$\langle X \rangle = \int_{\Gamma} X \cdot N(\vec{k}, \vec{r}) \cdot f(\vec{r}, \vec{k}, t) d\Gamma \quad (I-1)$$

$N(\vec{k}, \vec{r})$ étant la densité d'états dans l'espace des phases.

Dans le cas d'un système d'électrons indépendants à l'équilibre thermodynamique :

- la fonction de distribution n'est autre que la fonction de Fermi :

$$f_0(\vec{k}) = \frac{1}{1 + \exp \frac{E(\vec{k}) - E_F}{kT}}$$

- la densité d'états est une constante $N = \frac{2}{(2\pi)^3}$ (1)

Si H est l'hamiltonien du système, le théorème de Liouville s'exprime par la relation :

$$\frac{df}{dt} = 0 = \frac{\partial f}{\partial t} + [f, H]$$

qui indique que la variation de la densité de probabilité f le long d'une trajectoire électronique de l'espace des phases est toujours nulle.

Nous pouvons donc écrire :

$$f(\vec{k}_1, \vec{r}_1, t_1) = f(\vec{k}_2, \vec{r}_2, t_2)$$

c'est à dire :

$$\frac{df}{dt} = 0 = \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{k} \text{ grad}_{\vec{k}} f + \vec{r} \text{ grad}_{\vec{r}} f = 0$$

Pour un système uniforme ($\text{grad}_{\vec{r}} f = 0$), en utilisant la relation bien connue

$$\vec{k} = \frac{\vec{F}_T}{\hbar}$$

il vient :

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\vec{F}_T}{\hbar} \text{grad}_{\vec{k}} f = 0 \quad (\text{I-2})$$

\vec{F}_T représente la force totale exercée sur les électrons. Cette grandeur peut être décomposée en deux parties :

F_{ext} : forces extérieures (dues au champ électrique appliqué, par exemple) ;

F_c : forces d'interaction avec le milieu, qui sont matérialisées par les collisions.

L'équation (1-2) devient :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{ext}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} \quad (\text{I-3})$$

où l'on pose :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{ext}} = - \frac{\vec{F}_{\text{ext}}}{\hbar} \text{grad}_{\vec{k}} f$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = - \frac{\vec{F}_c}{\hbar} \text{grad}_{\vec{k}} f$$

L'équation de Boltzmann exprime donc que la variation de f au cours du temps est le bilan de l'action des forces extérieures et de la tendance au retour à l'équilibre due aux collisions.

Les forces extérieures peuvent ou non dépendre du temps.

Considérons successivement ces deux cas :

I.1.1.1. *Etat stationnaire, forces extérieures indépendantes du temps*

Le régime stationnaire étant caractérisé par :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0$$

l'équation (I-3) se réduit à :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ext}} = 0$$

Le problème est d'exprimer $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}}$ sous sa forme explicite.

Pour cela on peut dire que sous l'effet des collisions, la variation pendant un temps dt du nombre d'électrons existant dans un volume dV de l'espace des phases autour d'un point (\vec{r}, \vec{k}) est égal à la différence entre :

- le nombre dN_1 d'électrons qui possédaient à l'instant t les coordonnées (\vec{r}, \vec{k}) et qui au temps $(t + dt)$ ont pour coordonnées (\vec{r}', \vec{k}') , \vec{r}' et \vec{k}' pouvant prendre toutes les valeurs possibles dans l'espace des phases.

$$dN_1 = dt \int d^3r' \int d^3k' \cdot \underbrace{P(\vec{r}, \vec{k}, \vec{r}', \vec{k}')}_{\text{nombre d'états disponibles en } (\vec{r}', \vec{k}')} \cdot \underbrace{N \cdot [1 - f(\vec{r}', \vec{k}', t)]}_{\text{nombre d'états au point de départ}} \cdot \underbrace{N \cdot f(\vec{r}, \vec{k}, t)}_{\text{nombre d'états au point de départ}}$$

$P(\vec{r}, \vec{k}, \vec{r}', \vec{k}')$ est la probabilité par unité de temps pour qu'un électron de coordonnées (\vec{r}, \vec{k}) se trouve après collision dans un volume élémentaire centré sur le point (\vec{r}', \vec{k}') .

- le nombre dN_2 d'électrons rentrant dans le volume dV , venant de tout l'espace. dN_2 peut s'exprimer de la même façon :

$$dN_2 = dt \int d^3 r' \int d^3 k' \cdot P(\vec{r}', \vec{k}', \vec{r}, \vec{k}) \cdot N \cdot f(\vec{r}', \vec{k}', t) \cdot N \cdot [1 - f(\vec{r}, \vec{k}, t)]$$

On suppose généralement que les collisions sont instantanées et localisées en un point de l'espace, soit :

$$P(\vec{r}, \vec{k}, \vec{r}', \vec{k}') = P(\vec{r}, \vec{k}, \vec{k}') \cdot \delta(\vec{r}' - \vec{r})$$

Par ailleurs, si les centres de collisions sont répartis de façon uniforme, P est indépendante de \vec{r} .

Dans ces conditions :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}} = N^2 \int \left\{ P(\vec{k}', \vec{k}) \cdot f(\vec{r}', \vec{k}', t) [1 - f(\vec{r}, \vec{k}, t)] - P(\vec{k}, \vec{k}') \cdot f(\vec{r}, \vec{k}, t) [1 - f(\vec{r}', \vec{k}', t)] \right\} d^3 k' \quad (\text{I-4})$$

Dans ce travail, les champs électriques appliqués auront une amplitude très faible, et les perturbations apportées de l'extérieur seront donc petites. On choisit donc d'écrire la fonction de distribution sous la forme :

$$f(\vec{k}, \vec{r}) = f_0(E) + f_1(\vec{k}, \vec{r})$$

où E est l'énergie des porteurs et $f_1(\vec{k}, \vec{r})$ l'écart de la fonction de distribution par rapport à sa valeur à l'équilibre thermodynamique $f_0(E)$ (avec $f_1(\vec{k}, \vec{r}) \ll f_0(E)$).

L'expression de $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}}$ peut encore se simplifier si on fait les

deux hypothèses fondamentales suivantes :

a) la probabilité de collision ne dépend que de k initial et de l'angle θ entre les vecteurs \vec{k} et \vec{k}' , soit :

$$P(\vec{k}, \vec{k}') = P(\vec{k}', \vec{k}) = \delta(k - k') \cdot P(k, \theta)$$

b) l'électron garde la même énergie avant et après la collision, (collisions élastiques).

Ces deux approximations entraînent que les surfaces d'énergie constante dans l'espace des k sont sphériques et que les vecteurs \vec{v}_k et \vec{k} sont colinéaires.

On montre alors {1} que $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}}$ peut se mettre sous la forme :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}} = - \frac{f(\vec{r}, \vec{k}, t) - f_0(E)}{\tau(k)} = - \frac{f_1(\vec{r}, \vec{k})}{\tau(k)}$$

où $\tau(k)$ peut être considéré comme le temps de relaxation des porteurs caractérisés par le vecteur \vec{k} .

Rappelons cependant que ces relations introduisant la notion de temps de relaxation ne sont applicables que dans le cas de collisions élastiques, c'est à dire :

- dans le cas de collisions sur impuretés ionisées où l'électron est défléchi sans perte notable d'énergie ;

- dans le cas d'interaction avec des phonons acoustiques de faible énergie ($\hbar \cdot \omega_q \ll E$)

En effet, nous indiquerons en troisième partie que lorsqu'un électron de vecteur d'onde \vec{k} subit une collision avec un phonon, l'électron absorbe ou émet un phonon de vecteur d'onde \vec{q} tel que :

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q} + \vec{K}$$

\vec{K} étant un vecteur principal du réseau réciproque et \vec{k}' le vecteur d'onde de l'électron après la collision.

L'électron gagne ou perd alors une quantité d'énergie $\hbar \cdot \omega_q$.
La conservation de l'énergie implique que :

$$E' = E \pm \hbar \cdot \omega_q$$

où E et E' sont les valeurs de l'énergie avant et après la collision, et l'on n'obtient une collision élastique que si $\hbar \omega_q \ll E$.

Finalement, l'équation de Boltzmann pour un système uniforme s'écrit :

$$\frac{\vec{F}_{\text{ext}}}{\hbar} \xrightarrow{\text{grad}_{\vec{k}}} f = - \frac{f_1(\vec{r}, \vec{k})}{\tau(k)}$$

I.1.1.2. Etat stationnaire, forces extérieures dépendantes du temps

Si une force \vec{F} extérieure est de la forme $\vec{F} = \vec{F}_0 \cdot e^{j\omega t}$
la fonction de distribution peut s'écrire :

$$f(\vec{k}, \vec{r}, t) = f_0(E) + f_1(\vec{k}, \vec{r}, t) = f_0(E) + f'_1(\vec{k}, \vec{r}) \cdot e^{j\omega t}$$

Dans le cas d'une perturbation de faible amplitude, f'_1 variera linéairement par rapport aux composantes de la force.

L'équation de Boltzmann pour un système uniforme devient :

$$-\frac{f_1}{\tau(k)} - j\omega f_1 = \frac{\vec{F}_{\text{ext}}}{\hbar} \xrightarrow{\text{grad}_{\vec{k}}} f$$

soit encore :

$$-\frac{f_1}{\tau(k)} = \frac{\vec{F}_{\text{ext}}}{\hbar} \xrightarrow{\text{grad}_{\vec{k}}} f$$

$$1 + j\omega\tau(k)$$

Si l'on compare cette relation à celle obtenue en régime stationnaire, on remarque que la résolution des problèmes en régime alternatif peut se dé-

duire de celle des problèmes en régime statique en remplaçant τ par

$$\frac{\tau(k)}{1 + j\omega\tau(k)}$$

I.1.2. Calcul de la conductivité

Quand on peut définir des temps de relaxation $\tau(k)$, il est facile de calculer des grandeurs comme la conductivité ou la densité de courant.

Les deux éventualités précédentes sont à envisager : perturbation indépendante du temps (champ électrique continu) puis dépendante du temps (champ électrique sinusoïdal). Dans les deux cas, la perturbation est supposée être faible.

I.1.2.1. Cas d'un champ électrique \mathcal{E} porté par Ox, continu, faible

La force s'exerçant sur un électron est $\vec{F}_{\text{ext}} = -e\vec{\mathcal{E}}$ et l'équation de Boltzmann s'écrit :

$$\frac{1}{\hbar} e \vec{\mathcal{E}} \text{ grad}_{\vec{k}} f = \frac{f_1(\vec{r}, \vec{k})}{\tau(k)}$$

Le semi-conducteur étant non dégénéré, $f_0(E)$ peut être assimilé à :

$$\exp \frac{E_F - E}{kT}$$

Dans le cadre de nos hypothèses, supposons que les surfaces d'énergie sont sphériques et que la loi de dispersion est parabolique c'est à dire que :

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (m^* \text{ est la masse effective des porteurs})$$

Les temps de relaxation $\tau(k)$ sont donc des fonctions $\tau(E)$ de l'énergie.

$f_1(\vec{r}, \vec{k})$ étant faible, $f(\vec{r}, \vec{k})$ peut être remplacé par $f_0(E)$ dans le premier membre:

$$\vec{\text{grad}}_{\vec{k}} f \approx \vec{\text{grad}}_{\vec{k}} f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial E} \vec{\text{grad}}_{\vec{k}} E$$

En utilisant la relation bien connue :

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \vec{\text{grad}}_{\vec{k}} E$$

\vec{v} étant la vitesse des porteurs,

il vient :

$$\vec{\text{grad}}_{\vec{k}} f \approx \hbar \vec{v} \frac{\partial f_0}{\partial E}$$

D'où :

$$f_1(\vec{r}, \vec{k}) = -e\tau \frac{f_0}{kT} \vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{v} = -e\tau \frac{f_0}{kT} \mathcal{E}_x v_x$$

La densité de courant dans la direction Ox est donnée par :

$$J_x = -\frac{e}{4\pi^3} \int f_1 v_x d^3 k$$

soit finalement {2}.

$$J_x = \frac{n e^2}{m^*} \langle \tau \rangle \mathcal{E}$$

La conductivité statique s'exprime alors par :

$$\sigma_0 = \frac{J_x}{\mathcal{E}} = \frac{n e^2}{m^*} \langle \tau \rangle$$

où n est la densité de porteurs par unité de volume ;
 m^* est la masse effective de conductivité des porteurs ;

$$\langle \tau \rangle = \frac{\langle \tau E \rangle}{\langle E \rangle} = \frac{\int_0^{\infty} \tau(E) \cdot E^{3/2} \exp \frac{-E}{kT} dE}{\int_0^{\infty} E^{3/2} \exp \frac{-E}{kT} dE} \quad (I-6)$$

I.1.2.2. Champ appliqué sinusoïdal et faible

Nous avons montré précédemment que la solution du problème en régime sinusoïdal pouvait se déduire de la solution en régime statique en remplaçant $\tau(E)$ par

$$\frac{\tau(E)}{1 + j\omega\tau(E)}$$

La conductivité est alors une grandeur complexe :

$$\sigma = \frac{ne^2}{m^*} \left\langle \frac{\tau}{1 + j\omega\tau} \right\rangle = \sigma' + j\sigma'' \quad (I-7)$$

$$\sigma' = \frac{ne^2}{m^*} \left\langle \frac{\tau}{1 + \omega^2 \tau^2} \right\rangle = \frac{ne^2}{m^*} \frac{\int_0^{\infty} E^{3/2} e^{-E/kT} \frac{\tau(E)}{1 + \omega^2 \tau^2(E)} dE}{\int_0^{\infty} E^{3/2} e^{-E/kT} dE} \quad (I-8)$$

$$\sigma'' = -\frac{ne^2}{m^*} \left\langle \frac{\omega \tau^2}{1 + \omega^2 \tau^2} \right\rangle = -\frac{ne^2}{m^*} \frac{\int_0^{\infty} \frac{\omega \tau^2(E)}{1 + \omega^2 \tau^2(E)} E^{3/2} e^{-E/kT} dE}{\int_0^{\infty} E^{3/2} e^{-E/kT} dE}$$

Remarque : Si on suppose en première approximation τ indépendant de l'énergie on aboutit aux relations de Drude {3}

$$\sigma' = \frac{\sigma_0}{1 + \omega^2 \tau^2} \quad \sigma'' = \frac{\sigma_0 \omega \tau}{1 + \omega^2 \tau^2} \quad (\text{I-9})$$

que l'on obtient par application de la relation fondamentale de la dynamique aux porteurs compte tenu d'un terme de friction :

$$\frac{dv}{dt} = \frac{eE}{m} - \frac{v}{\tau}$$

I.1.3. Conclusion

Nous venons de montrer comment l'équation de Boltzmann permet de calculer la conductivité lorsqu'on peut définir un temps de relaxation $\tau(k)$ et que la dépendance de celui-ci en fonction de l'énergie des porteurs est connue.

Cependant, cette méthode n'est applicable en toute rigueur qu'à des cas particuliers où les collisions sont élastiques. D'autre part la façon de définir le temps de relaxation implique que la fonction de distribution revienne à l'équilibre en suivant une loi exponentielle $e^{-t/\tau}$, ce qui peut ne pas être vrai, particulièrement aux temps courts, pour tous les mécanismes de conduction.

Pour étudier sous une forme générale la dynamique des porteurs il faut envisager le problème des phénomènes de transport sous un autre angle.

Dans ce but, Kubo {4} dans sa théorie générale des processus irréversibles a relié la conductivité électrique d'un système matériel à l'étude des fluctuations spontanées de ce milieu, à l'équilibre, en l'absence de champ extérieur appliqué.

Nous exposerons dans ce qui suit les principaux résultats et les possibilités de cette méthode.

I.2. THEORIE DE KUBO

I.2.1. Calcul de la conductivité

Considérons un cristal où N électrons peuvent interagir avec des phonons, impuretés, etc... Soit H_0 l'hamiltonien du système des N électrons à l'équilibre, H_0 tenant compte de toutes les interactions. Appliquons dans une direction Ox, un champ électrique \mathcal{E} d'amplitude faible. Nous envisagerons successivement le cas où le champ électrique appliqué est une fonction quelconque du temps, et ensuite le cas où ce champ varie sinusoidalement avec le temps.

I.2.1.1. Cas d'un champ électrique quelconque fonction du temps
 $\mathcal{E} = \mathcal{E}(t)$

Sous l'effet de la faible perturbation apportée au système, l'hamiltonien total peut être écrit sous la forme :

$$H_{total} = H_0 + \Delta H(t)$$

où

$$\Delta H(t) = \sum_1^N e \vec{r}_i \cdot \vec{\mathcal{E}}(t) = \sum_1^N e x_i \mathcal{E}(t)$$

Sous l'effet de cette même perturbation, la fonction de distribution devient :

$$f(\vec{r}, \vec{k}, t) = f_0(E) + f_1(\vec{r}, \vec{k}, t) \quad \text{où } f_1(\vec{r}, \vec{k}, t) \ll f_0(E)$$

En supposant que le champ électrique est appliqué adiabatiquement à partir de $t = -\infty$, Kubo [5] montre, par intégration formelle de l'équation de Liouville :

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + [f, H]$$

que la densité de courant dans le milieu, observée dans une direction Oy

peut être écrite sous la forme :

$$J_y(t) = \sum_i e v_{iy} = \int_{-\infty}^t \phi_{xy}(t-t') \mathcal{E}(t') dt' \quad (I-10)$$

où v_{iy} est la vitesse suivant la direction Oy , du i ème porteur.

Par ailleurs la fonction $\phi_{xy}(t)$ se définit par l'équation suivante :

$$\phi_{xy}(t) = \frac{1}{kT} \int_{\Gamma} f_o \sum_N r v_x \cdot(o) \cdot \sum_N e v_y(t) d\Gamma \quad (I-11)$$

$\phi_{xy}(t)$ s'appelle la fonction réponse du système.

L'équation (I-10) montre que $\phi_{xy}(t)$ représente la réponse du système à une impulsion de Dirac appliquée au temps $t = 0$. La densité de courant $J_y(t)$ observée dans la direction Ox apparaît en effet comme une somme d'effets créés par des impulsions $\mathcal{E}(t')$ successives, t' variant de $-\infty$ à t .

Un traitement quantique plus rigoureux peut être mené de la même manière. La fonction de distribution est alors remplacée par la matrice densité.

Kubo montre que dans ce cas : {4} {5} :

$$\phi_{xy}(t) = \int_0^{1/kT} \text{Trace} \left\{ \rho_o \sum_N e v_x (-jh\lambda) \cdot \sum_N e v_y(t) \right\} \cdot d\lambda$$

Remarquons que lorsque λ varie de 0 à $1/kT$, $jh\lambda$ qui a les dimensions d'un temps est toujours inférieur à $\frac{jh}{kT} = 0,25 \cdot 10^{-13}$ seconde.

Or, nous verrons que dans le domaine de fréquences envisagé, aux températures voisines de la température ambiante, $(jh\lambda)$ est toujours inférieur au dixième de la période du champ électrique appliqué. On pourra donc

traiter le problème classiquement et écrire que :

$$\Phi_{xy}(t) = \frac{1}{kT} \left\langle \sum_N e v_x(0) \cdot \sum_N e v_y(t) \right\rangle$$

Supposons en outre que les particules sont indépendantes (cette hypothèse est légitime, les dopages étudiés étant de l'ordre de 10^{16} at/cm³). Les vitesses de deux porteurs différents ne sont pas corrélées. Dans ces conditions :

$$\Phi_{xy}(t) = \frac{1}{kT} \left\langle \sum_N e v_x(0) \cdot \sum_N e v_y(t) \right\rangle$$

se réduit à :

$$\Phi_{xy}(t) = \frac{Ne^2}{kT} \left\langle v_x(0) \cdot v_y(t) \right\rangle$$

Remarque

Généralement, les conditions expérimentales sont telles que la direction Oy coïncide avec la direction Ox d'application du champ électrique. Dans ce cas, la fonction réponse qui nous intéresse est :

$$\Phi_{xx}(t) = \frac{Ne^2}{kT} \left\langle v_x(0) \cdot v_x(t) \right\rangle$$

le symbole $\langle \quad \rangle$ indiquant la moyenne prise sur l'ensemble des états à l'équilibre, c'est à dire en l'absence de champ électrique appliqué, et l'on voit que dans ce cas, la fonction réponse est proportionnelle à la fonction de corrélation de la vitesse des porteurs.

Plus précisément, l'effet ne pouvant être antérieur à la cause, la fonction réponse $\Phi_{xx}(t)$ n'est définie que pour les temps positifs, alors que la fonction de corrélation de la vitesse des porteurs se définit quel que soit t.

Aussi écrivons nous que :

$$\phi_{xx}(t) = Y(t) \cdot \phi(t)$$

Y(t) étant la fonction de Heaviside

$$Y(t) = 1 \text{ pour } t \geq 0$$

$$Y(t) = 0 \text{ pour } t < 0$$

et $\phi(t) = \frac{Ne^2}{kT} \langle V_x(0) \cdot V_x(t) \rangle$ à un coefficient près la fonction de corrélation de la vitesse des porteurs. (I-13)

I.2.1.2. Cas d'un champ électrique sinusoïdal

$$\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_0 e^{j\omega t}$$

Dans ce cas, l'équation (I-10) devient :

$$J^{\mathbb{K}}(t) = \int_{-\infty}^t \phi_{xx}(t - t') \cdot \mathcal{E}_0 e^{j\omega t'} dt'$$

Nous pouvons écrire que :

$$J^{\mathbb{K}}(t) = \sigma^{\mathbb{K}}(\omega) \cdot \mathcal{E}(t)$$

en posant :

$$\sigma^{\mathbb{K}}(\omega) = \int_0^{\infty} \phi_{xx}(t) e^{-j\omega t} dt \quad (I-14)$$

La fonction réponse coïncidant avec la fonction de corrélation pour les temps $t > 0$, nous pouvons écrire

$$\sigma^{\mathbb{K}}(\omega) = \int_0^{\infty} \phi(t) e^{-j\omega t} dt \quad (I-15)$$

A partir de la relation précédente nous pouvons montrer que la fonction $\phi(t)$ peut être inversement déterminée à partir de $\sigma'(\omega)$. En effet :

$$\sigma'(\omega) = R. \int_0^{\infty} \phi(t) e^{-j\omega t} dt = \int_0^{\infty} \phi(t) \cdot \cos \omega t dt$$

En se servant des propriétés de parité de la fonction de corrélation ($\phi(t) = \phi(-t)$), nous pouvons encore écrire :

$$\sigma'(\omega) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(t) e^{-j\omega t} dt$$

Il est alors possible d'inverser la transformation de Fourier ce qui donne :

$$\phi(t) = \frac{1}{\Pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma'(\omega) e^{j\omega t} d\omega$$

De par sa signification physique $\phi(t)$ est une grandeur réelle ce qui implique :

$$\sigma^{\bar{x}}(-\omega) = \overline{\sigma^{\bar{x}}(\omega)}$$

la relation précédente devient :

$$\phi(t) = \frac{2}{\Pi} \int_0^{+\infty} \sigma'(\omega) \cos \omega t d\omega$$

soit (cf I.13) :

$$\langle v(o) \cdot v(t) \rangle = \frac{2kT}{\Pi N e^2} \int_0^{\infty} \sigma'(\omega) \cos \omega t d\omega \quad (I-16)$$

Ainsi lorsqu'il est possible de mesurer la conductivité sur une très large gamme de fréquences, la transformée de Fourier de ce spectre permet de connaître la fonction de corrélation des vitesses des porteurs en l'absence de champ électrique appliqué.

Ceci est un résultat tout à fait général, ne supposant aucune restriction sur le type de collisions existant et sur la fonction de corrélation $\phi(t)$ dont l'évolution temporelle peut être quelconque.

I.2.1.3. Remarque : Relations de Kramers-Krönig

$\sigma^{\mathbb{K}}(\omega)$ est une grandeur en général complexe. Sa partie réelle $\sigma'(\omega)$ et sa partie imaginaire $\sigma''(\omega)$ ne sont pas indépendantes.

En effet, à partir de la relation (I-14) nous pouvons écrire puisque $\phi_{\text{XX}}(t)$ est nulle pour $t < 0$:

$$\sigma^{\mathbb{K}}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_{\text{XX}}(t) e^{-j\omega t} dt$$

En prenant la transformée de Fourier inverse il vient :

$$\phi_{\text{XX}}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma^{\mathbb{K}}(\omega) e^{j\omega t} d\omega$$

Cette dernière relation combinée avec (I-14) donne :

$$\begin{aligned} \sigma^{\mathbb{K}}(\omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{+\infty} e^{-j\omega t} dt \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma^{\mathbb{K}}(\omega') e^{j\omega' t} d\omega' \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma^{\mathbb{K}}(\omega') d\omega' \int_0^{+\infty} e^{-j(\omega - \omega') t} dt \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma^{\mathbb{K}}(\omega') \left[\Pi \delta(\omega - \omega') - j P \left(\frac{1}{\omega - \omega'} \right) \right] d\omega' \end{aligned}$$

$$D'où \sigma^{\mathbb{K}}(\omega) = -\frac{j}{\pi} P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sigma^{\mathbb{K}}(\omega')}{\omega - \omega'} d\omega'$$

On retrouve les relations de Kramers-Krönig : {6}

$$\begin{aligned} \sigma'(\omega) &= \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sigma''(\omega')}{\omega - \omega'} d\omega' \\ \sigma''(\omega) &= -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sigma'(\omega')}{\omega - \omega'} d\omega' \end{aligned} \tag{I-17}$$

I.2.1.4. Nous venons de montrer comment à partir du spectre $\sigma'(\omega)$ il est possible de connaître $\phi(t)$ et d'en déduire le mécanisme de retour à l'équilibre des porteurs.

Nous nous proposons de démontrer qu'à partir des propriétés de cette fonction de corrélation, on peut accéder aux caractéristiques du matériau comme la masse effective et le temps de relaxation.

I.2.2. Développements asymptotiques de la conductivité

A partir de la formule (I-15) et en intégrant successivement par parties, il vient en séparant parties réelle et imaginaire :

$$\sigma'(\omega) = -\frac{\overset{\circ}{\phi}(0)}{\omega^2} + \frac{\overset{\circ\circ}{\phi}(0)}{\omega^4} + \dots$$

$$\sigma''(\omega) = -\frac{\overset{\circ\circ}{\phi}(0)}{\omega} + \frac{\overset{\circ\circ\circ}{\phi}(0)}{\omega^3} - \frac{\overset{\circ\circ\circ\circ}{\phi}(0)}{\omega^5} + \dots$$

Ces développements montrent que la conductivité du système à toutes les fréquences, est déterminée uniquement par le comportement statique du système à l'équilibre, c'est à dire plus précisément par les dérivées successives à l'origine de $\phi(t)$.

I.2.3. Détermination des dérivées successives

A partir du spectre expérimental de $\sigma'(\omega)$, il est possible d'obtenir les dérivées successives de $\phi(t)$ à l'origine.

En dérivant l'équation (I-15) sous le signe somme nous obtenons :

$$\overset{\circ\circ}{\phi}(t) = \frac{(j\omega)^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma''(\omega) e^{j\omega t} d\omega$$

$$= \frac{(j\omega)^2}{2\pi} \int_0^{+\infty} \omega^2 [\sigma^{\#}(\omega) e^{j\omega t} + \sigma^{\#}(-\omega) e^{-j\omega t}] d\omega$$

En utilisant les conditions de parité de $\sigma^{\#}(\omega)$

$$\phi^{\circ\circ}(0) = -\frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} \omega^2 \sigma'(\omega) d\omega$$

et de la même façon $\phi^{2n}(0) = \frac{(-1)^n}{\pi} \int_0^{+\infty} \omega^{2n} \sigma'(\omega) . d\omega$ (I-18)

Il est intéressant de préciser la signification physique des dérivées successives que nous pouvons déterminer à partir de (I-18) ;

I.2.3.1. Dérivée d'ordre 0

$$\phi(t) = \frac{Ne^2}{kT} \langle v(0) . v(t) \rangle \quad (\text{cf I-13})$$

C'est la fonction de corrélation des vitesses de porteurs. Au temps $t = 0$:

$$\langle v(0) . v(t) \rangle = \langle v(0) . v(0) \rangle$$

A l'équilibre thermodynamique, la moyenne des carrés des vitesses est $\frac{kT}{m^{\#}}$

On a donc :

$$\phi(0) = \frac{Ne^2}{m^{\#}}$$

Connaissant le nombre de porteurs il est donc possible à partir de $\phi(0)$ de déterminer la masse effective.

I.2.3.2. Dérivée d'ordre 1

$$\phi^{\circ}(t) = \frac{Ne^2}{kT} \langle v(0) . \gamma(t) \rangle \text{ où } \gamma(t) \text{ représente l'accélération des porteurs}$$

Au temps $t = 0$, $\phi(0) = \frac{Ne^2}{kT} \langle v(0) \cdot \gamma(0) \rangle$

et l'on voit que $\dot{\phi}(0) = 0$ car la vitesse et l'accélération auxquelles sont soumis les porteurs ne sont pas corrélées au temps $t = 0$.

Cette remarque est importante car elle montre que l'hypothèse de la relaxation $\phi(t) = \phi(0) e^{-t/\tau}$ n'est jamais valable aux temps courts puisque $\phi(0)$ aurait pour valeur $\dot{\phi}(0) = -\frac{1}{\tau} \neq 0$

Steele {7} a introduit une fonction plus correcte présentant un palier à l'origine aux temps courts, et une forme exponentielle aux temps longs

$$\phi(t) = \phi(0) \cdot \exp\left(\frac{-t}{\tau_1}\right) \cdot \exp\left(\frac{\tau_2}{\tau_1}\right) \cdot \exp\left[\frac{-\tau_2}{\tau_1} \exp\left(\frac{-t}{\tau_2}\right)\right] \quad \text{avec } \frac{\tau_2}{\tau_1} \ll 1$$

A partir de cette relation nous montrons (Figure 1) comment cette propriété ($\dot{\phi}(0) = 0$) se répercute théoriquement sur les spectres en fréquences $\sigma'(\omega)$. On voit que pour des fréquences de l'ordre de $1/\tau_2$, la diminution de σ' est beaucoup plus brutale que dans l'hypothèse de la relaxation couramment admise.

I.2.3.3. Dérivée d'ordre 2

$$\phi(t) = \frac{Ne^2}{kT} \langle v(0) \cdot \gamma(t) \rangle = \frac{-Ne^2}{kT} \langle \gamma(0) \cdot \gamma(t) \rangle$$

$\phi(t)$ peut encore s'exprimer sous la forme suivante :

$$\phi(t) = \frac{-Ne^2}{kT} \frac{1}{m^2} \langle F(0) \cdot F(t) \rangle$$

F étant la force s'exerçant sur chaque porteur et m^* leur masse effective.

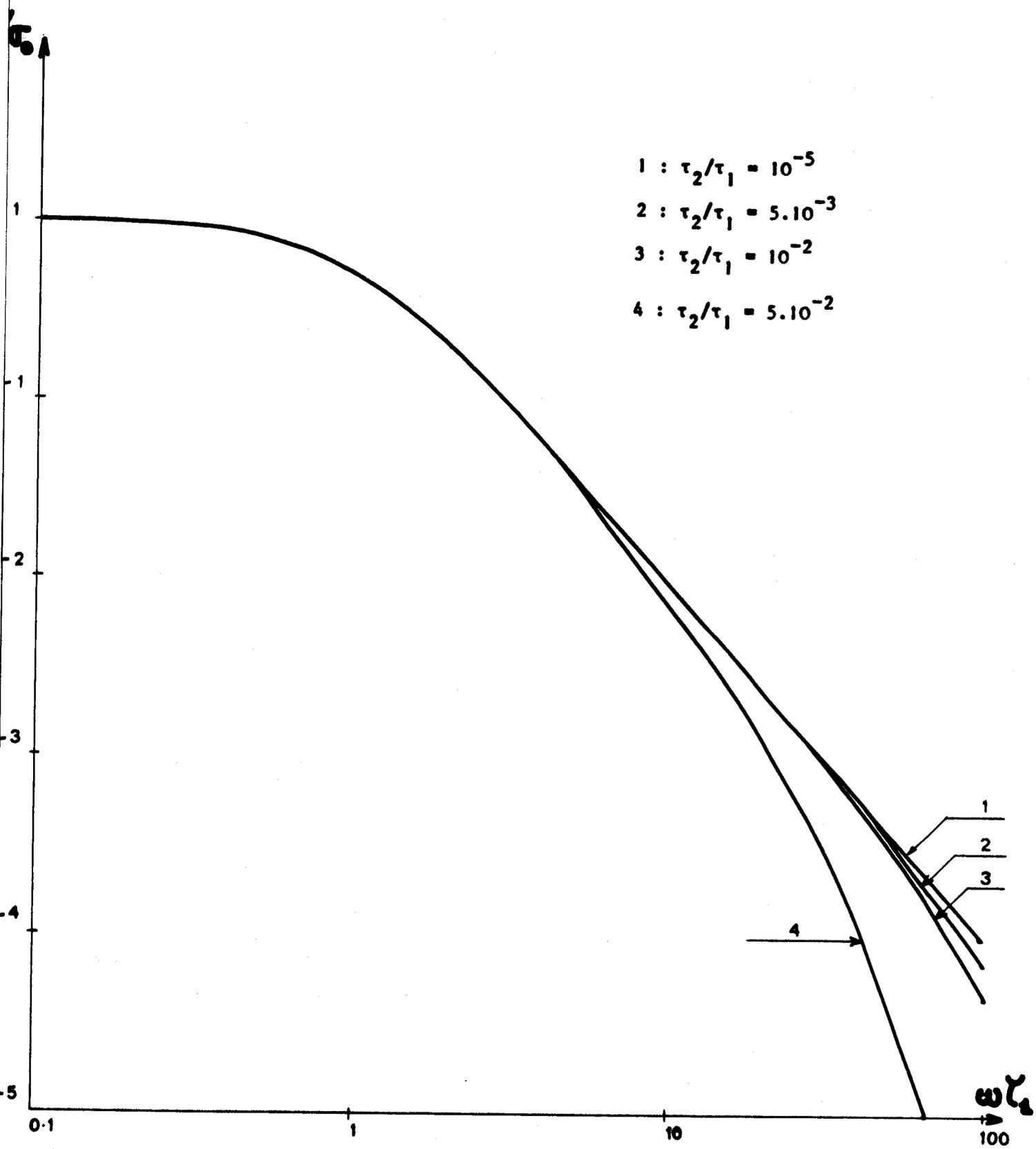


Figure 1



$$\text{Au temps } t = 0 : \phi(0) = \frac{-Ne^2}{kT} \frac{1}{m\pi^2} \langle F(0) \cdot F(0) \rangle$$

$\phi(t)$ est donc la fonction de corrélation des forces agissant sur les porteurs.

Par son temps de corrélation elle donne des informations sur la durée de collision ; Par ailleurs, la valeur au temps $t = 0$ exprime la force moyenne agissant sur les électrons.

I.2.4. Temps de relaxation

Nous venons de montrer comment le spectre $\sigma(\omega)$, à condition d'être tracé avec grande précision principalement en très haute fréquence, pouvait permettre de déterminer des paramètres comme la masse effective ou le temps de collision.

Une autre grandeur particulièrement importante peut être déduite de la fonction de corrélation $\phi(t)$. En effet, calculons l'aire τ sous la courbe de la fonction $\phi(t)$ normalisée à 1 au temps $t = 0$.

$$\tau = \frac{\int_0^{\infty} \langle v(0) \cdot v(t) \rangle dt}{\langle v(0) \cdot v(0) \rangle} \quad (I-19)$$

en combinant cette relation avec (I-14) on obtient :

$$\sigma(0) = \frac{Ne^2}{m\pi} \tau$$

Cette relation est similaire à la formule classique de la conductivité continue. Cependant, le temps de relaxation est ici un temps de relaxation moyen qui peut être déterminé par la simple connaissance du spectre $\sigma'(\omega)$ sans connaissance préalable de la distribution en fonction de l'énergie du temps de relaxation des porteurs. L'intérêt de cette détermination est qu'elle peut s'effectuer sans connaître la densité et la masse

effective des porteurs contrairement aux méthodes usuelles de mesure du temps de relaxation, qui nécessitent des mesures conjointes de mobilité de Hall et de mobilité de conductivité {8}, {9}, {10}.

I.2.5. Conclusion

Nous venons de montrer que la théorie de Kubo, par son aspect général, présente de nombreux avantages par rapport à la théorie de Boltzmann. En particulier aucune hypothèse n'a besoin d'être avancée quant à la nature des collisions, ni au sujet du mécanisme de retour à l'équilibre.

La détermination du spectre $\sigma'(\omega)$ à large gamme de fréquence permet de déterminer la fonction de corrélation des vitesses $\phi(t)$ et par là même le mécanisme de relaxation. La connaissance des valeurs prises par la fonction de corrélation et par ses dérivées successives à l'instant $t = 0$ doit permettre de déterminer le temps de relaxation, la masse effective des porteurs, et la force moyenne agissant sur les électrons.

C H A P I T R E I I

RELATIONS ENTRE LA CONDUCTIVITE ET LES GRANDEURS ACCESSIBLES

A LA MESURE

-o-o-o-o-o-o-o-o-

DEFINITIONS ET TECHNIQUES EXPERIMENTALES

II.1. DEFINITIONS

L'équation de Maxwell : $\vec{\text{rot}} \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$ permet d'écrire dans le cas où le champ appliqué est sinusoïdal :

$$\vec{\text{rot}} \vec{H} = (\sigma + j\omega\epsilon_0 \epsilon) \vec{E}$$

Dans le cas d'un semi-conducteur :

- ϵ représente la permittivité relative du réseau. C'est une grandeur réelle qui ne dépend généralement pas de la fréquence et nous posons :

$$\epsilon = \epsilon'_{\text{Reseau}}$$

- σ la conductivité, correspond à la contribution des porteurs libres ; nous avons montré que c'est une grandeur en général complexe que nous noterons $\sigma^* = \sigma' + j\sigma''$

L'équation de Maxwell en régime sinusoïdal permet d'introduire les notions de conductivité totale

$$\sigma_T^{\#} = \sigma^{\#} + j\omega\epsilon_0 \epsilon'_{\text{Réseau}}$$

et de permittivité totale

$$\epsilon_T^{\#} = \frac{\sigma^{\#} + j\omega\epsilon_0 \epsilon'_{\text{Réseau}}}{j\omega\epsilon_0}$$

du matériau.

Ces deux grandeurs sont liées par une relation très simple :

$$\sigma_T^{\#} = j\omega\epsilon_0 \epsilon_T^{\#}$$

et nous pourrons écrire de façon équivalente :

$$\epsilon_T' = \epsilon'_{\text{Réseau}} + \frac{\sigma''(\omega)}{\omega\epsilon_0} \quad (\text{II-1})$$

$$\epsilon_T'' = \frac{\sigma'(\omega)}{\omega\epsilon_0} \quad (\text{II-2})$$

Par ailleurs il est également commode d'introduire l'indice $n^{\#}$ complexe défini par :

$$n^{\#} = \sqrt{\epsilon_T^{\#}} = n - jk$$

où $\left\{ \begin{array}{l} n \text{ est l'indice réel} \\ k \text{ est le coefficient d'extinction} \end{array} \right.$

Nous pourrons donc utiliser de façon équivalente les relations :

$$\epsilon_T'(\omega) = n^2(\omega) - k^2(\omega) \quad (\text{II-3})$$

$$\epsilon''_T(\omega) = 2n(\omega) \cdot k(\omega) \quad (\text{II-4})$$

L'intégration des équations de Maxwell pour un matériau non magnétique montre que la constante de propagation d'une onde plane est donnée par :

$$\gamma = \sqrt{j\omega\mu (\sigma + j\omega\epsilon)} = \alpha_t + j\beta$$

où α_t est le coefficient d'atténuation en tension et β la constante de phase. En utilisant les conventions précédentes :

$$\gamma = \sqrt{j\omega\mu \sigma_T^*}$$

En élevant au carré il vient :

$$\alpha_t^2 - \beta^2 = -\omega\mu\sigma''_T \quad 2\alpha_t\beta = \omega\mu\sigma'_T$$

soit puisque :

$$\beta = 2\pi/\lambda = \frac{\omega}{v} = \frac{n\omega}{c}$$

$$\epsilon_0 \mu \neq \epsilon_0 \mu_0 = \frac{1}{c^2}$$

$$2\alpha_t = \alpha \quad \alpha \text{ coefficient d'atténuation en puissance}$$

$$n = \frac{c}{v} \quad n \text{ indice du matériau}$$

$$\alpha(\omega) = \frac{\sigma'(\omega)}{\epsilon_0 \cdot n(\omega) \cdot c} \quad (\text{II-5})$$

Ces différentes relations nous montrent que la mesure du déphasage caractérisé par β et de l'atténuation α de l'onde électromagnétique dans le matériau permet d'accéder à la permittivité ou à la conductivité complexe.

II.2. DESCRIPTION DE L'APPAREILLAGE UTILISE

Dans le cas où l'indice du matériau est connu, la relation (II-5) nous montre que la mesure du seul coefficient d'atténuation α suffit pour déduire σ' .

La détermination de σ peut s'effectuer à partir de mesures de coefficient de transmission T d'une lame semi-conductrice à faces parallèles, d'épaisseur connue. Ces mesures sont faciles à mettre en oeuvre techniquement à large bande de fréquences.

Malheureusement, l'indice du matériau n'est connu en toute rigueur que lorsque les matériaux sont peu dopés et par suite peu conducteurs (dans ce cas, $n \approx n_{\text{réseau}}$). Cependant, lorsque le matériau est plus dopé, nous montrerons ultérieurement que l'indice peut être déterminé par itérations successives, en utilisant les relations de Kramers-Krönig.

Il est nécessaire, pour utiliser une telle méthode, de déterminer le coefficient de transmission T dans une large bande de fréquences, et nous nous proposons de décrire ici l'ensemble des méthodes de mesures qui nous ont permis de mesurer le coefficient de transmission T pour une longueur d'onde variant de 30 μ à 4,4 mm.

II.2.1. Gamme millimétrique

a) $\lambda \approx 4$ mm

La source est un klystron Philips YK 1010. Un détecteur accordable permet d'obtenir une bonne sensibilité

b) $\lambda \approx 1$ mm

La source est un carcinotron CSF CO 10 dont la gamme de fréquences est comprise entre 300 et 330 GHz. Les signaux sont détectés à l'aide d'une cellule de Golay puis amplifiés.

Dans les deux cas, les sources sont monochromatiques et les mesures s'opèrent en propagation libre (guides surdimensionnés circulaires). Ceci permet :

- d'une part d'éliminer tous les phénomènes de contact parasites entre l'échantillon et le guide {11}, {12}
- d'autre part d'effectuer d'une façon commode des études en fonction de l'angle entre le champ électrique et les axes cristallographiques du cristal. Il suffit en effet simplement de tourner l'échantillon autour de la direction de propagation de l'onde électromagnétique.

Le contrôle permanent du niveau de l'onde électromagnétique incidente par l'intermédiaire d'un coupleur C nous permet de vérifier la stabilité de la puissance délivrée par l'oscillateur. Ce contrôle est particulièrement nécessaire lors des mesures à température variable.

Nous donnons Figure 2 le schéma du montage utilisé.

II.2.2. Gamme Infra-rouge lointain

a) $30\mu < \lambda < 1$ mm. Spectromètre Beckmann

Le rayonnement polychromatique d'une lampe à vapeur de mercure est analysé par un interféromètre de Michelson équipé de cinq séparatrices différentes correspondant à toute la gamme de fréquences.

Le schéma de l'ensemble de l'appareillage est représenté Figure 3.

Le signal d'interférence est détecté et mémorisé pendant le déplacement du miroir M_1 . Un calculateur hybride {13} réalisé au laboratoire effectue l'analyse harmonique du signal. La réponse spectrale est enregistrée point par point. La comparaison des enregistrements à vide et en charge permet de déterminer le coefficient de transmission $T(\lambda)$ de la lame semi-conductrice étudiée. La résolution dépend du nombre de points échantillonnés et du pas

d'échantillonnage. Elle peut donc être constante sur toute la gamme de fréquences. La meilleure résolution obtenue est de $1,25 \text{ cm}^{-1}$

b) $45\mu < \lambda < 600\mu$. Spectromètre Caméca SI 36B

Cet appareillage comporte une source polychromatique (lampe à vapeur de mercure) associée à un monochromateur constitué de réseaux, de filtres et de miroirs interchangeables. La rotation d'un réseau permet de faire varier la fréquence. La résolution dépend de la dimension des diaphragmes et fentes utilisés. Elle peut varier de 5 cm^{-1} aux environs de $\lambda = 250 \text{ cm}^{-1}$ à $0,7 \text{ cm}^{-1}$ aux environs de $\lambda = 15 \text{ cm}^{-1}$.

Les signaux sont détectés à l'aide d'une cellule de Golay puis amplifiés.

II.2.3. Remarque sur la façon de diaphragmer l'échantillon

Les cellules de mesure utilisées dans les différents dispositifs ne présentent pas la même ouverture.

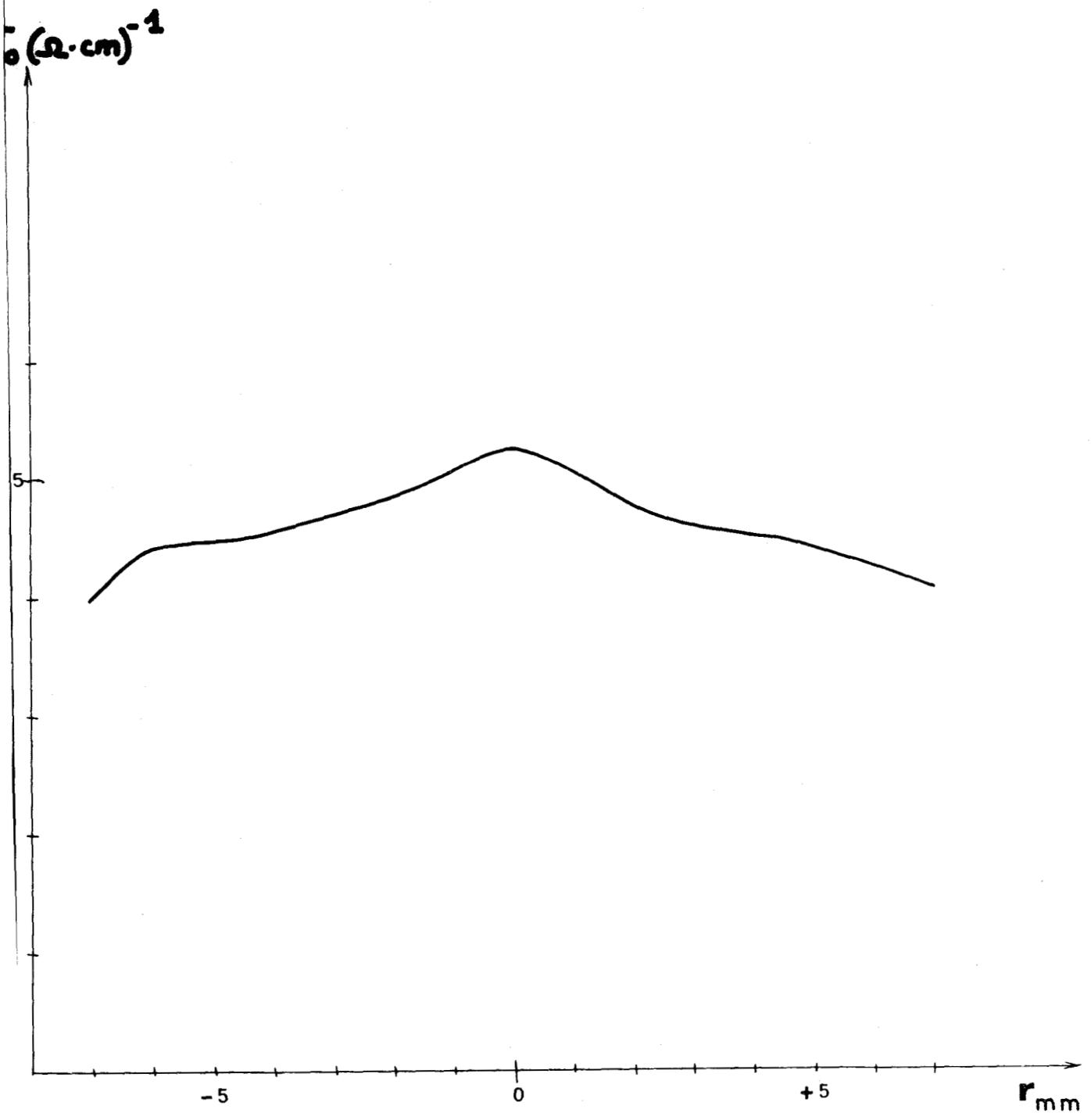
En effet, dans le domaine optique, la finesse du faisceau détermine le diamètre utile de l'échantillon. Elle est de :

- quelques millimètres sur le spectromètre Beckmann
- 1 centimètre sur le spectromètre Caméca

dimension qui ne peut être diminuée sans réduire la sensibilité.

Dans le domaine millimétrique, la technique de mesure en guides surdimensionnés, impose des échantillons de plus grand diamètre (18 mm pour $\lambda = 1 \text{ mm}$, 25 mm pour $\lambda = 4 \text{ mm}$).

D'éventuelles hétérogénéités de dopage créées au cours des tirages des cristaux (particulièrement distribution radiale) peuvent provoquer le fait que la conductivité moyenne mesurée sur un échantillon diffère selon que celui-ci est plus ou moins diaphragmé.



Distribution radiale de la conductivité - Cristal 3037 type P

Figure 4



Pour remédier à cette cause d'erreur et recouper les mesures effectuées aux différentes fréquences avec les diaphragmes différents, nous établissons pour chaque échantillon la "carte" représentant la distribution radiale de la conductivité continue grâce à la technique classique dite "des quatre pointes" {14}.

Nous donnons (Figure 4) un exemple de carte de dopage, où la valeur de la conductivité continue est tracée en fonction de la distance au centre de l'échantillon. A partir de ces cartes, il est possible d'obtenir la conductivité continue moyenne en fonction du diamètre des diaphragmes utilisés.

En effet, la distribution étant approximativement de révolution autour d'un axe perpendiculaire à la plaquette, nous pouvons écrire que :

$$\sigma_{\text{moyen}} = \frac{1}{\pi R^2} \int_0^R \sigma(r) \cdot 2\pi r \cdot dr$$

R étant le rayon de la partie utile de la cellule utilisée. Pour tenir compte des variations de σ moyen en fonction de l'appareillage utilisé, il suffit ensuite de rapporter les résultats de mesure à cette valeur moyenne de la conductivité. En pratique, pour les échantillons étudiés, la variation de σ moyen est inférieure à 5%.

II.3. COEFFICIENT DE TRANSMISSION, COEFFICIENT DE PROPAGATION

Pour déterminer le coefficient d'atténuation en puissance α et la conductivité complexe des échantillons nous avons effectué des mesures de transmission sur des disques de silicium à faces parallèles polies optiquement, réalisés par L.T.T. {15}.

Du fait des réflexions multiples à l'intérieur de la lame, le coefficient de transmission s'écrit :

$$T = \frac{(1 - R)^2 \exp(-ah)}{1 - 2R \cos \frac{4\pi nh}{\lambda} \exp(-ah) + R^2 \exp(-2ah)} \quad (\text{II-6})$$

où $\left\{ \begin{array}{l} h \text{ représente l'épaisseur de la lame} \\ R \text{ est le coefficient de réflexion en puissance sur la face d'entrée du} \\ \text{dioptré air semi-conducteur, donné par la relation :} \end{array} \right.$

$$R = \frac{(n - 1)^2 + k^2}{(n + 1)^2 + k^2}$$

Dans le cas général la courbe représentative de $T(\lambda)$ fait apparaître des franges (Figure 5) dont les enveloppes ont pour équations :

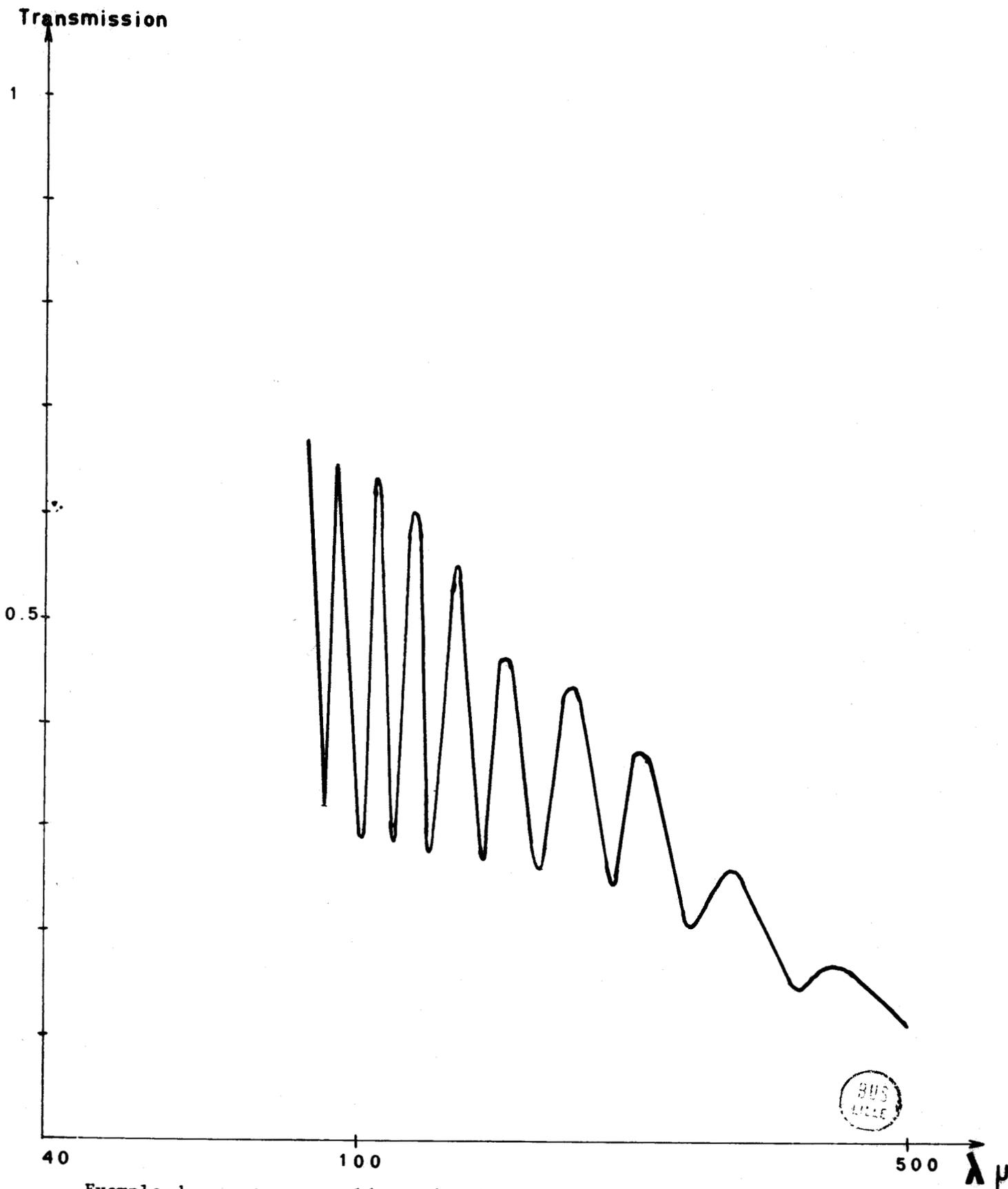
$$T_{\max}(\omega) = \frac{(1 - R)^2 \exp(-\alpha h)}{(1 - R \exp(-\alpha h))^2} \quad (\text{II-7})$$

$$T_{\min}(\omega) = \frac{(1 - R)^2 \exp(-\alpha h)}{(1 + R \exp(-\alpha h))^2}$$

Lorsque les franges sont très marquées (T_{\max} très différent de T_{\min}) la mesure de T permet difficilement de déterminer α et σ^* . Il faut en effet connaître avec grande précision l'indice dans toute la gamme de fréquences, car une faible variation de n entraîne une modification importante du terme en $\cos\left(\frac{4\pi n h}{\lambda}\right)$

L'indice n peut cependant être déterminé à partir des fréquences correspondant à T_{\max} et T_{\min} mais un tel procédé ne peut être utilisé qu'en haute fréquence où le matériau est peu absorbant.

Au contraire en basse fréquence les franges d'interférence ne sont distinctes que pour des échantillons d'épaisseur très faible (100 à 200). Les franges d'interférence s'élargissent alors considérablement vers les basses fréquences et en ce qui concerne la gamme infra-rouge très lointain, sont de plus altérées par la résolution des appareils (Figure 5). La détermination de l'indice est alors trop imprécise pour que les mesures de transmission soient exploitables directement par la formule (II-6).



Exemple de spectre cannelé - Cristal de type N, d'épaisseur 150 μ et de résistivité en continu = 0,6 Ω .cm.

Figure 5

C'est pourquoi les conditions expérimentales (choix de la hauteur d'échantillon, de la résolution de l'appareillage de mesure) ont toujours été choisies dans ce travail de façon à limiter au maximum l'amplitude des franges observées. Dans ce but, nous nous sommes constamment placés dans un des deux cas particuliers suivant :

1°) Cas des absorptions telles que le produit $\alpha h \ll 1$

On peut alors négliger les réflexions multiples sur les deux faces du cristal et T se met sous la forme :

$$T = (1 - R)^2 \exp(-\alpha h)$$

et l'on obtient à partir de la relation (II-5) :

$$\sigma = \frac{\epsilon_0 n.c}{h} \text{Log} \frac{(1 - R)^2}{T} \tag{II-8}$$

2°) Cas où la résolution en fréquence de l'appareillage est faible

Dans le domaine de l'infra-rouge lointain, les sources utilisées sont polychromatiques, et dans ce cas, nous ne mesurons pas $T(\omega)$ mais :

$$\frac{1}{\Delta\omega} \int_{\omega - \Delta\omega/2}^{\omega + \Delta\omega/2} T(\omega) \cdot d\omega$$

où $\Delta\omega$ est la résolution en pulsation de l'appareil.

Afin d'obtenir une expression simplifiée du coefficient de transmission, nous avons toujours employé des échantillons suffisamment épais pour obtenir un ordre d'interférence élevé, et nous nous sommes placés dans des conditions telles que $\Delta\omega$ soit largement supérieure à la périodicité en fréquence (ou plus exactement en pulsation) des franges d'interférences. Dans ces conditions, le coefficient de transmission (relation II-6) intégré

sur une période est pratiquement égal au coefficient de transmission expérimental et l'on a :

$$T_{\text{mesuré}} \neq \frac{(1 - R)^2 \exp(-\alpha h)}{1 - R^2 \exp(-2\alpha h)} \quad (\text{II-9})$$

Remarquons que généralement, αh est important et le dénominateur :

$$1 - R^2 \exp(-2\alpha h)$$

est proche de 1, et l'on retrouve approximativement la relation utilisable dans le premier cas soit :

$$T \approx (1 - R)^2 \exp(-\alpha h)$$

Cependant cette relation n'est pas toujours suffisamment exacte, en particulier aux hautes fréquences où αh est faible : pour les dopages considérés, le fait de négliger $R^2 \exp(-2\alpha h)$ devant 1 entraîne une erreur de l'ordre de 10% sur $\exp(-\alpha h)$; c'est pourquoi il est préférable d'utiliser la relation complète (relation II-9) qui s'écrit encore :

$$\sigma' = \frac{\epsilon_0 n c}{h} \text{Log} \frac{(1 - R)^2 + (1 - R)^4 + 4 R^2 T^2}{2T} \quad (\text{II-10})$$

On remarque que même dans ces deux cas simplifiés, les relations (II-8) et (II-10) ne sont cependant pas directement exploitables pour déterminer la conductivité et nous nous proposons de décrire maintenant le procédé itératif qui nous a permis cette détermination de σ' .

II.4. DETERMINATION DE LA CONDUCTIVITE $\sigma(\omega)$

Un procédé usuel consiste à mesurer pour une même fréquence la transmission pour deux ou trois hauteurs différentes ce qui permet d'éliminer le coefficient de réflexion R et de déduire la valeur du coefficient d'atténuation α .

Pour utiliser cette méthode dans notre cas, il faudrait pour chaque fréquence trois échantillons de conductivité strictement semblable pour lesquels la relation $T = (1 - R)^2 \exp(-\alpha h)$ soit valable (les plaquettes de silicium devraient être alors assez épaisses pour qu'il n'y ait pas de franges d'interférences) ; il faudrait en outre que ces échantillons présentent une atténuation suffisamment faible pour être mesurée avec précision.

Ceci d'une part oblige à multiplier le nombre d'échantillons. D'autre part les plaquettes de silicium étant taillées le long d'un lingot ne présentent jamais exactement la même conductivité en continu et donc, à fréquence donnée, ne présentent pas le même indice $n(\omega)$ ni le même coefficient de réflexion $R(\omega)$.

La méthode "des trois hauteurs" est de ce fait imprécise. Nous avons préféré utiliser un procédé de calcul numérique basé sur les relations de Kramers-Krönig, exploitant ainsi le fait que nos mesures effectuées à très large gamme de fréquence nous permettent d'obtenir la valeur du coefficient de transmission $T(\omega)$ de l'échantillon dans tout le spectre de fréquences.

Le principe utilisé repose sur une méthode d'itérations successives.

Dans une première étape supposons que $n = n_{\text{réseau}}$ et que le coefficient d'extinction k est nul (cette hypothèse est vérifiée en infrarouge proche lorsque l'absorption due aux porteurs libres devient négligeable).

Calculons alors pour chaque fréquence $\sigma'(\omega)$ par la relation ^{*} :

$$\sigma'(\omega) = \frac{\epsilon_0 n_{\text{rés}} c}{h} \text{Log} \frac{(1 - R)^2 + (1 - R)^4 + 4 R^2 T^2(\omega)}{2 T(\omega)} \quad (\text{II-10})$$

où $R = \frac{(n_{\text{rés}} - 1)^2}{(n_{\text{rés}} + 1)^2}$ et $T(\omega)$ est le coefficient de transmission expérimental.

* La relation II-10 se réduit à la relation II-8 lorsque αh est $\ll 1$. Elle peut donc être considérée comme valable dans les deux cas étudiés précédemment ($\alpha h \ll 1$ et faible résolution en fréquence de l'appareillage)

Nous obtenons un premier spectre approché $\sigma' = f(\omega)$.

Les relations de Kramers-Krönig qui peuvent s'écrire en tenant compte des propriétés de parité : $\sigma'(-\omega) = \sigma'(\omega)$:

$$\sigma''(\omega) = \frac{2\omega}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\sigma'(\omega') \cdot d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2}$$

nous permettent alors à partir de ce premier spectre de calculer pour tout ω une première estimation de $\sigma''(\omega)$

A fréquence donnée, le couple de valeurs $\sigma'(\omega)$ et $\sigma''(\omega)$ permet de déterminer l'indice $n(\omega)$, le coefficient d'extinction $k(\omega)$ et le coefficient de réflexion $R(\omega)$ (relations II-1, II-2, II-3, II-4).

Ces valeurs de $n(\omega)$, $k(\omega)$, $R(\omega)$ réinjectées dans la relation (II-10) permettent alors d'obtenir une meilleure estimation de $\sigma'(\omega)$ puis de $\sigma''(\omega)$. L'itération est poursuivie jusqu'à ce que le calcul converge à la précision voulue.

L'organigramme de calcul utilisé en pratique est résumé page 39.

En vue de vérifier la validité du procédé, nous avons introduit dans la relation (II-10) un coefficient de transmission $T(\omega)$ calculé théoriquement dans l'hypothèse d'une relaxation non distribuée soit :

$$\sigma^{\#} = \frac{\sigma_0}{1 + j\omega\tau}$$

Nous avons choisi

$$\sigma_0 = 80 (\Omega\text{m})^{-1} \text{ et } \tau = 2,2 \cdot 10^{-13} \text{ s}$$

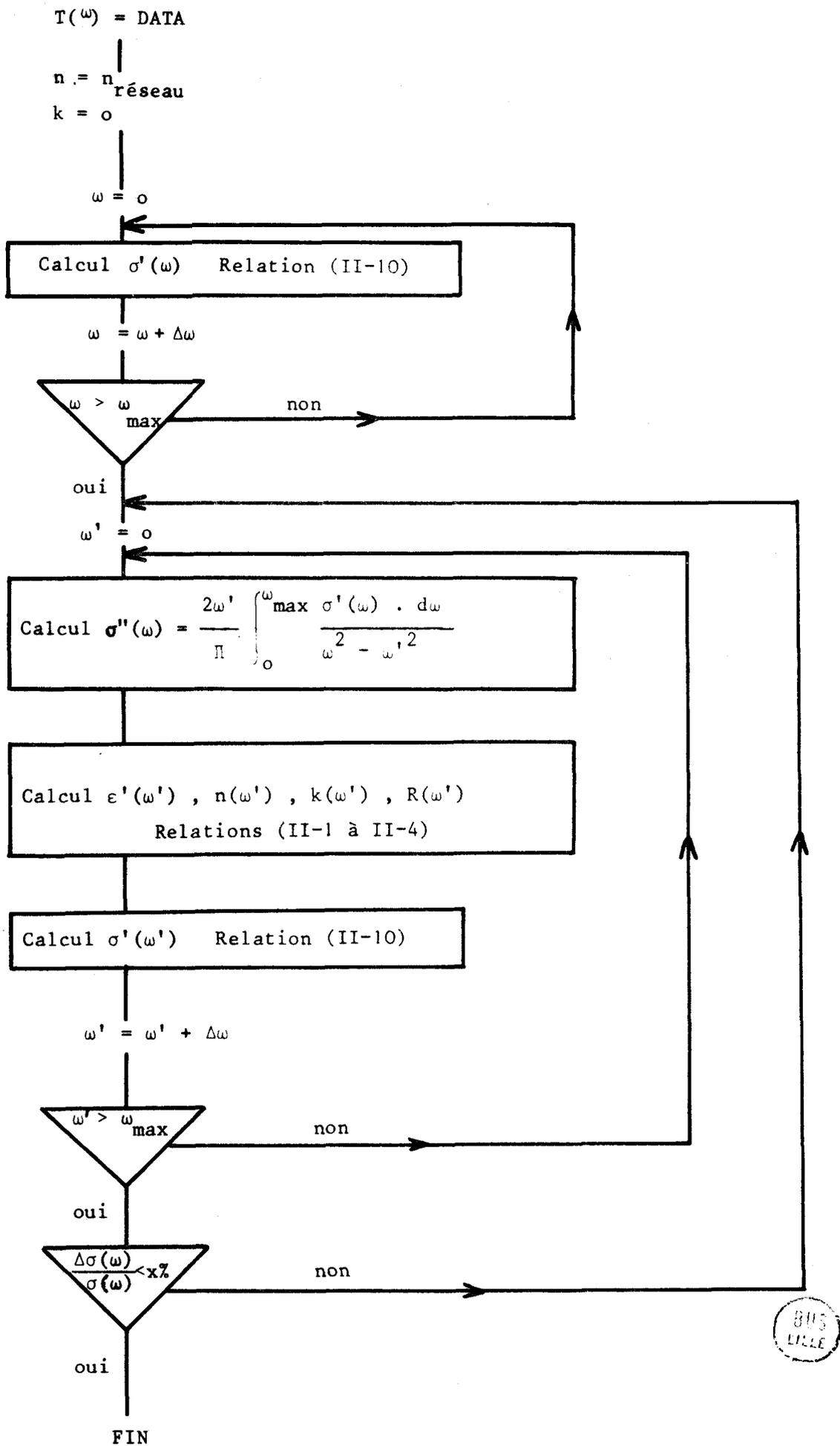
c'est à dire que nous nous sommes placés pour cette vérification théorique dans le cas où la variation d'indice est relativement très importante dans la bande de fréquences envisagée.

Nous donnons (Figure 6 et 7) l'évolution de l'indice $n(\omega)$ et de $\sigma'(\omega)$ avant et après deux itérations.

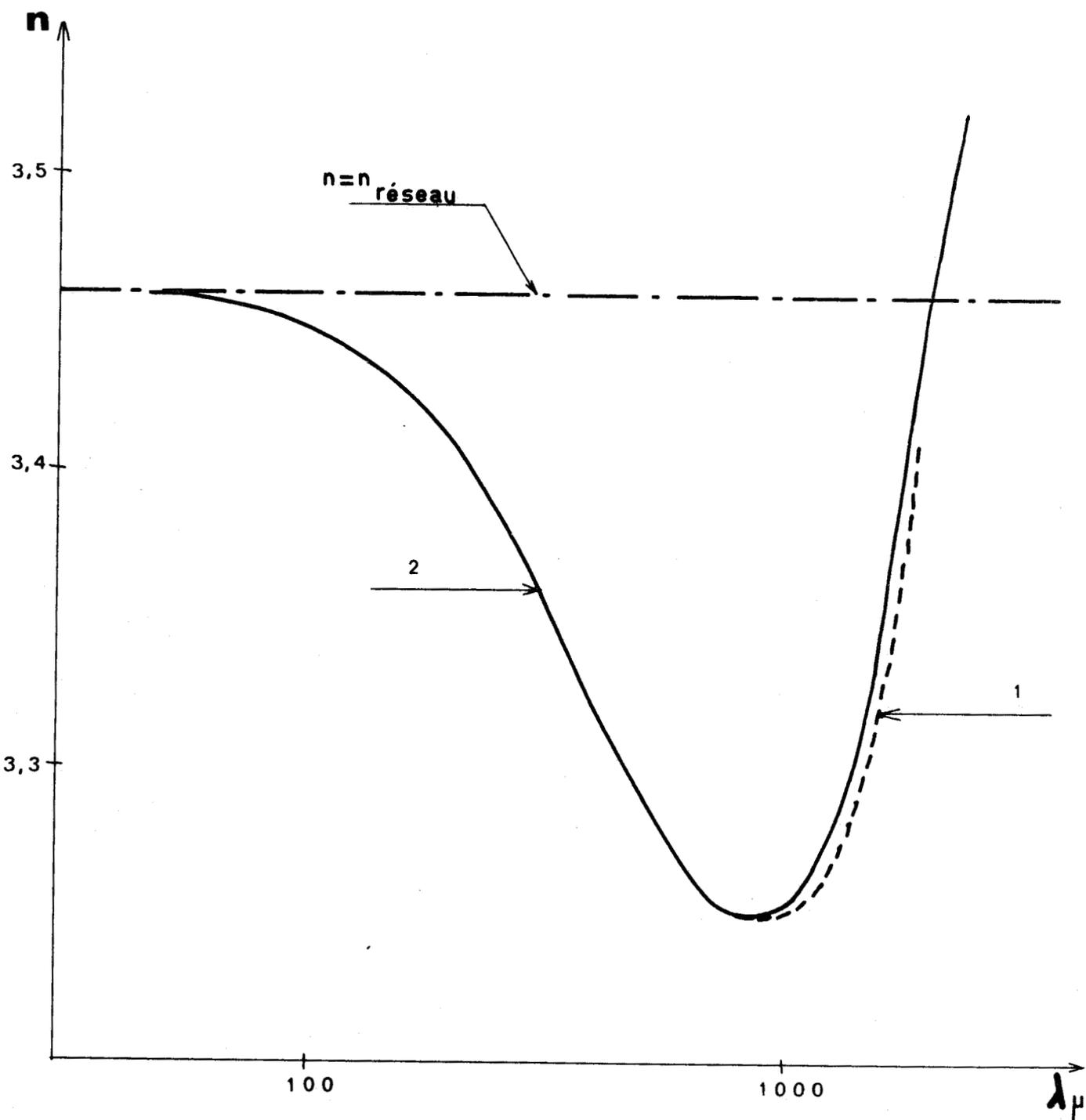
Nous pouvons vérifier que le procédé est très rapidement convergent et que nous retrouvons bien après itération $\sigma'(\omega)$ de la forme :

$$\sigma'(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 + \omega^2 \tau^2}$$

En pratique nous pouvons nous contenter d'un nombre d'itérations voisin de 3 ou 4.



BUS
LILLE

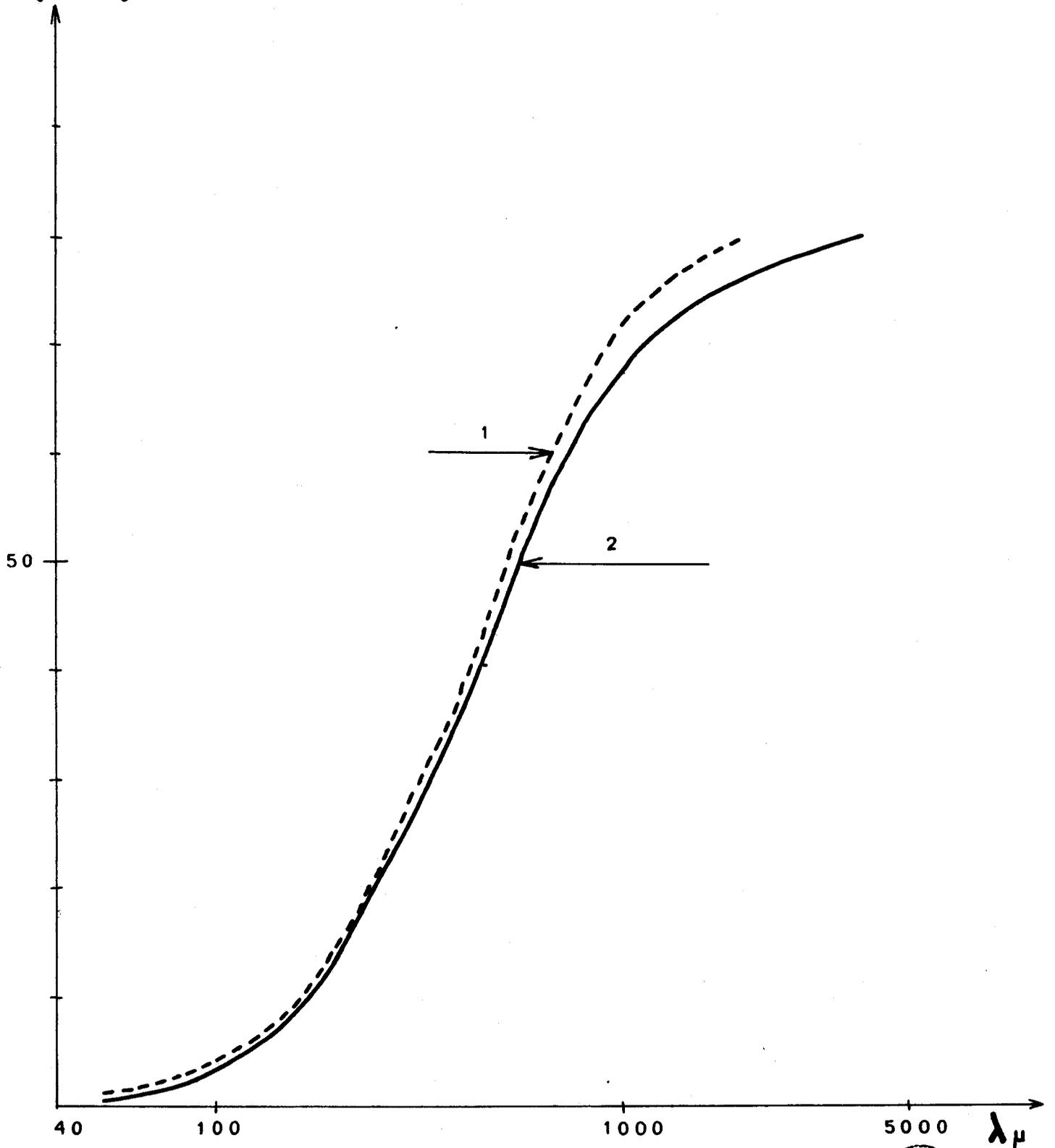


Evolution de l'indice n au cours des itérations successives

Figure 6



$\sigma'(\Omega \cdot m)^{-1}$



Evolution de σ' au cours des itérations successives



Figure 7

CHAPITRE III

RESULTATS EXPERIMENTAUX ET INTERPRETATION

-O-O-O-O-O-O-

Nous avons étudié de façon comparative, en gamme millimétrique et infra-rouge lointain, la transmission présentée par des plaquettes de silicium de type P et de type N.

Nos efforts se sont portés plus particulièrement sur des échantillons possédant une densité de porteurs comprise entre $3 \cdot 10^{15}$ et $6 \cdot 10^{15} / \text{cm}^3$ ce qui correspond à une concentration en impuretés fréquemment utilisée lors de la réalisation de dispositifs hyperfréquences à semi-conducteurs.

Notre étude se subdivise en trois parties :

1°) Etude en fonction de la direction des axes cristallographiques de matériaux de type P et de type N respectivement dopés au Bore et au Phosphore.

2°) Etude en fonction de la fréquence de l'onde électromagnétique

- de cristaux de type N dopés respectivement au Phosphore, à l'Arsenic et à l'Antimoine, de même orientation cristallographique

- de cristaux de type N dopés au Phosphore présentant différentes orientations cristallographiques

- de cristaux de type P dopés au Bore, d'orientations cristallographiques différentes

3°) Etude en fonction de la température entre 350°K et 77°K pour des matériaux de type P et N respectivement dopés au Bore et au Phosphore.

Nous résumons dans le tableau 1 les caractéristiques essentielles des divers échantillons faisant l'objet de notre travail. Les directions cristallographiques indiquées sont les directions perpendiculaires aux échantillons c'est à dire les directions perpendiculaires au champ sinusoïdal appliqué.

III.1. ETUDE EN FONCTION DE L'ORIENTATION DES AXES CRISTALLOGRAPHIQUES

Les mesures de mobilité sont habituellement réalisées en régime continu ou dans la gamme des hyperfréquences.

Dans le premier cas, l'échantillon est souvent muni de sondes de potentiel ou de courant ; dans le second cas l'échantillon est inséré dans un guide d'ondes ou placé dans une cavité {12}, {8}, {16}, {17}, {18}, {20}.

Dans ces deux configurations, il est difficile d'étudier sur un même échantillon l'influence de l'orientation du champ électrique appliqué par rapport à la direction cristallographique du monocristal utilisé.

En ce qui nous concerne, nous avons montré que la technique du guide surdimensionné permet facilement de pallier à cette difficulté dans la gamme millimétrique. En infra-rouge lointain où les sources émettent un signal non polarisé, nous avons, de façon plus commode, utilisé un polariseur "Cambridge Instruments" formé d'une mince feuille de polythène sur laquelle est disposée une fine grille d'aluminium.

III.1.1. Résultats expérimentaux

A toutes les fréquences envisagées, nous avons constaté aux erreurs d'expérience près, que le fait de tourner l'échantillon dans un

Cristal	Type	Dopant	orien- tation	Résistivité en continu (Ω cm)	1	2	3
3037	P	Bore	<111>	2 à 2,5	x	x	x
3038	P	Bore	<100>	2,08	x	x	.
2734	P	Bore	<110>	2,6 à 2,7	x	x	
2560	N	Phosphore	<111>	1 à 1,43	x	x	x
2643	N	Phosphore	<100>	1,25 à 1,37	x	x	x
727A	N	Phosphore	<110>	0,95 à 0,99	x	x	
3062	N	Antimoine	<111>	0,5		x	
309A	N	Arsenic	<111>	2,6 à 2,64		x	

1 : Etude en fonction des axes cristallographiques

2 : Etude en fonction de la fréquence

3 : Etude en fonction de la température

Tableau 1



plan perpendiculaire à la direction de propagation de l'onde hyperfréquence ne modifie pas le coefficient de transmission quelle que soit la direction cristallographique du monocristal. La conductivité du silicium, qu'il soit de type N ou de type P, paraît donc parfaitement isotrope.

III.1.2. Interprétation

De nombreux travaux {2} ont permis de déterminer la structure de bande du silicium qui est désormais bien connue. Nous examinons séparément les cas très différents de la bande de conduction et de la bande de valence.

III.1.2.1. Bande de conduction

La bande de conduction est formée de six ellipsoïdes de révolution autour des axes $\langle 100 \rangle$ dans l'espace des \vec{k} (Fig.8)

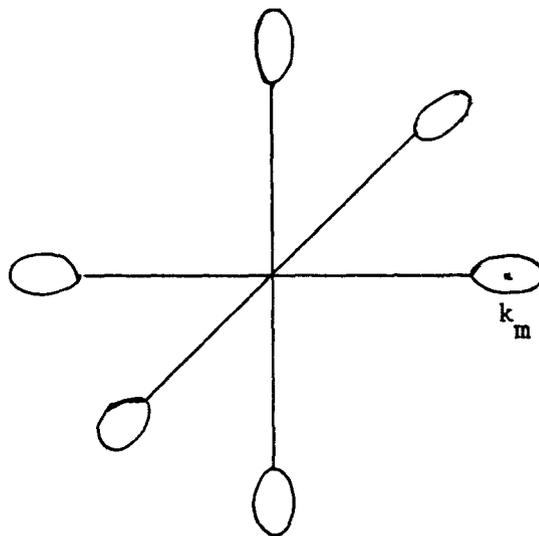


Figure 8

Ces ellipsoïdes sont centrés à 0.85 fois la distance séparant le milieu de la zone de Brillouin et sa limite.

Au voisinage de k_m qui correspond au centre des ellipsoïdes, l'énergie des électrons dans la bande de conduction s'écrit :

$$E = E_c + \frac{\hbar^2}{2m_l} (k_x - k_m)^2 + \frac{\hbar^2}{2m_t} (k_y^2 + k_z^2)$$

m_l et m_t indiquant les masses effectives respectivement longitudinale (suivant un grand axe des ellipsoïdes) et transversale (suivant un petit axe des ellipsoïdes).

Il est facile de se ramener au cas des bandes d'énergie sphériques en effectuant le changement de variable :

$$k'_x = \sqrt{\frac{m_t}{m_l}} k_x ; \quad k'_y = \sqrt{\frac{m_t}{m_t}} k_y ; \quad k'_z = \sqrt{\frac{m_t}{m_t}} k_z$$

De façon générale nous avons montré au chapitre I que :

$$\sigma_{\text{Oxx}} = \frac{e^2}{4\pi^3 kT} \int \tau \cdot v_x^2 \cdot f_0 \cdot d^3 k$$

$$\sigma_{\text{Oxy}} = \frac{e^2}{4\pi^3 kT} \int \tau \cdot v_x \cdot v_y \cdot f_0 \cdot d^3 k$$

D'une part, comme les surfaces d'énergie ont les plans de coordonnées comme plans de symétrie, la quantité σ_{oxy} est toujours nulle.

D'autre part, le tenseur de conductivité total se réduit à un scalaire puisque lorsqu'on somme la contribution des six "vallées" dans une même direction, deux de ces vallées interviennent longitudinalement, les quatre autres interviennent transversalement. Il vient alors :

$$\sigma_o = \frac{Ne^2}{3} \left[\frac{\langle \tau_l \rangle}{m_l} + 2 \frac{\langle \tau_t \rangle}{m_t} \right] \quad (\text{III-1})$$

τ_l et τ_t étant les temps de relaxation dans les directions respectivement longitudinales et transversales.

Ces considérations permettent d'expliquer que nous ne constatons expérimentalement aucune anisotropie dans le matériau de type N, à la température ambiante.

III.1.2.2. Bande de valence

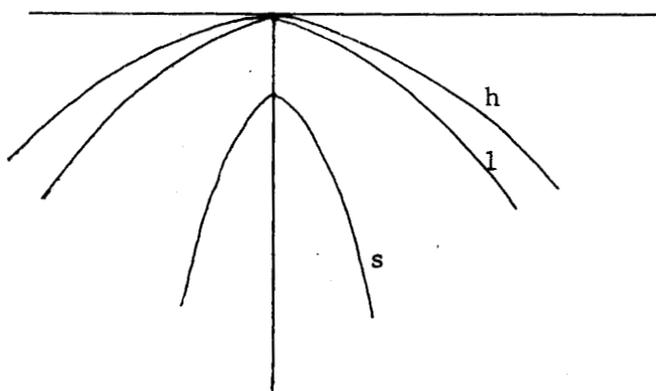


Figure 9

Elle comporte trois bandes distinctes (Fig. 9)

a) deux d'entre elles, les bandes h et l sont dégénérées en $k = 0$. Elles ne possèdent pas la même courbure ; les porteurs possèdent une masse effective différente :

- la bande h porte des trous lourds
- la bande l porte des trous légers

En outre ces deux bandes ne sont pas sphériques.

Selon les travaux de Dexter, Zeiger et Lax, l'énergie des trous se met sous la forme {2}

$$E = E_v - \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ A k^2 + \left[B^2 k^4 + C^2 (k_x^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2) \right]^{1/2} \right\}$$

A, B, C étant des constantes déterminées par résonance cyclotronique; le signe \pm indiquant l'une ou l'autre des bandes.

L'énergie peut encore être écrite sous la forme :

$$E = E_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} g(\theta, \phi) \quad (\text{III-2})$$

$g(\theta, \phi)$ étant un facteur correctif d'anisotropie.

b) la bande s, dont la dégénérescence en $k = 0$ est levée par interaction spin-orbite, est séparée des deux autres par un intervalle d'énergie 0,035 eV

Cette bande est sphérique. Nous négligeons ses effets, puisque sa population est beaucoup plus faible que celle des deux autres dans nos conditions d'expérience.

La conductivité totale est la somme des conductivités partielles dues aux trous lourds et aux trous légers :

$$\sigma_{\text{oxy}} = \frac{e^2}{4\pi^3 kT \hbar^2} \int \tau f_0 \frac{\partial E}{\partial k_x} \frac{\partial E}{\partial k_x} d^3 k$$

$$\sigma_{\text{oxy}} = \frac{e^2}{4\pi^3 kT \hbar^2} \int \tau f_0 \frac{\partial E}{\partial k_x} \frac{\partial E}{\partial k_y} d^3 k$$

E présentant le caractère anisotrope donné par la relation (III-2).

Cependant, aucune anisotropie dans la bande de valence ne peut être décelée par simple mesure de conductivité.

En effet, de par la symétrie cubique des surfaces d'énergie dans l'espace des \vec{k} , le tenseur de conductivité se réduit à un scalaire.

D'une part, les plans de coordonnées étant des plans de symétrie pour les surfaces d'énergie, $\sigma_{oxy} = 0$

D'autre part, les axes Ox, Oy et Oz étant équivalents :

$$\sigma_{oxx} = \sigma_{oyy} = \sigma_{ozz}$$

De ce fait, la conductivité s'écrit pour chaque bande :

$$\sigma_{oh} = P_h e^2 \frac{\langle \tau \rangle}{m_h} \Lambda_h$$

Dans cette expression,

P indique la concentration en trous de chaque bande

A est une constante rendant compte de la moyenne des effets d'anisotropie sur la totalité des surfaces d'énergie.

La conductivité observée est :

$$\sigma_o = \sigma_{oh} + \sigma_{ol}$$

σ_o peut se mettre sous une forme plus simple soit :

$$\sigma_o = \frac{P e^2 \langle \tau \rangle}{m^*}$$

où P représente la concentration totale en trous ;

m^* peut être défini comme une masse effective moyenne de conductivité globale des trous ;

$\langle \tau \rangle$ est le temps de relaxation moyen des porteurs, supposé égal pour les deux bandes de valence

En conclusion, nous avons vérifié que le tenseur de conductivité est un scalaire pour les deux types de semi-conducteurs, comme le laissait prévoir la structure de bande du silicium.

Il est intéressant de remarquer qu'en conséquence, aucun effet anisotrope lié au réseau cristallin ne semble intervenir.

Si le résultat obtenu n'apporte aucune information nouvelle sur la structure de bande du silicium, il faut souligner que la méthode expérimentale mise au point peut être généralisée à l'étude d'autres cristaux anisotropes ou au silicium lorsqu'un effet extérieur, comme un champ magnétique ou un champ électrique fort, crée une anisotropie au sein du cristal.

III.2. ETUDE EN FONCTION DE LA FREQUENCE DE L'ONDE ELECTROMAGNETIQUE

III.2.1. Résultats expérimentaux

A partir des spectres de transmission $T(\omega)$ nous avons montré (Chapitre II) comment les relations de Kramers-Krönig permettent de déterminer les spectres $\sigma'(\omega)$ ou de façon équivalente les spectres $\frac{\sigma'}{\sigma_0}(\omega)$

Nous donnons à titre d'exemple quelques spectres expérimentaux obtenus.

- Sur la figure 10 nous représentons l'évolution en fonction de la fréquence de la conductivité réduite $\frac{\sigma'}{\sigma_0}$ des cristaux 727A, 2643, 2560 de type N, dopés au Phosphore, correspondant aux différentes orientations cristallographiques $\langle 110 \rangle$, $\langle 100 \rangle$, $\langle 111 \rangle$.

- Sur la figure 11 nous étudions l'influence du type d'impureté utilisé et nous donnons l'évolution de la conductivité réduite en fonction de la fréquence pour les cristaux 309A, 3062, 2560 de type N, de direction cris-

tallographique $\langle 111 \rangle$ et dopés respectivement à l'arsenic, à l'antimoine et au phosphore.

- Enfin, nous étudions des cristaux de type P ; nous représentons sur la figure 12 la conductivité réduite des cristaux 2734, 3037, 3038 dopés au Bore et dont l'orientation cristallographique est respectivement $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$, $\langle 100 \rangle$.

Nous donnons également un exemple de spectre complet concernant la partie réelle de l'indice $n(\omega)$ pour le cristal 2560 de type N et le cristal 3037 de type P (figure 13).

L'examen de ces différents spectres permet de formuler dès maintenant les remarques générales suivantes :

- le changement d'orientation des axes cristallographiques ne semble pas affecter de façon sensible les spectres expérimentaux (Fig 10 et 12).



Nous confirmons donc les propriétés d'isotropie du silicium de type P et de type N.

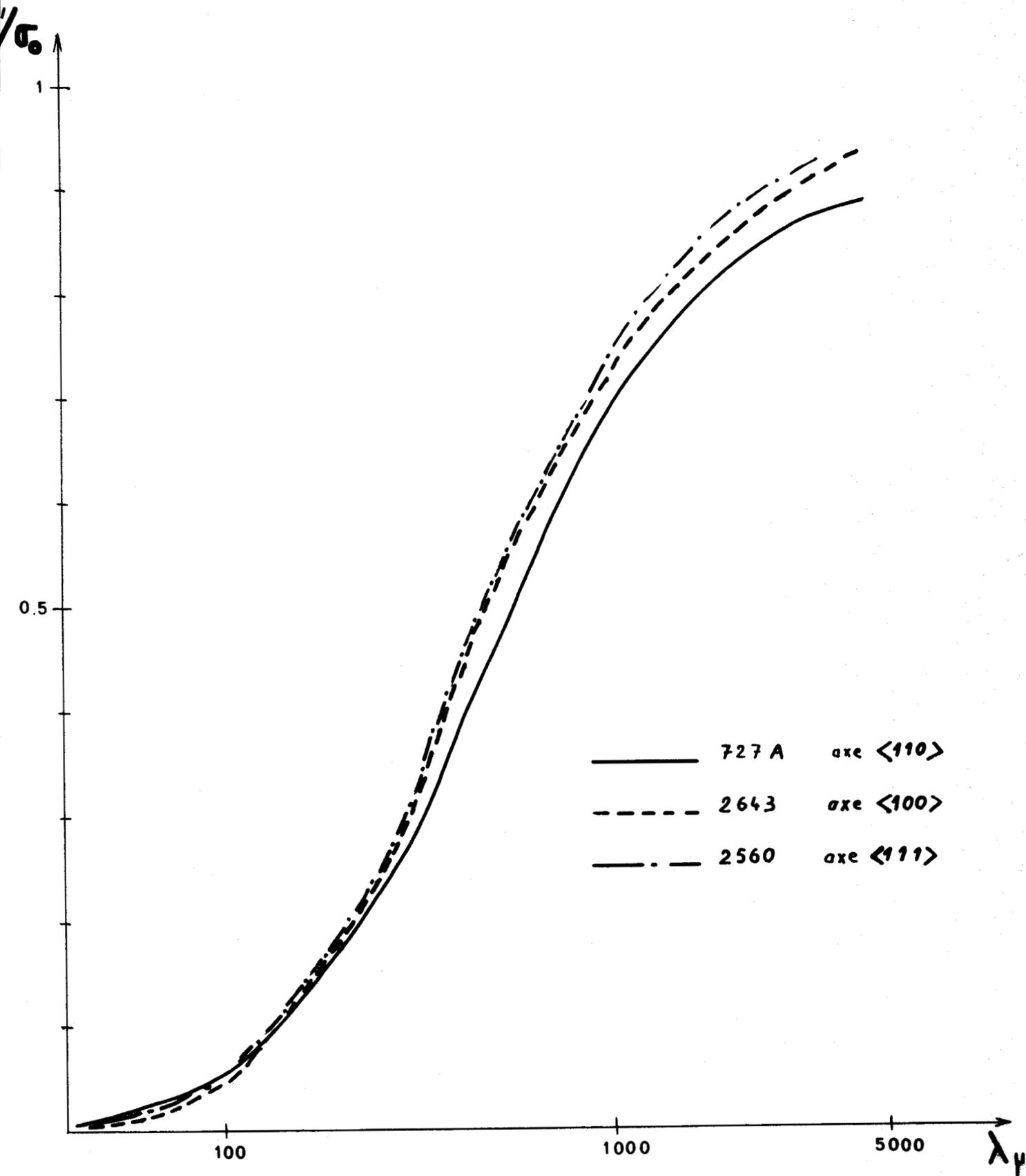
- le type d'impureté utilisé n'influe pas de façon considérable sur le spectre $\frac{\sigma'(\omega)}{\sigma_0}$ (Fig.11).

Dans le cas des cristaux dopés à l'antimoine, la distribution radiale de résistivité des échantillons ne permet pas de tirer de conclusions valables.

- si l'on compare (Fig 14 et Fig 15) les spectres $\frac{\sigma'(\omega)}{\sigma_0}$ observés à ceux qui correspondent à la théorie la plus simple (loi de Drude)

$$\sigma = \frac{\sigma_0}{1 + \omega^2 \tau^2}$$

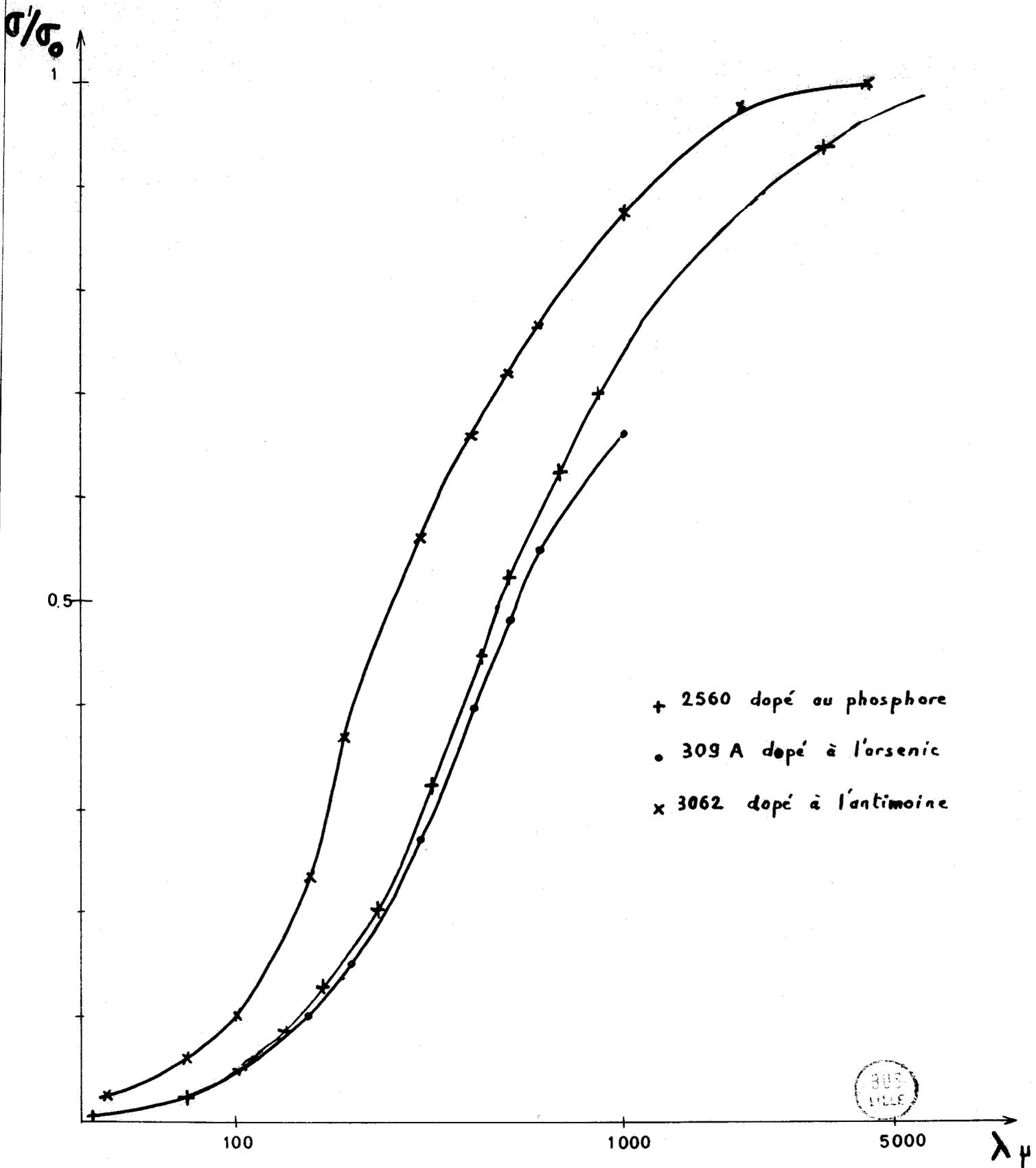
on constate des différences très sensibles entre courbes théoriques et expérimentales.



Conductivité réduite en fonction de la longueur d'onde pour des cristaux de type N dopés au phosphore et d'axes cristallographiques différents.

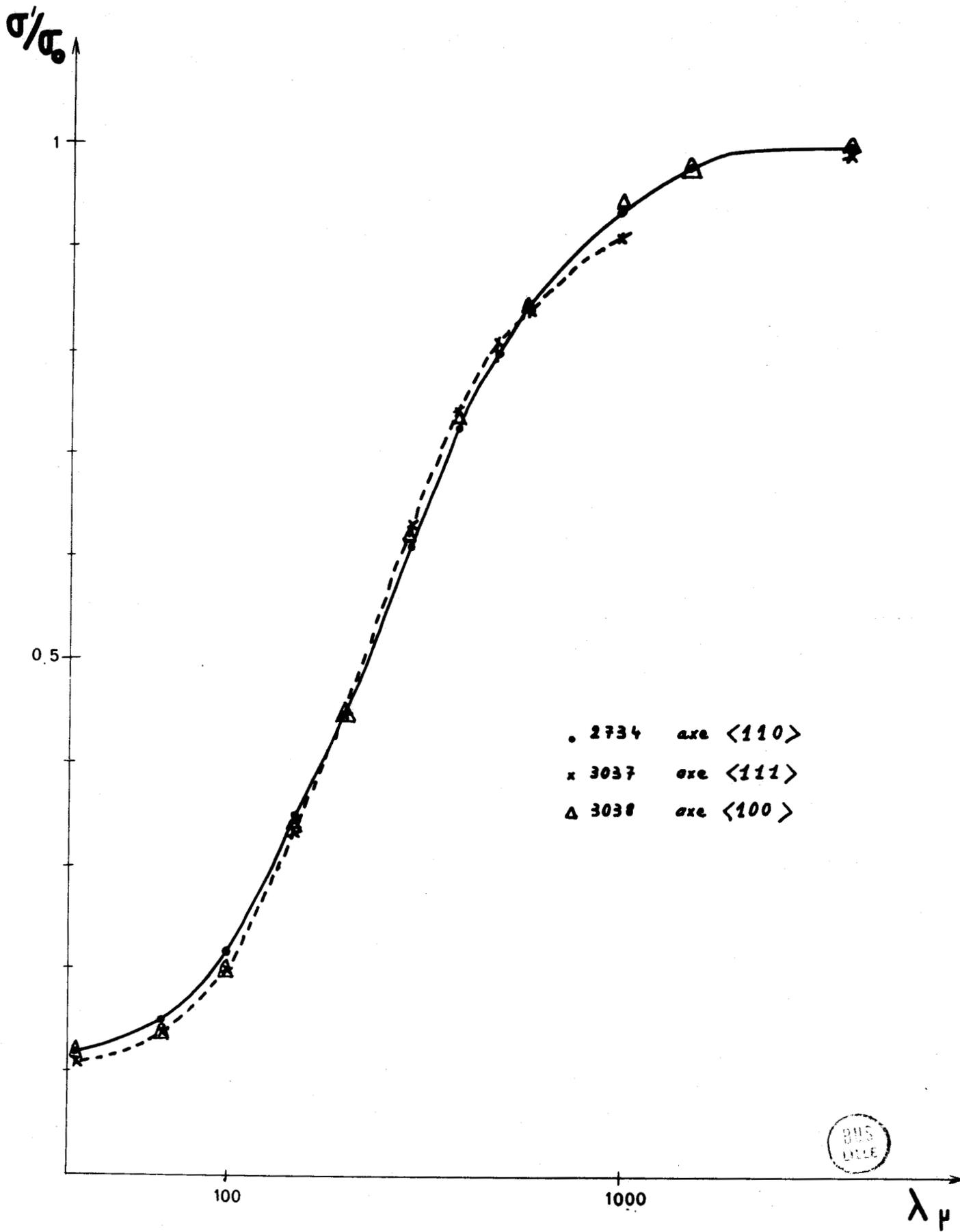
Figure 10





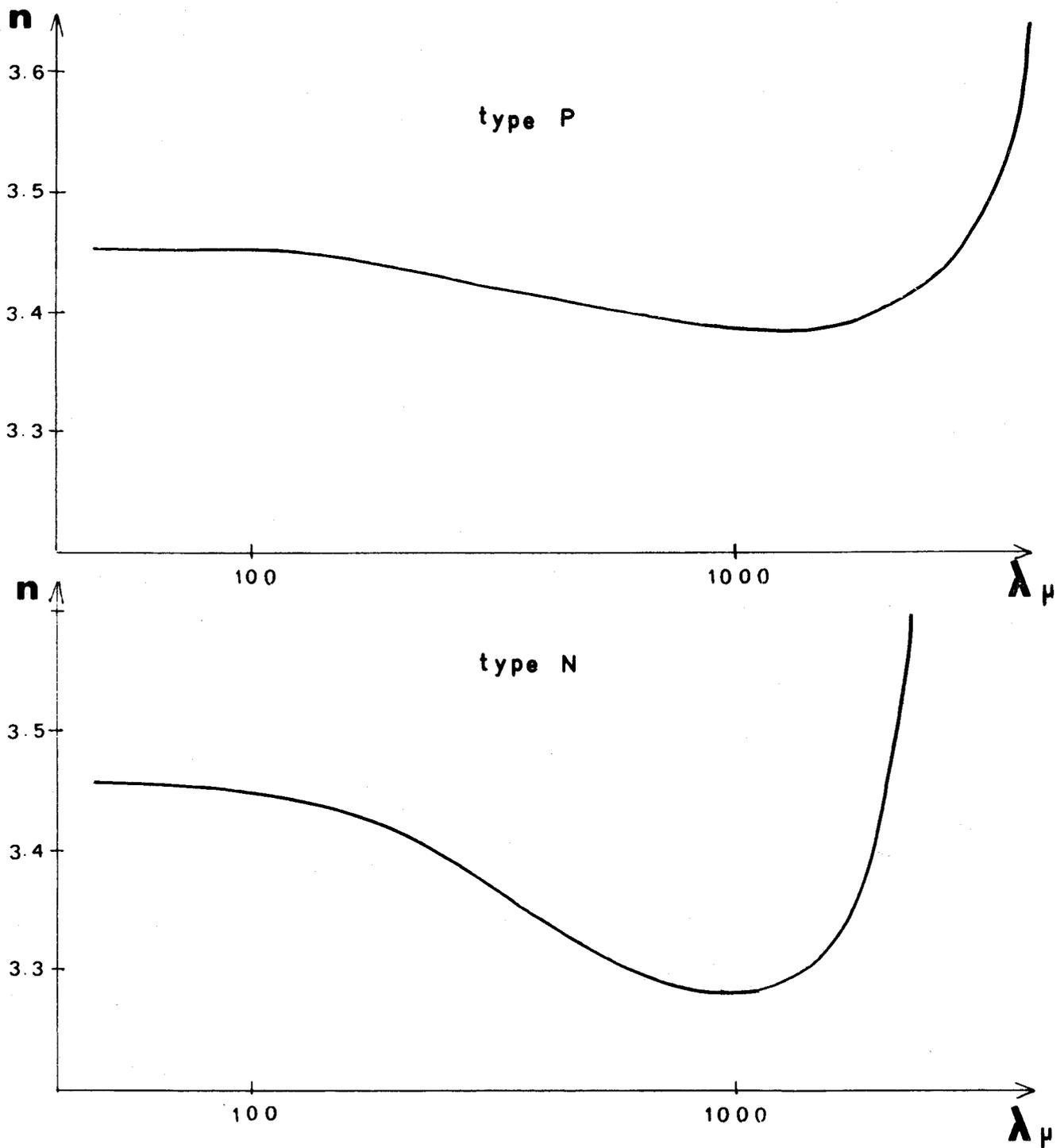
Conductivité réduite en fonction de la longueur d'onde pour 3 monocristaux de type N, dopés différemment et possédant la même orientation cristallographique $\langle 111 \rangle$.

Figure 11



Conductivité réduite en fonction de la longueur d'onde pour des monocristaux de type P, dopés au bore et d'axes cristallographiques différents.

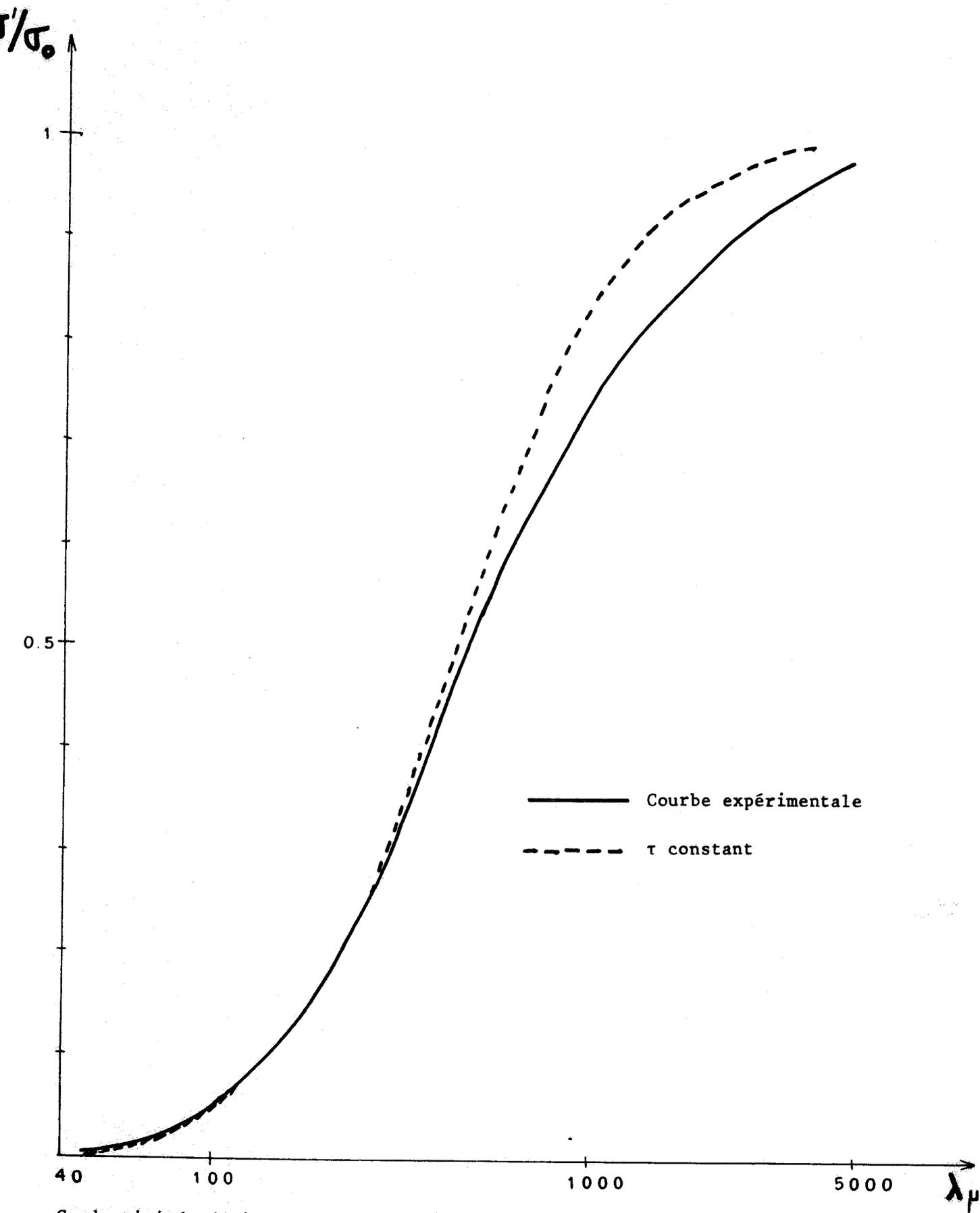
Figure 12



Evolution de l'indice n en fonction de la longueur d'onde, déduite du coefficient de transmission expérimental par les relations de Kramers-Krönig.

Figure 13

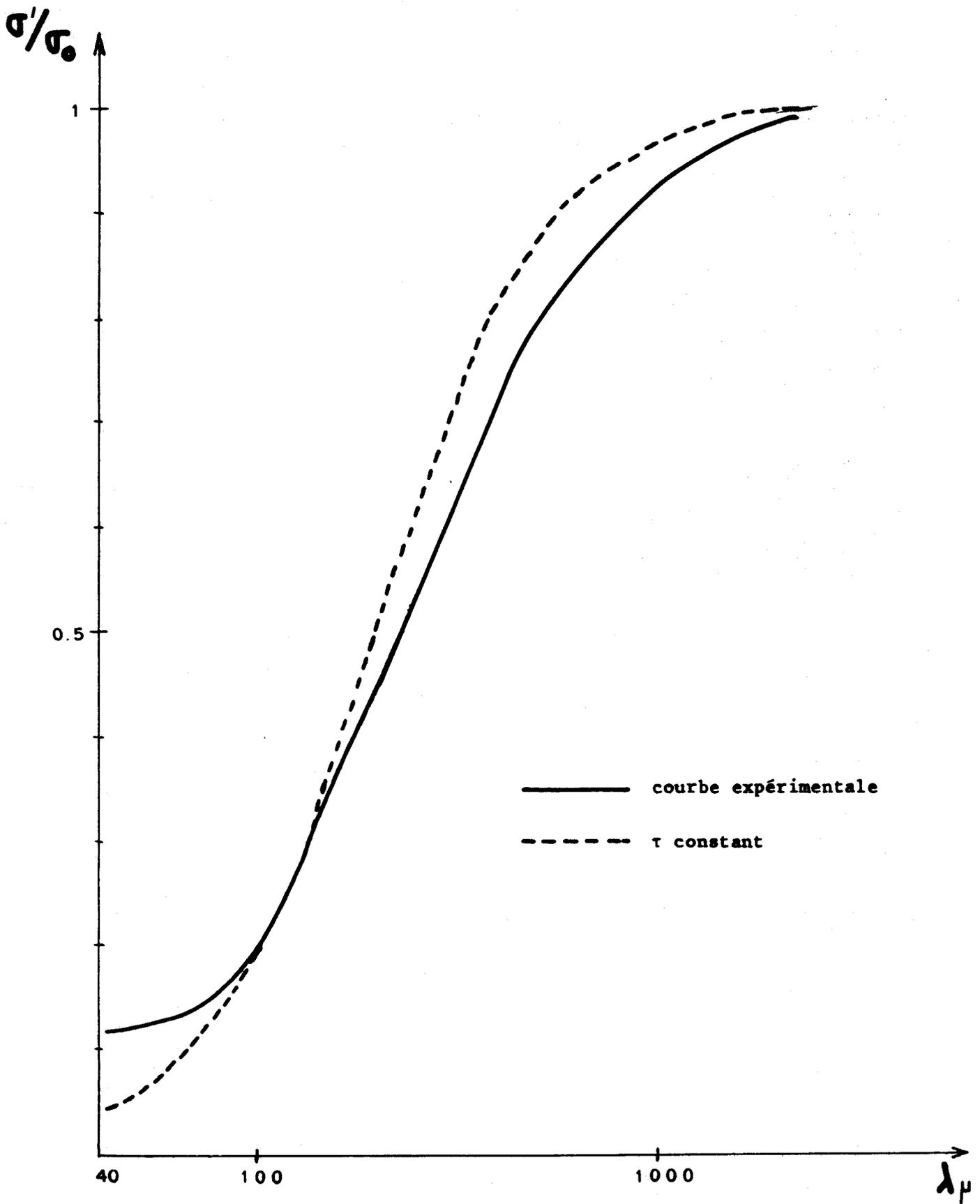




Conductivité réduite en fonction de la longueur d'onde pour un monocristal de type N

Figure 14





Conductivité réduite en fonction de la longueur d'onde pour un monocristal de type P.

Figure 15



Nous nous proposons maintenant d'interpréter et d'exploiter de façon plus détaillée l'ensemble des spectres obtenus.

III.2.2. Détermination de la fonction de corrélation et du temps de corrélation de la vitesse des porteurs

Nous avons montré (Chapitre I) qu'à partir de $\sigma'(\omega)$ il est possible d'obtenir la fonction de corrélation de la vitesse des porteurs (rel. I-16). On a :

$$\phi'(t) = \frac{\int \frac{\sigma'(\omega)}{\sigma_0} \cos \omega t \, d\omega}{\int \frac{\sigma'(\omega)}{\sigma_0} \, d\omega}$$

Cette relation peut être exploitée numériquement pour obtenir $\phi'(t)$

Si la conductivité est de la forme

$$\frac{\sigma'(\omega)}{\sigma_0} = \frac{1}{1 + \omega^2 \tau^2}$$

la transformée de Fourier doit donner une exponentielle ou, de façon équivalente, $\text{Log } \phi'(t)$ doit être représenté par une droite passant par l'origine et de pente $-1/\tau$.

Nous donnons (Fig 16) les variations temporelles de $\text{Log } \phi'(t)$ calculé numériquement pour un cristal de type N.

Nous constatons qu'expérimentalement, $\text{Log } \phi'(t)$ s'écarte d'une droite. La relaxation est plus rapide aux temps courts et plus lente

Log $\Phi(t)$

0

1

2

1

2

3

4

5

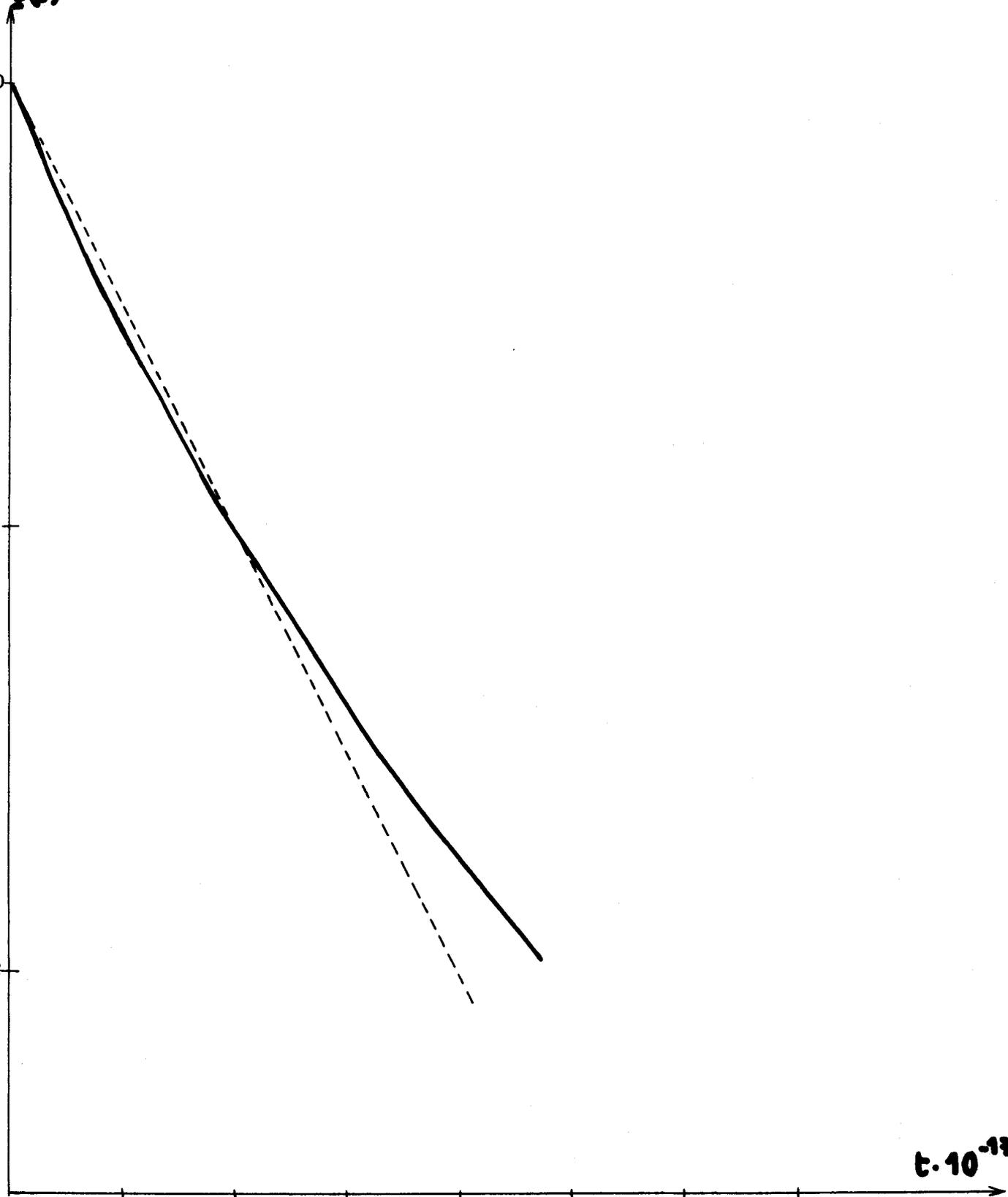
6

7

$t \cdot 10^{-13}$ (s)



Figure 16



aux temps longs que celle correspondant au modèle de Drude.

Nous mettons ainsi en évidence le fait que le temps de relaxation n'est pas le même pour tous les porteurs. Il faut donc tenir compte de la variation du temps de relaxation en fonction de l'énergie des électrons ou des trous.

Par ailleurs, les mesures étant faites jusqu'à une fréquence maximum de 60.000 GHz environ, il est impossible d'avoir des informations sur le retour à l'équilibre pour des temps inférieurs à $t = \frac{1}{\omega_{\max}}$ c'est à dire $t < 0,3 \cdot 10^{-14}$ seconde.

Le palier à l'origine de la fonction de corrélation des vitesses n'apparaît pas expérimentalement. Nous pouvons seulement déduire que le palier, s'il existe, est d'une durée inférieure à $0,3 \cdot 10^{-14}$ seconde.

Cependant, des mesures en infra-rouge proche pourraient permettre d'approfondir cet aspect de l'étude de la conductivité, dans la mesure toutefois où celle-ci ne serait pas gênée par des absorptions de réseau. Il serait, en outre, nécessaire de se limiter à des fréquences inférieures aux fréquences de transition entre bande de conduction et bande de valence sinon, les effets dus à ces transitions risquent de masquer le palier à l'origine de $\phi(t)$.

Néanmoins, des informations intéressantes peuvent être déduites des courbes $\phi(t)$ expérimentales.

Sans connaître préalablement la relation $\tau(E)$ liant le temps de relaxation à l'énergie, il est possible comme nous l'avons montré dans la première partie, (équation I-19) de trouver le temps de relaxation moyen en calculant l'aire sous la courbe $\phi(t)$.

Nous donnons dans le tableau 2 les temps de relaxation ainsi déterminés pour les différents cristaux.

Cristal	Type	ρ moyen (Ω cm)	τ exp	τ Irwin
3037	P	2	$1,06 \cdot 10^{-13}$	$9,1 \cdot 10^{-14}$
3038	P	2	-	-
2734	P	2	-	-
2560	N	1,25	$2,2 \cdot 10^{-13}$	$1,7 \cdot 10^{-13}$
2643	N	-	-	-
727A	N	1	$2,4 \cdot 10^{-13}$	$1,75 \cdot 10^{-13}$
309A	N	2,6	$2,4 \cdot 10^{-13}$	$1,75 \cdot 10^{-13}$
3062	N	0,45	$1,4 \cdot 10^{-13}$	$1,25 \cdot 10^{-13}$

Tableau 2

Les valeurs du temps moyen de relaxation expérimentales sont déduites à partir de la fonction d'autocorrélation des vitesses de porteurs $\phi(t)$. Les mêmes valeurs peuvent être déduites des spectres en conductivité $\sigma'(\omega)$ comme nous le montrerons plus loin.



A notre connaissance, cette méthode de détermination ne semble pas avoir encore été utilisée.

L'intérêt essentiel de cette méthode est qu'elle est directe et qu'elle ne nécessite pas la connaissance préalable

- de la masse effective
- du nombre exact de porteurs
- de la loi de distribution $\tau = f(E)$

Les temps de relaxation ainsi déduits pour les différents matériaux étudiés peuvent être comparés à ceux que l'on peut calculer à partir des mobilités données par Irwin {28} reportés également dans le tableau 2. Pour cela nous avons pris pour valeur de masse effective de conductivité {2}

- $m^* = 0.26 m_0$ pour les électrons
- $m^* = 0.374 m_0$ pour les trous

Nos mesures présentent dans quelques cas un désaccord important avec les travaux cités précédemment. Cependant, il semble que notre méthode de détermination est la plus précise. Elle supprime en particulier deux importantes sources d'erreur que constituent souvent les déterminations de la masse effective et du nombre de porteurs.

III.2.3. Etude de la distribution du temps de relaxation des porteurs en fonction de leur énergie

Si la transformée de Fourier du spectre permet directement de déterminer le temps de relaxation moyen des porteurs, l'étude détaillée du spectre $\frac{\sigma'(\omega)}{\sigma_0}$ fournit également des renseignements sur la loi de distribution.

En effet, lorsqu'une hypothèse est avancée sur la loi $\tau(E)$, $\frac{\sigma'}{\sigma_0}$ peut être calculé par un traitement numérique et comparé aux spectres obtenus pratiquement. On peut alors en déduire la distribution théorique

des temps de relaxation qui concorde le mieux avec les résultats expérimentaux.

Le fait que $\frac{\sigma'}{\sigma_0}$ ne dépend que du produit $\omega\tau(E)$ nous facilite la tâche. Dans ces conditions, nous pouvons nous limiter, dans une première étape, à une détermination de $\tau(E)$ à une constante multiplicative près.

Ensuite, lorsque la courbe $\frac{\sigma'}{\sigma_0} = f(\langle\omega\tau\rangle)$ est tracée, il est facile de translater celle-ci sur le spectre expérimental en vue de vérifier la validité de la loi $\tau(E)$ choisie et de déterminer d'une façon exacte le temps de relaxation moyen.

Nous nous proposons par ce moyen d'étudier les différents mécanismes de collision des porteurs libres dans le silicium.

Nous avons vu précédemment (Fig 14 et 15) que les spectres expérimentaux ne peuvent être décrits par une simple relaxation classique (loi de Drude) et que l'écart observé par rapport à celle-ci est différent suivant que le silicium est de type N ou de type P.

En conséquence, nous étudions séparément et successivement le silicium de type P et de type N puisque, d'une part, la conductivité des deux types de matériaux ne varie pas de la même façon en fonction de la fréquence, et que, d'autre part, la structure de bande n'y intervient pas de la même façon.

III.2.3.1. Phénomène de relaxation dans le silicium de type P

III.2.3.1.1. Etudes de différents types de collisions

La principale cause de collisions à la température ambiante est l'interaction des porteurs avec le réseau. En effet les vibrations du réseau provoquent une déformation du potentiel cristallin.

Lorsqu'un ion vibre, le potentiel qu'il crée se déplace rigidement avec lui ; nous pouvons supposer que le potentiel de déformation V_D s'écrit sous la forme :

$$V_D = E_1 \vec{\nabla}_r \cdot \vec{u}_r$$

E_1 est une constante de déformation

\vec{u}_r caractérise le déplacement des atomes

La probabilité par unité de temps $P(k, k')$ pour qu'un électron passe d'un état \vec{k} à un état \vec{k}' est telle que :

$$P(k, k') \propto \frac{2}{\hbar} |\langle k' | V_D | k \rangle|^2 \times \text{densité d'états finaux}$$

$\langle k' | V_D | k \rangle$ est un élément de matrice de la perturbation

On montre que cet élément de matrice n'est différent de zéro que si :

$$\vec{k} - \vec{k}' = \pm \vec{q} + \vec{K}$$

\vec{q} est le vecteur d'onde du phonon créé ou absorbé

\vec{K} vecteur principal du réseau réciproque

Dans le silicium de type P où les bandes d'énergie sont en première approximation sphériques et centrées en $k = 0$, seules les transitions à $(\vec{k}-\vec{k}')$ petit sont possibles.

Examinons quels sont les phonons pouvant intervenir au cours des collisions.

1°) Phonons acoustiques de grande longueur d'onde et de faible énergie

La conservation de l'énergie implique que

$$E(k) = E(k') \pm \hbar \omega_q$$

$\hbar\omega_q$ étant l'énergie du phonon émis ou absorbé.

L'énergie du phonon étant très faible devant E, les collisions sont élastiques. Dans ces conditions, la densité de phonons décrite par la statistique de Bose-Einstein :

$$n_q = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_q}{kT}\right) - 1}$$

se réduit puisque $\hbar\omega_q/kT \ll 1$ à :

$$n_q = \frac{kT}{\hbar\omega_q}$$

On montre {29} que dans ce cas l'élément de matrice M^2 s'écrit :

$$M^2 = |\langle k' | V_D | k \rangle|^2 = \frac{\hbar\omega_q}{2\rho V} \frac{E^2}{s^2} \frac{l_{ac}}{s^2} \left[n_q + \frac{1}{2} + \frac{\partial N_q}{2} \right]$$

ρ est la densité du matériau

V son volume

s la vitesse du son dans le matériau

$\partial N_q = -1$ pour une absorption

$\partial N_q = +1$ pour une émission

En sommant sur toutes les valeurs de k possibles après collision, il vient :

$$P(k, k') = \frac{1}{\tau_{ac}} = \frac{8\pi^3}{h^4} \frac{kT}{\rho s^2} E_{lac}^2 (2m^*)^{3/2} E^{1/2} \quad (\text{III-4})$$

$\frac{1}{\tau_{ac}}$ est donc proportionnel au produit T.E.^{1/2} et nous posons :

$$\frac{1}{\tau_{ac}} = W'_A T^{3/2} \left(\frac{E}{kT} \right)^{1/2}$$

avec : $W'_A = \frac{8\pi^3}{h^4} \frac{k^{3/2}}{\rho s^2} E_{lac}^2 (2m^*)^{3/2}$

2°) Phonons optiques

Harrison {30} a étudié de façon détaillée les propriétés de symétrie de la bande de valence du silicium.

En développant les éléments de matrice $\langle k' | V_D | k \rangle$ en puissance de k/K et en calculant les premiers termes non nuls pour les différents types de phonons, il montre que les transitions par phonons optiques et les transitions par phonons acoustiques peuvent apporter des contributions du même ordre à la mobilité.

Les phonons optiques ont une grande énergie et les collisions ne conservent plus l'énergie des porteurs. Cependant, la probabilité de collision peut, suivant Herring {31}, s'exprimer comme l'inverse d'un temps de relaxation optique.

En posant :

$$\hbar\omega_q = k\theta$$

où θ est la température caractéristique du phonon, on montre que l'élément de matrice M s'écrit de la même façon que pour le type acoustique :

$$M^2 = \frac{E_{lopt}^2 \hbar \omega_q}{2 V \rho s^2} \left[n_q + \frac{1}{2} + \frac{\partial N_q}{2} \right]$$

E_{lopt}^2 caractérisant le couplage électron-phonon optique.

En sommant sur toutes les valeurs de k possibles après collision, il vient :

$$\frac{1}{\tau_{opt}} = \frac{E_{lopt}^2}{\rho s^2} \frac{m^{3/2}}{2^{1/2} \pi} \frac{k^{3/2}}{h^4} \theta^{3/2} \left[\frac{\left(\frac{E}{k\theta} + 1 \right)^{1/2}}{e^{\theta/T} - 1} + \frac{\left(\frac{E}{k\theta} - 1 \right)^{1/2}}{1 - e^{-\theta/T}} \right] \quad (III-5)$$

ou zéro si $\frac{E}{k\theta} < 1$

que nous écrirons :

$$\frac{1}{\tau_{opt}} = W'_i \theta^{3/2} \left[\frac{\left(\frac{E}{k\theta} + 1\right)^{1/2}}{e^{\theta/T} - 1} + \underbrace{\frac{\left(\frac{E}{k\theta} - 1\right)^{1/2}}{1 - e^{-\theta/T}}}_{\text{ou zéro si } \frac{E}{k\theta} < 1} \right] \quad (\text{III-6})$$

avec :

$$W'_i = \frac{E_{lopt}^2}{\rho s^2} \frac{m^{3/2}}{2^{1/2} \pi} \frac{k^{3/2}}{h^4}$$

Le spectre de vibration de réseau (que nous détaillerons par la suite Fig 20b) établi par Brockhouse {32} indique que les phonons optiques dont les vecteurs d'onde sont très faibles ont une température caractéristique de 735°K.

Cette hypothèse est en désaccord avec celle de Holm et Champlin {12}. Celui-ci se réfère aux travaux de Long {33} concernant un matériau de type N et prend pour température caractéristique des phonons optiques :

$$\theta = 630^\circ\text{K}$$

Or, cette température est, nous le verrons, une moyenne prise sur diverses transitions possibles par phonons optiques pour des électrons se trouvant dans la bande de conduction.

On ne peut effectuer cette moyenne dans le cas du matériau de type P puisque, les surfaces d'énergie étant en première approximation sphériques et centrées en $k=0$, seules sont à considérer les transitions par phonons de vecteur d'onde petit.

3°) Collisions sur impuretés ionisées

La présence d'impuretés ionisées nous conduit à considérer une troisième source de collisions.

En basse température, alors que les collisions sur le réseau ont peu d'importance, les chocs sur impuretés ionisées interviennent de façon

prépondérante pour limiter la mobilité.

La probabilité de collision dans ce cas a été calculée par Brooks-Herring {34}.

Le potentiel de perturbation est du type coulombien :

$$V_P = \frac{Z e}{4\pi\epsilon r} \exp\left(-\frac{r}{d}\right)$$

où Ze est la charge effective de l'atome d'impureté

ϵ est la constante diélectrique du milieu (elle est voisine de 12 pour le silicium)

r est la distance du point considéré à l'atome d'impureté

d est une distance de coupure du champ coulombien traduisant l'effet d'écran créé par les porteurs environnants.

Les chocs sur impuretés ionisées ont pour effet de dévier la trajectoire électronique alors que le porteur ne perd pratiquement pas d'énergie. La notion de temps de relaxation a donc un sens.

On montre {34} que le temps de relaxation τ_I limité par les collisions sur impuretés est de la forme :

$$\frac{1}{\tau_I} = \frac{\pi e^4 N_I}{\epsilon^2 (2m^*)^{1/2} E^{3/2}} \left[\text{Log}(b+1) - \frac{b}{b+1} \right] \quad (\text{III-7})$$

avec :

$$b = \frac{2\epsilon m^* kTE}{\pi \hbar^2 e^2 N'}$$

N_I est le nombre d'atomes d'impuretés ionisées

N' est le nombre de porteurs libres.

Pour les dopages utilisés (densité de donneurs ou d'accepteurs supérieure à $10^{15}/\text{cm}^3$) le logarithme varie d'un facteur non négligeable

quand E ou T varie. Aussi écrivons nous :

$$\frac{1}{\tau_I} = W'_3 E^{-3/2} \left[\text{Log} (b + 1) - \frac{b}{b + 1} \right] \quad (\text{III-8})$$

avec :

$$W'_3 = \frac{\pi e^4 N_I}{\epsilon^2 (2m^*)^{1/2}}$$

III.2.3.1.2. Temps de relaxation total

Lorsque les trois types de collision coexistent, les probabilités de collision s'ajoutent ; il en est de même des inverses des temps de relaxation :

$$\frac{1}{\tau_{\text{total}}} = \frac{1}{\tau_{\text{ac}}} + \frac{1}{\tau_{\text{opt}}} + \frac{1}{\tau_I}$$

Soit en reprenant les relations (III-4), (III-6) et (III-8) :

$$\frac{1}{\tau_{\text{total}}} = W'_A \left\{ T^{3/2} \left(\frac{E}{kT} \right)^{1/2} + W_1 \theta^{3/2} \left[\frac{\left(\frac{E}{k\theta} + 1 \right)^{1/2}}{e^{\theta/T} - 1} + \frac{\left(\frac{E}{k\theta} - 1 \right)^{1/2}}{1 - e^{-\theta/T}} \right] \right. \\ \left. + W_3 E^{-3/2} \left[\text{Log} (b + 1) - \frac{1}{b + 1} \right] \right\} \quad (\text{III-9})$$

absorpt. émission
ou zéro si $\frac{E}{k\theta} < 1$

avec $W_1 = \frac{W'_1}{W'_A}$ et $W_3 = \frac{W'_3}{W'_A}$

W_1 et W_3 sont des constantes de couplage fixant les contributions relatives des collisions sur phonons optiques et sur impuretés ionisées par rapport à celle des collisions sur phonons acoustiques.

Nous nous proposons maintenant d'étudier dans quelle mesure à partir de nos spectres expérimentaux, il est possible de déterminer la constante W_1 intervenant dans l'expression (III-9).

*III.2.3.1.3. Exploitation des résultats expérimentaux
et première estimation de la constante de
couplage W_1*

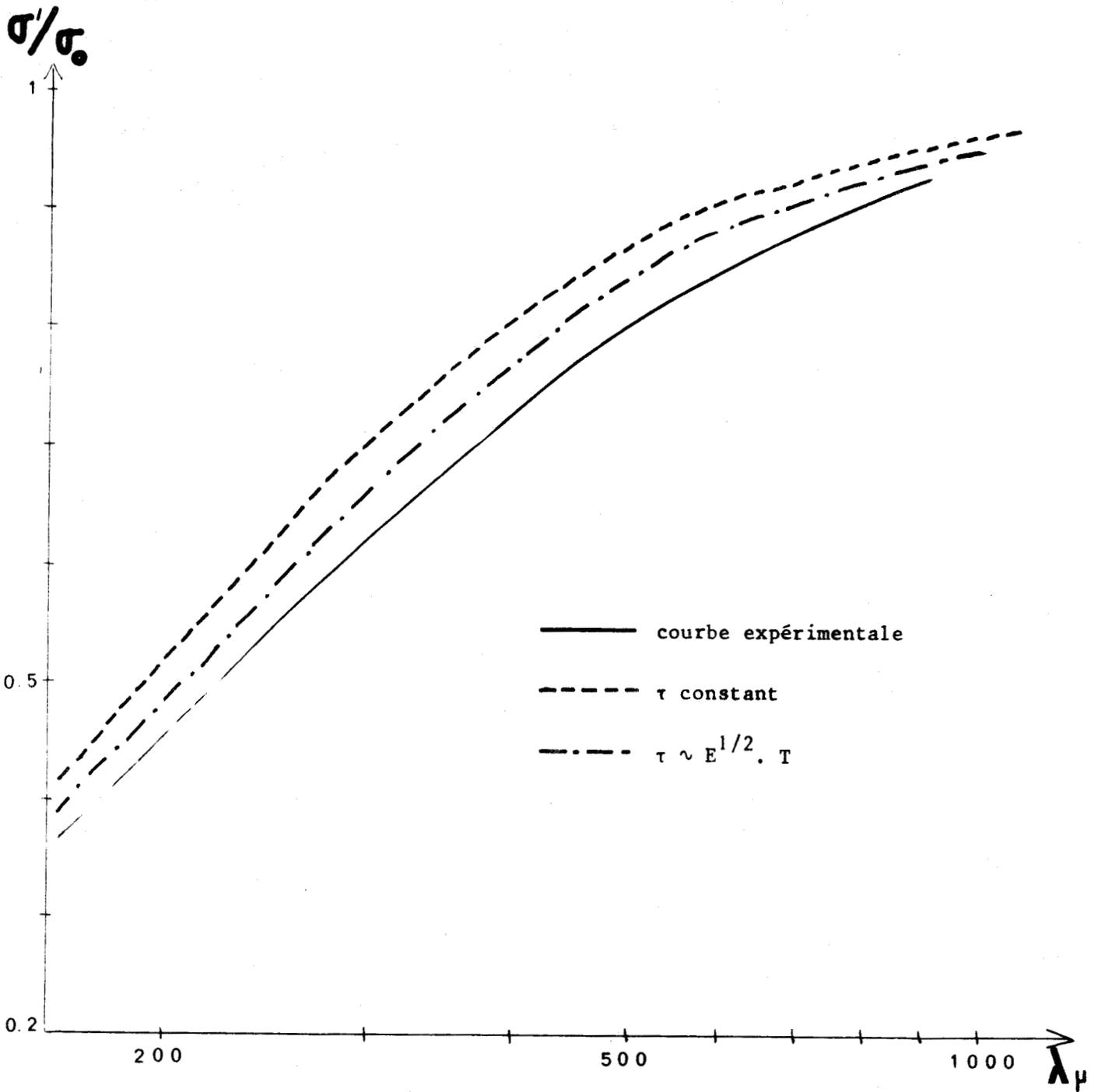
Nous pouvons calculer par intégration numérique les spectres théoriques

$$\frac{\sigma'}{\sigma_0} = \frac{\left\langle \frac{\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2} \right\rangle}{\langle \omega\tau \rangle}$$

correspondant à différentes distributions τ (E.T) et les comparer aux courbes $\frac{\sigma'(\omega)}{\sigma_0}$ expérimentales.

Une distribution correspondant au cas purement acoustique $1/\tau \sim T.E^{1/2}$ ne décrit pas les résultats obtenus (Fig 17). Nous mettons ainsi en évidence le fait que les collisions par phonons optiques interviennent dans le silicium de type P.

Nous avons calculé le coefficient W_3 à partir de la relation de Brooks-Herring qui pour les dopages considérés semble encore valable [16] et choisi pour température caractéristique des phonons optiques $\theta = 735^\circ\text{K}$ pour les raisons précédemment exposées (§ III.2.3.1.1.).



Conductivité réduite d'un monocristal de type P pour différentes lois $\tau(E, T)$

Figure 17



Les spectres expérimentaux et théoriques coïncident pour des longueurs d'onde supérieures à 100 microns si l'on tient compte des collisions sur impuretés et des collisions sur le réseau. Il est cependant essentiel de remarquer que la détermination de W_1 est peu précise et que la coïncidence est obtenue aux erreurs expérimentales près pour des valeurs de W_1 comprises entre 2 et 10.

Ces résultats sont en accord avec les travaux de Holm et Champlin {12} d'Elstner {35} de Asche et Von Borzeszkowski {36} qui trouvent $W_1 = 2,5$ à partir de mesures de mobilité et de conductivité sur une large gamme de températures. Cependant, certains de ces auteurs introduisent, du fait de la non-parabolicité de la bande 1 de valence pour les faibles valeurs de l'énergie, la notion de masse effective dépendant de la température, notion par ailleurs controversée {29}.

Notre méthode de détermination de W_1 par l'analyse du spectre de conductivité en fonction de la fréquence présente l'important avantage d'utiliser des mesures effectuées à température constante et donc à masse effective constante. En outre, la connaissance de la valeur exacte de la masse effective n'est pas nécessaire pour déterminer W_1 .

Il reste cependant à augmenter la précision de notre méthode d'une part en améliorant les techniques expérimentales et d'autre part en travaillant simultanément en fonction de la fréquence et de la température.

Par ailleurs, la superposition des courbes théoriques $\frac{\sigma'}{\sigma_0} = f(\langle\omega\tau\rangle)$ et des courbes expérimentales correspondantes nous indique pour quelle fréquence le produit $\langle\omega\tau\rangle = 1$.

Il est ainsi possible de déterminer le temps moyen de relaxation des porteurs dans le matériau.

Nous retrouvons les résultats trouvés par transformée de Fourier directe du spectre en fréquences (cf tableau 2).

III.2.3.1.4. Absorption excédentaire présentée par le
matériau de type P en haute fréquence

Sur la figure 18 où nous avons reporté le spectre expérimental, nous remarquons pour les faibles longueurs d'ondes un écart par rapport au spectre théorique correspondant à la distribution précédemment définie ($W_1 = 2,5$; $\theta = 735^\circ\text{K}$). Nous constatons pour des longueurs d'ondes inférieures à 100 microns l'apparition d'une absorption excédentaire et nous nous proposons maintenant d'interpréter ce phénomène.

L'absorption excédentaire semble être due à des transitions interbandes des trous entre les bandes h et l au voisinage du sommet de la bande de valence.

En effet, les fréquences envisagées ici sont telles qu'elles peuvent correspondre à des transitions électroniques induites par la radiation électromagnétique. Le problème a été traité théoriquement par Kahn {37} et nous rappelons les résultats essentiels de ses travaux.

L'élément de matrice correspond à la transition entre la bande h et la bande l s'écrit :

$$M = \int \psi_h \mathcal{E} \nabla \psi_l \, d\tau$$

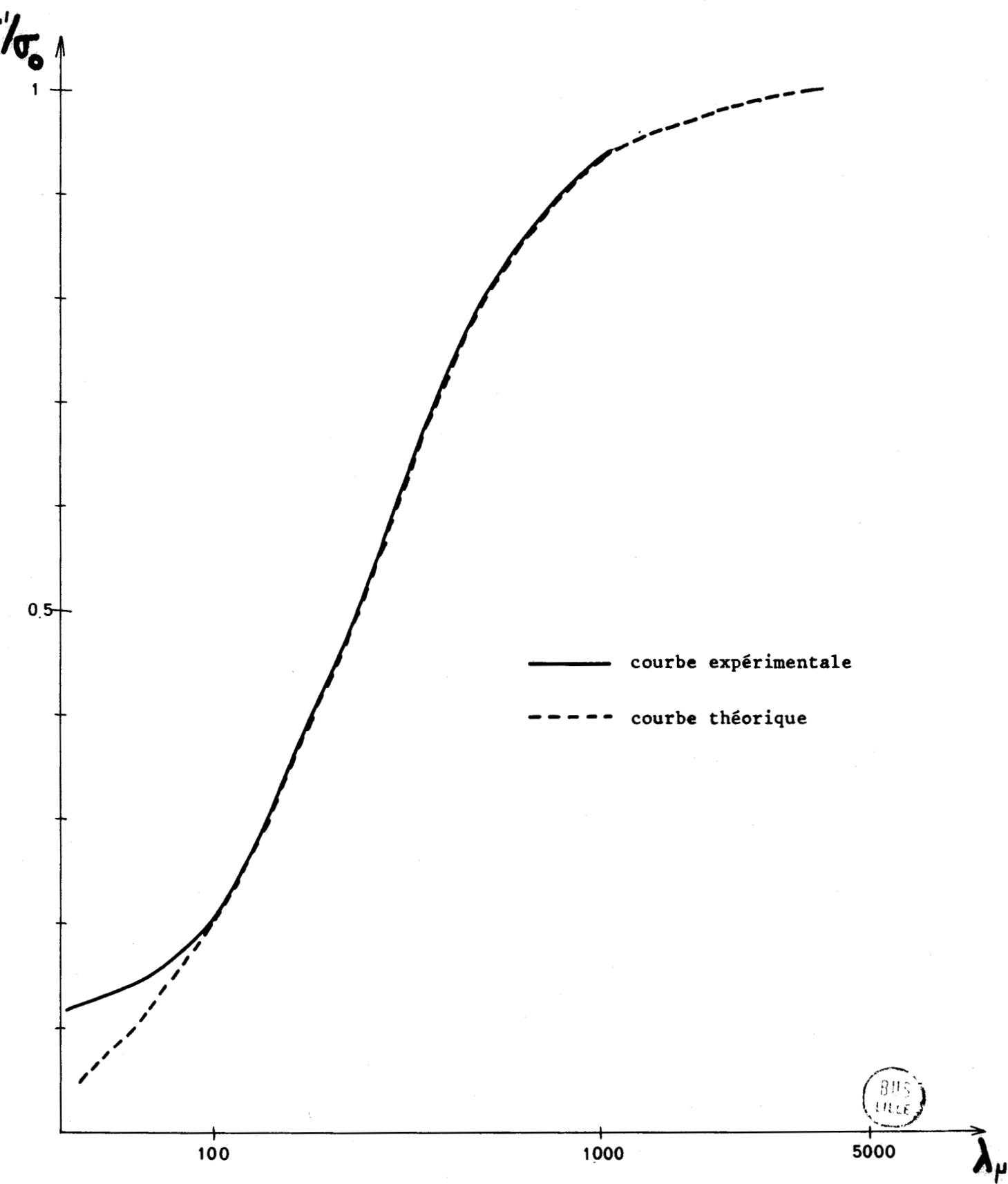
ψ_l et ψ_h sont des fonctions de Bloch

\mathcal{E} le champ électrique de l'onde électromagnétique

La conductivité moyenne est donnée par la relation :

$$\sigma = \frac{\pi e^2 \mathcal{K}}{m^2 \omega} \int \delta(\omega_{hl} - \omega) |M|^2 N_h(k) \, dk$$

où $\omega_{hl} = \frac{E_h - E_l}{\mathcal{K}}$ correspond à la différence de pulsation entre les deux bandes



BUS
LILLE

Conductivité réduite du monocristal 3037 (Type P) montrant une absorption excédentaire pour les faibles longueurs d'ondes.

Figure 18

$N_h(k)$ est la densité d'états dans la bande h.

Les transitions se font par l'intermédiaire d'un photon et se font verticalement. Aussi, ω_{h1} est une fonction de k à ω donné.

A fréquence donnée, la sommation doit être étendue à toutes les valeurs de k telles que $\omega_{h1} = \omega$.

L'intégration conduit alors à l'expression suivante de la conductivité :

$$\sigma_{hl} = \frac{2^{1/2} 4\pi \cdot e^2 \hbar^{3/2} A_{12}^2 m_h^{\pi} m_1^{\pi} 5/2 N \nu^{1/2}}{\left[1 + \left(\frac{m_1^{\pi}}{m_h^{\pi}} \right)^{3/2} \right] m_0^2 (m_h^{\pi} - m_1^{\pi})^{5/2} (kT)^{3/2}} \left[\exp \left(- \frac{h\nu}{kT} \frac{m_1^{\pi}}{m_h^{\pi} - m_1^{\pi}} \right) - \exp \left(- \frac{h\nu}{kT} \frac{m_h^{\pi}}{m_h^{\pi} - m_1^{\pi}} \right) \right]$$

Le premier terme correspond au passage des trous de la bande h à la bande l. Le deuxième terme correspond à l'émission induite de la bande l à la bande h. ν est la fréquence : $\nu = \omega/2\pi$

A_{12} est un paramètre sans dimension introduit au cours du calcul de l'élément de matrice M.

En choisissant

$$m_h^{\pi} = 0,5 m_0 \quad m_1^{\pi} = 0,166 m_0 \quad \{2\}$$

et $A_{12} = 2,56$ (coefficient calculé par Kahn {37})

nous avons calculé théoriquement la valeur du coefficient de transmission T de l'échantillon résultant de l'addition :

- de la conductivité "interbande"
- de la conductivité "intrabande" liée aux porteurs libres calculée à partir de la distribution $\tau(E.T)$ précédemment définie.

Nous donnons sur la même figure le coefficient de transmission calculé en ne tenant compte que de ce dernier effet (Fig 19).

Nous constatons qu'il y a bon accord entre théorie et expérience à condition de tenir compte des transitions interbandes et nous pensons mettre ainsi en évidence que l'absorption excédentaire présentée par le silicium de type P en haute fréquence provient bien des transitions entre bandes de valence.

A notre connaissance, ces transitions n'ont jamais été observées à ce jour sur le silicium, quoique leur existence ait été prévue depuis de nombreuses années par Kahn et observées expérimentalement sur le germanium.

III.2.3.2. Phénomènes de relaxation dans le silicium de type N

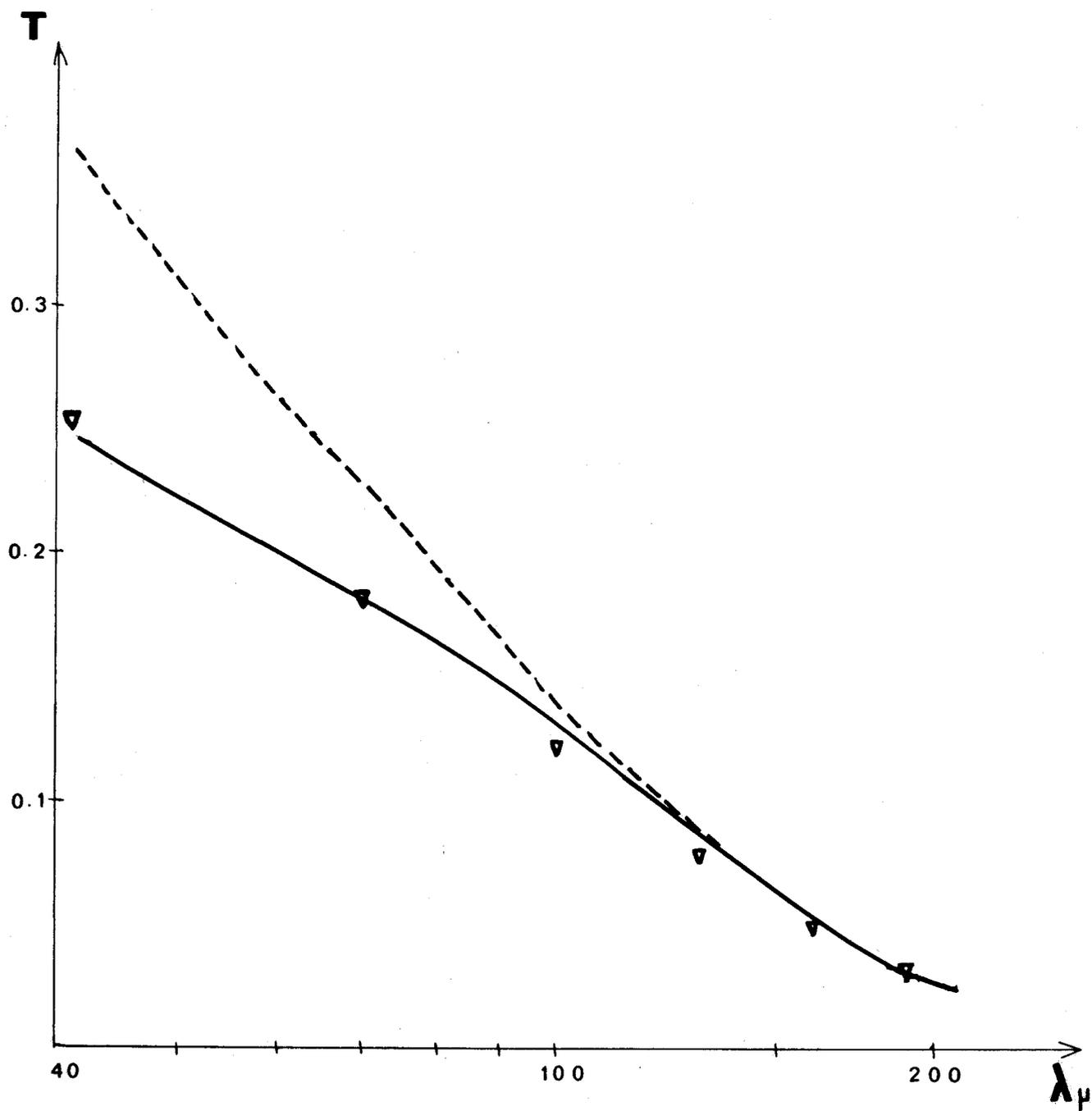
III.2.3.2.1. Etude des différents types de collisions

Les trois types de collisions précédemment décrits existent également dans un matériau de type N :

- collisions sur phonons acoustiques
- collisions sur phonons optiques
- collisions sur impuretés ionisées

Cependant, la structure de la bande de conduction est très différente de celle présentée par la bande de valence et les contributions relatives des trois processus ne sont pas identiques.

Nous avons vu que la bande de conduction comporte six vallées équivalentes.



Coefficient de transmission du monocristal 3037 (type P)

- courbe expérimentale
- - - courbe théorique calculée sans transitions interbandes
- ∇ points théoriques calculés en tenant compte des transitions interbandes

Figure 19



Examinons quelles sont les transitions possibles.

1°) à l'intérieur d'une même bande (transitions "intrabandes")

Les collisions se font de telle façon que $\vec{k} - \vec{k}'$ soit faible. Il y a alors émission ou absorption de phonons possédant un faible vecteur d'onde \vec{q} .

Harrison {30} montre que dans le cas de la bande de conduction la contribution des phonons optiques de faible vecteur d'onde est très faible devant celle des phonons acoustiques.

Par ailleurs, les vallées sont ellipsoïdales et par conséquent les probabilités de collision intrabandes et le temps de relaxation sont anisotropes. Nous devons donc définir deux temps de relaxation τ_t et τ_l respectivement perpendiculaire et parallèle au grand axe de l'ellipsoïde.

Les collisions se faisant principalement par phonons acoustiques, nous poserons :

$$\frac{1}{\tau_{\text{intra } t}} = W'_A T^{3/2} \left(\frac{E}{kT} \right)^{1/2} \quad \text{et} \quad \frac{1}{\tau_{\text{intra } l}} = C_A W'_A T^{3/2} \left(\frac{E}{kT} \right)^{1/2} \quad (\text{III-10})$$

où C_A est une constante d'anisotropie déterminée par Long {33} : $C_A = 1,5$.

2°) entre deux bandes différentes (transitions "interbandes")

Les collisions se font avec de grandes variations de \vec{k} . Le processus est dit "Umklapp". Dans ce cas, $(\vec{k} - \vec{k}') = \vec{q} \pm \vec{K}$, \vec{K} étant un vecteur principal du réseau principal.

Deux types de transitions peuvent se produire {33} comme nous le montrons sur la figure 20a) :

- transitions "f" entre deux ellipsoïdes situés sur deux axes perpendiculaires
- transitions "g" entre deux ellipsoïdes situés sur un même axe.

Dans le cas des transitions "f" :

$$\vec{k} - \vec{k}' \neq 1,2 \vec{k}_{\max} \quad \text{d'où : } \vec{q} = \vec{k}_{\max}$$

Dans le cas des transitions "g" :

$$\vec{k} - \vec{k}' \neq 1,7 \vec{k}_{\max} \quad \text{d'où : } \vec{q} = 0,3 \vec{k}_{\max}$$

Le spectre de vibration établi par Brockhouse {3?} que nous rappelons sur la figure 20b), permet de déterminer les températures de phonons correspondantes à ces deux valeurs de \vec{q} .

Cependant, des travaux théoriques sur les propriétés de symétrie de la bande de conduction ont montré que certaines transitions sont interdites.

Seuls peuvent intervenir :

- pour les transitions "g" les phonons de la branche longitudinale acoustique (L.A.)
- pour les transitions "f" les phonons de la branche longitudinale acoustique (L.A.) et de la branche transverse optique (T.O.)

ce qui correspond aux températures suivantes :

$$\text{L.A. (g)} = 240^\circ\text{K} \quad ; \quad \text{L.A. (f)} = 540^\circ\text{K} \quad ; \quad \text{T.O (f)} = 680^\circ\text{K}$$

Ces températures sont théoriques et comme nous le verrons ultérieurement peuvent différer sensiblement de celles relevées expérimentalement par différents auteurs.

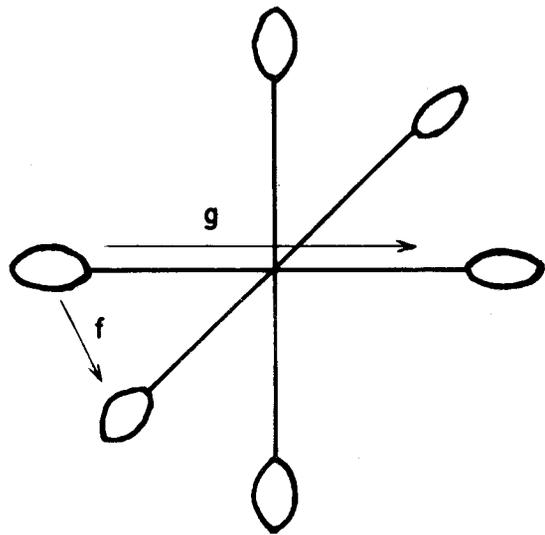


Figure 20 a)

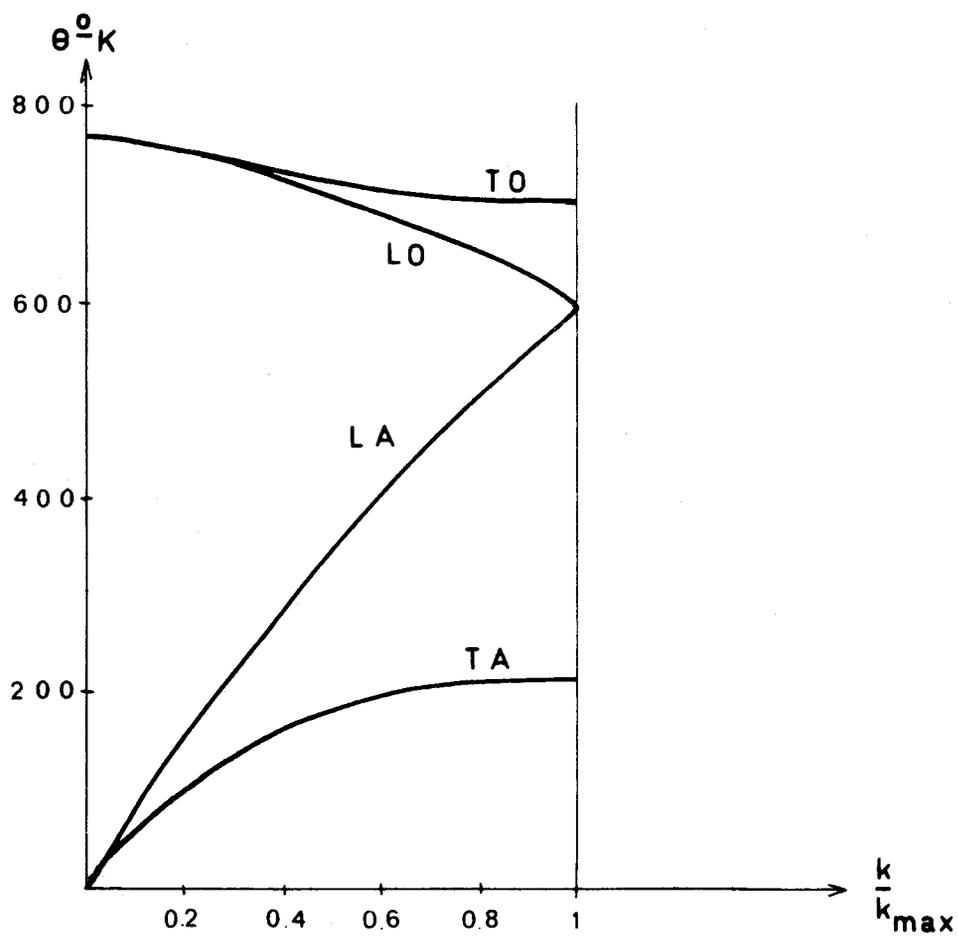


Figure 20 b)



Les collisions sont isotropes car la position de l'électron sur l'ellipsoïde final dépend peu de sa position sur l'ellipsoïde initial.

Le temps de relaxation, comme pour le silicium de type P, se met sous la forme :

$$\frac{1}{\tau_{opt}} = \sum_i W'_i \theta_i^{3/2} \left[\frac{\left(\frac{E}{k\theta_i} + 1\right)^{1/2}}{e^{\theta_i/T} - 1} + \frac{\left(\frac{E}{k\theta_i} - 1\right)^{1/2}}{1 - e^{-\theta_i/T}} \right] \quad (III-11)$$

ou zéro si $\frac{E}{k\theta_i} < 1$

l'indice i indiquant les différents phonons concernés

avec :

$$W'_i = \frac{E_{lopt}^2 m^{\pi 3/2} k^{3/2}}{\rho s^2 2^{1/2} \pi h^4}$$

3°) collisions sur impuretés ionisées.

Elles provoquent des transitions intrabandes puisqu'elles sont presque élastiques. Elles possèdent en outre un caractère d'anisotropie très marqué puisque les collisions à faible angle de diffusion sont les plus nombreuses.

Nous devons donc définir aux temps de relaxation τ_{It} et τ_{Il} respectivement perpendiculaire et parallèle au grand axe des ellipsoïdes.

Nous poserons de la même façon que pour le matériau de type P (cf III-7) :

$$\frac{1}{\tau_{It}} = W'_3 E^{-3/2} \left[\text{Log} (b + 1) - \frac{b}{b + 1} \right] \quad (III-12)$$

$$\frac{1}{\tau_{Il}} = C'_I \cdot \frac{1}{\tau_{IT}}$$

où C_I est une constante d'anisotropie déterminée par Long {33} : $C_I = 0,25$.

III.2.3.2.2. Temps de relaxation total et expression de
la conductivité

Deux temps de relaxation s'obtiennent à partir des relations (III-10), (III-11) et (III-12).

- le premier τ_t correspond au temps de relaxation dans une direction perpendiculaire au grand axe des ellipsoïdes:

$$\frac{1}{\tau_t} = W'_A \left\{ T^{3/2} \left(\frac{E}{kT} \right)^{1/2} + \sum_i W_i \theta_i^{3/2} \left[\frac{\left(\frac{E}{k\theta_i} + 1 \right)^{1/2}}{e^{\theta_i/T} - 1} + \frac{\left(\frac{E}{k\theta_i} - 1 \right)^{1/2}}{1 - e^{-\theta_i/T}} \right] \right. \\ \left. + W_3 E^{3/2} \left[\text{Log } (b + 1) - \frac{b}{b + 1} \right] \right\} \quad \text{ou zéro si } \frac{E}{k\theta_i} < 1 \quad \text{(III-13)}$$

où les trois termes correspondent respectivement aux probabilités de collision avec phonons acoustiques, phonons optiques et impuretés ionisées.

- le deuxième τ_l qui correspond au temps de relaxation dans une direction parallèle au grand axe des ellipsoïdes est donné par une relation similaire :

$$\frac{1}{\tau_l} = W'_A \left\{ C_A T^{3/2} \left(\frac{E}{kT} \right)^{1/2} + \sum_i W_i \theta_i^{3/2} \left[\frac{\left(\frac{E}{k\theta_i} + 1 \right)^{1/2}}{e^{\theta_i/T} - 1} + \frac{\left(\frac{E}{k\theta_i} - 1 \right)^{1/2}}{1 - e^{-\theta_i/T}} \right] \right. \\ \left. + C_I W_3 E^{-3/2} \left[\text{Log } (b + 1) - \frac{b}{b + 1} \right] \right\} \quad \text{ou zéro si } \frac{E}{k\theta_i} < 1 \quad \text{(III-14)}$$

Les constantes $W_i = \frac{W'_i}{W'_A}$ et $W_3 = \frac{W'_3}{W'_A}$ expriment les contributions relatives des collisions sur phonons optiques et sur impuretés ionisées par rapport à celle des collisions sur phonons acoustiques.

Il est intéressant d'étudier maintenant la contribution de ces deux temps de relaxation dans le calcul de la conductivité totale.

Nous avons vu (rel III-1) que la conductivité statique d'un matériau de type N peut s'exprimer par :

$$\sigma_o = \frac{Ne^2}{3} \left\langle 2 \frac{\tau_t}{m_t} + \frac{\tau_1}{m_1} \right\rangle$$

Cette expression peut se mettre sous la forme simplifiée :

$$\sigma_o = Ne^2 \frac{\langle \tau' \rangle}{m'}$$

en posant :

$$\tau' = \frac{2\tau_t \frac{m}{m_t} + \tau_1}{2 \frac{m_1}{m_t} + 1}$$

$$m' = \frac{3 m_t m_1}{m_t + 2 m_1}$$

Dans le cas d'un régime sinusoïdal, la nouvelle expression de la conductivité peut être obtenue en remplaçant respectivement :

$$\tau_1 \text{ par } \frac{\tau_1}{1 + j\omega\tau_1} \quad \text{et} \quad \tau_t \text{ par } \frac{\tau_t}{1 + j\omega\tau_t}$$

ce qui donne :

$$\sigma^{\pi} = \frac{Ne^2}{3} \left\langle \frac{2}{m_t} \frac{\tau_t}{1 + j\omega\tau_t} + \frac{\tau_1}{m_1 (1 + j\omega\tau_1)} \right\rangle \quad (\text{III-15})$$

Nous pouvons aisément déduire des relations précédentes la quantité $\frac{\sigma'(\omega)}{\sigma_0}$ qu'il nous est indispensable de déterminer pour pouvoir la comparer ensuite aux résultats expérimentaux :

$$\frac{\sigma'}{\sigma_0} = \frac{\left\langle 2 \frac{m_1}{m_t} \frac{\omega\tau_t}{1 + (\omega\tau_t)^2} + \frac{\omega\tau_1}{1 + (\omega\tau_1)^2} \right\rangle}{\langle \omega\tau' \rangle \left(2 \frac{m_1}{m_t} + 1 \right)} \quad (\text{III-16})$$

Nous avons choisi comme valeur pour le facteur d'anisotropie des masses :

$$\frac{m_1}{m_t} = 5,1 \quad (12)$$

Remarque : La relation précédente montre que c'est en fait le temps de relaxation τ_t qui influe de façon prépondérante sur les variations de la conductivité.

Toutes ces considérations montrent clairement qu'il est essentiel pour étudier le temps de relaxation des porteurs et la conductivité, de connaître les constantes de couplage W_i et les températures caractéristiques Θ_i ; aussi, nous paraît-il intéressant de résumer les différents travaux effectués à ce sujet.

Long, en étudiant la mobilité de conductivité en fonction de la température trouve que les phonons de basse température n'interviennent que faiblement :

$$W_1 (630^\circ) = 2 \quad ; \quad \frac{W_2 (190^\circ)}{W_1 (630^\circ)} = 0,07$$

Il faut remarquer que les températures de 190°K et 630°K ne sont que des moyennes prises sur les différentes températures de phonons en ne tenant pas compte des règles de sélection précédemment citées.

D'autres travaux sur la piézo-résistivité de Aubrey et al. {38} semblent confirmer les résultats de Long.

Cependant, Dumke {39} en étudiant le spectre de recombinaison radiative à basse température, détermine à partir de la position des pics d'émission, des températures de phonons différentes. L'intensité des pics indique une très grande importance des transitions par phonons longitudinaux acoustiques :

$$\frac{W_2 (267^\circ)}{W_1 (534^\circ)} = 2,5$$

Ces résultats sont presque confirmés par les études de photo-conductivité d'Onton {40} qui mènent au résultat suivant :

$$\frac{W_2 (307^\circ)}{W_1 (540^\circ)} = 1$$

La température de 307°K est interprétée en supposant que le centre des vallées est situé à une distance par rapport au centre de la zone de Brillouin de $0,79 k_{\max}$ au lieu de $0,85 k_{\max}$

Costato {41} par des travaux théoriques tenant compte des expériences en champ fort faites sur le silicium, semble confirmer les résultats de Dumke et d'Onton.

En conclusion, le problème de la détermination des W_i et θ_i semble non résolu et très controversé et il paraît intéressant d'étudier si notre méthode d'analyse du spectre de conductivité en fonction de la fréquence permet d'obtenir des renseignements sur les diverses constantes de couplage.

III.2.3.2.3. Exploitation des résultats expérimentaux

et estimation des constantes de couplage W_1

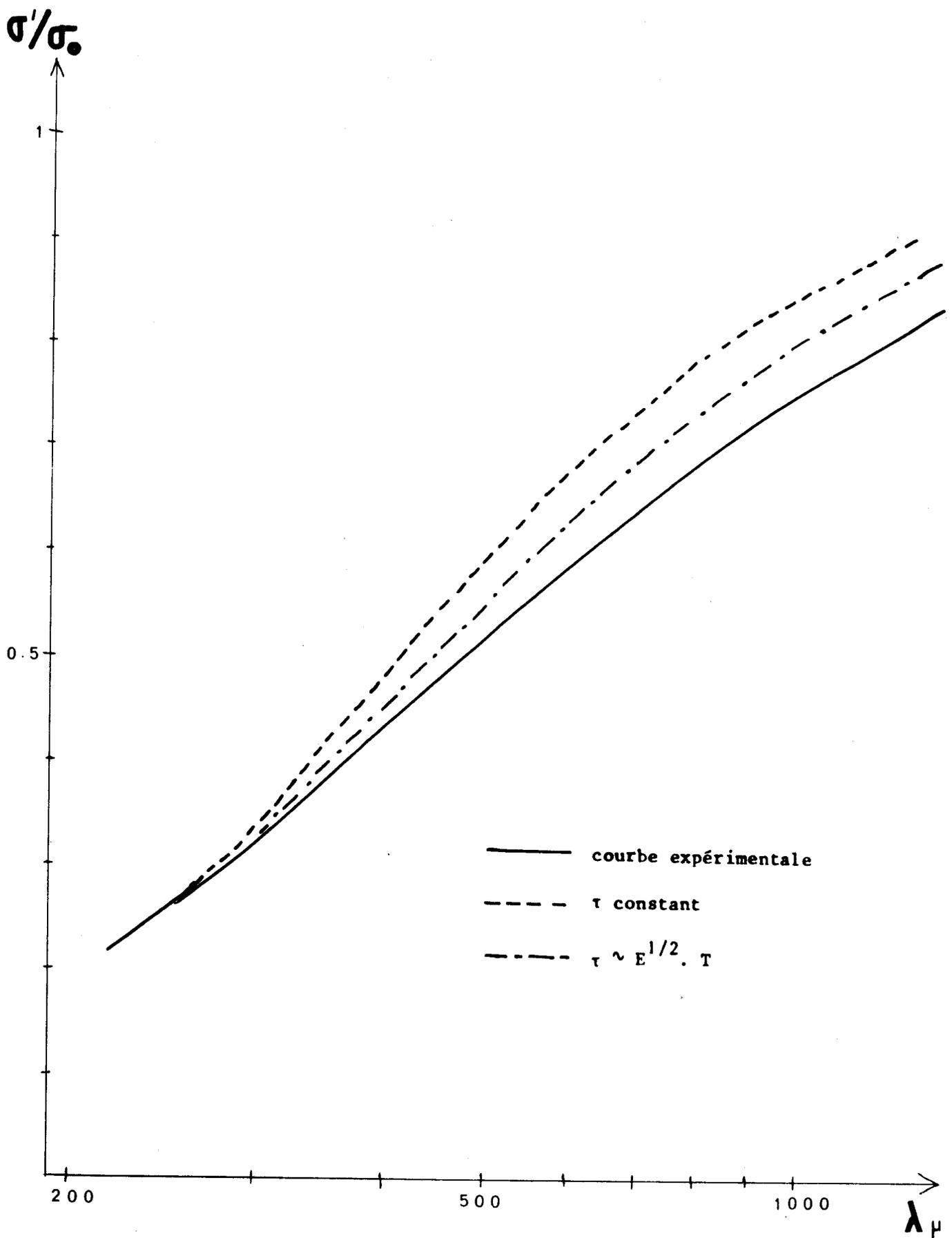
et W_2 .

A partir de la relation (III-16), il nous est facile de calculer par intégration numérique les spectres théoriques $\frac{\sigma'}{\sigma_0}$ correspondants à différentes distributions $\tau(E)$ et de les comparer aux spectres expérimentaux.

De même que pour le silicium de type P, nous voyons (Fig 21) que les collisions sur phonons acoustiques ne suffisent pas à expliquer l'écart du spectre expérimental par rapport à une relaxation non distribuée.

Nous pouvons donc conclure que les collisions sur phonons optiques (transitions intervallées) interviennent de façon importante dans le silicium de type N.

Nous avons calculé numériquement les spectres $\frac{\sigma'}{\sigma_0}$ inspirés des différents travaux cités précédemment :



Conductivité réduite d'un monocristal de type N pour différentes lois $\tau(E, T)$

Figure 21



- modèle d'Onton

$$W_1 (540^\circ) = 2 \quad \frac{W_2 (307^\circ)}{W_1 (540^\circ)} = 1 \quad (\text{III-17})$$

- modèle de Dumke

$$W_1 (534^\circ) = 2 \quad \frac{W_2 (267^\circ)}{W_1 (534^\circ)} = 2,5 \quad (\text{III-18})$$

- modèle de Long

$$W_1 (630^\circ) = 2 \quad \frac{W_2 (190^\circ)}{W_1 (630^\circ)} = 0,07 \quad (\text{III-19})$$

Nous avons constaté que théorie et expérience sont en meilleur accord pour le modèle de Dumke que pour le modèle de Long.

Ainsi, nous pouvons conclure que le taux de transitions "g" est très important dans le silicium de type N.

De la même façon que pour le silicium de type P, la superposition du spectre expérimental et du spectre théorique correspondant nous permet de déterminer pour quelle fréquence le produit $\langle \omega \tau \rangle$ est égal à 1.

Ceci est une méthode de détermination de τ donnant les mêmes résultats (tableau 2) que la méthode par transformée de Fourier directe du spectre $\frac{\sigma'}{\sigma_0}$, mais d'application plus difficile car elle suppose la connaissance préalable de la loi $\tau(E)$ en fonction de l'énergie des porteurs.

III.2.3.2.4. Conclusion

L'étude de l'évolution en fréquence de la conductivité permet théoriquement d'obtenir un très grand nombre d'informations sur la dynamique des porteurs au sein du cristal. Le nombre de paramètres intervenants (constantes de couplage, température de phonons), la précision de nos

résultats expérimentaux ne nous ont pas permis d'obtenir des résultats aussi quantitatifs que nous l'espérions initialement.

Néanmoins, nos travaux effectués en fonction de la fréquence ont permis d'obtenir les résultats suivants qui nous paraissent importants:

- détermination directe et précise des temps de relaxation des porteurs dans le silicium de type P et de type N.
- mise en évidence probable de transitions entre bandes de valence dans le silicium de type P.
- première estimation des différentes constantes de couplage caractérisant les collisions au sein du réseau et confrontation des résultats obtenus avec les valeurs (généralement assez controversées) obtenues par des méthodes différentes.

III.3. ETUDE EN FONCTION DE LA TEMPERATURE

III.3.1. Difficultés rencontrées

Pour préciser les températures de phonons et les paramètres de couplage correspondants et par conséquent pour connaître la distribution des temps de relaxation, nous avons entrepris une étude de la transmission et de la conductivité d'échantillons de silicium de type P et N en fonction de la température.

Cependant, dans la gamme de fréquences et de températures envisagées, certaines causes d'erreurs doivent être évitées.

1°) En infra-rouge lointain, lorsque la température diminue, nous voyons apparaître des raies d'absorption dues à des transitions entre les différents niveaux d'énergie des impuretés ionisées [43]. La présence de ces absorptions peut fausser, si l'on n'y prend pas garde, l'interprétation des spectres $\frac{\sigma'(\omega)}{\sigma_0}$ en haute fréquence.

2°) L'absorption des échantillons varie de façon importante en fonction de la température. Un échantillon qui, à température ambiante, présente un spectre de transmission continu peut, à une autre température, présenter des franges d'interférences ; il est donc nécessaire d'effectuer des mesures similaires sur des échantillons d'épaisseur différente pour s'assurer que les phénomènes observés ne sont pas liés à la présence de franges d'interférences.

III.3.2. Choix de la méthode de mesure

La solution la plus générale consiste à déterminer le nouveau spectre complet donnant la conductivité en fonction de la fréquence pour chaque température. On peut ainsi espérer analyser les modifications des spectres en fonction de la température et en déduire l'évolution correspondante du temps de relaxation moyen.

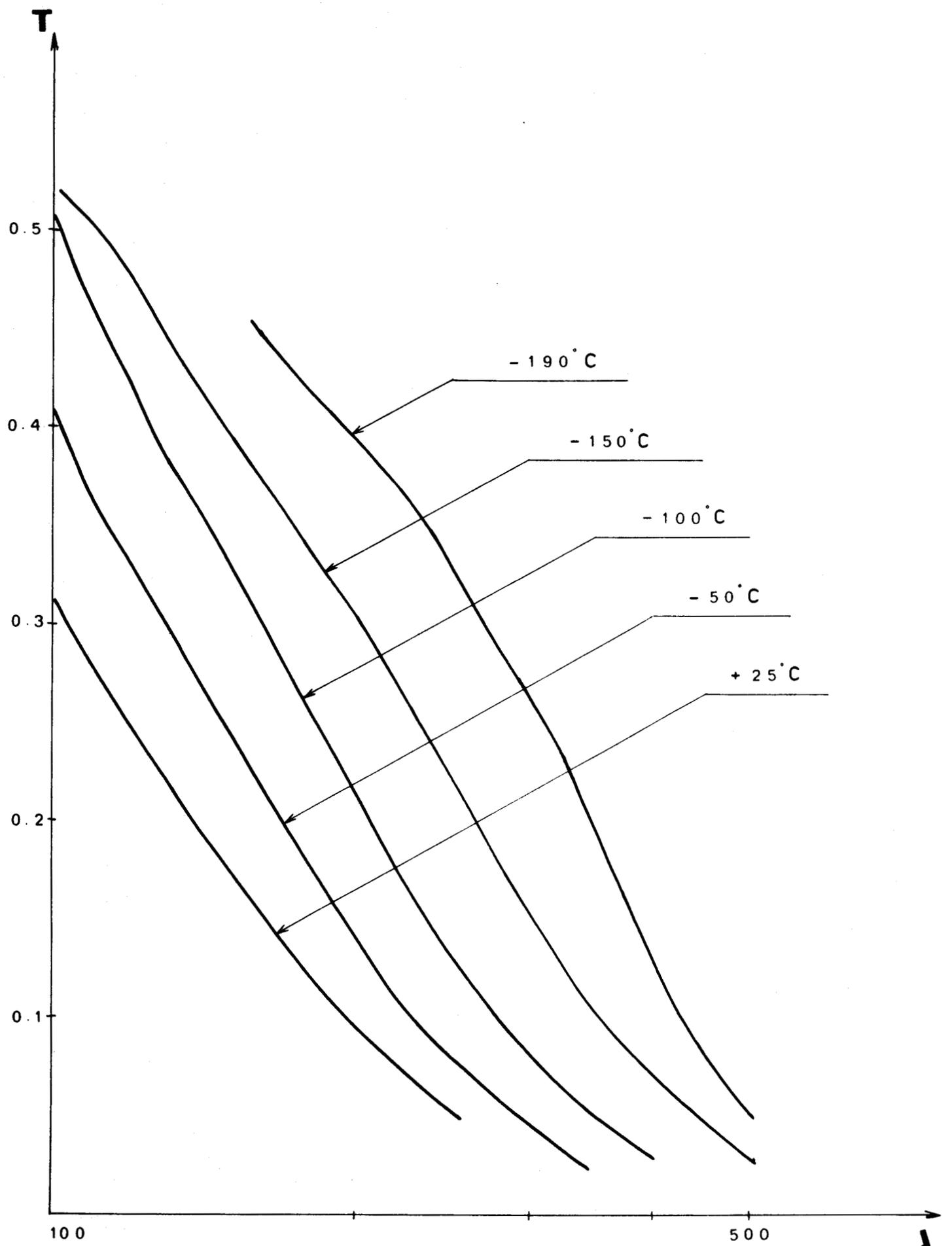
Cependant, comme le temps de relaxation augmente de façon considérable aux basses températures, tout le spectre se décale vers les longueurs d'ondes centimétriques ; il est donc difficile d'en effectuer une détermination complète (Fig. 22).

Une seconde méthode nous semble plus favorable et plus précise. Elle consiste à se placer à fréquence fixe et à mesurer alors la variation du coefficient de transmission de la lame semi-conductrice en fonction de la température.

Il faut alors choisir la fréquence de travail de façon à exalter les effets liés à la distribution $\tau(E,T)$ du temps de relaxation et à se placer dans les conditions de détermination optimale de cette distribution.

Dans ce but, nous avons calculé, à titre d'exemple, en fonction de la température, le coefficient de transmission théorique d'un échantillon de silicium de type N, d'épaisseur h et présentant à la température ambiante un temps de relaxation moyen :

$$\langle \tau_{amb} \rangle = 2,5 \cdot 10^{-13} \text{ seconde}$$



Coefficient de transmission du cristal n° 48 (type N) en fonction de la longueur d'onde à différentes températures.

Figure 22



Ce calcul a été effectué pour diverses fréquences telles que le produit $\langle \omega \tau_{amb} \rangle$ soit respectivement :

- très supérieur à 1
- inférieur à 1
- très inférieur à 1

Deux lois de distribution ont été envisagées :

- la première : τ (E.T) $\sim T.E^{1/2}$ correspond à des collisions avec phonons acoustiques
- la seconde tient compte en outre des collisions avec phonons optiques.

Nous prenons par exemple comme paramètres :

$$W_1 (534^\circ) = 2 \quad ; \quad W_2 (267^\circ) = 5 \quad (\text{cf III-18})$$

Nous n'avons tenu compte dans ce calcul :

- ni des collisions sur impuretés ionisées ($W_3 = 0$)
- ni en haute température d'une augmentation du nombre de porteurs causée par l'apparition d'une conduction intrinsèque prépondérante
- ni en basse température d'une diminution du nombre de porteurs due au fait que toutes les impuretés ne sont plus ionisées.

En effet, en ce qui concerne les deux derniers facteurs, la variation du nombre de porteurs intervient de la même façon quelle que soit la loi de distribution considérée ; le fait de ne pas en tenir compte ici ne change en rien nos conclusions qualitatives sur le choix des méthodes expérimentales.

De façon générale, nous constatons que le coefficient de transmission de l'échantillon varie de façon très différente en fonction de la température suivant la fréquence choisie et nous allons étudier plus en détail les trois cas envisagés.

Remarque :

La conductivité peut en première approximation s'exprimer par :

$$\sigma' = \frac{N e^2 \langle \tau \rangle}{m^{\pi} (1 + \omega^2 \langle \tau \rangle^2)}$$

et cette relation approchée peut nous suffire pour interpréter l'allure des courbes considérées.

a) $\lambda = 50$ microns $\langle \omega \tau_{amb} \rangle \gg 1$ (Figure 23)

h = 570 microns

Lorsque la température diminue, le temps de relaxation augmente ; le produit $\langle \omega \tau \rangle$ devient très supérieur à 1 ; la conductivité

$$\sigma'(\omega) \approx \frac{N e^2 \langle \tau \rangle}{m^{\pi} (1 + \omega^2 \langle \tau \rangle^2)} \approx \frac{N e^2}{m^{\pi} \omega^2 \langle \tau \rangle}$$

variant comme l'inverse de $\langle \tau \rangle$ décroît avec la température. Le matériau tend à devenir transparent.

Pour l'épaisseur considérée, la conductivité étant de plus en plus faible lorsque la température diminue, nous voyons sur la figure que des mesures de transmission ne permettent pas de déceler de différence notable entre une distribution de τ purement de type acoustique et une distribution comportant en outre des termes optiques. C'est pourquoi, l'étude ne semble intéressante qu'à condition d'utiliser des échantillons très épais.

b) $\lambda = 990$ microns $\langle \omega \tau_{amb} \rangle \approx 0,5$ (Figure 24)

h = 570 microns

L'interprétation de la courbe obtenue est la suivante :
 Pour les températures supérieures à 200°K, le produit $\langle \omega\tau \rangle$ est encore inférieur à 1 et la conductivité

$$\sigma' \approx \frac{Ne^2}{m} \frac{\langle \tau \rangle}{1 + \omega^2 \langle \tau \rangle^2} \sim \frac{Ne^2}{m} \langle \tau \rangle$$

varie proportionnellement au temps de relaxation et augmente quand la température diminue.

Pour des températures inférieures à 200°K, le produit $\langle \omega\tau \rangle$ devient supérieur à 1 et la conductivité

$$\sigma' \approx \frac{Ne^2}{m} \frac{\langle \tau \rangle}{1 + \omega^2 \langle \tau \rangle^2} \sim \frac{Ne^2}{m} \frac{1}{\omega^2 \langle \tau \rangle}$$

est inversement proportionnelle au temps de relaxation ; elle diminue en même temps que la température.

Ces variations se manifestent par un minimum de la courbe reliant le coefficient de transmission à la température.

La forme de cette courbe dépend beaucoup de la dérivée $\frac{d\tau}{dT}$ et traduit donc fortement la présence de collisions sur phonons optiques. Leur contribution a pour effet d'amener une croissance très rapide du temps de relaxation lorsque la température diminue. En effet, τ optique varie selon une loi en $(\exp \frac{\theta}{T} - 1)$.

c) $\lambda = 4400$ microns $\langle \omega\tau_{amb} \rangle \neq 0,1$ (Figure 25)

$h = 200$ microns

Le coefficient de transmission subit les mêmes variations que dans le cas précédent si ce n'est que le produit $\langle \omega\tau \rangle$ devient proche de 1 pour les

très basses températures et uniquement dans ce cas.

Il nous a paru intéressant de déterminer également (Fig 26) l'évolution du temps de relaxation en fonction de la température pour les deux types de distribution choisis. Cette évolution peut être en effet déterminée à partir d'une mesure de la conductivité statique (proportionnelle à $\langle \tau \rangle$). On voit que l'influence du type de distribution utilisé est alors beaucoup plus faible que dans les deux derniers cas exposés précédemment sur les figures 24 et 25.

Pour déterminer avec précision la loi de distribution $\tau(E.T)$ nous avons choisi une fréquence de travail telle que le produit $\langle \omega \tau \rangle$ passe par la valeur 1 au cours de la descente en température.

Notre méthode de détermination des constantes de couplage est originale et nous pensons que les résultats obtenus de cette façon sont beaucoup plus précis que ceux que l'on peut tirer des mesures de mobilité ou de conductivité statique.

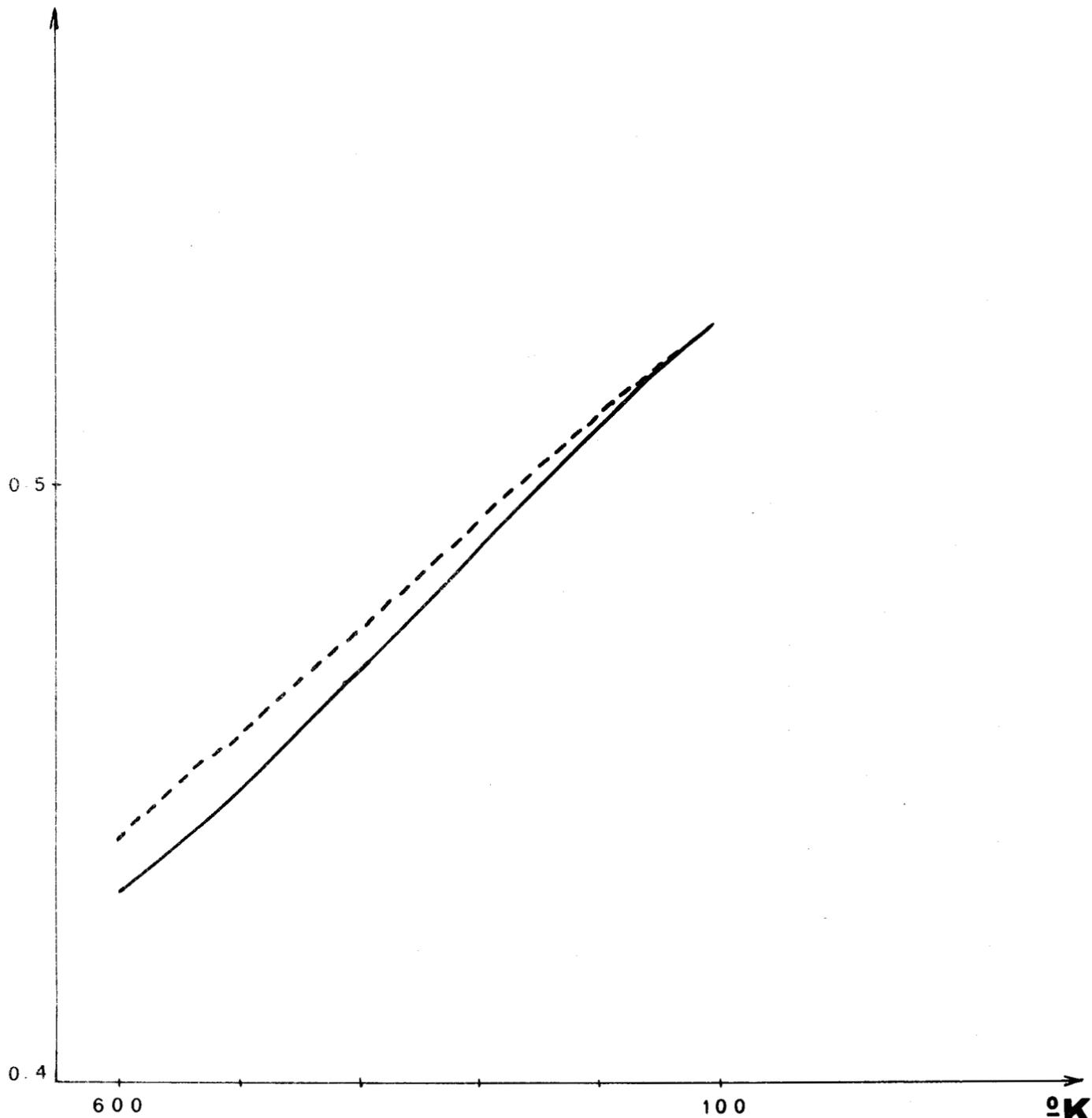
III.3.3. Résultats expérimentaux et interprétations

III.3.3.1. Présentation des courbes de transmission de divers échantillons en fonction de la température

Nous résumons dans le tableau N° 3 les différentes mesures effectuées ainsi que les longueurs d'ondes utilisées.

L'étude précédente montre que des conclusions intéressantes doivent être déduites des mesures en gamme millimétrique ; aussi, nous examinerons ici plus particulièrement les résultats obtenus pour des longueurs d'ondes égales à 1 mm et 4 mm.

transmission

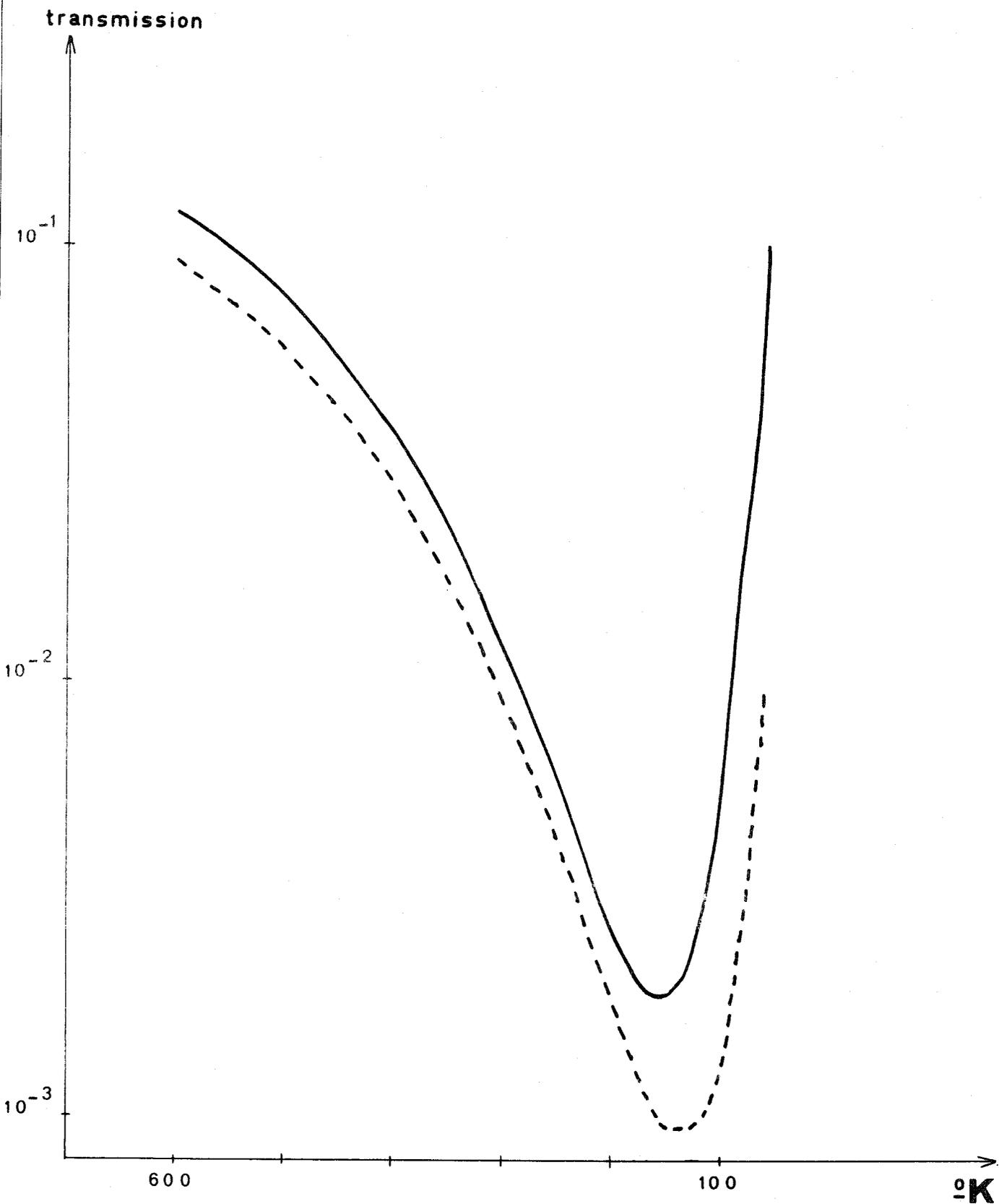


Coefficient de transmission théorique en fonction de la température pour une longueur d'onde de 50μ

- avec termes acoustiques seuls
- avec termes acoustiques et termes optiques

Figure 23



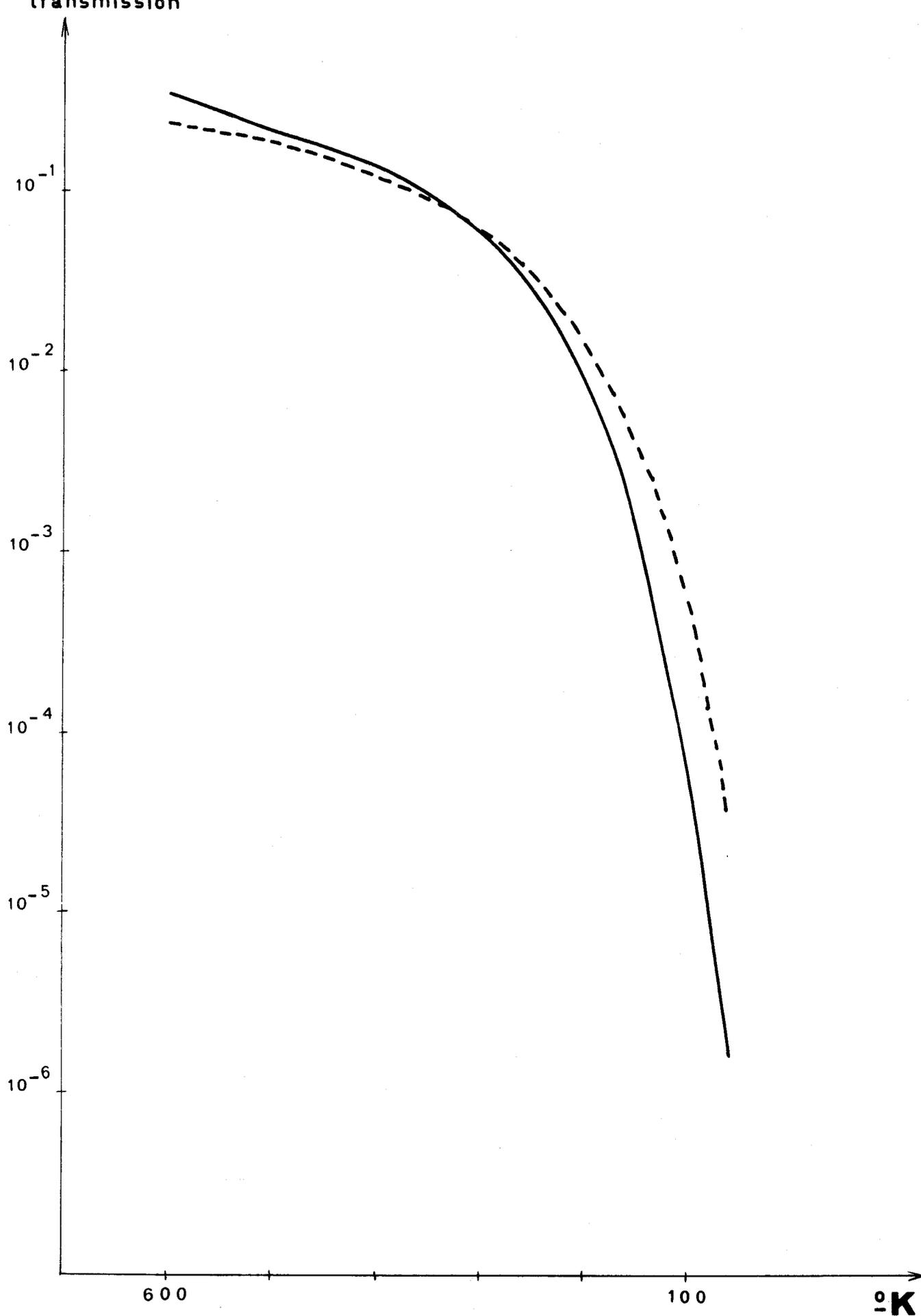


Coefficient de transmission théorique en fonction de la température pour une longueur d'onde de 990μ

- avec termes acoustiques seuls
- avec termes acoustiques et termes optiques

Figure 24



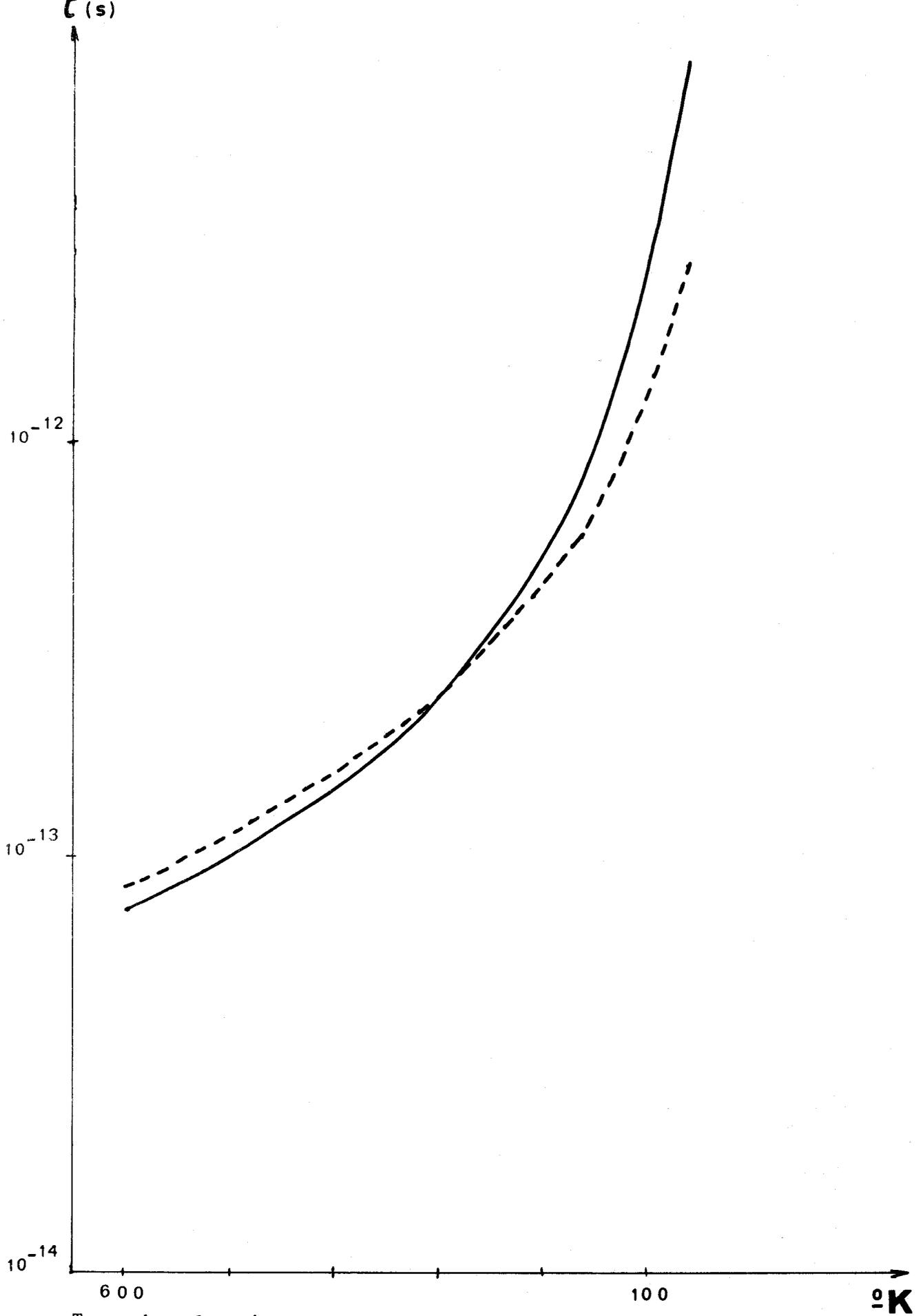


Coefficient de transmission théorique en fonction de la température pour une longueur d'onde de 4400 μ

- avec termes acoustiques seuls
- avec termes acoustiques et termes optiques



Figure 25



Temps de relaxation moyen théorique calculé en fonction de la température

- avec termes acoustiques seuls
- avec termes acoustiques et termes optiques

Figure 26



crystal	N°	Type	h (μ)	λ	N° Fig
3037	7	P	300	4 mm	27
-	-	-	-	1 mm	28
2643	120	N	600	1 mm	29
-	114	N	175	4 mm	30
-	-	N	-	1 mm	31
2560	48	N	600	100 à 500 microns	22

Tableau 3

Cependant, pour interpréter les résultats expérimentaux, il nous faut au préalable calculer le coefficient de transmission correspondant aux différentes distributions $\tau(E.T)$ que nous envisageons de vérifier expérimentalement ; nous nous proposons dans le paragraphe suivant de décrire la méthode de calcul utilisée.

III.3.3.2. Calcul du coefficient de transmission

Quand nous calculions dans un chapitre précédent $\frac{\sigma'(\omega)}{\sigma_0}$, la connaissance de la valeur exacte de σ^* n'était pas nécessaire et τ ne pouvait être exprimé qu'à une constante multiplicative près.

Au contraire, dans le cas où l'on veut calculer le coefficient de transmission à fréquence fixe et à température variable, il est absolument nécessaire d'accéder à la valeur exacte de $\sigma^{\bar{\pi}}$. Dans ce but, il nous fait déterminer au préalable le temps de relaxation moyen et le nombre des porteurs libres.

Le temps de relaxation moyen est imposé par la constante W'_A indépendante de la température (rel III-9, III-13, III-14), une fois que les constantes W_i sont connues.

Cette constante peut être calculée de façon précise à partir de la valeur du temps de relaxation moyen déterminé à température ambiante au moyen des spectres de conductivité en fonction de la fréquence.

Par ailleurs, le produit $\frac{Ne^2}{m^{\bar{\pi}}}$ qui intervient dans l'expression de $\sigma^{\bar{\pi}}$ est déterminé également à partir des mesures effectuées à la température ambiante de la conductivité statique σ_0 et du temps de relaxation moyen puisque :

$$\frac{Ne^2}{m^{\bar{\pi}}} = \frac{\sigma_0}{\langle \tau \rangle}$$

Dans le cas des basses températures, il faut en outre effectuer une correction pour tenir compte du fait que tous les donneurs ou accepteurs ne sont plus ionisés.

Dans ce but, nous avons utilisé des résultats obtenus par Putley {42} donnant le nombre de porteurs à une température quelconque. Dans le silicium de type N, le nombre d'électrons libres est donné par :

$$\frac{n(N_A + n)}{N_D - N_A - n} = \frac{N_C}{F} \quad (\text{III-20})$$

Dans le silicium de type P, le nombre de trous libres est donné par :

$$\frac{p (N_D + p)}{N_A - N_D - p} = \frac{N_v}{F} \quad \text{(III-21)}$$

où N_A est le nombre d'accepteurs

N_D est le nombre de donneurs

$$F = \sum_i g_i \exp (-E_i/kT)$$

E_i indiquant l'énergie de chaque niveau d'impureté

g_i le facteur de dégénérescence de chaque niveau

$$N_{c,v} = 2 \left(\frac{2\pi m^* kT}{h^2} \right)^{3/2}$$

Nous donnons (Fig 32) la variation du nombre de porteurs en fonction de la température pour les cristaux 2643 (type N) et 3037 (type P) calculé à partir des relations (III-20) et (III-21).

Nous voyons que cette variation est importante et ne peut absolument pas être négligée.

III.3.3.3. Interprétation des résultats

III.3.3.3.1. Silicium de type P

Nous représentons (Fig 27) le coefficient de transmission expérimental du cristal N° 7 rapporté à sa valeur à 25°C, mesuré pour une longueur d'onde de 4 mm.

Nous donnons également les courbes théoriques correspondantes pour des valeurs du paramètre de couplage W_1 égales à 2,5 et 10 (calculées en tenant compte des collisions sur impuretés ionisées et de la correction du nombre de porteurs (rel III-21)).

Nous reprenons sur une courbe supplémentaire un des cas précédents ($W_1 = 10$) en supposant que le nombre de porteurs reste constant en fonction de la température.

Nous constatons qu'en très basse température (inférieure à 170°K), le coefficient de transmission est très affecté par la variation du nombre de porteurs dont l'effet masque l'influence du paramètre de couplage W_1 . Celui-ci ne peut être alors déterminé avec précision.

En outre, nous remarquons que dans cette zone, la transmission est plus faible et par conséquent la conductivité est plus forte que ne le laisse prévoir la théorie.

Deux interprétations peuvent être données à ce phénomène :

- d'une part, la variation du nombre de porteurs est déduite d'une relation théorique et n'est pas connue avec précision. Il y aurait accord entre théorie et expérience si la diminution du nombre de porteurs était moins importante que celle calculée à partir de la relation (III-21).
- d'autre part, de nombreux auteurs {35} {36} constatent un phénomène similaire au cours d'études détaillées de la mobilité du silicium de type P en fonction de la température. La plupart d'entre eux attribuent ce fait à une diminution de la masse effective lorsque la température décroît, du fait de la non-parabolicité de la bande 1 de valence.

Pour des températures supérieures à 170°K , il y a accord entre les coefficients de transmission expérimentaux et théoriques pour une constante de couplage $W_1 = 10$.

Ce résultat est confirmé par des mesures similaires effectuées pour une longueur d'onde de 1 mm sur le même cristal ; nous montrons en effet (Fig 28) :

- que les variations du coefficient de transmission en basse température ont encore pour principale origine la variation du nombre de porteurs.

- qu'une valeur $W_1 = 10$ permet de décrire de façon satisfaisante les résultats expérimentaux pour des températures supérieures à 170°K .

Ce coefficient est beaucoup plus fort que la valeur de 2,5 obtenue dans l'hypothèse d'une masse effective variable avec la température [35] [36].

Cependant, cette dernière notion est assez controversée [29] et si l'on considère que la masse effective reste constante, il faut conclure que les collisions sur phonons optiques interviennent de façon très importante dans le silicium de type P.

La constante W_1 étant supposée égale à 10, nous pouvons alors donner comme résultat supplémentaire la constante W'_A fixant la valeur du terme acoustique dans le temps de relaxation (rel III-9). (Nous avons en effet montré (§ III.3.3.2.) que cette constante peut être déterminée à partir du temps de relaxation moyen mesuré à partir des spectres en fréquence effectués à température ambiante) :

$$W'_A = 9,1 \cdot 10^8 / \text{°K}^{3/2} \cdot \text{s}$$

Nous n'avons pas trouvé dans la littérature une valeur qui puisse être comparée à celle-ci.

III.3.3.3.2. Silicium de type N

Sur la figure 29, nous représentons en fonction de la température le coefficient de transmission expérimental du cristal 120, mesuré pour une longueur d'onde de 1 mm (et rapporté à sa valeur à 25°C).

Nous avons également reporté les valeurs théoriques correspondant au modèle de Dumke caractérisé par :

$$W_1 (534^\circ) = 2 \quad \text{et} \quad W_2 (267^\circ) = 5$$

et le calcul a été effectué en tenant compte des collisions sur impuretés ionisées avec et sans correction du nombre de porteurs.

De même que pour le silicium de type P, nous constatons que la variation du nombre de porteurs influe fortement sur le coefficient de transmission en basse température ; la détermination de W_1 et W_2 est de ce fait moins précise que nous ne l'espérons.

Cependant, en corrigeant le nombre de porteurs à partir de la relation (III-20), nous constatons que le modèle de Dumke semble décrire les résultats obtenus de façon assez satisfaisante.

Cette conclusion paraît confirmée par des mesures et des calculs similaires effectués sur le cristal 114 pour une longueur d'onde de 4 mm comme nous le montrons sur la figure 30.

Il apparaît ainsi que les transitions "g" par collisions sur phonons de faible température caractéristique semblent intervenir de façon importante dans le silicium de type N.

Compte tenu des constantes précédemment définies,

$$W_1 (534^\circ) = 2 \quad ; \quad W_2 (267^\circ) = 5$$

nous pouvons, de même que pour le matériau de type P, calculer la constante W'_A fixant la valeur du terme acoustique dans le temps de relaxation (voir III-13), (III-14)).

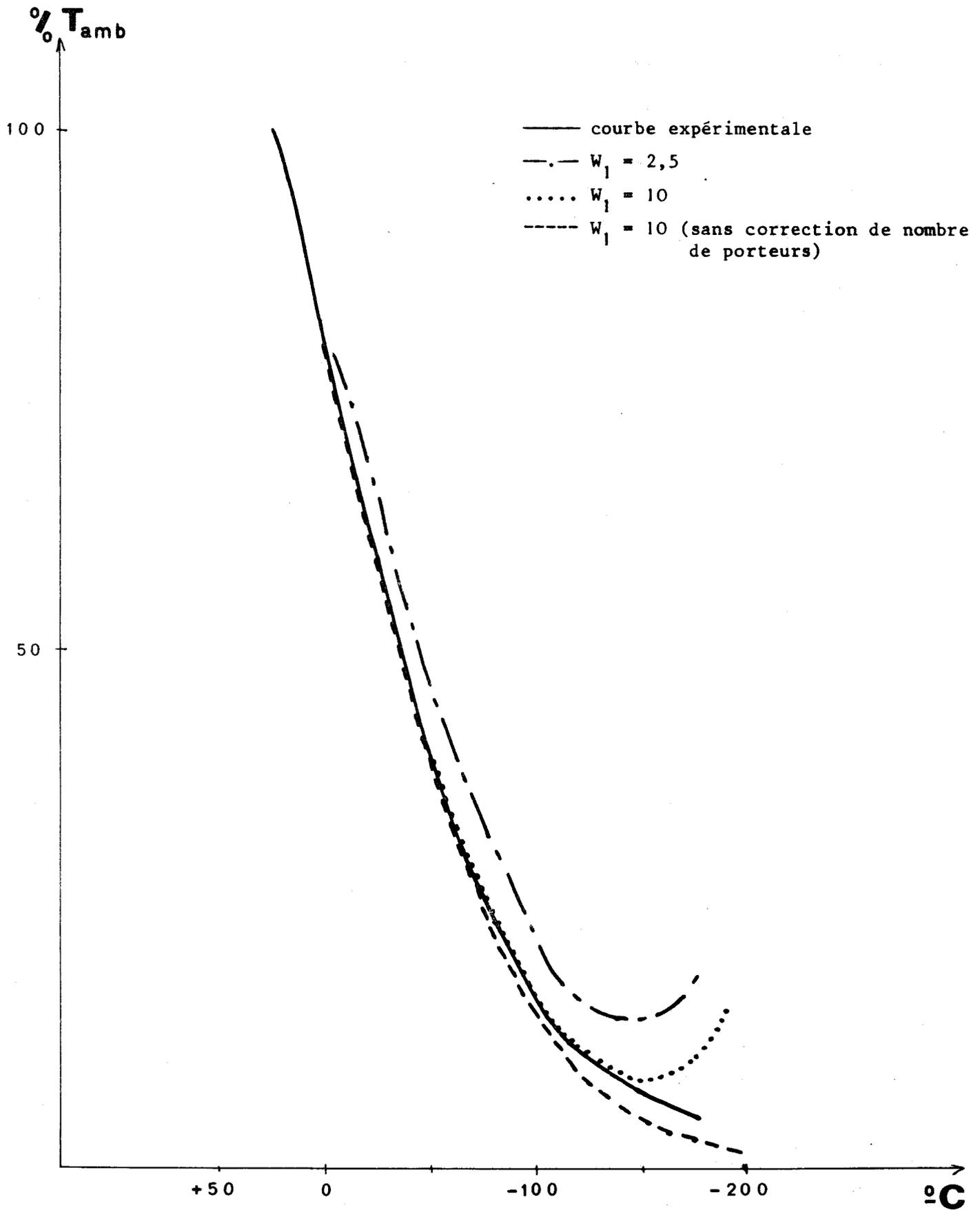
Nous avons trouvé :

$$W'_A = 1,5 \cdot 10^8 / ^\circ K^{3/2} \cdot s$$

Ce résultat est assez proche de la valeur :

$$W'_A = 2,4 \cdot 10^8 / ^\circ K^{3/2} \cdot s$$

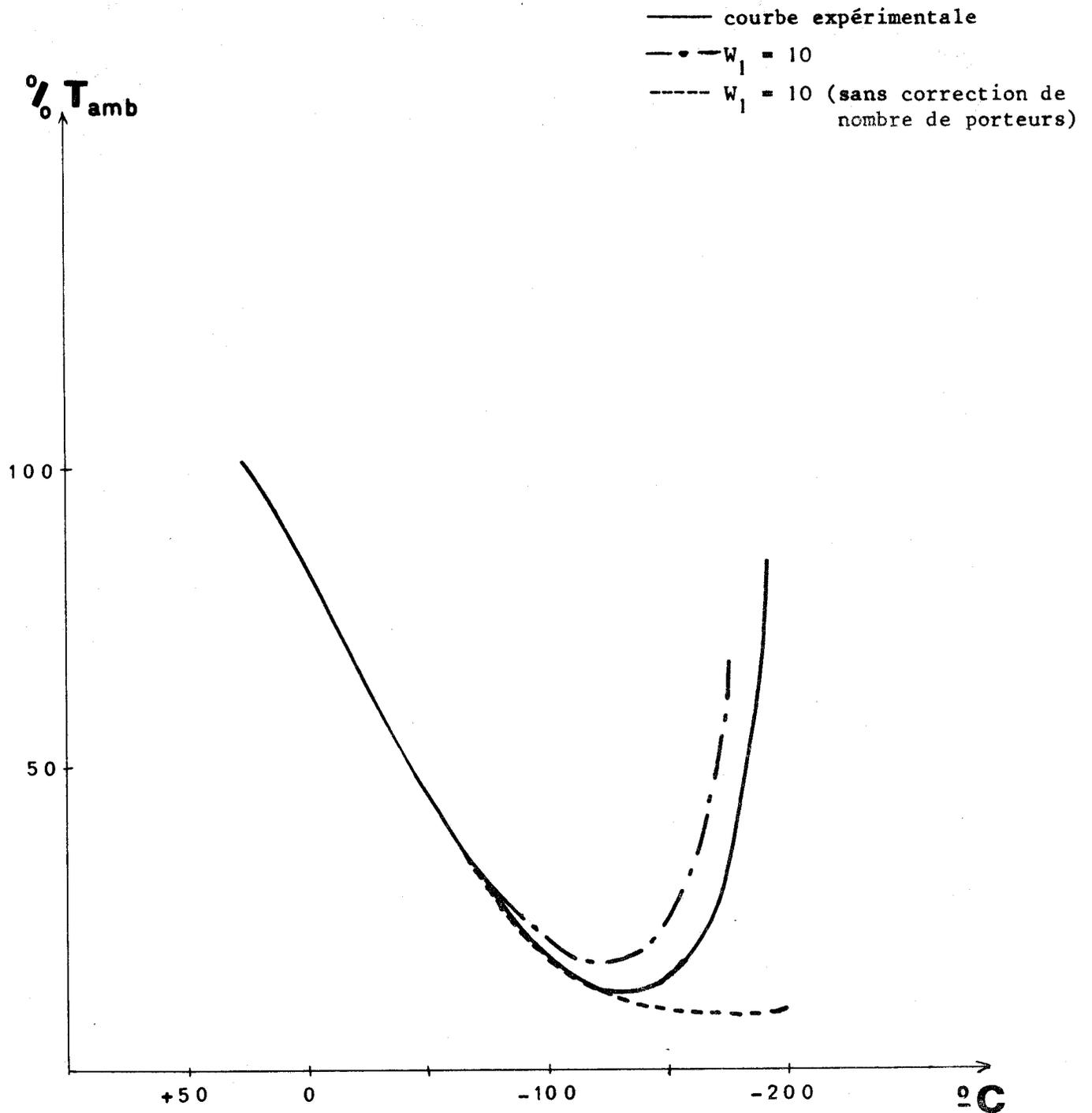
qui est nécessaire à Holm et Champlin [44] pour interpréter de façon satisfaisante leurs travaux en champ électrique intense sur le silicium de type N.



Coefficient de transmission expérimental du cristal N° 7 pour une longueur d'onde de 4 mm rapporté à sa valeur à 25°C

Figure 27

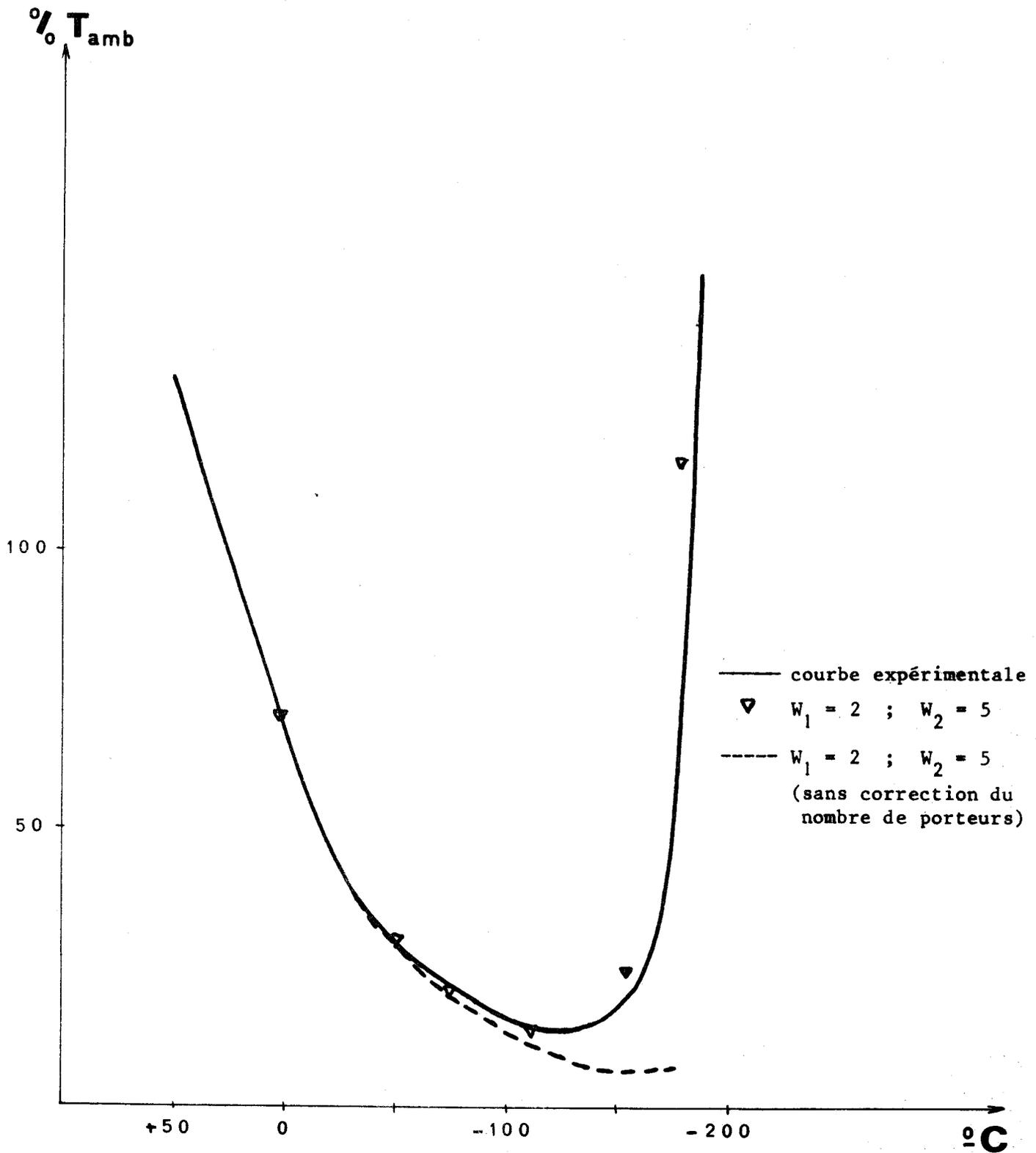




Coefficient de transmission expérimental du cristal N° 7 pour une longueur d'onde de 1 mm rapporté à sa valeur à 25°C

Figure 28

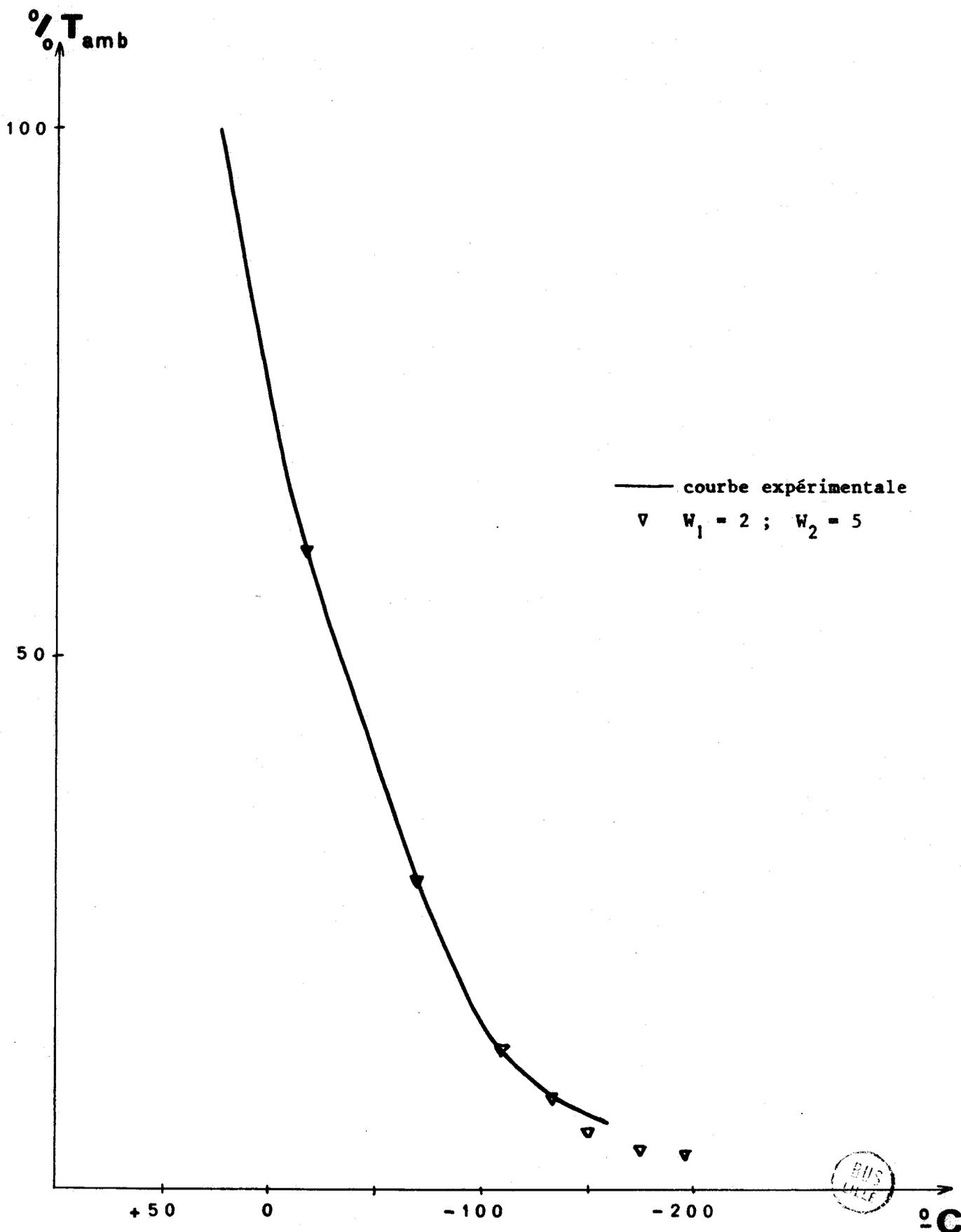




Coefficient de transmission expérimental du cristal N° 120 pour une longueur d'onde de 1 μm rapporté à sa valeur à 25°C

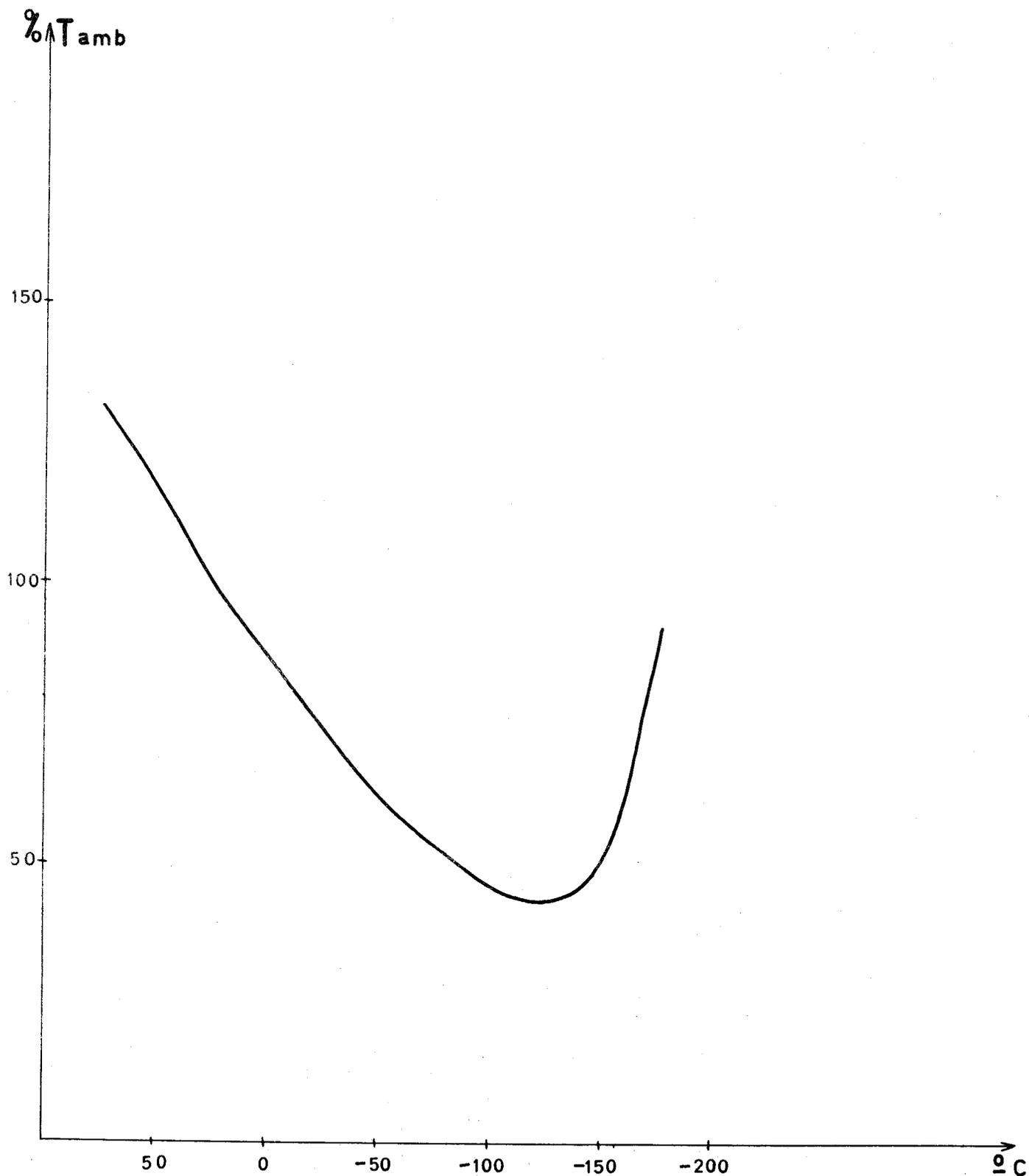
Figure 29





Coefficient de transmission expérimental du cristal N° 114 pour une longueur d'onde de 4 mm rapporté à sa valeur à 25°C

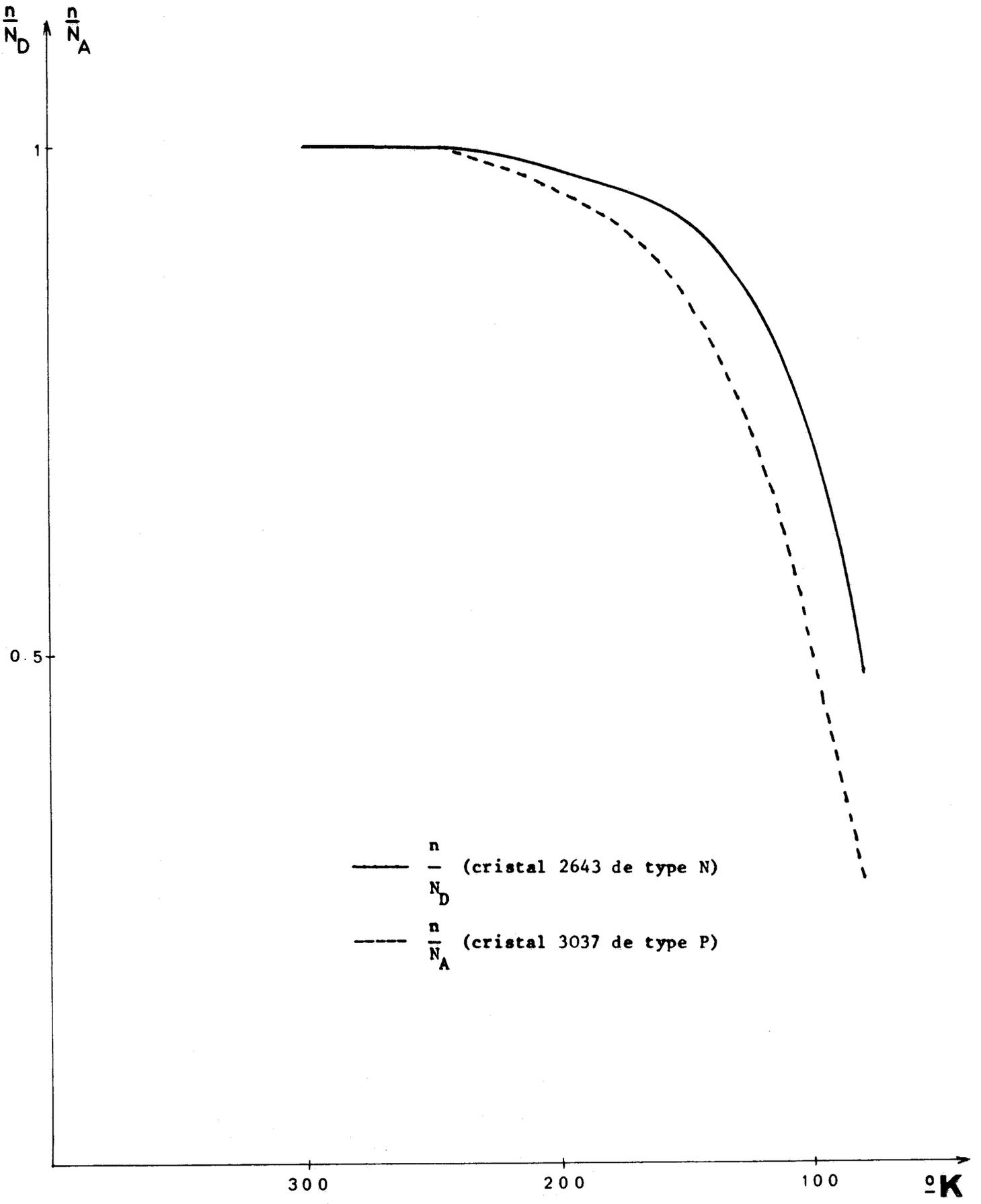
Figure 30



Coefficient de transmission expérimental du cristal n° 114 pour une longueur d'onde de 1 mm rapporté à sa valeur à 25°C

Figure 31





Correction du nombre de porteurs en fonction de la température.



Figure 32

Cependant, notons que ces auteurs déterminent W'_A à partir d'une mesure de mobilité à 77°K {33}. A cette température la contribution des collisions sur phonons optiques est presque nulle et W'_A peut être alors déterminé sans connaissance préalable de W_1 et W_2 .

Il faut remarquer en outre que ces auteurs au cours du même travail {44} supposent ensuite que :

$$W_1(630^\circ) = 2 \quad W_2(190^\circ) = 0,15 \quad (\text{modèle de Long})$$

or nous avons calculé à partir de notre mesure de temps de relaxation à la température ambiante que la valeur correspondante de W'_A serait de $4,5 \cdot 10^8 / ^\circ K^{3/2} \cdot s$.

Cette contradiction semble étayer l'hypothèse déjà émise que le modèle de Dumke décrit mieux les résultats expérimentaux que le modèle de Long.

III.3.4. Conclusion

Nous avons montré au cours de ce chapitre que les mesures en fonction de la température, du coefficient de transmission permettent d'étudier les divers mécanismes de collision porteurs-réseau d'une façon approfondie.

Nous avons mis au point une méthode précise de détermination des constantes de couplage W_1 ainsi que les programmes numériques nécessaires à son exploitation.

Dans le cadre de notre travail, toutes les possibilités de cette méthode n'ont pu être utilisées du fait du taux important de collisions sur impuretés ionisées et de la variation du nombre de porteurs en basse température. Aussi nous comptons dans une prochaine étude à partir de mesures sur des cristaux moins dopés, isoler au maximum l'effet des collisions sur le réseau et tirer des informations précises sur la loi $\tau(E,T)$ liant le temps de relaxation à la température et à l'énergie des porteurs.

C O N C L U S I O N

--00000000--

Ce travail constitue la première étape d'une étude générale entreprise par notre laboratoire de l'absorption par porteurs libres présentée par les semi-conducteurs dans le domaine hertzien et infra-rouge lointain et il est probable que la qualité et la précision des résultats obtenus pourra être améliorée dans de grandes proportions dans un proche avenir.

Nous pensons néanmoins que ce travail a permis d'obtenir dès maintenant des résultats qui nous paraissent intéressants.

D'un point de vue expérimental, nous avons réalisé et mis au point tout d'abord un ensemble d'appareillages permettant à température largement variable, la mesure du coefficient de transmission de lames semi-conductrices dans un intervalle de fréquences compris entre 70 GHz ($\lambda = 4$ mm) et 7500 GHz ($\lambda = 40$ microns). Par ailleurs, une méthode de dépouillement numérique des résultats expérimentaux basée sur les relations de Kramers-Krönig a été mise au point. Cette méthode permet la détermination des deux composantes de la permittivité complexe dans tout l'intervalle de fréquence considéré. Un tel procédé nous a permis d'entreprendre une étude et une caractérisation systématiques de l'absorption présentée par le silicium à température et à fréquence largement variable pour différents types et concentrations d'impuretés et en fonction de l'orientation des axes cristallographiques.

D'un point de vue théorique, à la lumière des résultats expérimentaux obtenus, nous avons pu obtenir également quelques résultats importants.

En premier lieu nous avons mis au point une méthode très simple permettant la détermination directe du temps de corrélation de la vitesse des porteurs et ce procédé qui utilise le concept de fonction de corrélation et qui ne nécessite pas la connaissance simultanée des porteurs et des masses

effectives doit pouvoir être appliqué avec profit dans l'étude des semi-conducteurs.

En second lieu, notre travail a permis de mettre en évidence dans le silicium de type P une absorption excédentaire pour des longueurs d'ondes inférieures à 100μ et d'attribuer ce phénomène à des transitions entre bandes de valence. Ce résultat est à notre connaissance original.

Enfin, l'interprétation de l'ensemble des spectres obtenus nous a permis d'aborder l'étude de la distribution des temps de relaxation des porteurs et l'estimation des constantes de couplage relatives à différentes collisions des porteurs avec le réseau. Lors de ces déterminations, nous avons pu préciser les conditions expérimentales optimales permettant la détermination la plus précise des constantes de couplage. La méthode que nous avons commencée à utiliser est nouvelle et toutes ses possibilités n'ont pu être totalement exploitées dans le cadre de ce travail.

Aussi, nous nous proposons de poursuivre cette étude sur l'absorption présentée par le silicium car nous pensons en effet que les méthodes que nous avons proposées peuvent constituer un puissant moyen d'investigation de la dynamique des porteurs libres au sein d'un semi-conducteur.

§§§

B I B L I O G R A P H I E

--00000000--

- {1} J. TAVERNIER et D. CALECKI Introduction aux phénomènes de transport linéaires dans les semi-conducteurs. Masson - 1970
- {2} A. VAPAILLE Physique des dispositifs à semi-conducteurs. Masson - 1970
- {3} M. RODOT Les matériaux semi-conducteurs (2). Dunod - 1965
- {4} R. KUBO Lectures in theoretical physics. 1, 120, 1959
- {5} R. KUBO J. Phys. Soc. Japan 12, N° 6, 1957
- {6} H.A. KRAMERS Atti Congresso Intern Fis 5, 544 (1927)
R. de L. KRONIG J. Opt. Soc. Amer. 12, 547 (1926)
- {7} W.A. STEELE J. Chem. Phys 38, 2411, 1963
- {8} D. LONG, J. MYERS Phys. Rev 120, 39, 1960
- {9} F.J. MORIN, J.P. MAITA Phys. Rev 96, 28, 1955
- {10} W.R. RUNYAN Silicon semi-conductor technology Mc Graw-Hill 1965
- {11} S. BENEDICT, W. SHOCKLEY Phys. Rev 89, 1152, 1953
- {12} J.D. HOLM, K.S. CHAMPLIN J. Appl. Phys 39, 275, 1968
- {13} J. VANBREMEERSCH Mémoire C.N.A.M. Lille 1973 (à paraître)

- {14} H.F. WOLF Silicon semi-conductor data Pergamon Press 1969
- {15} E. CONSTANT, Y. LEROY, M. VINDEVOGHEL, J. VINDEVOGHEL, J.P. SIMANSKI,
MM. CHIRON, LAGORSSE, FORTERRE, SEGUIN
Rapport de contrat D.R.M.E. 70/662 Juillet 1972
- {16} D. LONG, J. MYERS Phys. Rev 115, 1107, 1959
- {17} H. KOBAYASHI, T. KOBAYASHI, K. FUJISAWA J. Phys. Soc. Japan 28, 799, 1970
- {18} M.E. BRODWIN, W. SHOCKLEY Phys. Rev 89, 1152, 1953
- {19} R.E. BICHARA, J.P. POITEVIN IEEE. Trans. Instr. Meas. IM 13, 323, 1964
- {20} G.P. SRIVASTAVA, A.K. JAIN Rev. of Sci. Instr 42, 1793, 1971
- {21} W.E. KRAG Phys. Rev 118, 435, 1960
- {22} B.L. BOICHENKO, V.M. VASETSKII Sov. Phys. Solid State 7, 1361, 1966
- {23} M. PRINCE Phys. Rev 93, 1204, 1954
- {24} G.W. LUDWIG, R.L. WATTERS Phys. Rev 101, 1699, 1956
- {25} A.A. KUKHARSKII, V.K. SUBASHIEV Sov. Phys. S.C. 4, 234, 1970
- {26} W.G. SPITZER, H.Y. FAN Phys. Rev 106, 882, 1957
- {27} G. DRESSELHAUS, A.F.KIP, C. KITTEL Phys. Rev. 98, 368, 1955
- {28} J.C. IRWIN Solid State Electronics 11, 599, 1968
- {29} E.M. CONWELL Solid State Physics Supplément 9, 1967

- {30} W.A. HARRISSON Phys. Rev 104, 5, 1281, 1956
- {31} HERRING The Bell System Technical Journal 34, 2, 237, 1955
- {32} B.N. BROCKHOUSE Phys. Rev. Letters 2, 256, 1959
- {33} D. LONG Phys. Rev. 120 , 6, 2024, 1960
- {34} H. BROOKS, C. HERRING Phys. Rev 83, 879, 1951
- {35} L. ELSTNER Phys. Stat. Sol 17, 139, 1966
- {36} M. ASCHE, J. VON.BORZESKOWSKI Phys. Stat. Sol 37, 433, 1970
- {37} A.H. KAHN Phys. Rev 97, 6, 1647, 1955
- {38} J.E. AUBREY, W. GUBLER, T. HENNINGSEN, S.H. KOENIG Phys. Rev 130, 5,
1667, 1963
- {39} W.P. DUMKE Phys. Rev. 118, 938, 1960
- {40} A. ONTON Phys. Rev. Letters 22, 288, 1969
- {41} M. COSTATO, L. REGGIANI Phys. Stat. Sol 38, 665, 1970
- {42} PUTLEY Proc. of Phys. Soc London 72, 917, 1958
- {43} KOHN Solid State Phys 5, 257, 1957
- {44} J.W. HOLM-KENNEDY, K.S. CHAMPLIN J. Appl. Phys 43, 4, 1889, 1972