

N° d'ordre: 504

50376
1980
176

50376
1980
176

THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITÉ DES SCIENCES ET TECHNIQUES DE LILLE

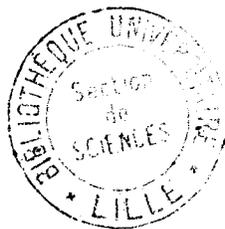
pour obtenir le grade de

DOCTEUR ES-SCIENCES PHYSIQUES

par

Jean VINDEVOGHEL

**PHENOMENES DE RELAXATION DES PORTEURS LIBRES
DANS LE SILICIUM DE TYPES P ET N
CONTRIBUTION DES TRANSITIONS INTERBANDES A LA
CONDUCTIVITE DU P-Si DANS LE DOMAINE DES ONDES
MILLIMETRIQUES ET DE L'INFRAROUGE LOINTAIN**



Soutenu le 9 décembre 1980 devant la Commission d'Examen

Jury :	MM. G. SALMER	Président
	E. CONSTANT	Rapporteur
	J.P. NOUGIER	Rapporteur
	J.F. PALMIER	Rapporteur
	R. FAUQUEMBERGUE	Examineur
	Y. LEROY	Examineur
	B. PISTOULET	Examineur
	L. REGGIANI	Examineur

A ma Mère,

A Monique, Corinne et Laurent

Embauché malgré moi dans l'usine à idées,
j'ai refusé de pointer.
Mobilisé de même dans l'armée des idées,
j'ai déserté.
Je n'ai jamais compris grand chose.
Il n'y a jamais grand chose ...
ni petite chose ...
Il y a autre chose ...
Autre chose, c'est ce que j'aime,
qui me plaît,
et que je fais ...

Jacques PREVERT

Ce travail a été réalisé au Centre Hyperfréquences et Semiconducteurs, L.A. au C.N.R.S. N° 287, de l'Université de Lille 1, dirigé par Monsieur le Professeur E. CONSTANT.

En m'accueillant dans son laboratoire, Monsieur le Professeur CONSTANT m'a permis, grâce à sa compétence et à ses conseils, de mener à bien ce travail et je lui en suis très reconnaissant.

Je remercie Monsieur le Professeur G. SALMER, de l'Université de Lille 1, qui me fait l'honneur d'assurer la Présidence de la Commission d'Examen.

Monsieur le Professeur J.P. NOUGIER, de l'Université de Montpellier, ainsi que Monsieur J.F. PALMIER du C.N.E.T., ont accepté d'examiner ces travaux et d'en être rapporteurs ; je les en remercie vivement.

Monsieur R. FAUQUEMBERGUE, Maître Assistant à l'Université de Lille 1, n'a jamais hésité à consacrer de longs et précieux moments à de fructueuses et amicales discussions. Je le remercie très sincèrement de faire partie de mon jury.

Monsieur le Professeur Y. LEROY, de l'Université de Lille 1, a contribué à la première phase de ces travaux de recherches ; je suis heureux qu'il accepte aujourd'hui de juger l'ensemble des résultats.

Mes remerciements s'adressent également à Monsieur le Professeur B. PISTOULET, de l'Université de Montpellier, et à Monsieur le Professeur L. REGGIANI, de l'Université de Modena, pour leur participation à mon Jury.

Je ne saurais oublier de remercier chaleureusement tous mes amis et amies du C.H.S. qui ont contribué chacun et chacune à leur manière à l'aboutissement de ce travail.

MM. VANBREMEERSCH et VANDERMOERE de la Centrale de Technologie, MM. JENNEQUIN, MICHON et ANDRIES de l'Atelier de Mécanique, MM. PLUQUET et DEHORTER du Service de Polycopie ont oeuvré efficacement à résoudre de nombreux problèmes techniques ; M. TINEL m'a donné de précieux conseils en ce qui concerne le calcul numérique : je les en remercie.

Mesdames M. FARGUE et J. LECHIEN ont eu la lourde tâche de dactylographier ce travail ; elles l'ont fait avec compétence et célérité et je les en remercie très sincèrement.

Enfin, je ne peux passer sous silence, non seulement l'efficacité mais aussi la dose de philosophie et de compréhension qu'a dû dépenser Monique lors de la réalisation de ce travail. Dire ici que je l'en remercie serait un bien faible mot...

SOMMAIRE

INTRODUCTION

<u>CHAPITRE I : METHODES DE MESURES - APPAREILLAGES.....</u>	p. 9
Introduction.....	p. 9
<u>I.1.</u> Coefficient de transmission.....	p. 10
<u>I.2.</u> Conductivité présentée par le semiconducteur	p. 12
I.2.1. Expression de $\sigma^*(\omega)$	p. 12
I.2.2. Détermination de la conductivité....	p. 15
<u>I.3.</u> Dispositifs de mesures.....	p. 17
I.3.1. Gamme millimétrique.....	p. 17
I.3.2. Gamme I.R.L.....	p. 19
I.3.3. Mesures de la conductivité statique.	p. 20
Bibliographie du chapitre I.....	p. 23
<u>CHAPITRE II : RESULTATS EXPERIMENTAUX.....</u>	p. 25
Introduction.....	p. 25
<u>II.1.</u> Coefficient de transmission.....	p. 30
<u>II.2.</u> Conductivité.....	p. 39

<u>CHAPITRE III : MECANISMES DE COLLISIONS.....</u>	p. 47
Introduction.....	p. 47
<u>III.1. Mécanismes de collisions dans le n-Si</u>	p. 52
III.1.1. Energie dans la bande de conduction.....	p. 52
III.1.2. Collisions sur le réseau.....	p. 53
III.1.2.1. Collisions sur phonons acoustiques.....	p. 54
III.1.2.2. Collisions sur phonons optiques.....	p. 57
III.1.3. Collisions sur impuretés ionisées.....	p. 59
III.1.4. Probabilité de collisions et temps de relaxation totaux...	p. 61
<u>III.2. Mécanismes de collisions dans le p-Si</u>	p. 62
III.2.1. Collisions sur le réseau.....	p. 63
III.2.1.1. Collisions sur phonons acoustiques.....	p. 63
III.2.1.2. Collisions sur phonons optiques.....	p. 65
III.2.2. Collisions sur impuretés ionisées.....	p. 66
III.2.3. Probabilité de collisions et temps de relaxation totaux...	p. 67
<u>III.3. Conductivité liée aux phénomènes de collisions.....</u>	p. 68
III.3.1. Conductivité statique.....	p. 68
III.3.2. Conductivité hyperfréquence..	p. 69
III.3.3. Détermination expérimentale de τ_m à partir des spectres de conductivité.....	p. 70
III.3.3.1. Cas du n-Si.....	p. 75
III.3.3.2. Cas du p-Si.....	p. 83
<u>III.4. Conclusion.....</u>	p. 89
Bibliographie du chapitre III.....	p. 91

CHAPITRE IV : BANDE DE VALENCE DU SILICIUM ET

<u>TRANSITIONS INTERBANDES</u>	p. 95
Introduction.....	p. 95
<u>IV.1.</u> Calcul des énergies $E_i(\vec{k})$	p. 97
IV.1.1. Equation d'onde des états stationnaires en représentation (\vec{k}, \vec{p}) , sans interaction spin-orbite.....	p. 97
IV.1.2. Avec interaction spin-orbite.....	p. 98
IV.1.3. Calcul des énergies $E_i(\vec{k})$	p. 101
<u>IV.2.</u> Mécanismes de transitions interbandes.....	p. 112
IV.2.1. Historique et introduction.....	p. 112
IV.2.2. Equation d'onde du système en présence d'un champ électromagnétique.....	p. 121
IV.2.2.1. Equation de Schrödinger dépendant du temps.....	p. 121
IV.2.2.2. Hamiltonien de perturbation.....	p. 122
IV.2.2.3. Eléments H_{ij} de la matrice optique.....	p. 123
IV.2.3. Probabilité de transitions directes entre deux bandes de valence i et j.....	p. 127
IV.2.4. Absorption et conductivité interbandes.....	p. 131
IV.2.4.1. Expression du flux d'énergie \bar{P}	p. 132
IV.2.4.2. Densité d'états $\rho(E_i - E_j)$	p. 133
IV.2.4.3. Absorption et conductivité interbandes.....	p. 136
IV.2.4.4. Résultats expérimentaux et interprétation.....	p. 148
IV.2.4.4.1. Etude à $T = 293^\circ \text{ K}$...	p. 148
IV.2.4.4.2. Etude en fonction de la température.....	p. 155
<u>IV.3.</u> Conclusion.....	p. 159
Bibliographie du chapitre IV.....	p. 163
<u>CONCLUSION</u>	p. 167

INTRODUCTION

Depuis quelques années, la tendance est à l'utilisation de dispositifs à semiconducteurs tels que sources de signaux, modulateurs, limiteurs, etc... fonctionnant à des fréquences très élevées, correspondant aux gammes millimétriques et submillimétriques.

L'un des semiconducteurs les plus couramment employé lors de la réalisation de ces dispositifs est le Silicium. L'intégration des composants étant de plus en plus poussée, de nombreux problèmes technologiques sont ainsi posés et si l'on veut dominer ces problèmes de réalisation de composants et d'appareillages fonctionnant en très haute fréquence, il est essentiel de parfaire la connaissance des divers mécanismes de transport de charges au sein du semiconducteur, lesquels sont liés bien évidemment à sa structure interne.

De nombreux travaux antérieurs, exploitant des mesures de mobilité de Hall [1] [2], de mobilité de conductivité [3 à 11], de résonance cyclotron [12], d'absorption ou de réflexion en gammes de fréquences optique et infrarouge proche [13 à 15], de propriétés diélectriques en gammes décimétrique et centimétrique [16 à 21] ont apporté de multiples renseignements sur la dynamique des porteurs de charge dans les semiconducteurs à structure diamant tels que le Germanium et le Silicium.

Par contre, il faut remarquer que peu de travaux, d'ailleurs très parcellaires, ont porté sur l'étude de la conductivité présentée par le Silicium homogène dans le domaine des ondes submillimétriques et de l'infrarouge lointain [22] [23].

Compte tenu de l'utilisation importante qui est faite de ce semiconducteur dans l'industrie de l'électronique rapide, ce fait semble paradoxal. Ce domaine de fréquences, d'un abord souvent difficile au point de vue expérimental, permet cependant d'obtenir de précieux renseignements sur

les propriétés volumiques du matériau et sur sa structure interne.

En particulier, le temps de relaxation des moments étant de l'ordre de 10^{-13} s dans le Silicium, on peut attendre de l'étude de la conductivité autour de 1500 GHz (fréquence correspondant à 10^{-13} s) qu'elle permette de décrire l'ensemble du domaine de relaxation de la vitesse des porteurs, ces derniers étant soumis dans le cristal à différentes sortes de collisions telles que collisions sur le réseau cristallin et sur impuretés ionisées. L'analyse des variations de la conductivité en infrarouge lointain doit permettre une détermination directe du temps de relaxation.

Pour ces raisons, une action exploratoire concernant le comportement du Silicium homogène en gammes millimétrique et infrarouge lointain a été entreprise au C.H.S. dès 1972 avec le soutien de la D.R.E.T. et en collaboration avec L.T.T..

Une étude systématique d'échantillons de Silicium homogène de types p et n (en fonction de la concentration en impuretés, du type d'impureté, de l'orientation cristallographique, de la température et de la fréquence) a été effectuée.

Les valeurs de la conductivité sont obtenues par l'intermédiaire de mesures de transmission, effectuées dans une gamme de fréquences très étendue, allant de 70 GHz ($\lambda = 4$ mm ou 2.5 cm $^{-1}$) à plus de 7500 GHz ($\lambda = 25$ μ m ou 400 cm $^{-1}$), en utilisant un procédé nouveau basé sur l'utilisation conjointe des relations de Kramers-Krönig et d'une méthode de calcul par itérations.

Nous avons ainsi mis au point une méthode originale de détermination directe du temps de relaxation τ_m , sans connaissance préalable de la concentration en porteurs libres et de leur masse effective, et ceci en fonction de la température [24].

Dans le cas du Silicium de type p, nous avons mis en évidence pour la première fois l'existence de transitions de porteurs entre les différentes bandes de valence [25]. Il nous a donc paru intéressant d'étudier plus en détails ce phénomène, afin d'essayer d'apporter des renseignements supplémentaires sur la structure de la bande de valence du Silicium, en particulier de préciser les valeurs des paramètres de bande L, M, N et de l'énergie spin-orbite Δ [26].

L'ensemble des résultats expérimentaux obtenus nous montre en effet que si les phénomènes de relaxation des porteurs libres, qui traduisent le retour à l'équilibre du système de porteurs sous l'effet de collisions (sur phonons acoustiques, sur phonons optiques et sur impuretés ionisées), décrivent correctement l'évolution fréquentielle de la conductivité présentée par le Silicium de type n dans tout le domaine de fréquences envisagé [24] [27], il n'en est pas de même pour un semiconducteur de type p [25 à 27].

Pour ce type de semiconducteur, on note qu'au delà de 3000 GHz ($\lambda = 100 \mu\text{m}$ ou 100cm^{-1}), une importante conductivité excédentaire apparaît, qui ne peut plus être expliquée par les mécanismes de collisions [25] [26]. Si on calcule l'énergie des porteurs qui sont alors mis en jeu, il apparaît que celle-ci est de l'ordre de grandeur de l'écart d'énergie entre les différentes bandes de valence, et on peut faire l'hypothèse que la conductivité excédentaire observée est due à des transitions de porteurs entre les différentes bandes d'énergie. De telles transitions ont déjà été observées partiellement dans le cas du Germanium [28] [29] ; pour ce semiconducteur, elles se situent dans le domaine de l'infrarouge proche.

Dans une première partie, après avoir exposé les méthodes de réalisation des échantillons de Silicium en volume, nous établirons les relations entre la grandeur mesurée (coefficient de transmission en puissance du matériau) et la conductivité et nous exposerons la méthode de dépouillement des spectres expérimentaux. Nous décrirons également les dispositifs de mesure mis en jeu dans toute la gamme de fréquences qui nous intéresse (millimétrique et infrarouge lointain : $\lambda = 4 \text{mm}$ à $25 \mu\text{m}$ ou $\nu = 2.5 \text{cm}^{-1}$ à 400cm^{-1}).

Dans la seconde partie, nous présenterons les résultats expérimentaux et nous montrerons comment leur analyse nous a permis de mettre en évidence les deux types de phénomènes précédemment évoqués : la relaxation des porteurs libres (Silicium de type n et p) et des mécanismes de transitions de porteurs entre bandes de valence (Silicium de type p). Ce sont ces deux mécanismes que nous allons tenter d'expliquer et d'interpréter.

La troisième partie de ce travail traitera des phénomènes de relaxation des porteurs libres qui ont lieu dans le Silicium de type n et de type p. Nous montrerons comment les spectres expérimentaux caractérisant les variations de la conductivité en fonction de la fréquence permettent de déterminer directement le temps moyen de relaxation des moments, sans connaissance préalable de la concentration en porteurs libres et de leur masse effective. Ce temps de relaxation sera comparé aux valeurs théoriques obtenues en tenant compte des collisions sur phonons acoustiques, sur phonons optiques et sur impuretés ionisées, et nous donnerons une évaluation des différentes constantes de couplage électrons-phonons.

La quatrième partie sera consacrée à l'étude des mécanismes de transitions interbandes que nous avons mis en évidence dans le Silicium de type p. Nous calculerons tout d'abord les énergies de chacune des bandes de valence (états stationnaires) en fonction du vecteur d'onde $\vec{k}(\theta, \phi, k)$ afin de montrer leur caractère fortement anisotrope. Ensuite, le semiconducteur étant irradié par un champ électromagnétique, nous calculerons les probabilités de transitions interbandes, les absorptions et les conductivités qui en résultent, pour toutes les valeurs de $\vec{k}(\theta, \phi, k)$. Nous exprimerons la conductivité totale théorique, résultant des mécanismes de relaxation (chapitre III) et de transitions interbandes. Ces valeurs théoriques, calculées en fonction de la température et de la fréquence, seront comparées aux valeurs expérimentales et nous discuterons nos résultats. Nous montrerons comment l'analyse des spectres expérimentaux permet d'évaluer l'énergie spin-orbite Δ et de donner une meilleure approximation des paramètres de bande L, M, N.

BIBLIOGRAPHIE

INTRODUCTION

- [1] W.E. KRAG
Phys. Rev. 118, 435 (1960)

- [2] B.L. BOICHENKO and V.M. VASETSKII
Sov. Phys. Solid State 7, 1361 (1966)

- [3] F.J. MORIN and J.P. MAITA
Phys. Rev. 96, 28 (1955)

- [4] M. PRINCE
Phys. Rev. 93, 1204 (1954)

- [5] G.W. LUDWIG and R.L. WATTERS
Phys. Rev. 101, 1699 (1956)

- [6] P. NORTON, T. BRAGGINS and H. LEVISTEIN
Phys. Rev. B 8, 5632 (1973)

- [7] R.A. LOGAN and A.J. PETERS
J. Appl. Phys. 31, 122 (1960)

- [8] D.C. CRONMEYER
Phys. Rev. 105, 522 (1957)

- [9] E.H. PUTLEY and W.H. MITCHELL
Proc. Phys. Soc. A 72, 193 (1958)

- [10] D. LONG and J. MYERS
Phys. Rev. 115, 1119 (1959)

- [11] D. LONG
Phys. Rev. 120, 2024 (1960)

- [12] G. DRESSELHAUS, A.F. KIP and C. KITTEL
Phys. Rev. 98, 368 (1955)

- [13] W.G. SPITZER and H.Y. FAN
Phys. Rev. 106, 882 (1957)

- [14] A.A. KUKHARSKII and V.K. SUBASHIEV
Sov. Phys. Semic 4, 235 (1970)

- [15] G. NAVASCUES and F. FLORES
Solid St. Com. 9, 1267 (1971)

- [16] S. BENEDICT and W. SHOCKLEY
Phys. Rev. 89, 1152 (1953)

- [17] J.D HOLM and K.S. CHAMPLIN
J. Appl. Phys. 39, 275 (1968)

- [18] H. KOBAYASHI, T. KOBAYASHI and K. FUJISAWA
J. Phys. Soc. Japan 28, 799 (1970)

- [19] M.E. BRODWIN and W. SHOCKLEY
Phys. Rev. 89, 1152 (1953)

- [20] R.E. BICHARA and J.P. POITEVIN
IEEE Trans. Instr. Meas. IM 13, 323 (1964)

- [21] G.P. SRIVASTAVA and A.K. JAIN
Rev. of. Sci. Instr. 42, 1793 (1971)

- [22] S. WALLEES
Arkiv for Fysik 25, 33 (1963)

- [23] SHAGANOV, KISLOVSKI and RUDYAVSKAYA
Optics and Spectr. (USA) 18, 174 (1965)

- [24] M. VINDEVOGHEL, J. VINDEVOGHEL and Y. LEROY
Infrared Phys. 15, 161 (1975)

- [25] J. VINDEVOGHEL, M. VINDEVOGHEL and Y. LEROY
Infrared Phys. 18, 99 (1978)

- [26] J. VINDEVOGHEL and M. VINDEVOGHEL
Phys. Stat. Sol(b) 96, 717, (1979)

- [27] M. VINDEVOGHEL
Thèse 3e cycle Lille (1973)

- [28] W. KAISER et al
Phys. Rev. 91, 1380 (1953)

- [29] R. NEWMANN and W.N. TYLER
Phys. Rev. 105, 885 (1957)

CHAPITRE I

METHODES DE MESURES - APPAREILLAGES

Les échantillons de Silicium faisant l'objet de cette étude ont été réalisés et mis à notre disposition par la Société L.T.T., dans le cadre d'un contrat D.R.E.T. commun au C.H.S. et à L.T.T..

Les monocristaux de Silicium ont été obtenus par tirage CZOCHRALSKI à partir de polycristal WACKER de très haute pureté, fondu dans un creuset de quartz [1]. Différents dopants ont été utilisés :

- Arsenic, Antimoine, Phosphore, pour réaliser des monocristaux de type n
- Bore pour réaliser des monocristaux de type p

La résistivité des monocristaux s'étage de $8 \text{ m}\Omega.\text{cm}$ à plus de $100\Omega.\text{cm}$; leur orientation a été effectuée suivant les axes [100], [110] ou [111].

Les échantillons issus des différents lingots de Silicium de type n ou p se présentent soit sous la forme de disques de diamètre 19 ou 30 mm dont les épaisseurs sont comprises entre $100 \mu\text{m}$ et $2000 \mu\text{m}$, pour les mesures en infrarouge lointain et en submillimétrique, soit sous la forme de parallélépipèdes pour les mesures en continu.

Un polissage mécano-chimique à base de LUSTROX (suspension d'oxyde de Zirconium dans une solution fortement basique) donne un poli optique aux échantillons destinés aux mesures en gammes infrarouge lointain et submillimétrique.

Les échantillons réalisés par L.T.T. (454 échantillons destinés aux mesures en infrarouge lointain et en submillimétrique) correspondent à quarante

et un types différents de monocristaux de Silicium, tant de type n que de type p.

Chaque échantillon possède une fiche technique caractérisant :

- le type du monocristal (n ou p) et le dopant
- le taux de dislocations
- la résistivité statique au centre et au bord : chaque disque est mesuré par la méthode des quatre pointes [2].

La conductivité en fonction de la fréquence ν - ou, plus précisément de la pulsation ω correspondante - $\sigma^*(\omega) = \sigma'(\omega) + i\sigma''(\omega)$ est déterminée à partir du coefficient d'absorption en puissance $\alpha(\omega)$ présenté par le semiconducteur, lui-même déduit de la mesure du coefficient de transmission $T_r(\omega)$ du matériau. Cette étude est effectuée en fonction de la température (de + 25°C à -100°C) pour des fréquences comprises entre 2.5 et 400 cm^{-1} (longueurs d'ondes comprises entre 4 mm et 25 μm).

I.1. COEFFICIENT DE TRANSMISSION

Les échantillons de Silicium qui sont étudiés dans ce travail ont des concentrations en impuretés comprises entre $10^{14}/\text{cm}^3$ et $10^{16}/\text{cm}^3$.

Ils se présentent sous forme de disques de diamètre 19 ou 30 mm, et se comportent comme des lames à faces parallèles, polies optiquement, dont l'épaisseur est h.

Du fait des réflexions multiples du signal de fréquence ν à l'intérieur de la lame semiconductrice d'épaisseur h, le coefficient de transmission en puissance T_r s'écrit :

$$T_r = \frac{(1 - R)^2 \exp(-\alpha h)}{1 - 2R \cos \frac{4\pi n h}{\lambda} \exp(-\alpha h) + R^2 \exp(-2\alpha h)} \quad (\text{I.1})$$

où R est le coefficient de réflexion en puissance du signal sur la face d'entrée du dioptre air-Si.

R est relié à l'indice complexe du matériau $n^* = n - i.k$ par la relation :

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

Remarquons que n et k dépendent de la fréquence dans le cas de matériaux présentant de fortes concentrations en impuretés, alors que si cette dernière est faible

$$n = \sqrt{\epsilon_{\text{Réseau}}} = \text{cte et } k = 0$$

L'examen de la relation (I.1) montre que, dans le cas général, la courbe $T_r(\omega)$ va présenter une série de maxima et de minima ; on observera donc des franges d'interférences dont les enveloppes sont données par :

$$T_{r.\text{Max}}(\omega) = \frac{(1 - R)^2 \exp(-\alpha h)}{[1 - R \exp(-\alpha h)]^2} \tag{I.2}$$

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

Lorsque les franges d'interférences sont très importantes ($T_{r\text{Max}}$ très différent de $T_{r\text{min}}$) il est évident que la mesure de $T_r(\omega)$ ne permettra qu'une détermination très imprécise de $\alpha(\omega)$ et donc de $\sigma^*(\omega)$. En effet, il suffit d'une très faible variation de l'indice de réfraction $n(\omega)$ pour entraîner une variation très importante du terme en $\cos \frac{4\pi n h}{\lambda}$.

De façon à s'affranchir de cet inconvénient, nous avons été amenés à choisir des conditions expérimentales (épaisseur de l'échantillon, résolution de l'appareillage de mesures) telles que l'amplitude des franges observées expérimentalement soit minimale.

Deux cas sont à envisager :

1°) - les absorptions α sont telles que $\alpha h \gg 1$

Dans ce cas, les réflexions multiples dans la lame semiconductrice peuvent être négligées ; seule subsiste la réflexion sur la face d'entrée et :

$$T_r \neq (1 - R)^2 \exp(-\alpha h) \tag{I.3}$$

Le coefficient d'absorption en puissance $\alpha(\omega)$ s'exprime alors comme :

$$\alpha(\omega) = \frac{1}{h} \text{Ln} \frac{(1 - R)^2}{T_r} \quad (\text{I.4})$$

2°) - La résolution en fréquence de l'appareillage de mesures est faible.

Dans ce cas nous ne mesurons pas $T_r(\omega)$ mais une valeur

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

où $\Delta\omega$ caractérise la résolution de l'appareillage.

Si on se place dans des conditions de mesures telles que $\Delta\omega$ soit très largement supérieur à la périodicité des franges d'interférences et donc si on utilise des échantillons suffisamment épais, le coefficient de transmission expérimental sera pratiquement égal au coefficient de transmission théorique donné par l'équation (I.1), intégré sur une période des franges d'interférences :

$$T_r \exp \neq T_r = \frac{(1 - R)^2 \exp(-\alpha h)}{1 - R^2 \exp(-2\alpha h)} \quad (\text{I.5})$$

Le coefficient d'absorption s'exprime alors suivant la relation :

$$\alpha(\omega) = \frac{1}{h} \text{Ln} \frac{(1 - R)^2 + [(1 - R)^4 + 4R^2 T_r^2]^{1/2}}{2 T_r} \quad (\text{I.6})$$

Remarquons que (I.5) revient à (I.3) si $\alpha h \gg 1$. En conséquence (I.5) peut être appliquée aussi bien dans les cas 1°) et 2°).

I.2. CONDUCTIVITÉ PRÉSENTÉE PAR LE SEMICONDUCTEUR

I.2.1. EXPRESSION DE $\sigma^*(\omega)$

Lorsque le semiconducteur est soumis à l'action d'un champ électromagnétique dont le champ électrique $\vec{\mathcal{E}}$ est sinusoïdal de pulsation ω :

$$\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_0 \exp(i\omega t)$$

ou les relations équivalentes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon'_T = \varepsilon_{\text{Réseau}} + \frac{\sigma''(\omega)}{\omega \varepsilon_0} = n^2(\omega) - k^2(\omega) \\ \varepsilon''_T = \frac{\sigma'(\omega)}{\omega \varepsilon_0} = 2 n(\omega) \cdot k(\omega) \end{array} \right. \quad (\text{I.10})$$

L'intégration des équations de Maxwell pour un matériau non magnétique montre en outre que la constante de propagation d'une onde plane T.E.M. est donnée par :

$$\gamma = \sqrt{j\omega\mu \sigma^*_T} = \alpha_t + i\beta \quad (\text{I.11})$$

où α_t est le coefficient d'atténuation en tension, et où β est la constante de phase = $\frac{n \cdot \omega}{c}$

A partir de (I.11), on obtient ainsi :

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_t^2 - \beta^2 = -\omega\mu\sigma''_T \\ 2\alpha_t \cdot \beta = \omega\mu \sigma'_T \end{array} \right.$$

et en remarquant que $\sigma'_T = \sigma'(\omega)$ nous avons immédiatement la relation :

$$2\alpha_t = \frac{c}{n} \mu \sigma'(\omega)$$

Comme $\varepsilon_0 \mu \neq \varepsilon_0 \mu_0 = \frac{1}{c^2}$ cette relation se met sous la forme :

$$\sigma'(\omega) = \varepsilon_0 \cdot n \cdot c \cdot \alpha(\omega) \quad (\text{I.12})$$

où $\alpha(\omega) = 2\alpha_t(\omega)$ est le coefficient d'atténuation en puissance présenté par le matériau.

La partie imaginaire $\sigma''(\omega)$ est obtenue à partir de (I.9) :

$$\sigma''(\omega) = \omega \epsilon_0 [n^2(\omega) - k^2(\omega) - \epsilon_{\text{Réseau}}]$$

I.2.2. DETERMINATION DE LA CONDUCTIVITE

Même dans les deux cas simplifiés correspondant aux relations (I.3) et (I.5), il ne nous est pas possible d'obtenir directement à partir d'un seul paramètre $T_r(\omega)$ les deux grandeurs caractéristiques du matériau $n(\omega)$ et $k(\omega)$, ou, ce qui revient au même $\sigma'(\omega)$ et $\sigma''(\omega)$.

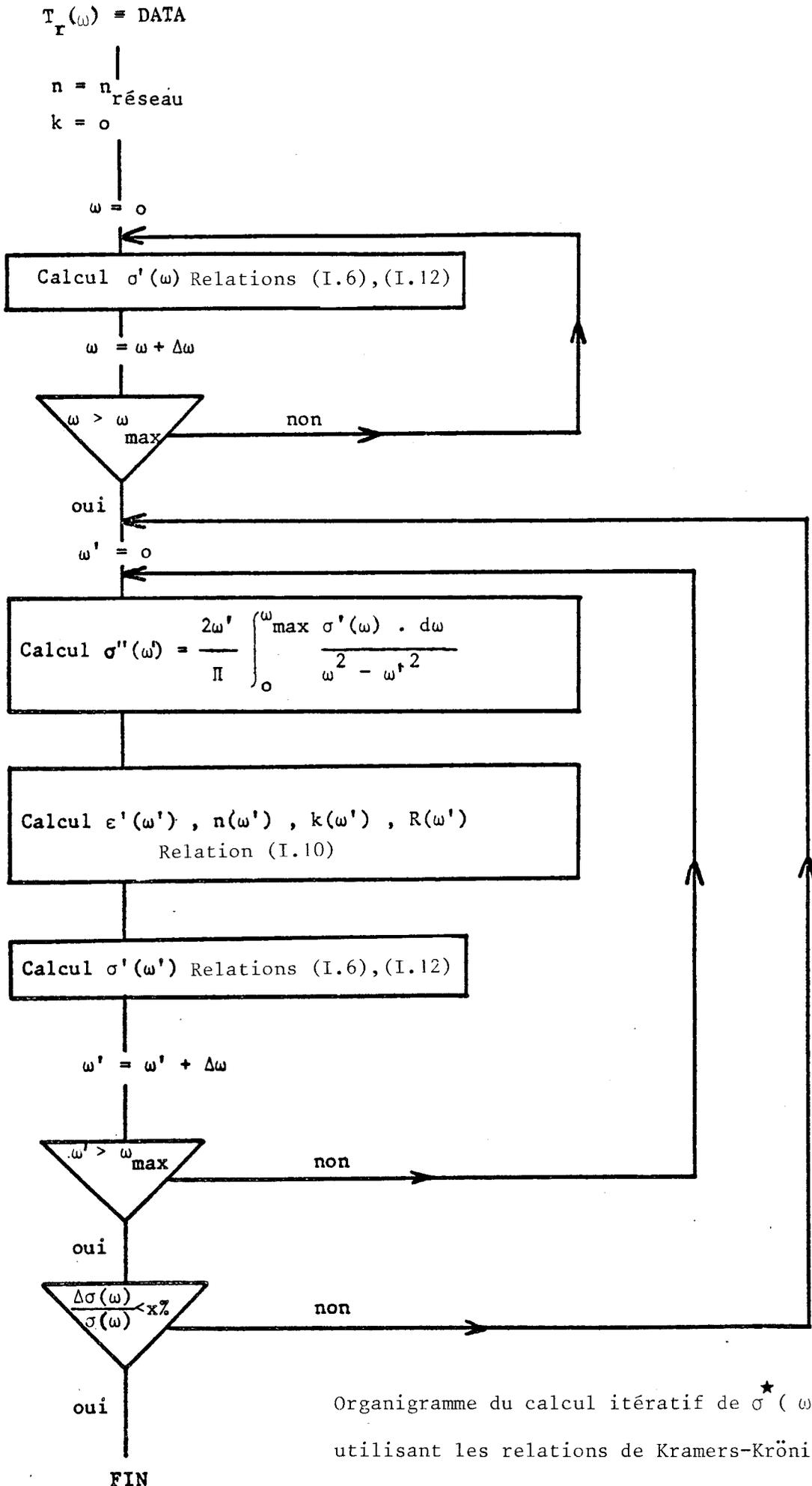
Nous avons donc exploité le fait que nos mesures de transmissions sont effectuées à très large bande de fréquences : il nous est possible d'utiliser les relations de KRAMERS-KRONIG [3] pour calculer $\sigma''(\omega)$ connaissant $\sigma'(\omega)$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma'(-\omega) = \sigma'(\omega) \\ \sigma''(\omega) = \frac{2\omega}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\sigma'(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \end{array} \right. \quad (\text{I.13})$$

Il apparait donc possible de concevoir un procédé de calcul itératif, qui va nous permettre de déterminer le spectre exact $\sigma'(\omega)$ tenant compte des variations fréquentielles de n , k , et du coefficient de réflexion R .

Le principe en est le suivant : dans un premier temps nous supposons que $n(\omega) = n_{\text{Réseau}} = \sqrt{\epsilon_{\text{Réseau}}} = \text{cte}$ et que $k(\omega) = 0$ (ceci est vrai lorsque l'absorption par porteurs libres est très faible, c'est-à-dire dans le cas où le matériau présente une concentration en impuretés très faible). Ces valeurs, injectées dans (I.6) nous fournissent un premier spectre approché $\sigma'(\omega)$.

Par utilisation de (I.13) nous obtenons alors également un premier spectre approché de $\sigma''(\omega)$ et donc une première estimation de $n(\omega)$, $k(\omega)$ et $R(\omega)$.



Organigramme du calcul itératif de $\sigma^*(\omega)$ utilisant les relations de Kramers-Krönig

Ces nouvelles valeurs de n , k , R sont alors réinjectées dans (I.6) de façon à obtenir une meilleure estimation de $\sigma'(\omega)$ puis ensuite de $\sigma''(\omega)$.

L'itération est poursuivie jusqu'à la convergence des résultats à la précision voulue ; la valeur exacte de $\sigma'(\omega)$ est ainsi obtenue.

L'organigramme de calcul utilisé [4] est donné page 16. En pratique, le nombre d'itérations nécessaires est de 3 à 4.

I.3. DISPOSITIFS DE MESURES

Les mesures du coefficient de transmission des divers échantillons semiconducteurs ont été effectuées en gamme millimétrique ($\lambda = 4$ mm, 2 mm, et 1 mm) et en infrarouge lointain (I.R.L.) ($\lambda = 600$ μm à 25 μm).

Les échantillons de Silicium à mesurer se présentent sous la forme de disques de diamètre égal à 19 ou 30 mm et dont les épaisseurs sont comprises entre 100 μm et 2000 μm . Ces lames à faces parallèles sont polies optiquement.

Lors d'une série de mesures, nous utiliserons toujours des échantillons de Silicium provenant du même cristal ; l'épaisseur sera choisie en fonction de la gamme de fréquences envisagée. Par ailleurs, l'exploitation de nos résultats de mesures nécessite la connaissance de la conductivité statique σ_0 en fonction de la température.

Nous décrivons dans cette partie les différents moyens mis en jeu.

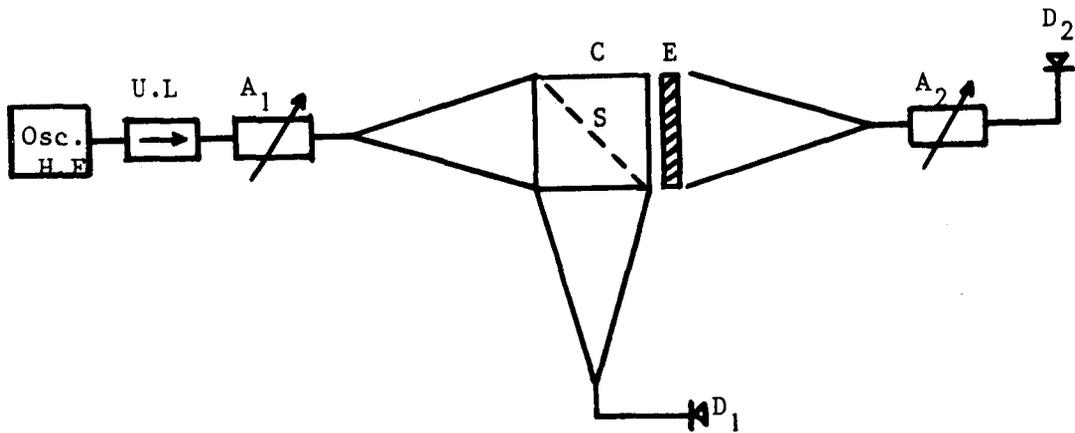
I.3.1. GAMME MILLIMETRIQUE

Les mesures sont effectuées à des longueurs d'ondes de :

- 4.4 mm : carcinotron CSF COE40B et klystron Philips YK 1010
- 2 mm : klystron Varian VRT 2123 A
- 1 mm : carcinotron CSF CO 10

De manière à nous affranchir des problèmes de contacts entre guides d'ondes et matériau semiconducteur, nous opérons dans tous les cas en propagation libre en utilisant des guides circulaires surdimensionnés.

Le schéma synoptique de ces différents bancs de mesures est donné figure I.1.



- A_1 et A_2 : atténuateurs étalonnés
- D_1 et D_2 : détecteurs

détecteurs accordables pour $\lambda = 4.4$ et 2 mm
cellules de Golay pour $\lambda = 1$ mm
- C : coupleur
- S : séparatrice
- E : cellule porte-échantillon ou éventuellement dispositif à température variable ; la cellule est alors stabilisée en température à $\pm 1^\circ$ de $+25^\circ$ à -100°C

Figure I.1.

Le coupleur C et le détecteur D_1 permettent un contrôle permanent du niveau de l'onde E.M et donc de la stabilité en puissance de l'oscillateur. Ce contrôle est particulièrement nécessaire lors des mesures à température variable ($+25^\circ\text{C}$ à -100°C). Ces dernières sont effectuées de façon relative, en comparant le niveau détecté en D_2 en fonction de la température au niveau détecté au même point à la température ambiante. Nous obtenons ainsi une bien meilleure précision sur la valeur de la transmission, le matériau devenant très absorbant à ces fréquences quand la température diminue.

L'atténuateur A_2 est un atténuateur étalonné de précision, il sert à mesurer l'atténuation présentée par le matériau et permet de s'affranchir des erreurs liées au système de détection, en travaillant à niveau détecté constant.

I.3.2. GAMME I.R.L.

Nous utilisons un spectromètre à réseaux Cameca SI 36 B qui permet de couvrir les longueurs d'ondes comprises entre $600 \mu\text{m}$ et $45 \mu\text{m}$.

La source (lampe à vapeur de mercure) est associée à un monochromateur constitué de différents filtres, réseaux et diaphragmes. La résolution en fréquence de l'appareillage dépend de la dimension des diaphragmes utilisés et peut varier de 5 cm^{-1} vers 250 cm^{-1} ($\lambda = 40 \mu\text{m}$) à 0.7 cm^{-1} vers 15 cm^{-1} ($\lambda = 660 \mu\text{m}$). Le signal transmis est détecté par une cellule de Golay puis amplifié.

Aux longueurs d'ondes comprises entre $50 \mu\text{m}$ (200 cm^{-1}) et $25 \mu\text{m}$ (400 cm^{-1}) nous avons utilisé un spectromètre Perkin Elmer type 457 à double faisceau.

Par ailleurs, un laser I.R.L. guidé, optiquement pompé [5] a été utilisé à deux longueurs d'ondes particulières : $118.8 \mu\text{m}$ (84 cm^{-1}) et $393.6 \mu\text{m}$ (25 cm^{-1}). Ce banc de mesures réalisé au laboratoire est représenté figure I.2..

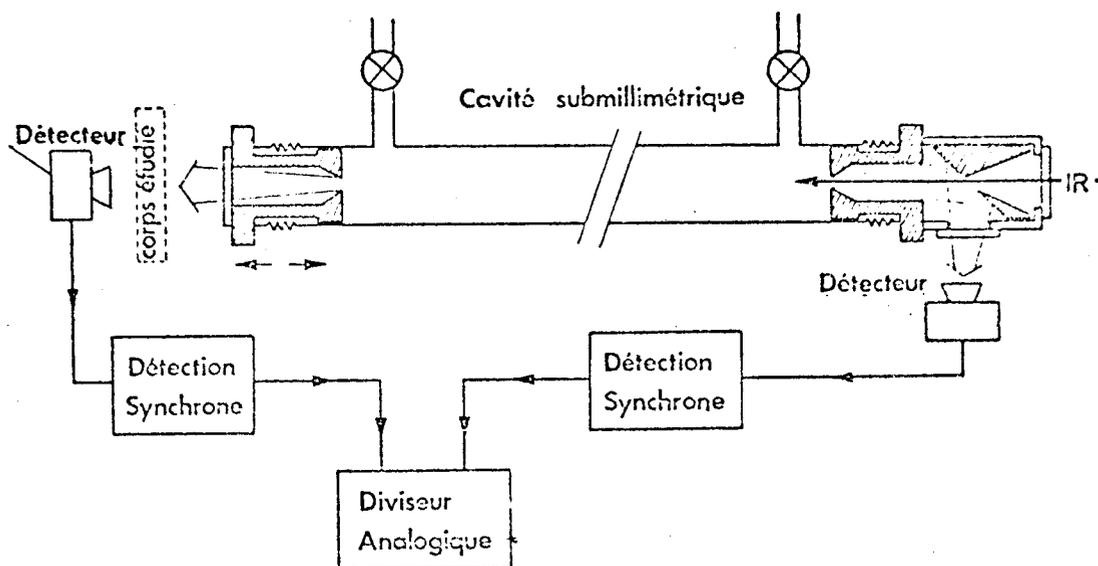


Figure I.2.

L'utilisation d'un diviseur analogique associé à deux détections synchrones a permis de s'affranchir des problèmes de stabilité du niveau de sortie de la source I.R.L. : à tout instant on mesure simultanément la puissance incidente sur l'échantillon et la puissance transmise [5].

Lors des mesures à température variable, les échantillons à mesurer sont placés dans un cryostat ; la régulation en température est assurée à $\pm 1^\circ\text{C}$.

Dans cette gamme de fréquences (I.R.L) et pour chaque fréquence que nous nous imposons, nous effectuons indifféremment :

- soit une mesure directe du coefficient de transmission T_r en fonction de la température,
- soit une mesure relative $\Delta T_r = T_r(T)/T_r(293^\circ\text{K})$, variation du coefficient de transmission à une température donnée T par rapport à sa valeur à température ambiante.

En effet, en gamme I.R.L le matériau est relativement transparent.

I.3.3. MESURES DE LA CONDUCTIVITE STATIQUE

La conductivité statique σ_0 du matériau doit également être mesurée en fonction de la température, de $+25^\circ\text{C}$ à -100°C .

A température ambiante σ_0 est mesurée classiquement par la méthode des quatre pointes [2]. La valeur de σ_0 en fonction de la température est, quant à elle, déterminée de deux façons.

La première méthode que nous avons utilisée consiste à mesurer la variation relative de σ_0 par rapport à sa valeur à la température ambiante, en utilisant un échantillon parallélépipédique du semiconducteur, issu du même cristal que les lames à faces parallèles utilisées lors des mesures hyperfréquences, et muni à ses extrémités de contacts ohmiques.

Cependant, il n'est pas toujours aisé de réaliser de tels contacts (en particulier lorsque le semiconducteur présente une faible concentration en impuretés) et en outre ces derniers doivent rester parfaits même à basse température.

Afin de vérifier les valeurs de $\sigma_0(T)$ obtenues par cette méthode - et donc de tester indirectement la qualité des contacts réalisés - nous avons utilisé conjointement aux mesures précédentes une méthode de mesure basée sur le fait qu'aux grandes longueurs d'ondes ($\lambda = 4.4$ mm) la conductivité hyperfréquence était très voisine de la conductivité statique (comme le montreront les courbes de conductivité expérimentales au chapitre II).

En effet, à cette longueur d'onde de 4.4 mm, le produit $\omega\tau_m \neq 0.15$ à 100°K (τ_m est le temps de relaxation des moments, comme nous le verrons par la suite). Nous montrerons au chapitre III que la conductivité hyperfréquence est de la forme

$$\frac{\sigma_0}{\langle 1 + \omega^2 \tau_m^2 \rangle}$$

dans ces conditions, l'erreur commise en approximant $\sigma_0(T)$ par $\sigma(4.4 \text{ mm}, T)$ sera inférieure à 2.5% entre 100°K et 300°K. De plus à $\lambda = 4.4$ mm nous utilisons des guides surdimensionnés et de ce fait tous les problèmes de contacts sont éliminés, comme nous l'avons mentionné précédemment (I.3.1.).

BIBLIOGRAPHIE

CHAPITRE I

- [1] E. CONSTANT (C.H.S.) - CHIRON (L.T.T.)
Rapport semestriel de contrat DRME 70/662 - 70 34 618 00 480 75 01
Juillet 1972
- [2] H.F. WOLF
Silicon semiconductor data, Pergamon Press (1969)
- [3] H.A. KRAMERS
Atti Congresso Intern. Fis 5, 544 (1927)
R. de L. KRONIG
J. opt. Soc. Am., 12, 47 (1926)
- [4] M. VINDEVOGHEL
Thèse 3ème cycle, Lille (1973)
- [5] J. DEPRET
Thèse Dr Ingénieur, Lille (1979)

CHAPITRE II

RESULTATS EXPERIMENTAUX

Nos études expérimentales ont été effectuées sur de très nombreux échantillons de n-Si et de p-Si, issus de monocristaux dont les résistivités statiques à 293°K, mesurées par la méthode des quatre pointes, sont comprises entre :

- 5 m Ω ·cm et 160 Ω ·cm pour le n-Si
- 10 m Ω ·cm et 220 Ω ·cm pour le p-Si

Comme le montrent les tableaux II.1 et II.2, qui regroupent les caractéristiques des monocristaux de type n et de type p, différents types d'impuretés (Arsenic, Antimoine et Phosphore pour le n-Si ; Bore pour le p-Si) ont été utilisés et l'orientation des monocristaux a été réalisée suivant l'un des trois axes cristallographiques [110], [100] ou [111].

Dans ces tableaux nous indiquons pour chaque monocristal, repéré par un numéro de code, le diamètre du lingot d'où seront issus les multiples échantillons ainsi que les variations de la résistivité statique le long du lingot.

Chaque échantillon est ensuite repéré par une fiche individuelle indiquant :

- le numéro de code du monocristal

3113
ULLF

	n.Arsenic			n.Antimoine			n.Phosphore		
	[110]	[100]	[111]	[110]	[100]	[111]	[110]	[100]	[111]
8 m ² -cm 8 x 10 ¹⁴ /cm ³				3060 ∅ 30 mm 5<<<15 mDcm	3054 ∅ 32 mm 5<<<15 mDcm	2652 ∅ 32 mm 5<<<15 mDcm			2055 ∅ 30 mm 4,5<<<10 mDcm
									204 A ∅ 19 mm 5<<<100 mDcm
70 mDcm									2051 ∅ 30 mm 70<<<90 mDcm
1,5 x 10 ¹⁷ /cm ³									
0,7 Dcm									
8 x 10 ¹³ /cm ³									
7 Dcm 7 x 10 ¹⁶ /cm ³									
70 Dcm									
8 x 10 ¹³ /cm ³									

Tableau II.1. : Monocristaux de type n.

	p-Bore		
	[110]	[100]	[111]
$15 \text{ m}\Omega\text{cm}$ $8 \times 10^{18}/\text{cm}^3$	3078 ϕ 30 mm $12 < \rho < 18 \text{ m}\Omega\text{cm}$	3079 ϕ 30 mm $12 < \rho < 18 \text{ m}\Omega\text{cm}$	2787 ϕ 19 mm $10 < \rho < 16 \text{ m}\Omega\text{cm}$
$250 \text{ m}\Omega\text{cm}$ $1.5 \times 10^{17}/\text{cm}^3$	2765 ϕ 30 mm $240 < \rho < 420 \text{ m}\Omega\text{cm}$	3076 ϕ 30 mm $220 < \rho < 280 \text{ m}\Omega\text{cm}$	3014 ϕ 25 mm $180 < \rho < 250 \text{ m}\Omega\text{cm}$
$1.9 \Omega\text{cm}$ $8 \times 10^{15}/\text{cm}^3$	2734 ϕ 30 mm $2.2 < \rho < 3 \Omega\text{cm}$	3038 ϕ 30 mm $1.4 < \rho < 2.7 \Omega\text{cm}$	3037 ϕ 19 mm $1.9 < \rho < 2.7 \Omega\text{cm}$
	2764 ϕ 30 mm $1.7 < \rho < 2.5 \Omega\text{cm}$		3086 ϕ 19 mm $0.9 < \rho < 1.6 \Omega\text{cm}$
$20 \Omega\text{cm}$ $7 \times 10^{14}/\text{cm}^3$	3032 ϕ 30 mm $8 < \rho < 15 \Omega\text{cm}$	3072 ϕ 30 mm $18 < \rho < 25 \Omega\text{cm}$	3071 ϕ 30 mm $17 < \rho < 23 \Omega\text{cm}$
$180 \Omega\text{cm}$ $8 \times 10^{13}/\text{cm}^3$		1301 ϕ 19 mm $110 < \rho < 220 \Omega\text{cm}$	2541 ϕ 28 mm $70 < \rho < 130 \Omega\text{cm}$
		1121 ϕ 19 mm $65 < \rho < 130 \Omega\text{cm}$	3021 ϕ 19 mm $90 < \rho < 110 \Omega\text{cm}$

Tableau II.2. : Monocristaux de type p.



- le type d'impuretés et le type du semiconducteur ;
- l'orientation cristallographique de l'échantillon ;
- le numéro d'ordre de l'échantillon, repérant sa position dans le lingot ;
- le diamètre de l'échantillon ;
- l'épaisseur de l'échantillon ;
- la résistivité statique de l'échantillon, mesurée au centre et au bord du disque.

Nous avons plus particulièrement exploité quantitativement les résultats de mesures relatifs à des monocristaux de Silicium de type n ou p dont la concentration en impuretés (à la température ambiante) est comprise entre $10^{14}/\text{cm}^3$ et $10^{16}/\text{cm}^3$. De telles concentrations, correspondant à des valeurs de résistivités statiques comprises entre environ $50 \Omega \cdot \text{cm}$ et $5 \Omega \cdot \text{cm}$ pour le n-Si et entre $100 \Omega \cdot \text{cm}$ et $1 \Omega \cdot \text{cm}$ pour le p-Si sont en effet fréquemment utilisées lors de la réalisation des dispositifs hyperfréquences à semi-conducteurs.

Les caractéristiques essentielles des monocristaux qui ont fait l'objet d'une étude quantitative approfondie sont résumées dans le tableau II.3.

Les épaisseurs des échantillons sont choisies de façon à se trouver dans des conditions expérimentales telles que l'équation (I.5.) soit utilisable, tout en assurant une transmission suffisamment importante pour qu'elle puisse être mesurée avec précision.

Le coefficient d'absorption variant de façon importante avec la fréquence, nous sommes amenés à utiliser des échantillons d'épaisseurs différentes (mais de caractéristiques statiques identiques) pour déterminer les spectres d'absorption ou de conductivité sur tout le domaine de fréquences envisagé.

Monocristal	ρ_0 (Ωcm) à 293° K	σ_0 (Ωm) ⁻¹ à 293° K	Orientation cristallographique	Epaisseur h des échantillons
2560 ou n° 1	1.25	80	[111]	600 et 200 μm
2643 ou n° 2	1.25	80	[100]	600 et 175 μm
727A ou n° 3	1	100	[110]	800 et 600 μm
721A ou n° 4	9	11	[100]	2000 μm
3037 ou n° 5	2	50	[111]	1200 et 300 μm
3038 ou n° 6	2	50	[100]	"
2734 ou n° 7	2	50	[110]	"
3071 ou n° 8	30	3.33	[111]	2000 μm
<p>- Les monocristaux 1 à 4 sont de type n, dopés au Phosphore ;</p> <p>- Les monocristaux 5 à 8 sont de type p, dopés au Bore.</p>				

Tableau II.3.



A titre d'exemple, l'échantillon d'épaisseur 300 μm du monocristal n° 5 est utilisé lors des mesures en gamme millimétrique ($\lambda = 4.4 \text{ mm}$ ou 2.2 cm^{-1} , 2 mm ou 5 cm^{-1} , 1 mm ou 10 cm^{-1}) où l'absorption donc la conductivité sont élevées, alors que celui d'épaisseur 1 200 μm est employé en gamme infrarouge lointain où l'absorption devient plus faible.

II.1. COEFFICIENT DE TRANSMISSION

Nous présentons sur les figures qui suivent quelques résultats typiques relatifs à l'évolution du coefficient de transmission T_T en fonction de la fréquence ν (exprimée en cm^{-1}) et de la température T .

Les figures II.1 et II.2, relatives à des échantillons de type n dont les conductivités statiques sont très différentes ($80(\Omega\text{m})^{-1}$ et $11(\Omega\text{m})^{-1}$), montrent que le coefficient de transmission varie très fortement avec la température, sur tout le domaine de fréquences envisagé.

Nous remarquons par ailleurs qu'aux fréquences basses, le coefficient de transmission devient très faible ; il sera donc difficile de le déterminer avec précision par mesure directe à toutes les températures.

Pour cette raison, aux fréquences inférieures à 10 cm^{-1} , nous avons préféré mesurer le pourcentage de transmission par rapport à la transmission à la température ambiante.

Ces résultats sont illustrés par les figures II.3, II.4 et II.5 relatives à divers échantillons de n-Si.

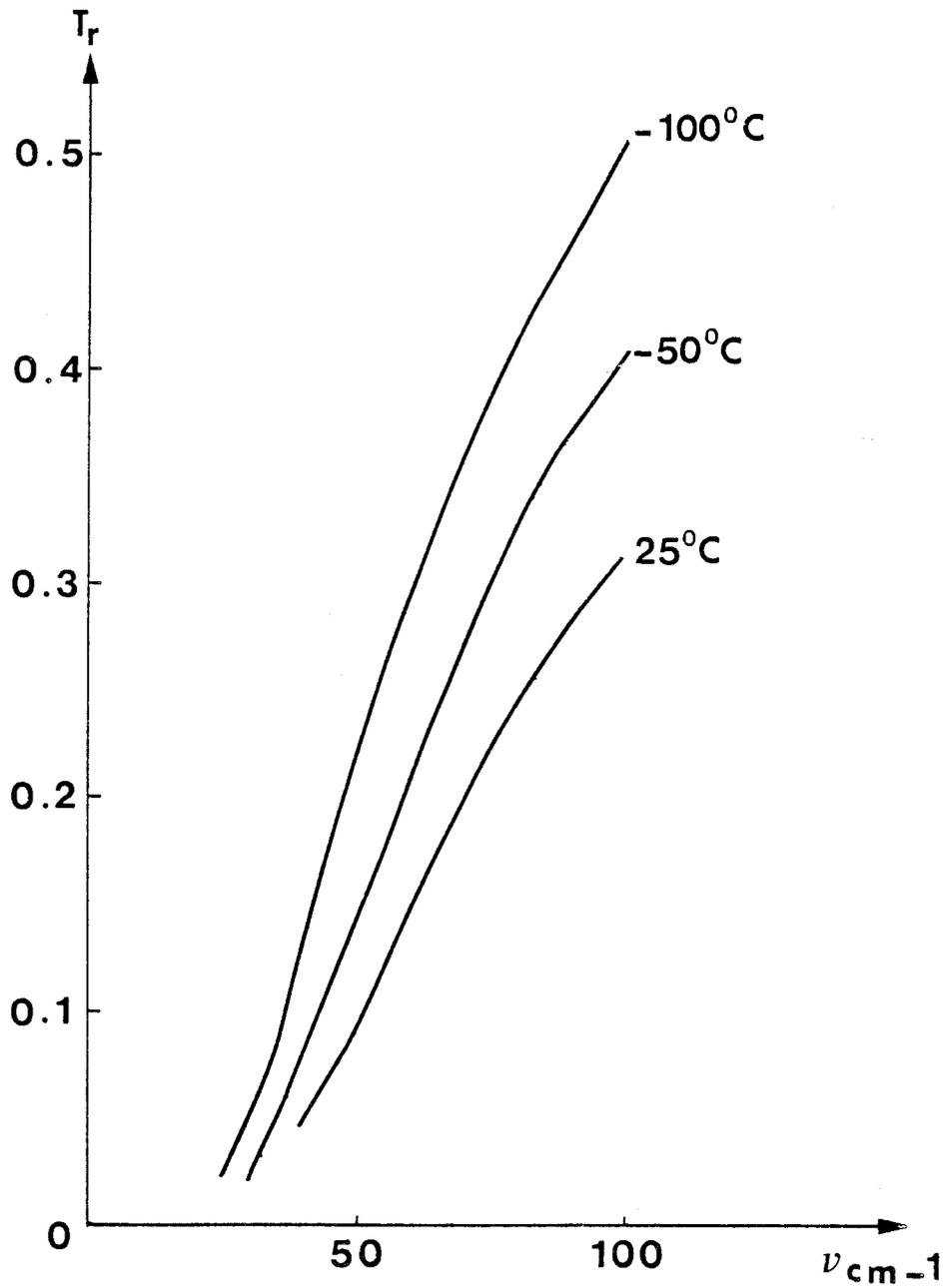


Figure II.1 : Coefficient de transmission du monocristal n°1 (nSi h=600 μm) en fonction de la fréquence et de la température.



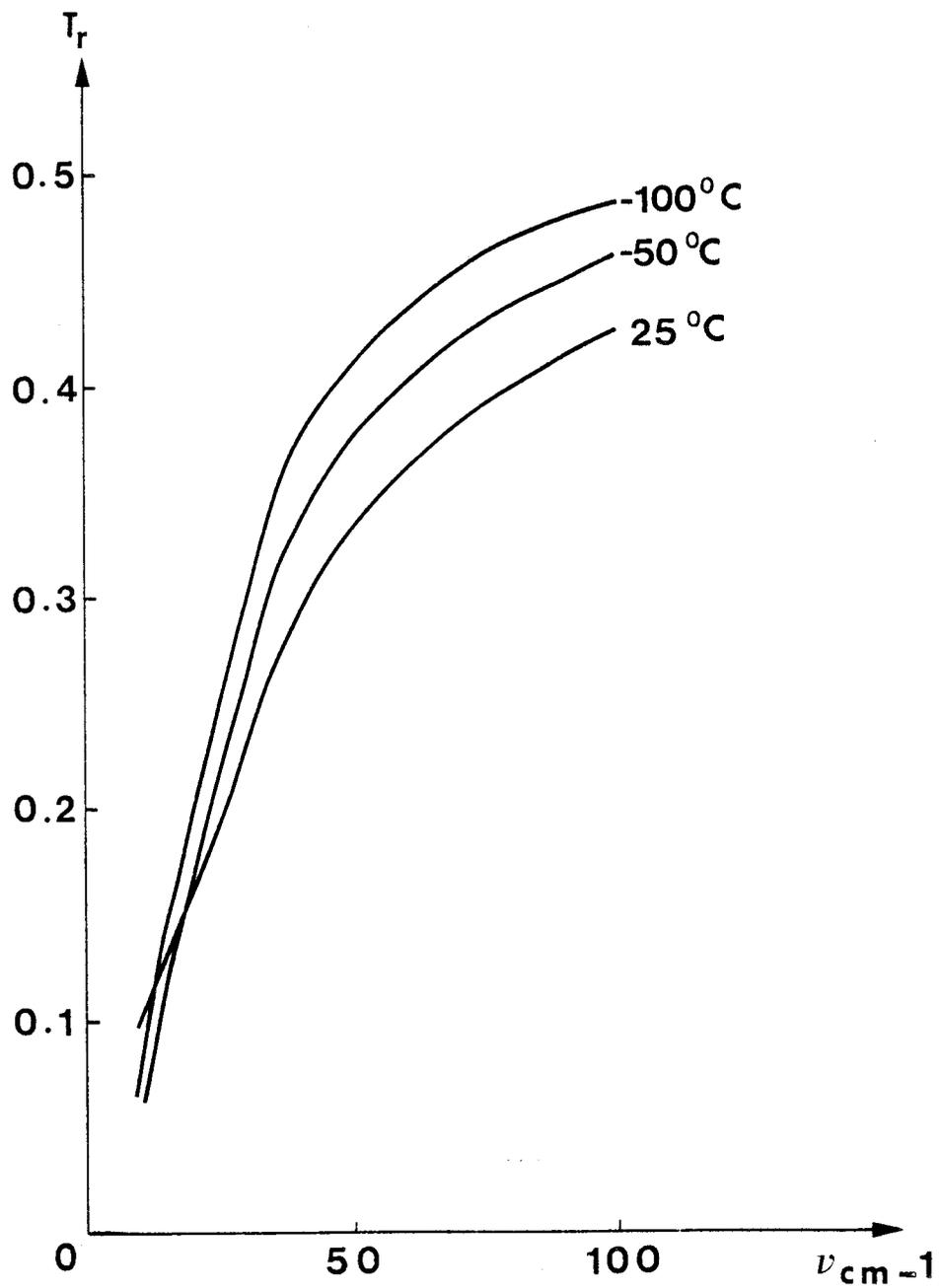


Figure II.2 : Coefficient de transmission du monocristal n°4 (nSi h=2000 μm) en fonction de la fréquence et de la température.



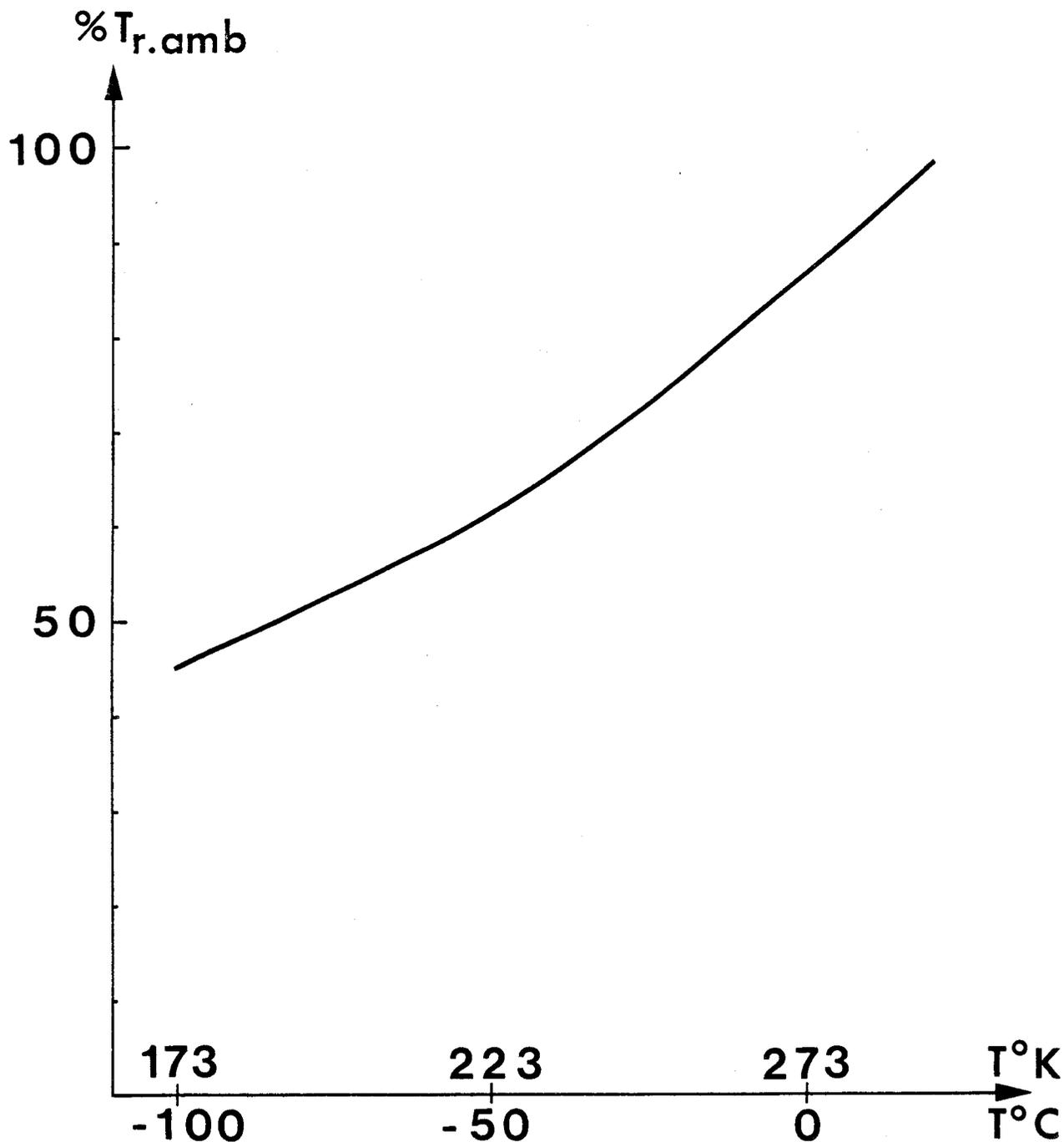


Figure II.3 : Coefficient de transmission (rapporté à sa valeur à la température ambiante) à $\lambda=1$ mm, en fonction de la température, du monocristal n°2 (nSi h=175 μ m.)



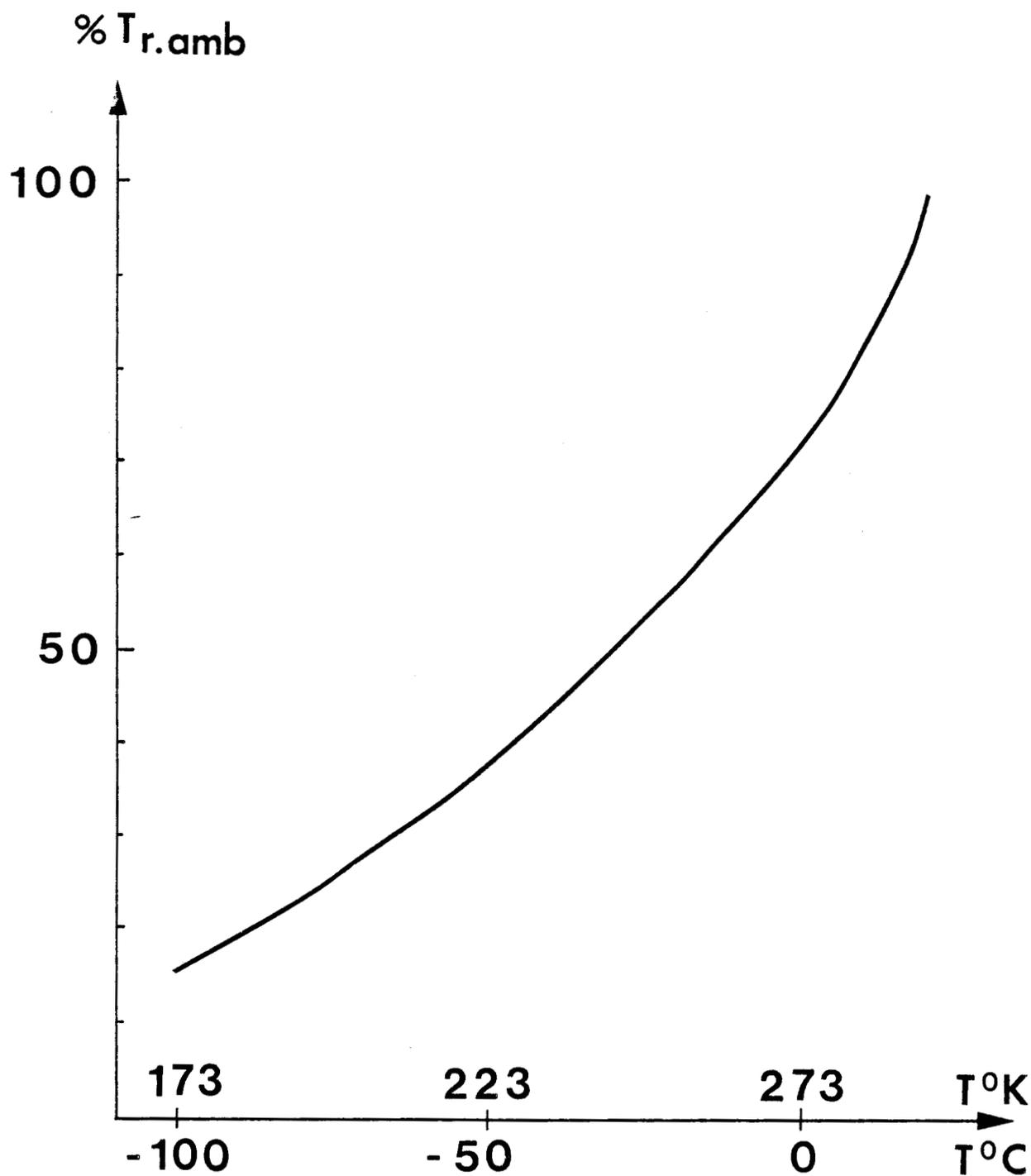


Figure II.4 : Coefficient de transmission (rapporté à sa valeur à la température ambiante) à $\lambda=44\text{mm}$, en fonction de la température, du monocristal n°2 (nSi h=175 μm)



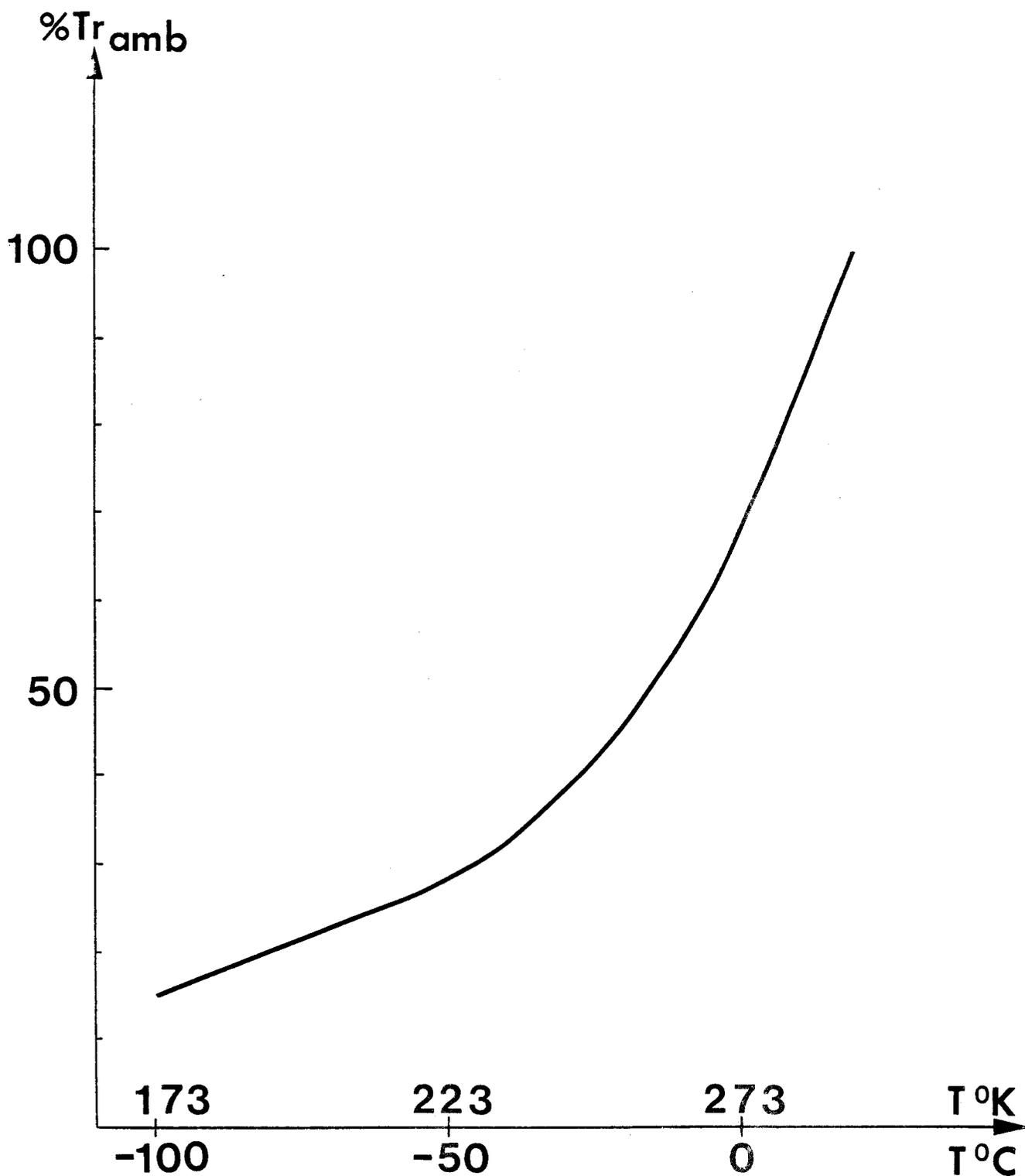


Figure II.5 : Coefficient de transmission expérimental (rapporté à sa valeur à la température ambiante) à $\lambda=1$ mm, en fonction de la température, du monocristal n°2 (nSi h=600 μ m)



La figure II.6 est relative à un échantillon de p-Si (monocristal n° 5 - échantillon d'épaisseur $h = 1\ 200\ \mu\text{m}$) et décrit son comportement en fonction de la fréquence et de la température ; ici encore $T_r(\nu)$ varie beaucoup avec la température et devient très faible aux basses fréquences.

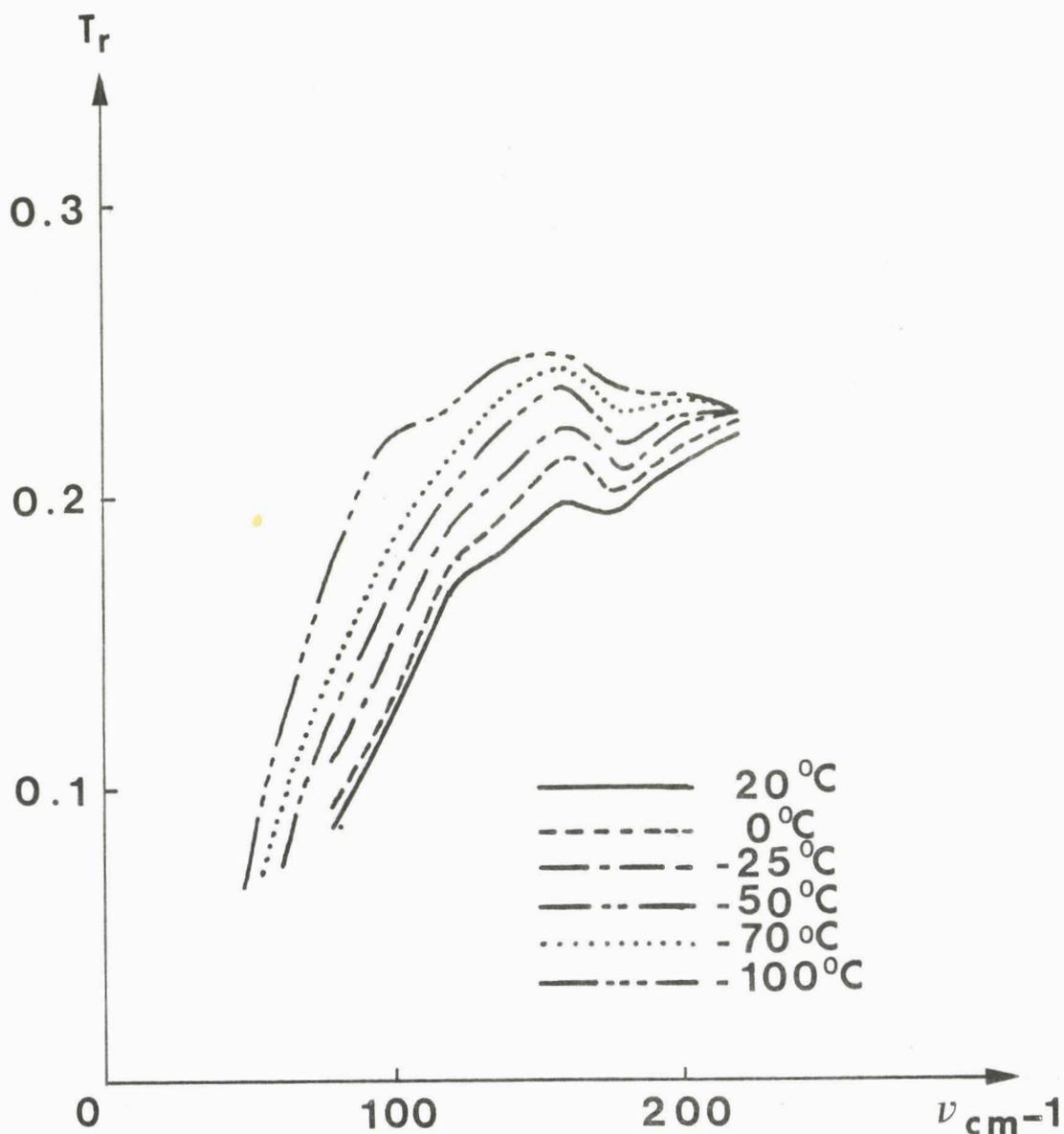


Figure II.6 : Coefficient de transmission du monocristal n° 5 (p-Si $h = 1\ 200\ \mu\text{m}$) en fonction de la fréquence et de la température.

Les figures II.7 et II.8 montrent les variations en fonction de la température du pourcentage de transmission par rapport à la transmission à température ambiante, lorsque la fréquence est basse : $\nu = 10\ \text{cm}^{-1}$ et $2.2\ \text{cm}^{-1}$.

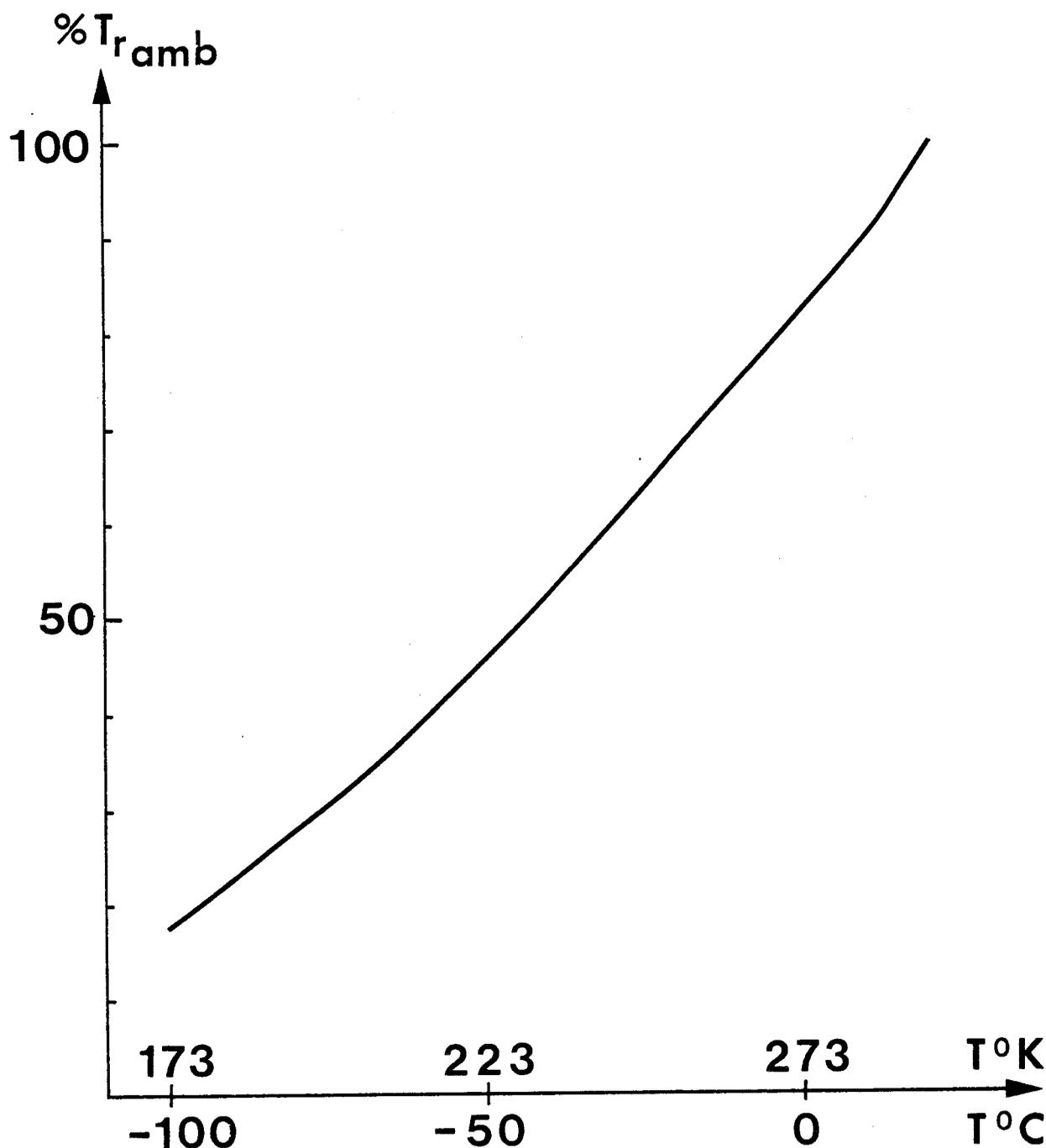


Figure II.7 : Coefficient de transmission (rapporté à sa valeur à la température ambiante) à $\lambda=1$ mm, en fonction de la température, du monocristal n°5 (pSi h=300 μ m)



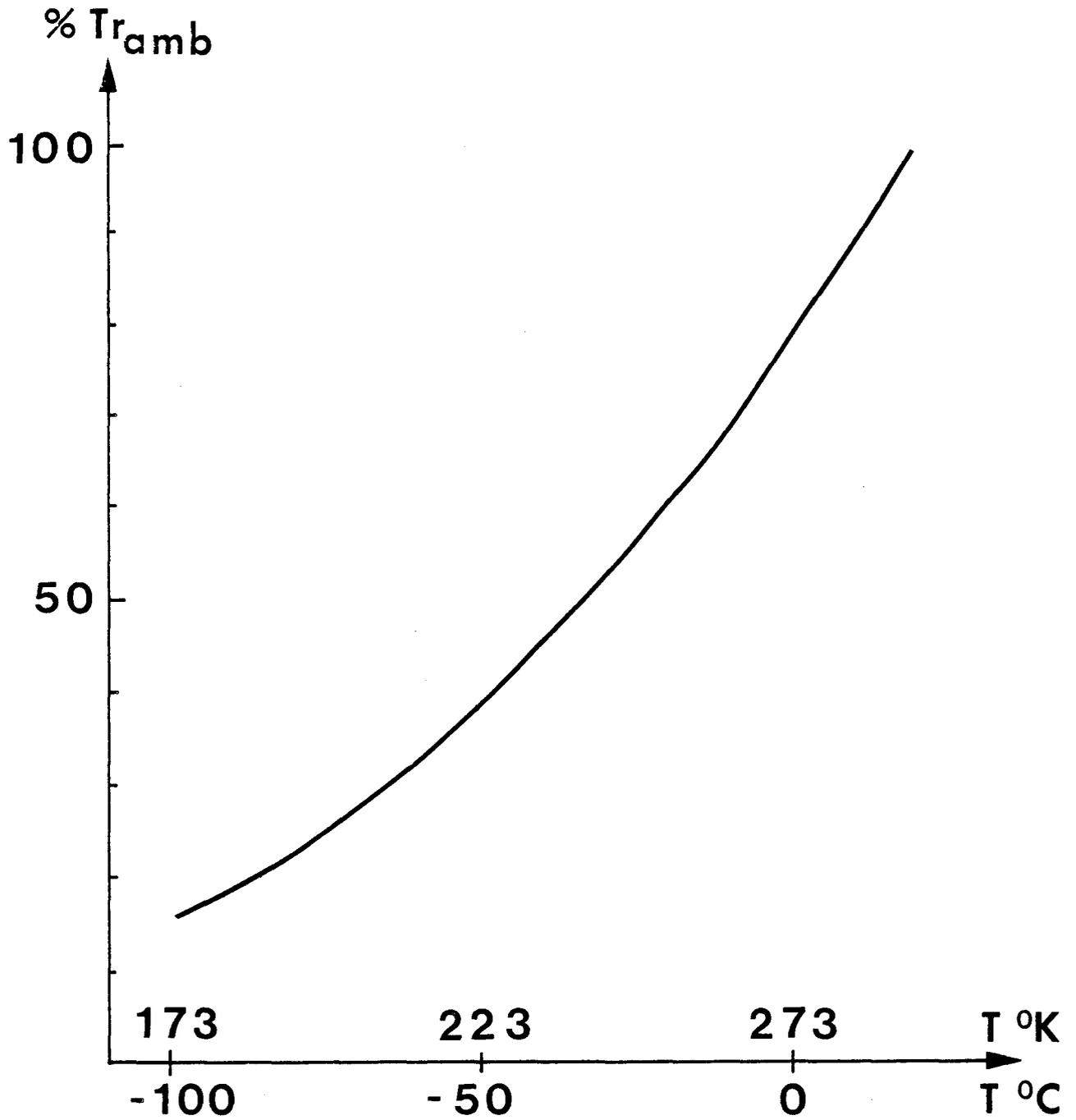


Figure II.8 : Coefficient de transmission (rapporté à sa valeur à la température ambiante) à $\lambda = 4.4$ mm, en fonction de la température, du monocristal n°5 (pSi $h = 300$ μ m)



II.2. CONDUCTIVITÉ

Disposant des spectres de transmission en fonction de la fréquence et en fonction de la température, il nous a été facile de déterminer les spectres de conductivité correspondants, en utilisant les relations (I.6), (I.9) et (I.12), les relations de Kramers-Krönig et le procédé de calcul numérique itératif décrit précédemment (Cf. I.2.2.).

A titre d'exemple, la figure II.9 montre l'évolution de $n(\nu)$ au début et à la fin du processus d'itérations, dans le cas des monocristaux n° 2 (n-Si) et n° 5 (p-Si). Le nombre d'itérations nécessaires à l'obtention des valeurs exactes de conductivité (à 1 % près) n'est que de trois.

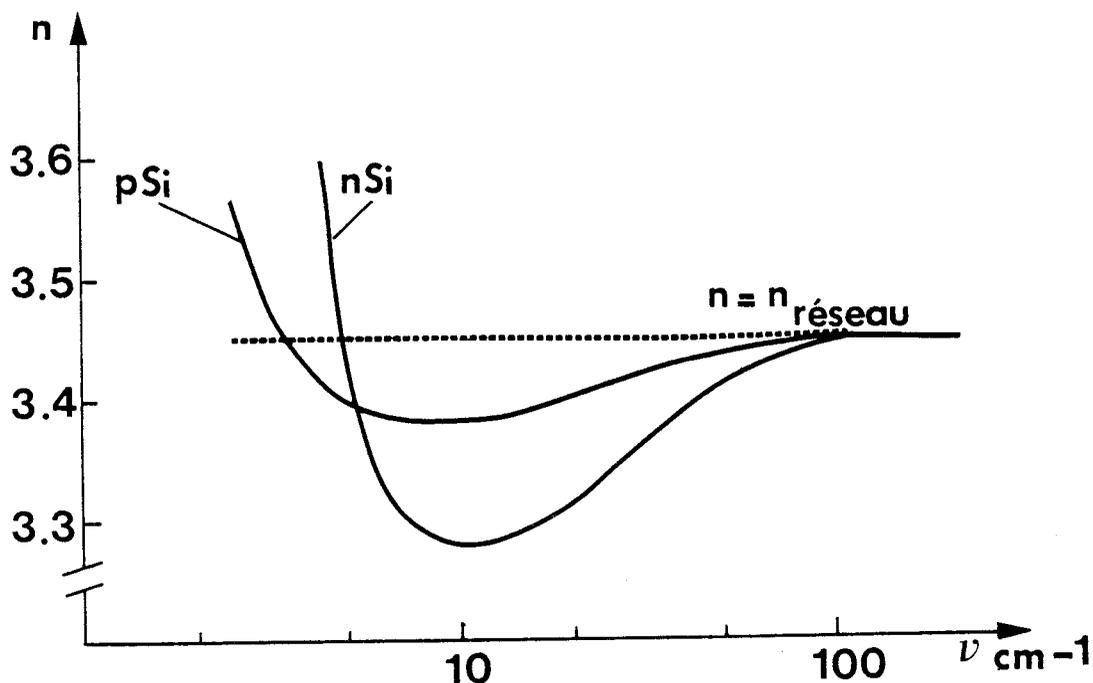


Figure II.9 : Indice en fonction de la fréquence pour des monocristaux de types n et p.

Les figures II.10 et II.11 représentent les spectres de conductivité réduite en fonction de la fréquence, à la température ambiante, pour les monocristaux n° 1, 2, 3 d'une part, et 5, 6, 7 d'autre part. On constate que ces deux groupes de monocristaux, dont les conductivités statiques sont identiques mais dont les orientations cristallographiques sont différentes, se comportent de façon identique lorsque la fréquence varie. L'orientation relative du champ électrique par rapport à la direction cristallographique est donc sans influence sur la conductivité : il n'existe donc aucun effet d'anisotropie dû au réseau cristallin et la conductivité est bien un scalaire. Remarquons que ce fait a pu être très facilement mis en évidence lors de nos mesures grâce à l'utilisation de guides surdimensionnés circulaires en gamme millimétrique et de polariseurs en gamme I.R.L. : la rotation de l'échantillon (ou du polariseur) dans la cellule de mesure n'apporte en effet aucune influence notable sur la transmission.

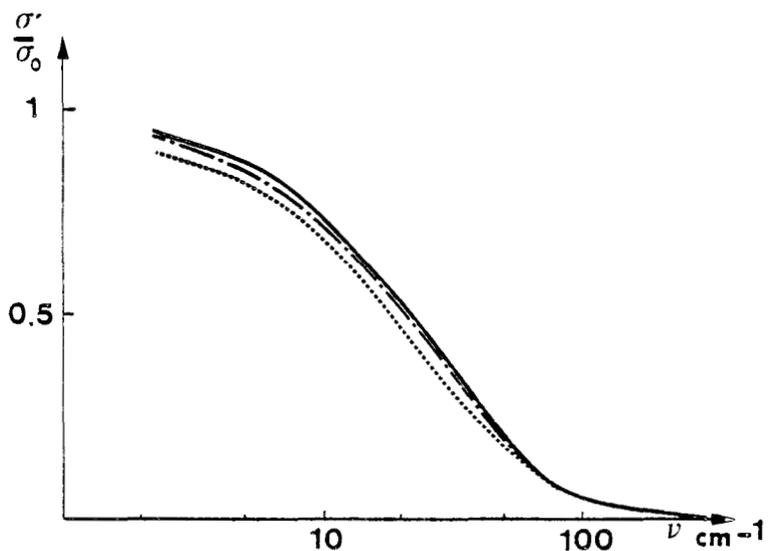


Figure II.10 : Conductivité réduite en fonction de la fréquence, à 293 °K, pour des monocristaux de type n d'orientations cristallographiques différentes.

- n° 1 : [111]
- n° 2 : [100]
- n° 3 : [110]

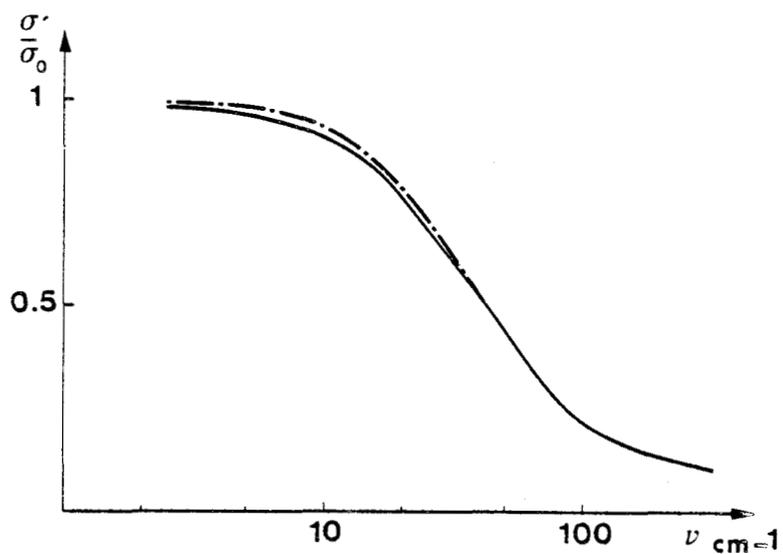


Figure II.11 : Conductivité réduite en fonction de la fréquence, à 293 °K, pour des monocristaux de type p d'orientations cristallographiques différentes.

- n° 5 : [111]
- n° 6 : [100]
- n° 7 : [110]



Le tracé des spectres de conductivité réduite en fonction de la température nécessite la connaissance de la loi de variation de la conductivité statique σ_0 en fonction de la température T.

Dans le cas du n-Si, il est relativement aisé de réaliser de bons contacts ohmiques. Nous avons donc déterminé $\sigma_0(T)$ par l'intermédiaire de la première méthode exposée en I.3.3. La figure II.12 montre la variation $\sigma_0(T)$ ainsi mesurée, pour le monocristal n° 4.

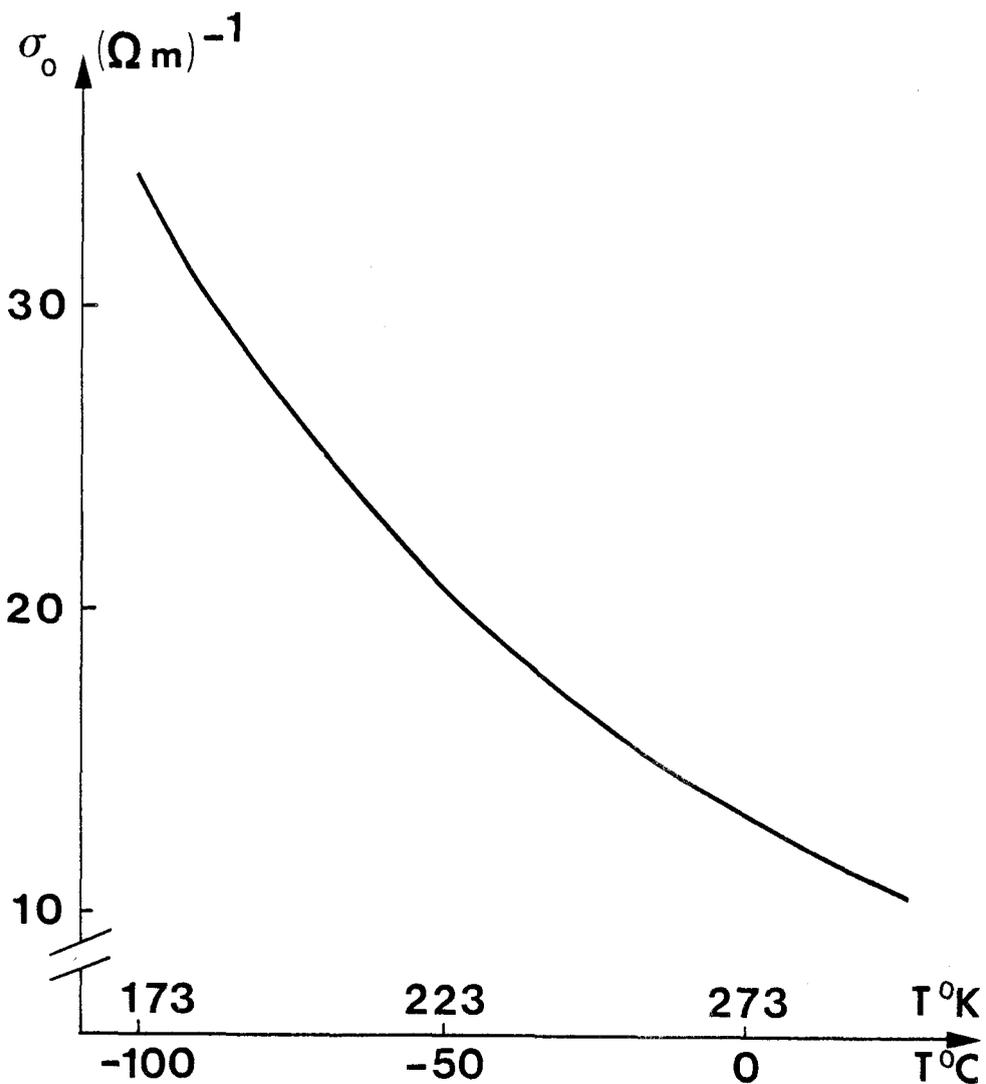


Figure II.12 : Conductivité statique en fonction de la température pour le monocristal n° 4 (n-Si $9 \Omega \cdot cm$).

Dans le cas du p-Si, la réalisation de bons contacts ohmiques (qui doivent être parfaits même en basse température) est plus aléatoire. Cependant, l'examen de la figure II.11 montre qu'aux fréquences basses ($\nu = 2.2 \text{ cm}^{-1}$ correspondant à $\lambda = 4.4 \text{ mm}$) la conductivité est très voisine de la conductivité statique σ_0 . Ce fait nous a permis de déterminer $\sigma_0(T)$ que nous approximations par sa valeur à 2.2 cm^{-1} (valeurs approchées à environ 3 %). La figure II.13 montre la variation $\sigma_0(T)$ mesurée par cette méthode, pour le monocristal n° 5.

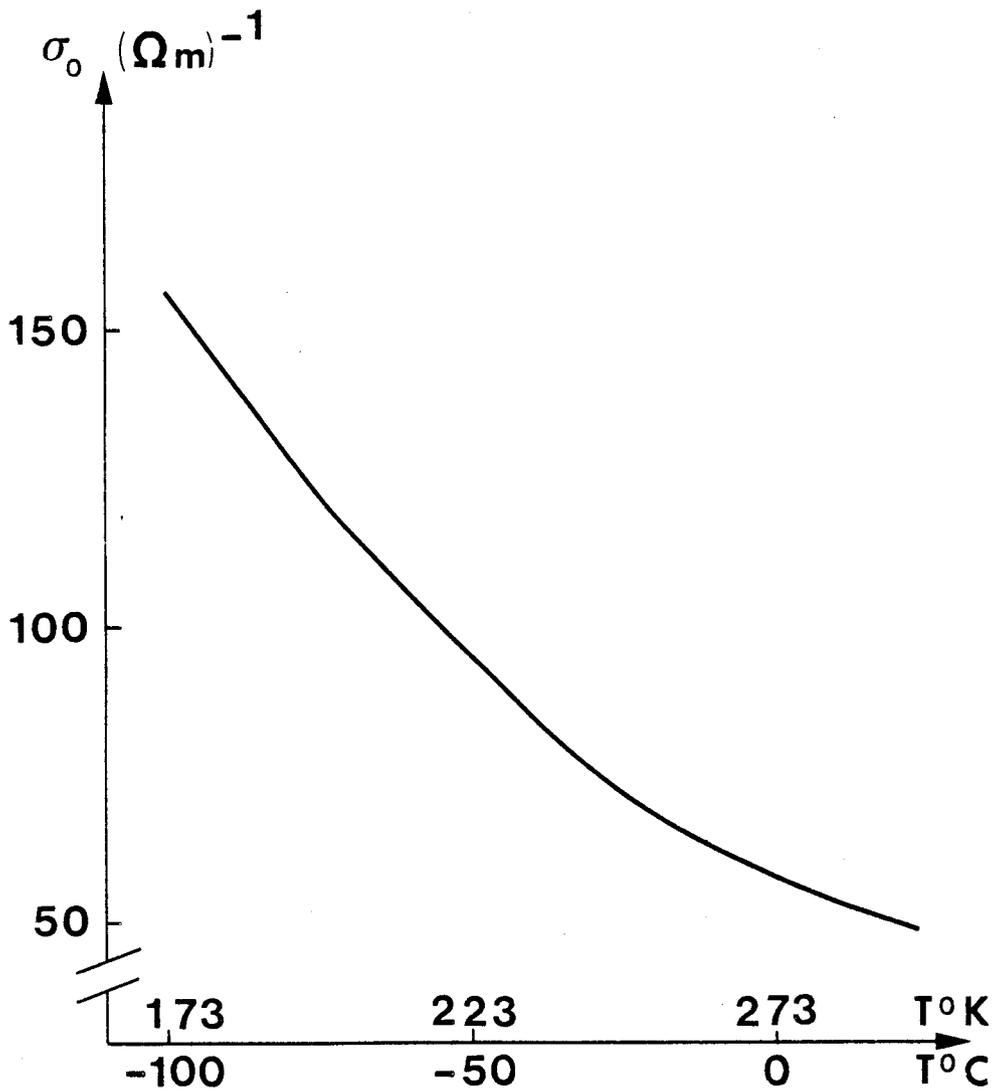


Figure II.13 : Conductivité statique, en fonction de la température pour le monocristal n° 5 (p-Si $2 \Omega\cdot\text{cm}$).

Les figures II.14 et II.15 décrivent les spectres en fonction de la fréquence et de la température des conductivités réduites σ'/σ_0 pour les deux types de semiconducteurs. Nous constatons immédiatement que le comportement en fonction de la fréquence n'est pas le même en ce qui concerne le n-Si et le p-Si. En effet, la conductivité réduite présentée par le p-Si est de beaucoup supérieure à celle présentée par le n-Si dans le domaine I.R.L., c'est-à-dire aux fréquences supérieures à environ 100 cm^{-1} .

Si l'évolution en fonction de la fréquence des deux types de matériaux n'était gouvernée que par des phénomènes de collisions caractérisés par un temps de relaxation des moments τ_m , la conductivité réduite pouvant alors s'exprimer par $\sigma'/\sigma_0 = <1 + \omega^2 \tau_m^2>^{-1}$ devrait tendre vers zéro dans les deux cas aux fréquences hautes. On constate qu'il en est bien ainsi pour le n-Si mais pas pour le p-Si.

Nous sommes donc amenés à faire l'hypothèse de l'existence d'un mécanisme supplémentaire dans le cas du p-Si. La conductivité excédentaire qui apparaît pour ce type de semiconducteur aux hautes fréquences est attribuée à des mécanismes de transitions de porteurs entre les différentes bandes de valence, ces transitions ayant un effet négligeable sur la conductivité aux fréquences basses ($\# < 100 \text{ cm}^{-1}$) où les mécanismes de collisions sont prépondérants.

Nous mettons ainsi en évidence deux types de phénomènes :

- des phénomènes de collisions, qui existent quel que soit le type de semiconducteur et quelle que soit la fréquence ;

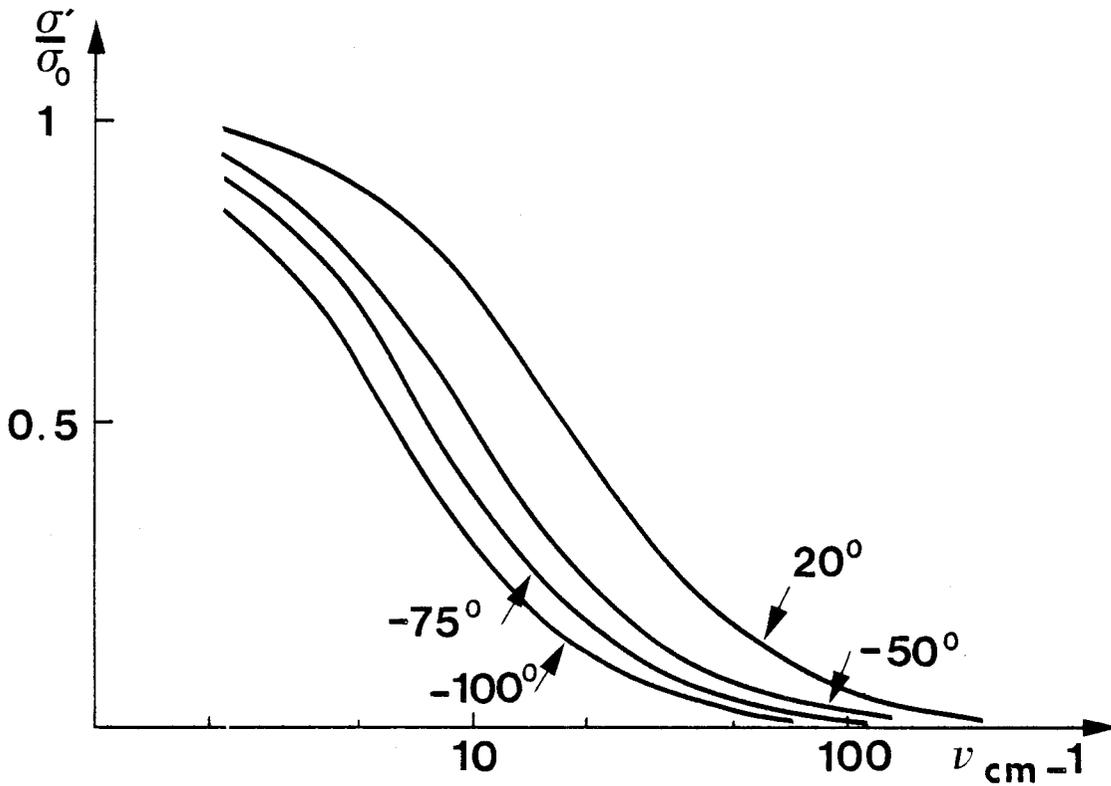


Figure II.14 : Conductivité réduite expérimentale en fonction de la fréquence et de la température pour le monocristal n° 4 (n-Si 9 Ω .cm)

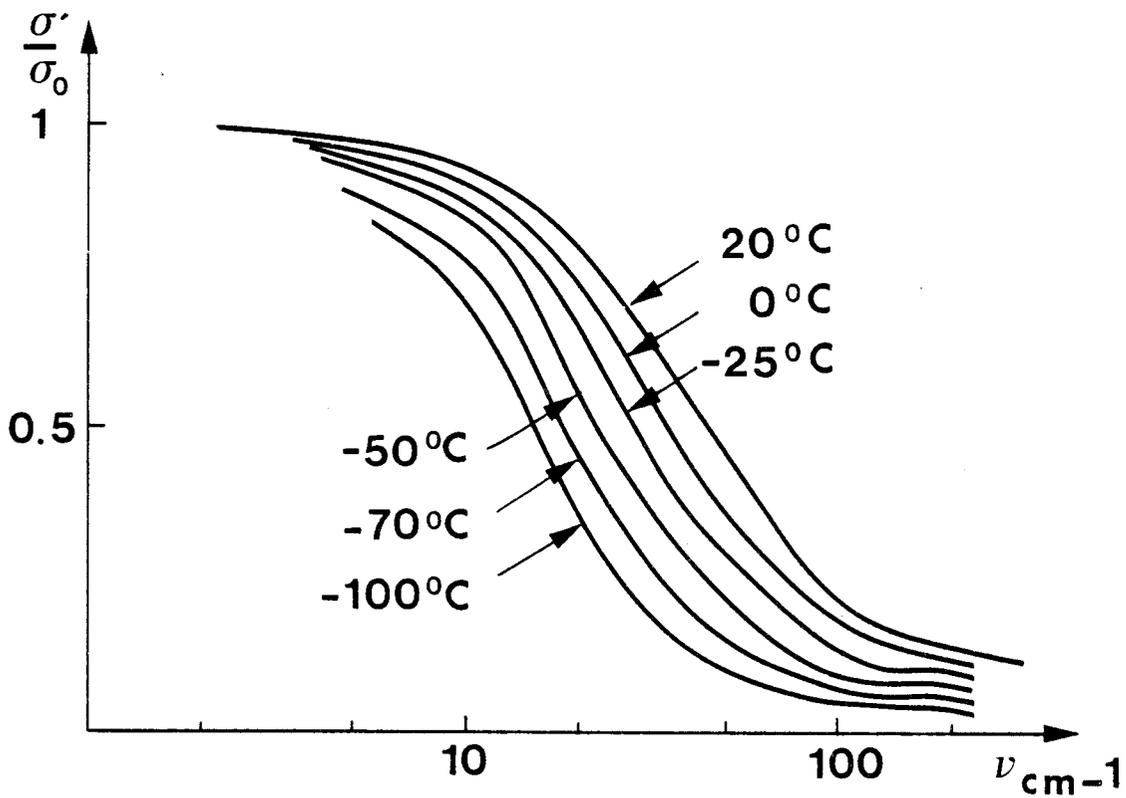


Figure II.15 : Conductivité réduite expérimentale en fonction de la fréquence et de la température pour le monocristal n° 5 (p-Si 2 Ω .cm)



- des phénomènes de transitions de porteurs entre bandes de valence, qui interviennent de façon importante en très haute fréquence, pour le p-Si.

Ce sont ces deux mécanismes que nous allons maintenant tenter d'expliquer.

CHAPITRE III

MECANISMES DE COLLISIONS

Dans ce chapitre, nous nous proposons de caractériser l'ensemble des porteurs libres dans le semiconducteur et d'étudier les interactions qu'ils subissent de la part du réseau cristallin.

Dans ce but, nous assimilerons le cristal semiconducteur à un ensemble de particules qui se trouvent en interaction.

A chaque particule, dont la position est caractérisée par le rayon vecteur \vec{r} et dont le vecteur d'onde est \vec{k} , se trouve associée une onde. La fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, \vec{k})$ relative à la particule vérifie alors l'équation d'onde des états stationnaires :

$$H \cdot \Psi = E \cdot \Psi \quad (\text{III.1})$$

où :

- E désigne l'énergie de la particule ; cette énergie dépend de \vec{k} ;
- H est l'hamiltonien de la particule.

Si l'hamiltonien H est connu, on peut déterminer l'énergie $E(\vec{k})$ et la fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, \vec{k})$ qui ne sont autres que les valeurs propres et les vecteurs propres de H .

Dans un réseau cristallin périodique tel que celui du Silicium, l'hamiltonien H est de la forme :

$$H = - \frac{\hbar^2}{2m} + U(\vec{r}) \quad (\text{III.2})$$

ou, en introduisant l'opérateur moment $p = -i\hbar\nabla_{\vec{r}}$:

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}) \quad (\text{III.3})$$

Dans ces expressions, $U(\vec{r})$ est l'énergie potentielle du réseau cristallin ; elle a la périodicité du réseau cristallin.

Dans ces conditions, l'équation d'onde des états stationnaires (III.1) admet pour solution des fonctions d'onde qui s'expriment sous la forme de fonctions de Bloch :

$$\Psi = \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) \cdot \exp(i\vec{k}\vec{r}) \quad (\text{III.4})$$

où $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ est périodique et possède la même période que le réseau cristallin.

Remarquons que l'équation d'onde des états stationnaires (III.1) peut également s'écrire sous la forme de l'équation de Schrödinger dépendant du temps :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H \cdot \Psi \quad (\text{III.5})$$

les solutions étant alors de la forme :

$$\Psi = \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \exp(-i \frac{E \cdot t}{\hbar}) \quad (\text{III.6})$$

Dans un cristal parfait au zéro absolu, pour un potentiel cristallin parfaitement périodique, la propagation de l'onde associée à une particule n'est pas perturbée. Cependant, dans un cristal réel, la présence d'impuretés ou de défauts de réseau, de même que l'agitation thermique des atomes, viennent perturber la périodicité du réseau cristallin. Ces perturbations locales du réseau provoquent des réflexions de l'onde associée au porteur, entraînant une modification de sa direction de propagation : tout se passe comme si le porteur subissait une collision sur le réseau ou sur le défaut.

Les origines de la perturbation du potentiel cristallin sont diverses : citons les vibrations du réseau, les impuretés ionisées ou neutres, les dislocations... Les collisions porteur-porteur n'ont, quant à elles, un effet significatif que pour des concentrations en porteurs libres très élevées [1] [2] bien supérieures aux concentrations envisagées dans cette étude. Les vibrations de réseau et les impuretés ionisées donnent lieu aux collisions les plus fréquentes :

- les collisions sur le réseau cristallin sont primordiales à température ambiante. Lors de telles collisions, différents types de phonons peuvent être émis ou absorbés : phonons acoustiques de faible énergie et de grande longueur d'onde, et phonons optiques de grande énergie et de faible longueur d'onde ;
- les collisions sur impuretés ionisées ont un effet prépondérant en basse température, là où les collisions sur le réseau deviennent négligeables.

Ce sont ces deux mécanismes dont nous tiendrons compte lors de notre étude.

Les collisions sur le réseau provoquent des changements d'état du porteur, qui passe de l'état \vec{k} où l'énergie

est $E(\vec{k})$ à l'état \vec{k}' d'énergie $E(\vec{k}')$ en émettant ou en absorbant un phonon de vecteur d'onde \vec{q} tel que :

$$\begin{cases} \vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q} \\ E(\vec{k}') = E(\vec{k}) \pm \hbar\omega_{\vec{q}} \end{cases}$$

où $\hbar\omega_{\vec{q}}$ représente l'énergie du phonon émis (signe -) ou absorbé (signe +).

Les mécanismes de collisions mettant en jeu plus d'un phonon peuvent être ici négligés puisque les températures de réseau envisagées dans cette étude sont toujours inférieures à 300° K [3].

La probabilité de transition entre les deux états \vec{k} et \vec{k}' d'énergies $E(\vec{k})$ et $E(\vec{k}')$ dépend du temps t comme $\frac{\sin^2 x t}{x^2}$ où

$$x = \frac{E(\vec{k}) - E(\vec{k}')}{2\hbar} \quad [3]$$

Si le temps moyen entre transitions est suffisamment grand -ce qui est le cas dans les matériaux à forte mobilité- la fonction $\frac{\sin^2 x t}{x^2}$ peut être remplacée par une fonction $\delta[E(\vec{k}) - E(\vec{k}')] [4]$. La probabilité de transition par unité de temps entre les deux états \vec{k} et \vec{k}' peut alors s'écrire :

$$w_{kk'} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{kk'}|^2 \delta[E(\vec{k}) - E(\vec{k}')] \quad (\text{III.7})$$

(Règle d'or n° 2)

où $H'_{kk'}$ est l'élément de matrice du potentiel de perturbation entre les deux états \vec{k} (état initial) et \vec{k}' (état final).

Les collisions sur impuretés ionisées, quant à elles, provoquent des déviations des trajectoires électroniques. On peut leur associer de la même manière

une probabilité de transition par unité de temps, fonction du potentiel de perturbation.

A chaque type de collision seront donc associés une probabilité de transition par unité de temps $w_{kk'}$, et un temps de relaxation $\tau(\vec{k}')$ tel que $1/\tau(\vec{k}') = w_{kk'}$. Les états finaux étant tels que $\vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q}$, la probabilité de transition totale devra être sommée sur tous les états finaux possibles : elle va donc dépendre de la structure de bande du semiconducteur par l'intermédiaire des relations de dispersion $E(\vec{k})$.

La configuration des bandes de conduction et de valence étant très différentes (Figure III.1), nous étudierons séparément les mécanismes de collisions dans le Silicium de type n (transitions sous l'effet de collisions dans la bande de conduction) et dans le Silicium de type p (transitions sous l'effet de collisions dans la bande de valence).

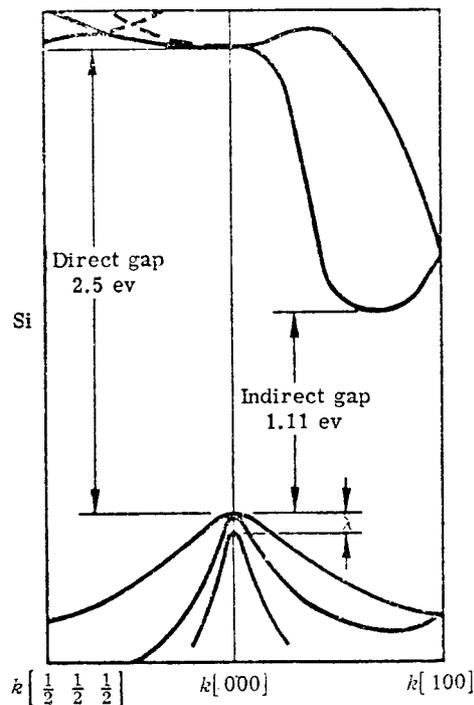


Figure III.1 : Energie en fonction du vecteur d'onde (d'après Shyh Wang, p : 183 [5]).

III.1. MÉCANISMES DE COLLISIONS DANS LE N-Si

III.1.1. ENERGIE DANS LA BANDE DE CONDUCTION

Il est bien connu que la bande de conduction du Silicium est constituée par la superposition de trois bandes différentes [5] [6].

Une des branches de la bande de conduction est disposée beaucoup plus bas que les deux autres (Figure III.1). La position du minimum absolu détermine le bas de la bande de conduction qui correspond à l'orientation [100] dans l'espace des \vec{k} . On trouve six minima d'énergie équivalents : la bande de conduction du Silicium comporte donc six vallées (Figure III.2).

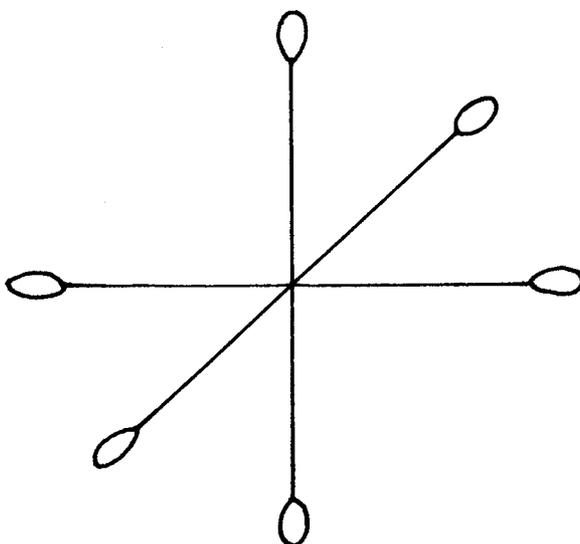


Figure III.2. : Bande de conduction du Silicium -
Les six vallées.

Les électrons qui contribuent aux transports de charges dans la bande de conduction du Silicium sont situés dans les six vallées équivalentes, aux environs des six minima de la bande de conduction,

le long des axes [100]. En effet, les autres minima secondaires situés au centre de la zone de Brillouin et le long des axes [111] correspondent à des énergies très élevées de l'ordre de 1'eV [2].

Au voisinage des vallées, les surfaces isoénergie se présentent sous la forme d'ellipsoïdes de révolution dont le grand axe est confondu avec l'orientation [100]. La relation de dispersion $E_i(\vec{k})$ relative à la ième vallée s'écrit alors :

$$E_i(\vec{k}) = E_C + \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{(\vec{k} - \vec{k}_{oi})_\ell^2}{m_\ell} + \frac{(\vec{k} - \vec{k}_{oi})_t^2}{m_t} \right] \quad (\text{III.8})$$

où :

- E_C est l'énergie du bas de la bande de conduction ;
- \vec{k}_{oi} désigne la position dans la zone de Brillouin du centre de la ième vallée ;
- les indices ℓ et t représentent les composantes longitudinale et transversale (suivant un grand axe ou un petit axe des ellipsoïdes) ;
- m_ℓ et m_t sont les masses effectives longitudinale et transversale de l'électron.

Les vallées sont centrées à $0.85 d$, d étant la distance qui sépare le centre de la première zone de Brillouin de sa limite.

III.1.2. COLLISIONS SUR LE RESEAU

Ces collisions sont primordiales à température ambiante. Les vibrations de réseau provoquent une déformation du potentiel cristallin. Si V_d est le potentiel de déformation,

la probabilité par unité de temps et par unité d'énergie pour qu'un porteur passe de l'état \vec{k} à l'état \vec{k}' s'exprimera par :

$$w_{kk'} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle k | V_D | k' \rangle|^2 \rho(E) = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{kk'}|^2 \delta[E(\vec{k}) - E(\vec{k}')] \cdot \rho(E)$$

(III.9)

où $\rho(E)$ désigne la densité d'états finaux.

Suivant que les états initiaux \vec{k} et finaux \vec{k}' sont voisins ou éloignés les uns des autres, c'est-à-dire suivant l'importance de $\vec{k} - \vec{k}' = \vec{q}$, l'énergie des phonons émis ou absorbés lors des collisions sera faible ou importante. Les processus mis en jeu seront extrêmement différents et donneront lieu à des transitions intravallées ou intervallées.

III.1.2.1. Collisions sur phonons acoustiques

Les phonons acoustiques ont une faible énergie. Il en résulte que les collisions sur phonons acoustiques sont élastiques et qu'elles donnent généralement naissance à des transitions intravallées.

Les vallées étant ellipsoïdales, les probabilités de transitions sont anisotropes et il en est de même des temps de relaxation qui leur sont associés.

Nous devons donc définir deux probabilités de transitions :

- l'une longitudinale, c'est-à-dire suivant un grand axe de l'ellipsoïde : $(w_{kk'})_l$
- l'autre transversale, suivant un petit axe de l'ellipsoïde : $(w_{kk'})_t$.

Les vallées étant centrées sur les axes [100] dans la zone de Brillouin, des arguments de symétrie permettent d'exprimer les potentiels de déformation en fonction de deux potentiels indépendants.

Suivant la notation de Herring [7] ces deux potentiels indépendants Z_u et Z_d permettent d'écrire les éléments de matrice $H'_{kk'}$ liés au potentiel de déformation sous la forme :

$$\left. \begin{aligned} |H'_{kk'}|_{\ell}^2 &= \frac{(Z_d + Z_u \cos^2 \theta) \hbar \omega_{q\ell}}{2V\rho u_{\ell}^2} \left(N_{q\ell} + \frac{1}{2} + \frac{\delta N_{q\ell}}{2} \right) \\ |H'_{kk'}|_t^2 &= \frac{(Z_u \sin \theta \cos \theta)^2 \hbar \omega_{qt}}{2V\rho u_t^2} \left(N_{qt} + \frac{1}{2} + \frac{\delta N_{qt}}{2} \right) \end{aligned} \right\} \quad (\text{III.10})$$

où :

- θ est l'angle entre \vec{q} et l'axe \vec{Oz} ;
- V est le volume du cristal ;
- ρ est la densité du matériau ;
- u_{ℓ} et u_t sont les composantes longitudinale et transversale de la vitesse du son dans le matériau ;
- $N_{q\ell}$ et N_{qt} sont les densités de phonons longitudinale et transversale, décrites par la statistique de Bose-Einstein :

$$N_{q(\ell \text{ ou } t)} = \frac{1}{\exp \frac{\hbar \omega_{q(\ell \text{ ou } t)}}{k_B T} - 1}$$

qui se réduit à $N_{q(\ell \text{ ou } t)} \approx \frac{k_B T}{\hbar \omega_{q(\ell \text{ ou } t)}}$

puisque $\hbar \omega_{q(\ell \text{ ou } t)} \ll k_B T$

- δN_q et $\delta N_{qt} = \left\{ \begin{array}{l} +1 \text{ pour une émission} \\ -1 \text{ pour une absorption} \end{array} \right\}$ de phonons longitudinale ou transversale.

$$\text{En posant : } \begin{cases} Z_{\ell} = Z_d + Z_u \cos^2 \theta \\ Z_t = Z_u \sin \theta \cos \theta \end{cases}$$

les éléments de matrice peuvent s'écrire :

$$|H'_{kk'}|_{\ell}^2 = \frac{Z_{\ell}^2}{2V\rho u_{\ell}^2}$$

$$|H'_{kk'}|_t^2 = \frac{Z_t^2}{2V\rho u_t^2}$$

Après sommation sur toutes les valeurs de \vec{k}' possibles après collision, il vient [3] :

$$\sum_{k'} (w_{kk'})_{\ell} = \frac{\sqrt{2} m_t m_{\ell}^{1/2} k_B T}{\Pi \hbar^4 \rho u_{\ell}^2} E^{1/2} \frac{3}{4} [aZ_d^2 + bZ_d Z_u + cZ_u^2] \quad (\text{III.11})$$

$$\sum_{k'} (w_{kk'})_t = \frac{\sqrt{2} m_t m_{\ell}^{1/2} k_B T}{\Pi \hbar^4 \rho u_t^2} E^{1/2} \frac{3}{4} [a'Z_d^2 + b'Z_d Z_u + c'Z_u^2]$$

où a, b, c, a', b', c' sont des coefficients sans dimension, qui dépendent des constantes d'élasticité ρu_{ℓ}^2 et ρu_t^2 .

$$\text{En posant } W_{ac,x} = \frac{3 \cdot 2^{5/2} \cdot \Pi^3 \cdot m_t \cdot m_{\ell}^{1/2} k_B^{3/2}}{h^4 \rho s^2} Z_x^2 \quad (\text{III.12})$$

(x représente soit ℓ , soit t)

où l'on néglige l'anisotropie élastique du cristal [3] (c'est-à-dire que ρu_{ℓ}^2 et ρu_t^2 sont remplacés par ρs^2 où s est la vitesse du son dans le matériau) et où Z_x^2 est tel que :

$$Z_x^2 = \begin{cases} Z_l^2 = Z_u^2 [1.40 \left(\frac{Z_d}{Z_u}\right)^2 + 2.40 \left(\frac{Z_d}{Z_u}\right) + 1.62] \\ Z_t^2 = Z_u^2 [1.33 \left(\frac{Z_d}{Z_u}\right)^2 + 1.15 \left(\frac{Z_d}{Z_u}\right) + 1.07] \end{cases} \quad (\text{III.13})$$

on obtient :

$$\frac{1}{\tau_{ac.x}} = \sum_{k'} (w_{kk'})_{ac.x} = W_{ac.x} \left(\frac{E}{k_B T}\right)^{1/2} T^{3/2} \quad (\text{III.14})$$

E étant l'énergie du porteur qui dépend de \vec{k} par l'intermédiaire de (III.8).

III.1.2.2. Collisions sur phonons optiques

Les phonons optiques ont une énergie élevée. Harrison [8] a montré, que dans le cas de la bande de conduction, la contribution des phonons optiques de faible vecteur d'onde était négligeable par rapport à celle des phonons acoustiques lors des transitions intravallées. Les collisions sur phonons optiques seront donc responsables essentiellement de transitions intervallées. Ces dernières s'effectuent avec de fortes variations du vecteur d'onde et dans ce cas, le processus mis en jeu est du type "Umklapp" :

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

où \vec{K} est un vecteur principal du réseau principal.

L'examen de la figure III.3 montre que deux types de transitions peuvent alors se produire :

- des transitions entre deux vallées situées sur des axes perpendiculaires : transitions de type "f"
- des transitions entre deux vallées situées sur un même axe : transitions de type "g".

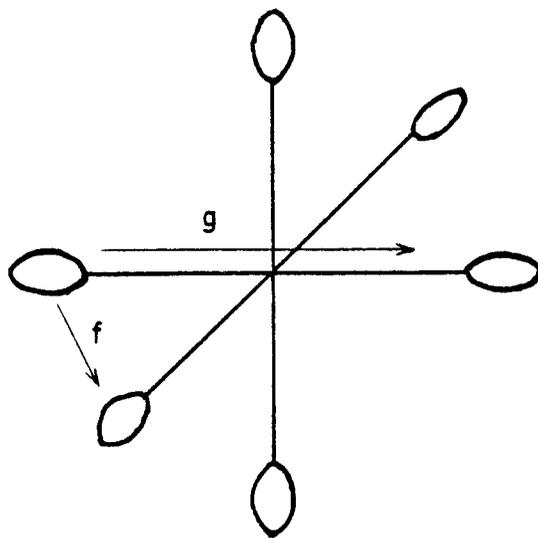


Figure III.3 : Transitions "f" et "g".

Le spectre de vibration de réseau, établi par Brockhouse [9] (figure III.4) permet de déterminer les températures de phonons associées à ces deux types de transitions.

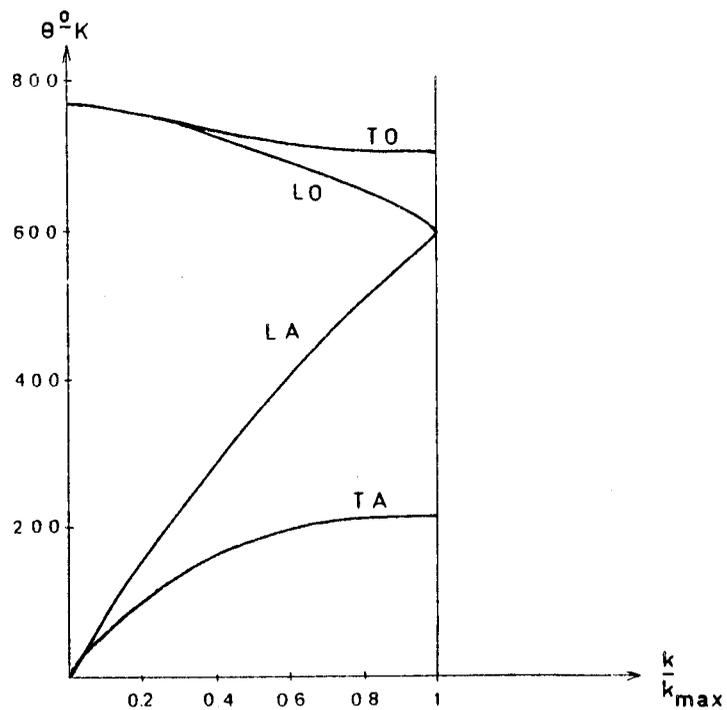


Figure III.4 : Spectre de vibration de réseau (d'après Brockhouse [9]).

Ces collisions sont isotropes car la position de l'électron sur l'ellipsoïde final dépend peu de sa position sur l'ellipsoïde initial [3] [8].

Harrisson [8] a montré que ces transitions sont prédominantes et que l'on peut introduire une probabilité de transition par unité de temps, qui, après intégration sur les états finaux, permet également d'introduire un temps de relaxation optique τ_{op} unique (collisions isotropes) tel que :

$$\frac{1}{\tau_{op}} = \sum_{k'} (w_{kk'})_{op} = \sum_j W_j \theta_j^{3/2} \left[\frac{(E/k_B \theta_j + 1)^{1/2}}{\exp(\theta_j/T) - 1} + \frac{(E/k_B \theta_j - 1)^{1/2}}{1 - \exp(-\theta_j/T)} \right] \quad (III.15)$$

ou zéro si
 $E/k_B \theta_j < 1$

l'indice j étant relatif aux différents phonons concernés, de température θ_j .

$$W_j = \frac{D_j^2 \cdot m_t \cdot m_l^{1/2}}{\sqrt{2} \cdot \Pi \cdot \rho \cdot \hbar^2 \cdot k_B^{1/2} \cdot \theta_j^2} \quad (III.16)$$

Les D_j sont des constantes relatives aux potentiels de déformation.

III.1.3. COLLISIONS SUR IMPURETES IONISEES

Ce type de collisions devient prépondérant en basse température, là où les collisions sur le réseau deviennent moins importantes.

Le potentiel de déformation est de type coulombien

$$V_D = \frac{Z \cdot e}{4\pi\epsilon r} \exp\left(-\frac{r}{d}\right) \quad (III.17)$$

où :

- Z_e = charge effective de l'atome d'impureté
- $\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r$ = constante diélectrique du milieu
- r = distance de coupure du champ coulombien, traduisant l'effet d'écran créé par les porteurs environnants.

Les collisions sur impuretés ionisées ont pour effet de dévier la trajectoire électronique, alors que le porteur ne perd pratiquement pas d'énergie.

Les collisions à faible angle de diffusion étant les plus nombreuses, ce type de collisions présente un caractère anisotrope très prononcé et il est encore nécessaire de définir deux probabilités de transition par unité de temps, donc deux temps de relaxation, l'un longitudinal et l'autre transversal.

D'après Jorgensen [10], la probabilité de transition par unité de temps longitudinale ou transversale, s'écrit, après intégration sur tous les états finaux \vec{k}' possibles :

$$\sum_{\vec{k}'} (w_{\vec{k}\vec{k}'})_{i \cdot x} = \frac{3\pi e^4 N_i \cdot m_t}{2^{3/2} (4\pi\epsilon_0\epsilon_r)^2 m_\ell^{3/2}} E^{-3/2} \left[a_x \text{Log}(1+b_x^2 q^2) - \frac{c_x}{1 + \frac{d_x}{q^2}} \right] \quad (\text{III.18})$$

où :

- x représente soit ℓ , soit t

$$- q = \frac{4\pi\epsilon_0\epsilon_r \cdot 2\pi m_\ell k_B T \cdot E}{e h^2 N} \quad (\text{III.19})$$

- N_i et N sont respectivement les concentrations en impuretés et en porteurs libres.

Nous pourrions alors poser :

$$\frac{1}{\tau_{i \cdot x}} = \sum_{\vec{k}'} (w_{\vec{k}\vec{k}'})_{i \cdot x} = K_{i \cdot x} \cdot E^{-3/2} \quad (\text{III.20})$$

Les valeurs des différents paramètres a_x , b_x , c_x , d_x sont indiquées dans le tableau III.1.

	$x = l$	$x = t$
a_x	1.059	3.765
b_x	1.226	0.788
c_x	1.20	5.21
d_x	4.97	5.87

Tableau III.1.

III.1.4. PROBABILITE DE COLLISIONS ET TEMPS DE RELAXATION TOTAUX

Lorsque les trois types de collisions coexistent, les probabilités de collisions s'ajoutent et il en est de même des inverses des temps de relaxation. Nous définirons donc deux temps de relaxation, l'un transversal, l'autre longitudinal, tels que :

$$\frac{1}{\tau_x} = \frac{1}{\tau_{ac \cdot x}} + \frac{1}{\tau_{op}} + \frac{1}{\tau_{i \cdot x}} \quad (III.21)$$

- Temps de relaxation transversal τ_t :

$$\frac{1}{\tau_t} = W_{ac \cdot t} \left[\left(\frac{E}{k_B T} \right)^{1/2} T^{3/2} + \sum_j \frac{W_j}{W_{ac \cdot t}} \theta_j^{3/2} \left[\frac{(E/k_B \theta_j + 1)^{1/2}}{\exp(\theta_j/T) - 1} + \frac{(E/k_B \theta_j - 1)^{1/2}}{1 - \exp(-\theta_j/T)} \right] + \frac{K_{i \cdot t}}{W_{ac \cdot t}} E^{-3/2} \right] \quad (III.22)$$

- Temps de relaxation longitudinal τ_ℓ :

$$\frac{1}{\tau_\ell} = W_{ac \cdot t} \left[C_A \left(\frac{E}{k_B T} \right)^{1/2} T^{3/2} + \sum_j \frac{W_j}{W_{ac \cdot t}} \Theta_j^{3/2} \left[\frac{(E/k_B \Theta_j + 1)^{1/2}}{\exp(\Theta_j/T) - 1} + \frac{(E/k_B \Theta_j - 1)^{1/2}}{1 - \exp(-\Theta_j/T)} \right] + \frac{K_{i \cdot \ell}}{W_{ac \cdot t}} E^{-3/2} \right] \quad (III.23)$$

Dans cette expression, $C_A = \frac{W_{ac \cdot \ell}}{W_{ac \cdot t}}$ est une constante d'anisotropie dont la valeur a été déterminée par Long [11] qui trouve $C_A = 1.5$ et $Z_d/Z_u = 0.05$.

Les constantes $W_j/W_{ac \cdot t}$ et $K_{i \cdot x}/W_{ac \cdot t}$ expriment les contributions relatives des collisions sur phonons optiques et sur impuretés ionisées par rapport aux collisions transversales sur phonons acoustiques.

Lorsqu'on somme la contribution des six vallées dans une même direction, deux d'entre elles interviennent longitudinalement et les quatre autres interviennent transversalement. Il est par conséquent possible de définir un temps de relaxation pondéré $\tau(E)$, qui s'exprime en fonction des temps de relaxation $\tau_t(E)$ et $\tau_\ell(E)$:

$$\tau(E) = \frac{2K}{2K + 1} \tau_t(E) + \frac{1}{2K + 1} \tau_\ell(E) \quad (III.24)$$

Dans cette expression, $K = m_\ell/m_t = 4.8$ [2] rend compte de l'anisotropie de la bande de conduction.

III.2. MÉCANISMES DE COLLISIONS DANS LE P-SI

Comme le montre la figure III.1, la bande de valence du Silicium, dont le sommet se trouve en $k = 0$

au centre de la première zone de Brillouin, est composée de trois sous-bandes correspondant à des types de populations différents :

- bande 1 peuplée de trous lourds
- bande 2 peuplée de trous légers
- bande 3 séparée des deux précédentes en $k = 0$ par l'énergie spin-orbite Δ .

Ces trois bandes sont dégénérées en $k = 0$.

Contrairement à la bande de conduction où il existe une relation analytique simple entre l'énergie E et le vecteur d'onde \vec{k} au voisinage des vallées (Cf. équation (III.8)), la bande de valence du Silicium ne peut être décrite par une telle relation : les surfaces d'énergie constante sont très fortement anisotropes, les relations de dispersion $E_i(\vec{k})$ relatives à chacune des trois sous-bandes dépendent fortement de l'orientation du vecteur d'onde \vec{k} .

Les calculs des probabilités de collisions nécessitant la connaissance parfaite des relations de dispersion $E_i(\vec{k})$, nous avons été amenés à calculer les énergies pour chaque valeur possible (en module et en argument) du vecteur d'onde $\vec{k}(\theta, \varphi, k)$. Nous exposerons par la suite, au chapitre IV, le processus de calcul qui nous a permis de déterminer ces relations de dispersion.

III.2.1. COLLISIONS SUR LE RESEAU

Lors des collisions, différents types de phonons peuvent être absorbés ou émis : phonons acoustiques, de faible énergie et phonons optiques, de grande énergie.

III.2.1.1. Collisions sur phonons acoustiques

Si $E(\vec{k})$ et $E(\vec{k}')$ désignent les énergies correspondant aux états \vec{k} et \vec{k}' , la loi de conservation de l'énergie

implique que l'on aît :

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k}') \pm \hbar\omega_q$$

où $\hbar\omega_q$ représente l'énergie du phonon émis (signe +) ou absorbé (signe -).

L'énergie du phonon étant très faible par rapport à $E(\vec{k})$ et $E(\vec{k}')$, les collisions sont élastiques et donnent principalement naissance à des transitions intrabandes. Dans ces conditions, la densité de phonons décrite par la statistique de Bose-Einstein :

$$N_q = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_q/k_B T) - 1}$$

se réduit à $N_q \approx \frac{k_B T}{\hbar\omega_q}$ puisque $\hbar\omega_q \ll k_B T$

Conwell [3] montre que l'élément de matrice est tel que :

$$|\langle k | V_D | k' \rangle|^2 = \frac{\hbar\omega_q}{2\rho V} \frac{E_{1ac}^2}{s^2} \left(N_q + \frac{1}{2} + \frac{\delta N_q}{2} \right) \quad (\text{III.25})$$

où :

- ρ = densité du matériau
- V = volume du matériau
- s = vitesse du son dans le matériau
- $\delta N_q = \begin{cases} + 1 & \text{pour une émission} \\ - 1 & \text{pour une absorption} \end{cases}$
- E_{1ac}^2 caractérise le couplage électron-phonon acoustique.

Après sommation sur toutes les valeurs de \vec{k}' possibles après collisions, il vient :

$$\sum_{k'} (w_{kk'})_{ac} = \frac{8\pi^3}{h^4} \frac{k_B T}{\rho s^2} E_{1ac}^2 (2m_d^*)^{3/2} E^{1/2} \quad (\text{III.26})$$

où m_d^* dépend des masses effectives de densité d'états m_i^* relatives aux trois bandes de valence et est défini par :

$$m_d^{*3/2} = m_1^{*3/2} + m_2^{*3/2} + m_3^{*3/2} \quad (\text{III.27})$$

On définit alors un temps de relaxation τ_{ac} dû aux collisions sur phonons acoustiques tel que :

$$\frac{1}{\tau_{ac}} = \sum_{k'} (w_{kk'})_{ac} \quad (\text{III.28})$$

Remarquant que $1/\tau_{ac}$ est proportionnel à $T \cdot E^{1/2}$ nous écrivons (III.28) sous la forme :

$$\frac{1}{\tau_{ac}} = W'_A \cdot T^{3/2} \cdot \left(\frac{E}{k_B T}\right)^{1/2} \quad (\text{III.29})$$

$$\text{où } W'_A = \frac{8\pi^3}{h^4} \frac{k_B^{3/2}}{\rho s^2} E_{1ac}^2 (2 m_d^*)^{3/2} \quad (\text{III.30})$$

III.2.1.2. Collisions sur phonons optiques

Harrison [8] a montré que les transitions entre deux états \vec{k} et \vec{k}' réalisées par phonons optiques peuvent apporter des contributions du même ordre que celles réalisées par phonons acoustiques.

Les phonons optiques ayant une énergie élevée, les collisions ne conservent plus l'énergie des porteurs. Cependant, Herring [7] a montré que la probabilité de collisions sur phonons optiques peut s'exprimer comme l'inverse d'un temps de relaxation optique τ_{op} .

On montre que l'élément de matrice s'écrit de la même façon que pour les phonons acoustiques :

$$|\langle k | V_D | k' \rangle|^2 = \frac{\hbar \omega_q}{2\rho V} \frac{E_{1op}^2}{s^2} \left(N_q + \frac{1}{2} + \frac{\delta N_q}{2} \right) \quad (\text{III.31})$$

où E_{1op}^2 caractérise le couplage électron-phonon optique.

En posant $\hbar\omega_q = k_B \cdot \theta$ où θ est la température caractéristique du phonon, on montre que, après sommation sur tous les états finaux :

$$\frac{1}{\tau_{op}} = \sum_{k'} (w_{kk'})_{op} = \frac{E_{1op}^2}{\rho s^2} \frac{m_d^{*3/2}}{\sqrt{2} \cdot \Pi} \frac{k_B^{3/2}}{h^4} \theta^{3/2} \quad (III.32)$$

$$\left[\frac{(E/k_B \theta + 1)^{1/2}}{\exp(\theta/T) - 1} + \frac{(E/k_B \theta - 1)^{1/2}}{1 - \exp(-\theta/T)} \right]$$

ou zéro si
 $E/k_B \theta < 1$

que l'on écrit :

$$\frac{1}{\tau_{op}} = W'_1 \theta^{3/2} \left[\frac{(E/k_B \theta + 1)^{1/2}}{\exp(\theta/T) - 1} + \frac{(E/k_B \theta - 1)^{1/2}}{1 - \exp(-\theta/T)} \right] \quad (III.33)$$

$$\text{avec } W'_1 = \frac{E_{1op}^2}{\rho s^2} \frac{m_d^{*3/2}}{\sqrt{2} \cdot \Pi} \frac{k_B^{3/2}}{h^4} \quad (III.34)$$

Le spectre de vibration de réseau (figure III.4) établi par Brockhouse [9] indique que les phonons optiques dont les vecteurs d'onde sont très faibles ont une température caractéristique $\theta = 735^\circ \text{ K}$.

III.2.2. COLLISIONS SUR IMPURETES IONISEES

La probabilité de collisions sur impuretés ionisées a été calculée par Brooks-Herring. On montre [12] qu'elle s'écrit, après intégration sur tous les états finaux :

$$\sum_{k'} (w_{kk'})_i = \frac{\Pi e^4 N_i}{(\epsilon_0 \epsilon_r)^2 (2m_d^*)^{1/2}} E^{-3/2} \left[\text{Ln}(b+1) - \frac{b}{b+1} \right] \quad (III.35)$$

où :

$$- b = \frac{2\epsilon_0\epsilon_r m_d^* k_B T \cdot E}{\pi \hbar^2 e^2 N'}$$

- N_i = nombre d'atomes d'impuretés ionisés

- N' = nombre de porteurs libres

et nous posons :

$$\frac{1}{\tau_i} = \sum_{k'} (w_{kk'})_i = W'_3 \cdot E^{-3/2} \left[\ln(b+1) - \frac{b}{b+1} \right] \quad (\text{III.37})$$

$$\text{avec } W'_3 = \frac{\pi e^4 N_i}{(\epsilon_0\epsilon_r)^2 (2m_d^*)^{1/2}} \quad (\text{III.38})$$

III.2.3. PROBABILITE DE COLLISIONS ET TEMPS DE RELAXATION TOTAUX

De même que pour le n-Si, lorsque les trois types de collisions coexistent, les probabilités de collisions par unité de temps s'ajoutent et il en est de même des inverses des temps de relaxation.

Le temps de relaxation total est $\tau(E)$ tel que :

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{ac}} + \frac{1}{\tau_{op}} + \frac{1}{\tau_i} \quad (\text{III.39})$$

soit :

$$\frac{1}{\tau} = W'_A \left\{ T^{3/2} \left(\frac{E}{k_B T} \right)^{1/2} + W_i \theta^{3/2} \left[\frac{(E/k_B \theta + 1)^{1/2}}{\exp(\theta/T) - 1} + \frac{(E/k_B \theta - 1)^{1/2}}{1 - \exp(-\theta/T)} \right] \right. \\ \left. \text{Zéro si } E/k_B \theta < 1 \right. \\ \left. + W_3 E^{-3/2} \left[\ln(b+1) - \frac{b}{b+1} \right] \right\} \quad (\text{III.40})$$

$$\text{avec } \left| \begin{array}{l} W_1 = \frac{W'_1}{W'_A} \\ W_3 = \frac{W'_3}{W'_A} \end{array} \right.$$

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 aux collisions sur phonons acoustiques.

III.3. CONDUCTIVITÉ LIÉE AUX PHÉNOMÈNES DE COLLISIONS

Lorsqu'on peut définir des temps de relaxation $\tau(E)$ (relations (III.22), (III.23) pour le n-Si, ou (III.40) pour le p-Si) traduisant les mécanismes de retour à l'équilibre du système de particules sous l'effet des collisions, il est aisé de calculer la conductivité du matériau semiconducteur.

Nous envisagerons deux cas, suivant que le semiconducteur est soumis à un champ électrique indépendant du temps ou dépendant du temps.

III.3.1. CONDUCTIVITE STATIQUE

Le semiconducteur est soumis à un champ électrique continu, d'amplitude faible. Il peut dans ces conditions être considéré comme près de l'équilibre. Dans ce cas, la statistique de Maxwell-Boltzmann s'applique et nous pouvons définir un temps moyen de relaxation des moments τ_m tel que :

$$\tau_m = \langle \tau(E) \rangle = \frac{\int_0^{\infty} \tau(E) \cdot E^{3/2} \cdot \exp(-E/k_B T) \cdot dE}{\int_0^{\infty} E^{3/2} \cdot \exp(-E/k_B T) \cdot dE} \quad (\text{III.41})$$

On montre alors aisément [6] que la conductivité statique présentée par le semiconducteur s'exprime comme :

$$\sigma_0 = \frac{(N \text{ ou } p) e^2}{m^*} \tau_m \quad (\text{III.42})$$

où :

- N ou p sont les concentrations en porteurs libres, respectivement dans les cas du n-Si et du p-Si
- m^* est la masse effective de conductivité, égale à 0.26 m pour le n-Si et à 0.374 m pour le p-Si [13].

III.3.2. CONDUCTIVITE HYPERFREQUENCE

Le champ électrique appliqué au semiconducteur est sinusoïdal, de pulsation ω et d'amplitude faible.

La conductivité est alors une grandeur complexe $\sigma^*(\omega)$ dont l'expression s'obtient en remplaçant $\langle \tau(E) \rangle$ par $\left\langle \frac{\tau(E)}{1 + i\omega \tau(E)} \right\rangle$ dans l'équation (III.42) [14] :

$$\sigma^*(\omega) = \sigma'(\omega) + i \sigma''(\omega) = \frac{(N \text{ ou } p) e^2}{m^*} \left\langle \frac{\tau(E)}{1 + i\omega \tau(E)} \right\rangle \quad (\text{III.43})$$

avec :

$$\left\langle \frac{\tau(E)}{1 + i\omega \tau(E)} \right\rangle = \frac{\int_0^\infty \frac{\tau(E)}{1 + i\omega \tau(E)} \cdot E^{3/2} \cdot \exp(-E/k_B T) \cdot dE}{\int_0^\infty E^{3/2} \cdot \exp(-E/k_B T) \cdot dE} \quad (\text{III.44})$$

Les parties réelle et imaginaire de $\sigma^*(\omega)$ s'expriment alors de la façon suivante :

$$\begin{cases} \sigma'(\omega) = \frac{(N \text{ ou } p) e^2}{m^*} \left\langle \frac{\tau(E)}{1 + \omega^2 \tau^2(E)} \right\rangle \\ \sigma''(\omega) = - \frac{(N \text{ ou } p) e^2}{m^*} \left\langle \frac{\omega \tau(E)}{1 + \omega^2 \tau^2(E)} \right\rangle \end{cases} \quad (\text{III.45})$$

III.3.3. DETERMINATION EXPERIMENTALE DE τ_m
A PARTIR DES SPECTRES DE CONDUCTIVITE

L'analyse des relations (III.22), (III.23) pour le n-Si et (III.40) pour le p-Si montre que les lois de variations de $\tau(E)$ en fonction de l'énergie peuvent se mettre sous la forme :

$$\tau(E) = \frac{1}{W_{ac}} f(E, T, \theta_i, W_i) \quad (III.46)$$

où :

$$- W_{ac} \left[\begin{array}{l} = W_{ac} \cdot t \text{ dans le cas du n-Si} \\ = W'_A \text{ dans le cas du p-Si} \end{array} \right] \text{ est une constante.}$$

- $f(E, T, \theta_i, W_i)$ est une fonction de l'énergie, de la température du réseau, des températures de phonons θ_i et où les W_i rendent compte de l'importance relative des divers mécanismes de collisions, par rapport aux collisions sur phonons acoustiques.

La valeur de W_{ac} est cependant assez mal connue et il est par conséquent impossible de calculer directement et sans ambiguïté $\tau_m = \langle \tau(E) \rangle$ à partir des expressions (III.46) et (III.41).

Nous allons montrer qu'il est cependant possible d'accéder directement à W_{ac} et donc à τ_m en utilisant les spectres de conductivité réduite.

En effet, (III.46) nous permet d'écrire :

$$\tau_m = \langle \tau(E) \rangle = \frac{1}{W_{ac}} \langle f(E, T, \theta_i, W_i) \rangle \quad (III.47)$$

et par conséquent :

$$\sigma_0 = \frac{(N \text{ ou } p)}{m^*} \frac{e^2}{W_{ac}} \langle f(E, T, \theta_i, W_i) \rangle \quad (III.48)$$

Par l'intermédiaire de (III.45), on obtient :

$$\sigma'(\omega) = \frac{(N \text{ ou } p) e^2}{m^* \omega} \left\langle \frac{\frac{\omega}{W_{ac}} f(E, T, \theta_i, W_i)}{1 + \omega^2 \frac{f^2(E, T, \theta_i, W_i)}{W_{ac}^2}} \right\rangle \quad (\text{III.49})$$

La conductivité réduite $\sigma'(\omega)/\sigma_0$ peut alors s'écrire :

$$\begin{aligned} \sigma'(\omega)/\sigma_0 &= \frac{1}{\left\langle \omega \frac{f(E, T, \theta_i, W_i)}{W_{ac}} \right\rangle} \left\langle \frac{\omega \frac{f(E, T, \theta_i, W_i)}{W_{ac}}}{1 + \omega^2 \frac{f^2(E, T, \theta_i, W_i)}{W_{ac}^2}} \right\rangle \\ &= g(\omega \langle \tau(E) \rangle) \end{aligned} \quad (\text{III.50})$$

Si la courbe $\sigma'(\omega)/\sigma_0 = g(\omega \langle \tau(E) \rangle) = g(\omega \tau_m)$ est tracée en fonction de $\omega \tau_m$ en utilisant en abscisse une échelle logarithmique, la forme de la courbe dépend uniquement de $f(E, T, \theta_i, W_i)$, c'est-à-dire des températures de phonons θ_i et du taux de collisions sur phonons optiques et sur impuretés ionisées par rapport aux collisions sur phonons acoustiques, et non de la constante W_{ac} .

En d'autres termes, une modification de la valeur de W_{ac} n'entraîne, pour une loi $f(E, T, \theta_i, W_i)$ donnée, qu'une translation du spectre $\sigma'(\omega)/\sigma_0$ suivant l'axe ($\text{Log } \omega \tau_m$)

En conséquence, il est possible d'accéder directement à la valeur exacte du temps de relaxation τ_m sans connaissance préalable de la constante W_{ac} en procédant de la façon suivante :

- dans un premier temps, nous nous fixons une loi de variation $f(E, T, \theta_i, W_i)$. Par intégration numérique, il est alors possible de tracer le spectre théorique de conductivité réduite σ'/σ_0 en fonction de $\omega \tau_m$ (équation (III.50)) qui correspond à ce type de distribution (figure III.5.a.).

Remarquons que pour $\omega \tau_m = 1$, la valeur numérique de σ'/σ_0 n'est égale à 0.5 que dans le cas où τ_m est indépendant de l'énergie (modèle de Drude-Zener). Cette constatation est mise en évidence sur la figure III.6.

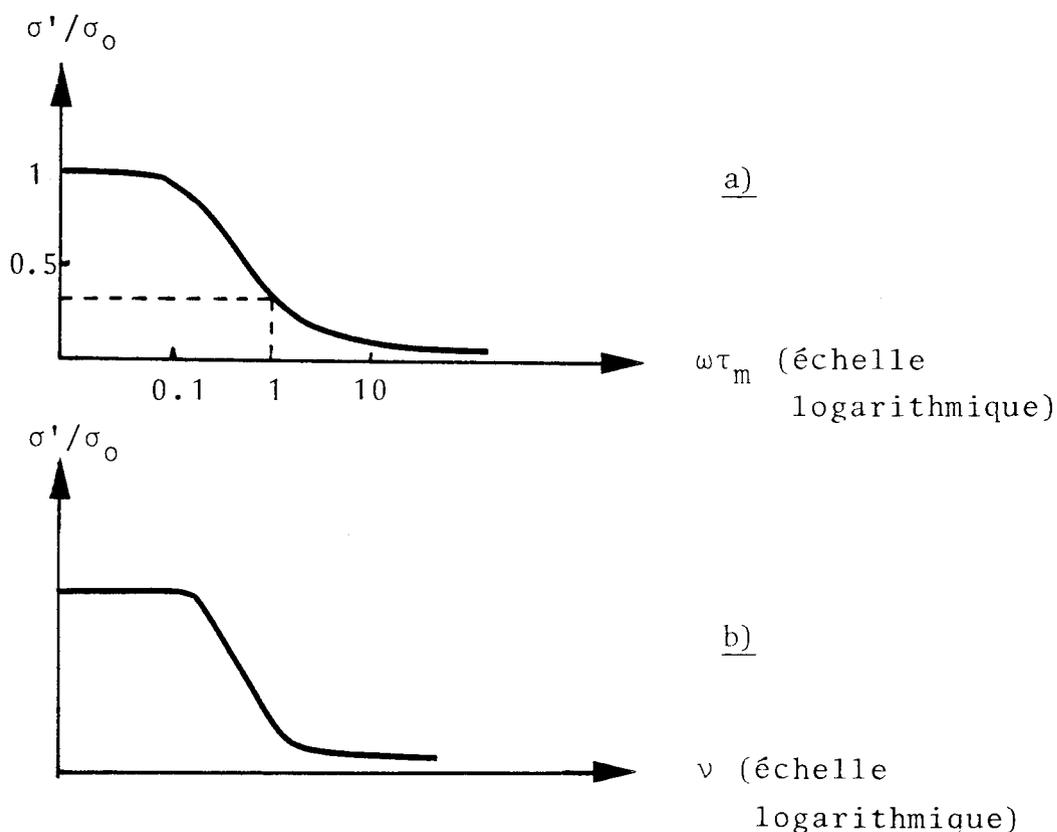


Figure III.5 : Détermination du temps de relaxation.

a) Courbe théorique correspondant à la distribution envisagée $f(E, T, \Theta_i, W_i)$;

b) Spectre expérimental.

- Nous cherchons alors à superposer à ce spectre théorique le spectre expérimental de conductivité réduite en fonction de la fréquence (figure III.5.b.), par simple translation des graphiques le long de l'axe horizontal.

- Si les deux spectres a) et b) ne coïncident pas parfaitement, le modèle choisi -donc la loi de variation $f(E, T, \theta_i, W_i)$ - est modifié (modification des constantes de couplage W_i et des températures de phonons θ_i) jusqu'à ce qu'on obtienne une coïncidence parfaite entre a) et b).

Nous utiliserons dans ce but les différentes valeurs de θ_i et W_i connues dans la littérature.

- Lorsque la coïncidence des spectres a) et b) est obtenue, il est alors possible de connaître τ_m puisque la superposition des graphiques nous indique, par exemple, la fréquence ν pour laquelle $\omega \tau_m = 1$.

Nous obtenons donc une détermination expérimentale de τ_m , sans connaissance préalable :

- de la concentration en porteurs libres N ou p ;
- de la masse effective m^* de ces porteurs ;
- de la constante W_{ac} .

REMARQUE : La concentration en porteurs libres n'intervient que dans le terme de $f(E, T, \theta_i, W_i)$ relatif aux collisions sur impuretés ionisées.

Dans le cas des concentrations en porteurs libres envisagées dans ce travail, ce terme n'a qu'une influence minime ($\neq 2\%$) sur la fonction $f(E, T, \theta_i, W_i)$, tout au moins à température ambiante.

On peut donc se contenter, pour calculer son influence, de posséder un ordre de grandeur de N ou p à température ambiante. Cet ordre de grandeur sera par exemple fourni par l'intermédiaire des courbes $\rho(N)$ ou $\rho(p)$ de la littérature ; la valeur de N ou p ainsi évaluée est utilisée dans un premier temps pour tracer le spectre théorique de conductivité réduite σ'/σ_0 en fonction de $\omega \tau_m$.

Lorsque la superposition des graphiques a) et b) est réalisée de la meilleure façon possible sur tout le domaine des fréquences (compte tenu que N ou p sont alors des valeurs approchées), nous en déduisons une valeur approchée de τ_m .

Cette valeur de τ_m , associée à la valeur expérimentale de σ_0 (Cf. chapitre II), permet de déduire une valeur plus réaliste de la concentration en porteurs libres : N ou $p = \frac{m^* \sigma_0}{e^2 \tau_m}$, laquelle est réinjectée dans la fonction $f(E, T, \theta_i, W_i)$.

Ce processus peut être poursuivi jusqu'à convergence complète des résultats et donne alors la vraie valeur de τ_m .

La méthode que nous venons d'exposer est valable quelle que soit la température T et elle permet donc d'accéder directement à la loi de variation $\tau_m(T)$, ce qui n'est pas le cas lorsque τ_m est déduit classiquement de mesures de mobilité en fonction de la température.

Par ailleurs, notre méthode nous permet d'obtenir a posteriori une valeur originale de W_{ac} à température ambiante dans des conditions telles que, pour les concentrations en impuretés que nous considérons, la contribution des collisions sur impuretés ionisées est faible.

Ceci n'est pas le cas dans la méthode usuelle qui consiste à ajuster W_{ac} sur les mesures de mobilité à très basse température [2] : les collisions sur phonons optiques sont alors négligeables devant celles sur phonons acoustiques, cependant la contribution relative des collisions sur impuretés ionisées est très importante et la détermination de W_{ac} dépend essentiellement de la description plus ou moins exacte de ce processus.

Notre valeur de $W_{ac} = \frac{\tau_m \exp^{al} (293^\circ \text{ K})}{\langle f(E, T = 293^\circ \text{ K}, \theta_i, W_i) \rangle}$ est utilisée

par la suite pour interpréter les résultats expérimentaux obtenus à température variable.

De plus, en utilisant les résultats relatifs à $\sigma_0(T)$ (Cf. chapitre II) conjointement à $\tau_m(T)$, nous pouvons en déduire la loi de variation de la concentration en porteurs libres en fonction de la température $N(T)$ (cas du n-Si) ou $p(T)$ (cas du p-Si), en supposant que les masses effectives de conductivité restent constantes en fonction de la température, ou de façon plus générale, la variation $(N \text{ ou } p)/m^*$ en fonction de la température, si l'on admet que la masse effective puisse varier avec la température.

III.3.3.1. Cas du n-Si

La figure III.6 représente les valeurs théoriques de la conductivité réduite, à $T = 293^\circ \text{ K}$, en fonction de $\omega \tau_m$, pour différents types de distribution $\tau(E)$.

Trois cas sont ici envisagés :

- a) - temps de relaxation indépendant de l'énergie : bien qu'il soit bien connu que le modèle de Drude-Zener ne décrive que très imparfaitement le comportement fréquentiel de la conductivité présentée par le semiconducteur, nous l'avons envisagé, de façon à mettre en évidence l'erreur commise lors de son utilisation éventuelle.
- b) - temps de relaxation $\tau \sim T.E^{1/2}$: nous ne prenons en compte ainsi que les collisions sur phonons acoustiques.
- c) - temps de relaxation $\tau(E)$ tenant compte des collisions sur phonons acoustiques, optiques et sur impuretés ionisées (Cf. relations (III.22) et (III.23)).

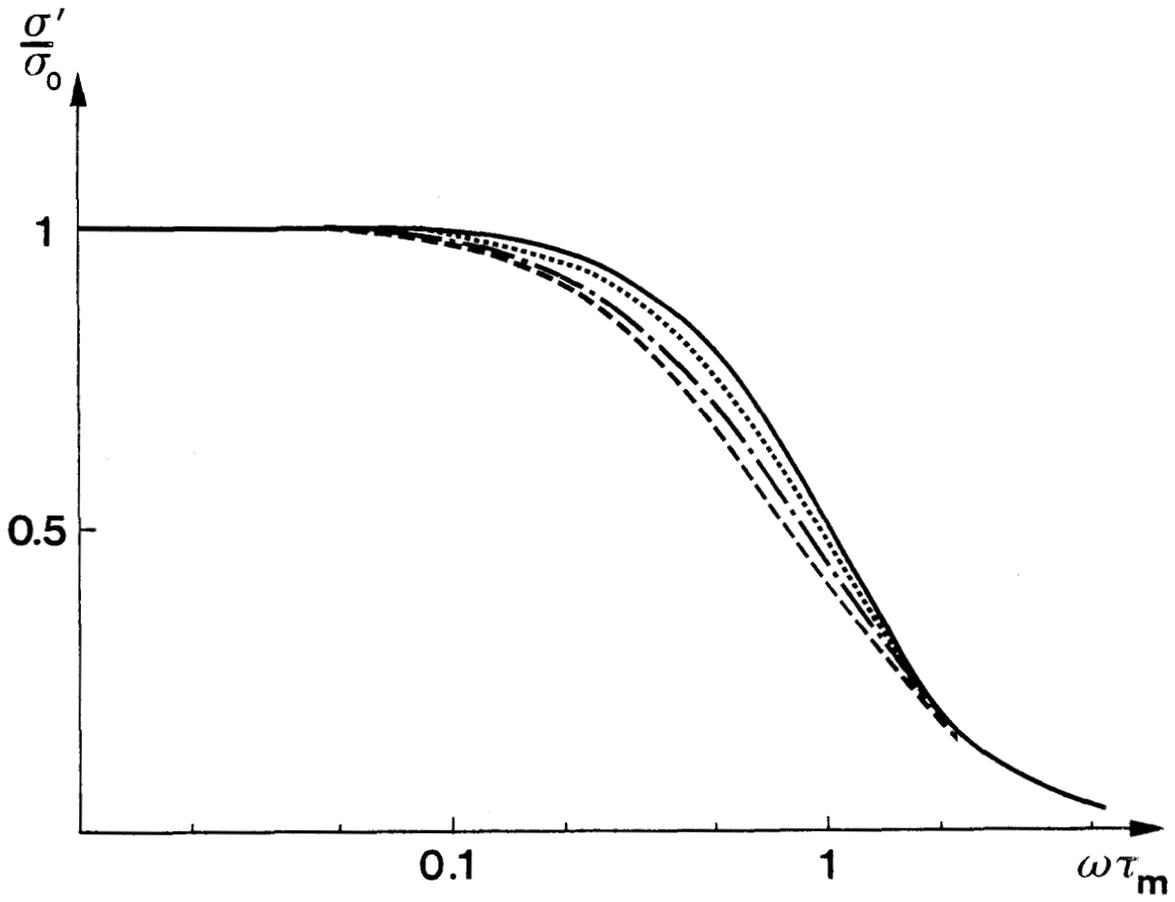


Figure III.6 : Conductivité réduite théorique pour différents types de distributions $\tau(E)$.

- Drude
- $\tau \sim T \cdot E^{1/2}$
- Dumke-Folland-Onton-Costato
- - - - Long



Les valeurs des températures de phonons θ_j et des constantes W_j (Cf. équation (III.16)) liées aux potentiels de déformation étant encore très controversées, les calculs théoriques relatifs au cas c) ont été effectués en utilisant des modèles proposés par différents auteurs ; ces modèles sont exposés dans le tableau III.2.

	θ_1 (°K) "g"	θ_2 (°K) "f"	θ_3 (°K) "f"	$\frac{W_1}{\bar{W}_{ac \cdot t}}$	$\frac{W_2}{\bar{W}_{ac \cdot t}}$	$\frac{W_3}{\bar{W}_{ac \cdot t}}$
LONG [15]	190	630	-	0.15	2	-
DUMKE [16]	307	534	-	0.835	0.334	-
FOLLAND [17]	290	558	695	0.623	0.124	0.490
ONTON [18]	307	540	-	0.635	0.635	-
COSTATO et REGGIANI [19]	307	540	680	0.915	0.13	0.082

TABLEAU III.2.

Dans tous les cas, la contribution des collisions sur impuretés ionisées a été calculée en utilisant le modèle de Jorgensen [10] dont les caractéristiques ont été données auparavant (tableau III.1).

On peut voir sur la figure III.6 que les collisions sur phonons optiques ont un effet important sur l'allure de la courbe $\sigma'/\sigma_0(\omega \tau_m)$ mais qu'il paraît difficile expérimentalement de trancher en faveur de l'un quelconque des modèles envisagés au tableau III.2, les écarts entre les diverses courbes théoriques étant très faibles.

La comparaison des spectres expérimentaux et théoriques est effectuée figure III.7.

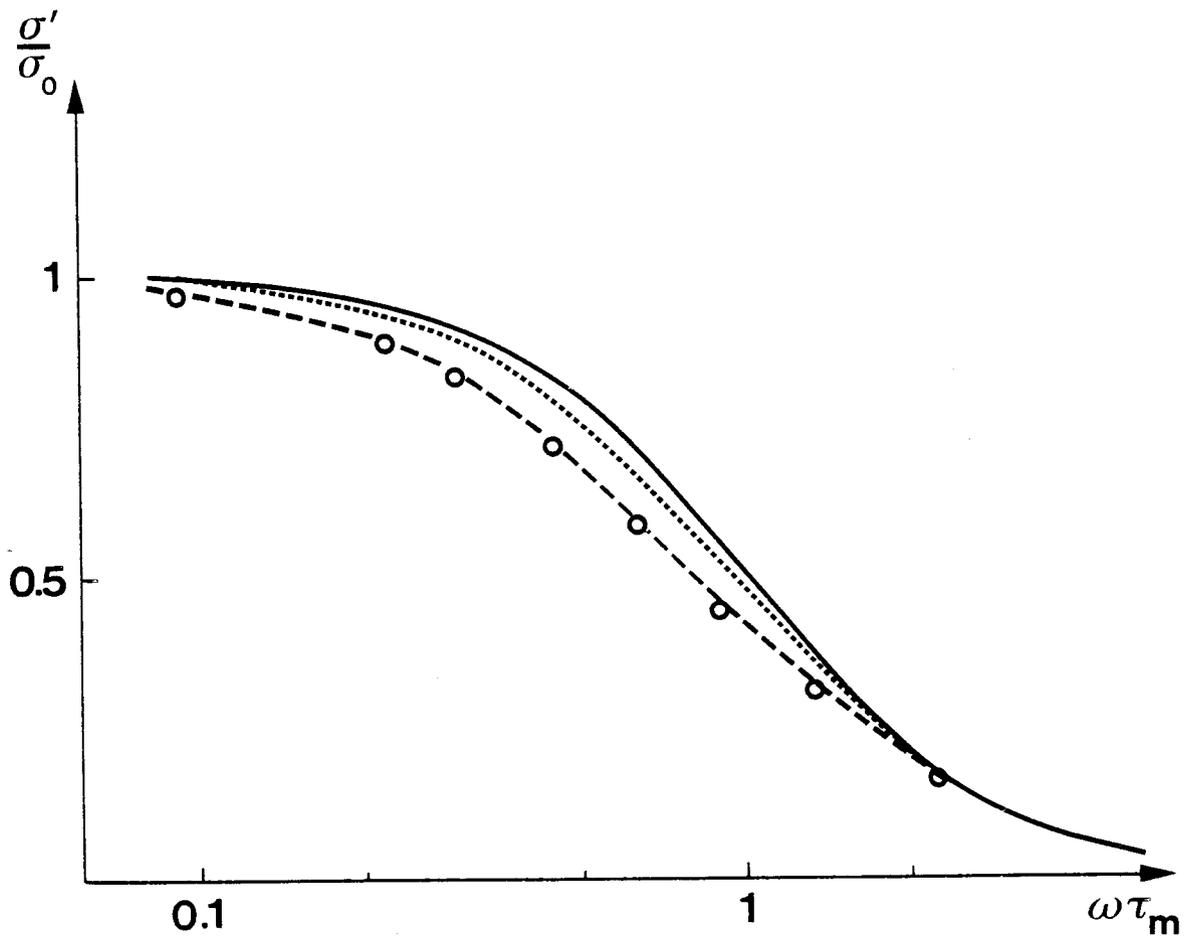


Figure III.7 : Comparaison des spectres expérimentaux et théoriques, à 293° K, pour le monocristal n° 4 (n-Si 9 $\Omega \cdot \text{cm}$).

- $\tau(E) = \text{cte}$
- - - - - $\tau(E) \sim T \cdot E^{1/2}$
- Long
- Points expérimentaux (Fig. II.14) reportés en fonction de $\omega\tau_m$.



Elle permet de conclure que le modèle élémentaire de Drude-Zener ($\tau(E)$ indépendant de l'énergie), ainsi que le modèle ne tenant compte que des seules collisions sur phonons acoustiques ne permettent pas d'expliquer le comportement fréquentiel de la conductivité présentée par le semiconducteur. Par contre, si nous prenons en compte les collisions sur phonons acoustiques, sur phonons optiques et sur impuretés ionisées, il est possible de superposer les spectres expérimentaux et théoriques. On peut donc ainsi déterminer le temps moyen de relaxation des moments.

En pratique, nous avons utilisé le modèle de Long pour effectuer cette détermination, car il semble décrire mieux que les autres la réalité expérimentale.

Les valeurs expérimentales de τ_m obtenues à 293° K pour les échantillons n° 1 à 4 sont données dans le tableau III.3.

n° échantillon	τ_m à 293° K
1	$2.2 \times 10^{-13} \text{ s} \pm 0.04 \times 10^{-13} \text{ s}$
2	" "
3	$2.4 \times 10^{-13} \text{ s} \pm 0.04 \times 10^{-13} \text{ s}$
4	$2.32 \times 10^{-13} \text{ s} \pm 0.04 \times 10^{-13} \text{ s}$

TABLEAU III.3.

Ces valeurs de τ_m nous ont permis d'évaluer la constante $W_{ac.t}$ qui est indépendante de la concentration en impuretés :

$$W_{ac.t} = (2.22 \pm 0.04) \times 10^8 / \text{sec}/^\circ \text{K}^{3/2}$$

Les mêmes mesures sont effectuées en fonction de la température, de 293° K à 173° K. Notons que lorsque la température diminue, la contribution relative des collisions sur phonons optiques devient de plus en plus faible. De ce

fait, les spectres de conductivité réduite correspondant aux différents modèles envisagés (tableau III.2), déjà très voisins à température ambiante, vont tendre à se confondre.

Nos résultats expérimentaux permettent cependant de lever cette indétermination. En effet, nous ne mesurons pas la conductivité mais le coefficient de transmission présenté par le matériau. Ce coefficient de transmission varie exponentiellement avec la conductivité (Cf. équation (I.5)) et de ce fait les effets des diverses constantes W_i se trouvent considérablement amplifiés. Il nous a semblé intéressant de calculer les valeurs théoriques des coefficients de transmission présentés par les échantillons mesurés, pour les différents modèles envisagés dans le tableau III.2.

La figure III.8 représente les variations du coefficient de transmission relatif au monocristal n° 4, réduit par rapport à sa valeur à $T = 293^\circ \text{K}$, en fonction de la température, à une longueur d'onde de 4.4 mm, pour les différents modèles envisagés. Nous comparons ces valeurs aux valeurs expérimentales : nous constatons un excellent accord avec le modèle de Long.

Les valeurs expérimentales $\tau_m(T)$ relatives au monocristal n° 4 sont reportées sur la figure III.9.

Nous en déduisons la loi de variation de la mobilité en fonction de la température $\mu(T)$ que nous comparons figure III.10 à des valeurs obtenues par différents auteurs utilisant, soit des mesures de temps de vol [2] [20] réalisées sur des échantillons très purs ($N \leq 10^{12}/\text{cm}^3$), soit des déterminations déduites de mesures d'effet Hall [21] [26]. Nos mesures sont en excellent accord avec ces diverses valeurs de la littérature.

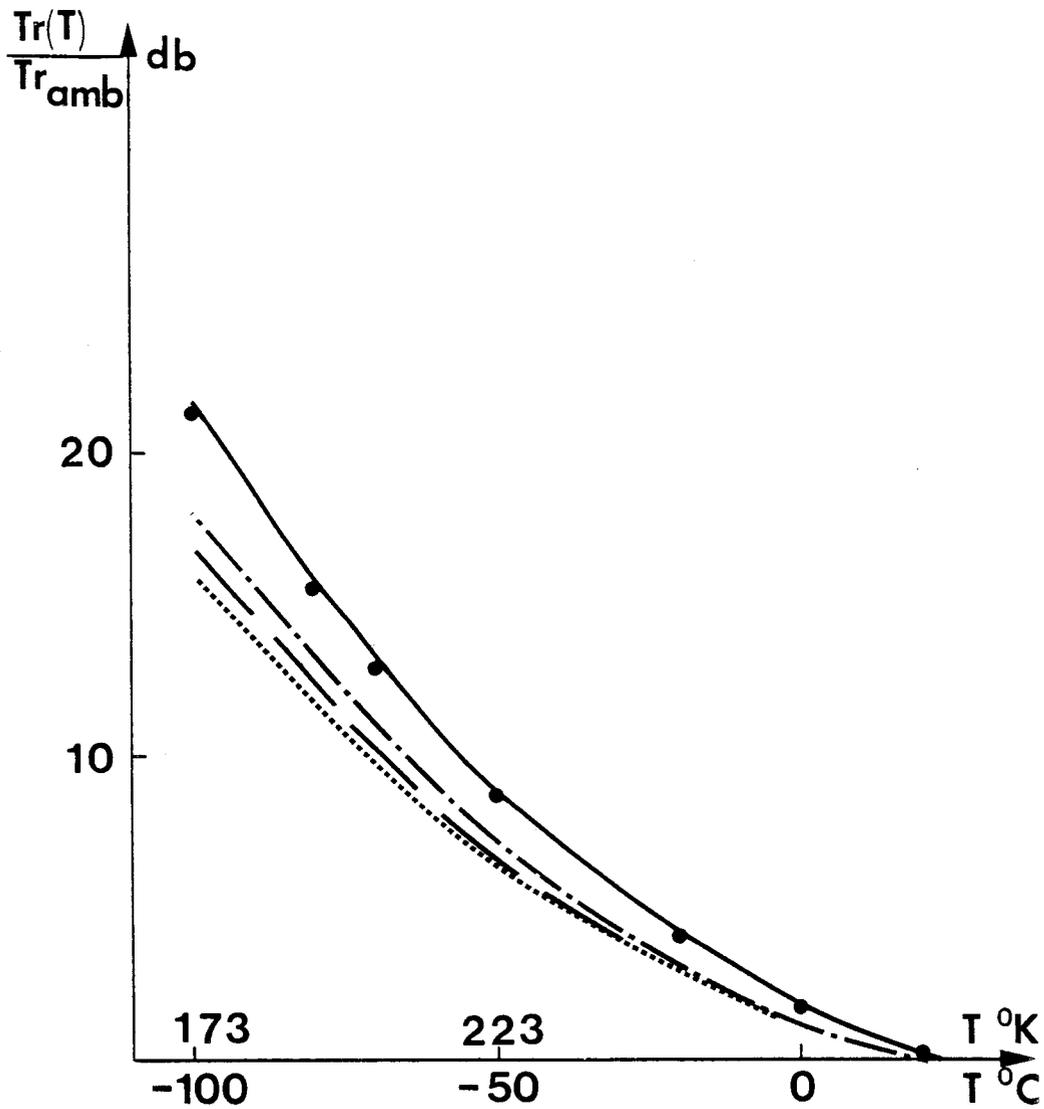


Figure III.8 : Coefficient de transmission (réduit par rapport à sa valeur à 293° K) en fonction de la température, à $\lambda = 4.4$ mm. Comparaison des valeurs expérimentales et théoriques.

- Long
- - - Folland
- — — Onton
- - - - - Dumke-Costato
- Points expérimentaux



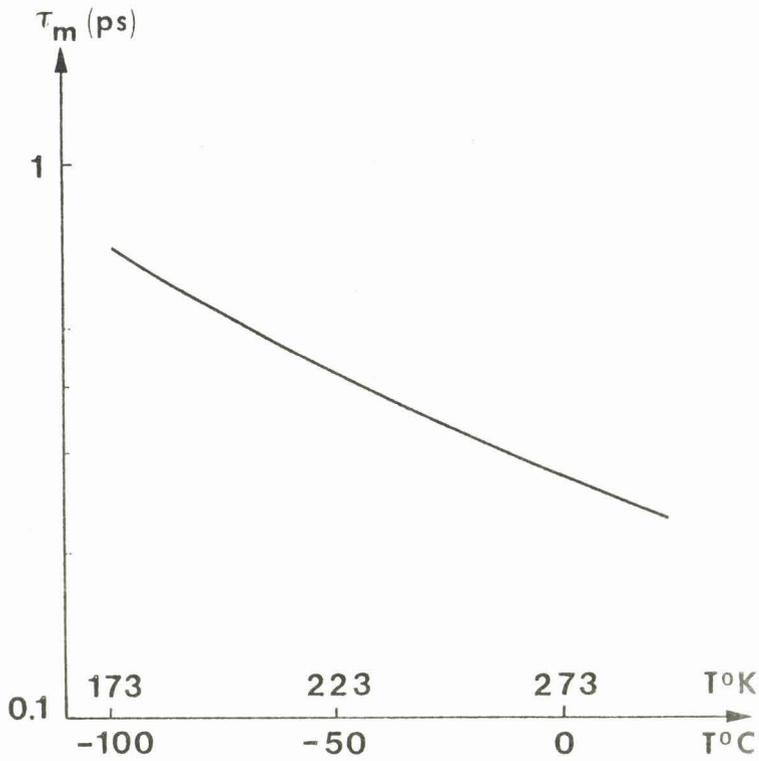


Figure III.9 : Temps de relaxation des moments en fonction de la température, pour le monocristal n° 4.

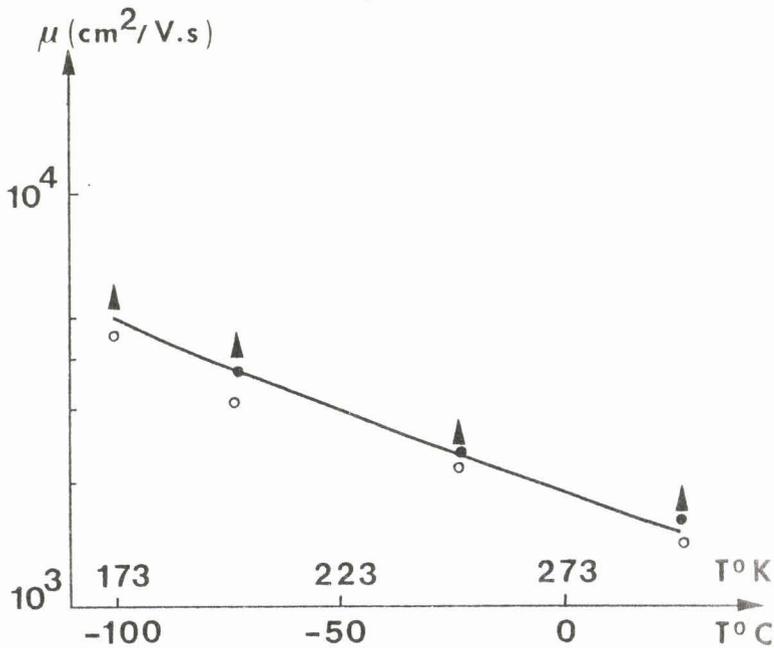


Figure III.10 : Mobilité en fonction de la température pour le monocristal n° 4.



- Nos valeurs expérimentales
- ▲ Logan et Peters [26]
- Norton [21]
- Canali [2]

III.3.3.2. Cas du p-Si

De même que pour le n-Si, les trois types de collisions -sur phonons acoustiques, sur phonons optiques et sur impuretés ionisées- coexistent.

La figure III.11 compare les spectres de conductivité réduite théorique aux valeurs expérimentales obtenues sur le monocristal n° 5, pour des températures variant de 293° K à 173° K.

Les valeurs des constantes intervenant dans l'expression du temps de relaxation $\tau(E)$ (équation (III.40)) que nous avons utilisées lors du calcul des spectres théoriques $\sigma'/\sigma_0 = g(\omega \langle \tau(E) \rangle)$ (Cf. équation (III.50)) à température variable, sont données dans le tableau III.4.

Θ	$= 735^\circ \text{ K}$	[9]
W_1	$= \frac{W'_1}{W'_A}$	$= 2.5$ [22]
W_3	$= \frac{W'_3}{W'_A}$	$= 3.4 \times 10^5 (\text{°K})^3$ [23]
x	$= \frac{b}{T \cdot E}$	$= 2.9 \times 10^{-2} (\text{°K})^{-2}$ [23]

TABEAU III.4

L'examen de la figure III.11 montre que le modèle envisagé -relaxation des porteurs libres mettant en jeu les collisions sur phonons acoustiques, optiques et sur impuretés ionisées- décrit correctement les résultats expérimentaux pour des fréquences inférieures à environ 80 cm^{-1} mais que d'importants écarts apparaissent aux fréquences plus élevées.

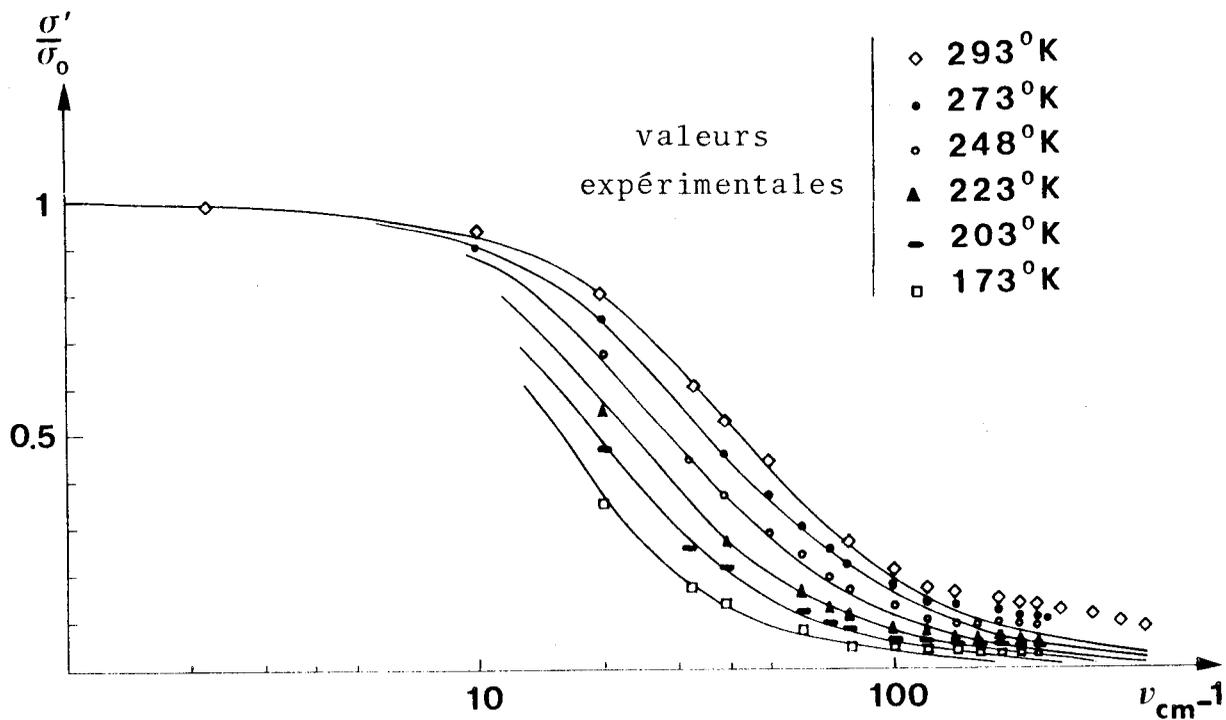


Figure III.11 : Conductivité réduite théorique en fonction de la fréquence et de la température (*). Comparaison aux valeurs expérimentales (monocristal n° 5 : p-Si 2 $\Omega \cdot \text{cm}$)

(*) : courbes en traits pleins.



Les phénomènes de relaxation ne permettent donc d'expliquer les variations de conductivité que pour des fréquences inférieures à 80 cm^{-1} . Au delà de cette fréquence, pour les matériaux considérés dans cette étude, une conductivité supplémentaire apparaît, que nous nous proposons d'étudier ultérieurement à partir de l'existence de transitions de porteurs entre les différentes bandes de valence, sous l'effet de la radiation appliquée au semiconducteur. La figure III.12 donne un exemple de cet accroissement de conductivité, à $T = 293^\circ \text{ K}$. L'étude de ces mécanismes de transitions interbandes fait l'objet du chapitre suivant.

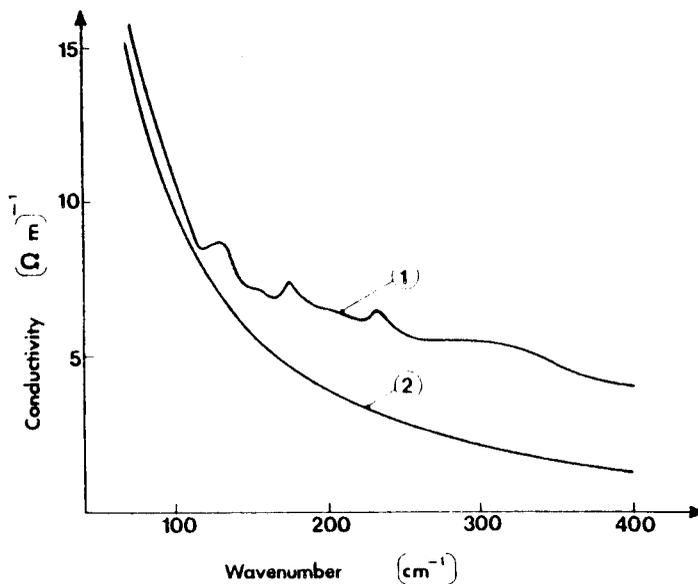


Figure III.12 : Comparaison des conductivités expérimentale (courbe 1) et de relaxation (courbe 2) pour $\nu > 60 \text{ cm}^{-1}$, à 293° K , pour le monocristal n° 5 (p-Si $2 \Omega \cdot \text{cm}$) [23].

Bien que l'ajustement des spectres théoriques et expérimentaux ne soit pas possible sur tout le domaine de fréquences, il est cependant possible de déterminer la valeur du temps moyen de relaxation des moments τ_m . Une valeur de $\tau_m = 10^{-13}$ s à 293° K a été ainsi trouvée (remarquons que la fréquence pour laquelle $\omega \tau_m = 1$ est de 53 cm^{-1} pour $\tau_m = 10^{-13}$ s ; cette fréquence est nettement en deçà de 80 cm^{-1} , fréquence pour laquelle apparaît l'excès de conductivité).

Les valeurs expérimentales de $\tau_m(T)$ sont reportées sur la figure III.13 ; nous les comparons aux résultats déduits des travaux récents de Sheng S. Li [24] (études théoriques et expérimentales de mobilité et de résistivité en fonction de la température d'échantillons de caractéristiques statiques similaires aux nôtres). L'accord est excellent sur tout le domaine de températures ($\neq 5\%$).

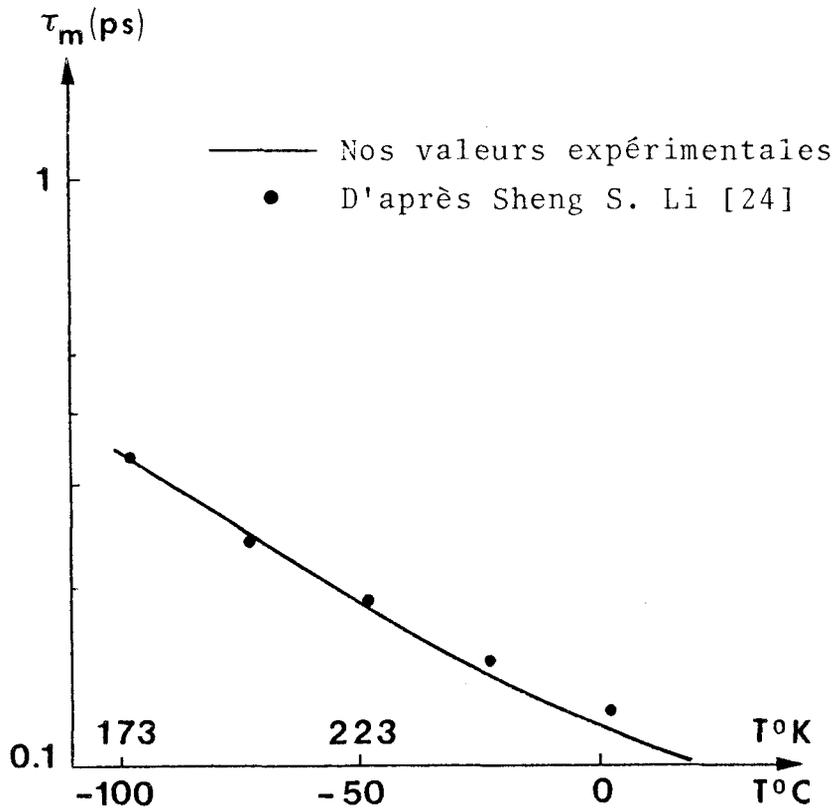


Figure III.13 : Temps de relaxation des moments en fonction de la température (monocristal n° 5).

De même que pour le n-Si, nous avons déterminé la valeur de la constante W'_A à partir de nos résultats expérimentaux.

Nous trouvons :

$$W'_A = (1.38 \pm 0.04) \times 10^8 / \text{sec} / ^\circ\text{K}^{3/2}$$

La valeur du potentiel de déformation acoustique E_{1ac} (obtenue à partir de (III.30)) est alors de 2.56 eV. Certains auteurs, tels Sheng. S. Li [24] et Ottaviani [25] expriment la constante de couplage W_1 entre phonons optiques et phonons acoustiques sous la forme :

$$W_1 = \frac{W'_1}{W'_A} = \frac{D^2 \hbar^2 s^2}{2E_{1ac}^2 k_B^2 \theta^2}$$

Le paramètre de déformation D est alors relié à W_1 et E_{1ac}^2 par :

$$D = \frac{\sqrt{2 \cdot W_1} E_{1ac} \cdot k_B \cdot \theta}{\hbar s}$$

Nous comparons dans le tableau III.5 les valeurs du paramètre de déformation D obtenues par ces auteurs à notre valeur expérimentale, déduite de W'_A et de E_{1ac} .

Sheng. S. Li	$D = 5.7 \times 10^8 \text{ eV/cm}$
Ottaviani	$D = 5.1 \times 10^8 \text{ eV/cm}$
Notre valeur expérimentale	$D = 6.07 \times 10^8 \text{ eV/cm}$

TABLEAU III.5

La variation de la mobilité en fonction de la température $\mu(T)$ est déduite de ces valeurs. Sur la figure III.14 nous comparons nos valeurs expérimentales

à celles de différents auteurs ; ici encore l'accord est excellent.

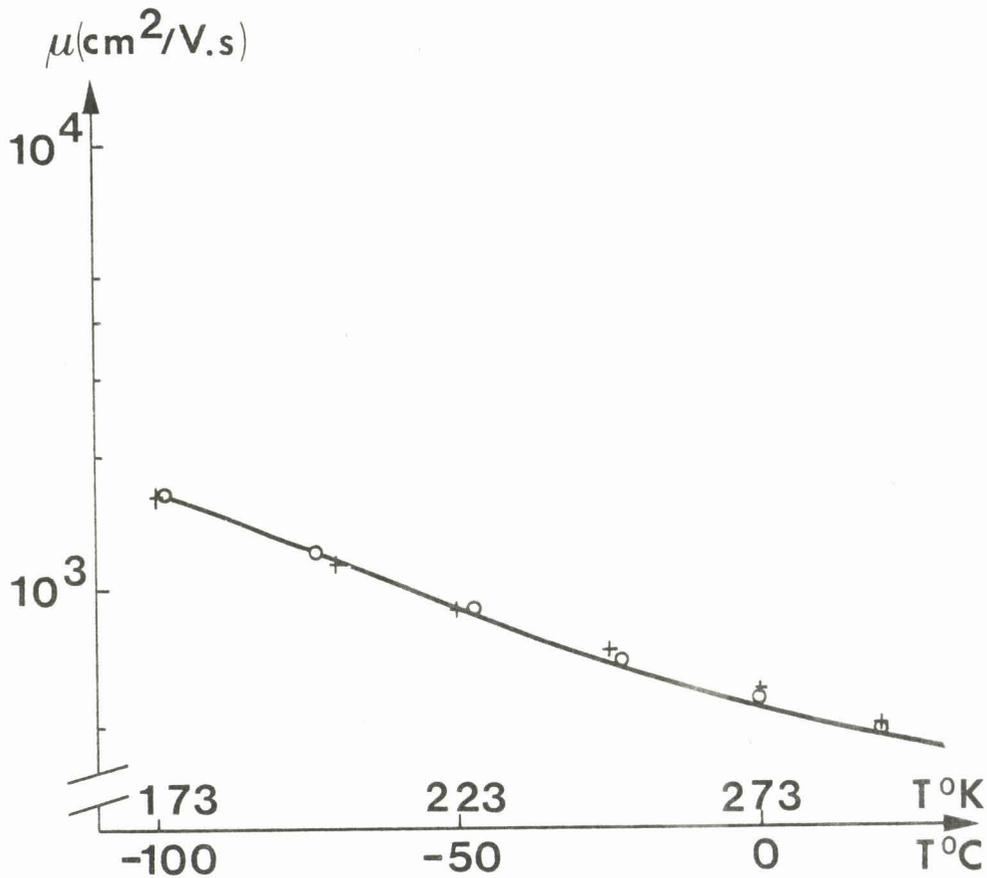


Figure III.14 : Mobilité en fonction de la température (monocristal n° 5)

- Nos valeurs expérimentales
- + D'après Sheng. S. Li [24]
- D'après Ottaviani [25]

Par ailleurs, la variation en fonction de la température de la concentration en porteurs libres, déduite des valeurs expérimentales de $\sigma_0(T)$ (figure II.13) et de $\tau_m(T)$ (figure III.13) est représentée figure III.15 et comparée aux résultats obtenus par Sheng S. Li.



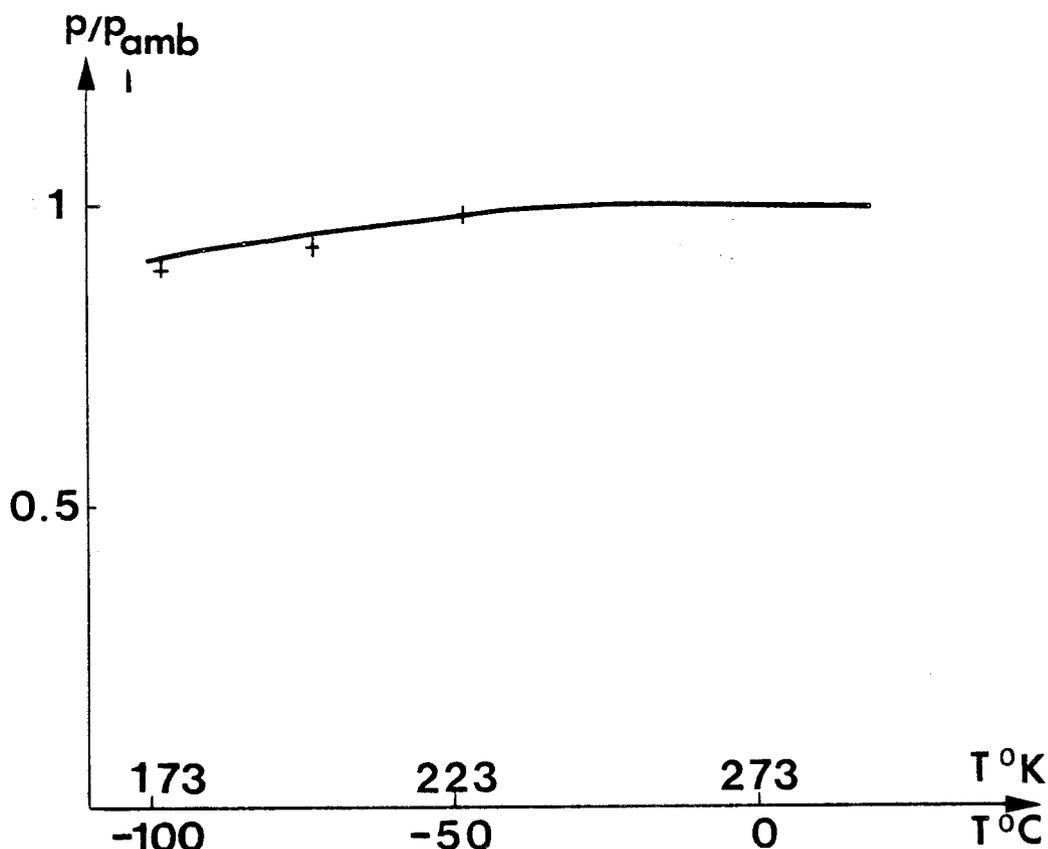


Figure III.15 : Variation de la concentration en porteurs libres en fonction de la température (monocristal n° 5)

— Nos valeurs expérimentales
 + D'après Sheng S. Li. [24].

III.4. CONCLUSION

Nous venons de montrer qu'une prise en compte complète des phénomènes de collisions des porteurs sur le réseau (collisions sur phonons acoustiques et sur phonons optiques) et sur les impuretés ionisées permet de décrire très correctement les variations de conductivité du n-Si en fonction de la fréquence et de la température. Dans le cas du p-Si, les phénomènes de relaxation des porteurs libres ne permettent de décrire les variations de conductivité que jusqu'à des fréquences inférieures à environ 80 cm^{-1} : au delà de cette limite, les transitions de porteurs entre bandes de valence deviennent importantes et provoquent un accroissement de conductivité.

Cet accroissement de conductivité n'avait jusqu'à présent jamais été mis en évidence expérimentalement.

Par ailleurs, nous avons pu déterminer directement, aussi bien pour le n-Si que pour le p-Si, l'évolution du temps moyen de relaxation des moments en fonction de la température.

BIBLIOGRAPHIE

CHAPITRE III

- [1] ADAWI
Phys. Rev. 120, 118 (1960).
- [2] C. CANALI et al.
Phys. Rev. B 12, 2265 (1975).
- [3] E.M. CONWELL
Solid State Physics (Supplement 9)
Acad. Press, New York (1967).
- [4] L.I. SCHIFF
"Quantum Mechanics" Mc Graw-Hill, New York (1949).
- [5] SHYH WANG
"Solid State Electronics"
Mc Graw-Hill, New York (1966).
- [6] P. KIREEV
"Physique des semiconducteurs"
Mir, Moscou (1975).
- [7] C. HERRING
Bell System Tech. J. 34, 237 (1955)
- [8] W.A. HARRISSON
Phys. Rev. 104, 1281 (1956).

- [9] B.N. BROCKHOUSE
Phys. Rev. Letters 2, 256 (1959).
- [10] M.H. JORGENSEN
Phys. Rev. 156, 834 (1967)
- [11] D. LONG and J. MYERS
Phys. Rev. 120, 39 (1960).
- [12] H. BROOKS and C. HERRING
Phys. Rev. 83, 879 (1951).
- [13] A. VAPAILLE
"Physique des dispositifs à semiconducteurs"
Tome I, Masson, Paris (1970).
- [14] J.D. HOLM and K.S. CHAMPLIN
J. Appl. Phys. 39, 275 (1968).
- [15] D. LONG
Phys. Rev. 120, 2024 (1960).
- [16] W.P. DUMKE
Phys. Rev. 118, 938 (1960).
- [17] N.O. FOLLAND
Phys. Rev. B 1, 1648 (1970).
- [18] A. ONTON
Phys. Rev. Letters 22, 288 (1969).
- [19] M. COSTATO and L. REGGIANI
Phys. Stat. Sol. 38, 665 (1970).
- [20] C. JACOBONI et al.
Solid State Electronics 20, 77 (1977).

- [21] P. NORTON, T. BRAGGINS and H. LEVINSTEIN
Phys. Rev. B 8, 5632 (1973).
- [22] M. ASCHE and J. VON BORZESKOWSKI
Phys. Stat. Sol. 37, 433 (1970).
- [23] J. VINDEVOGHEL, M. VINDEVOGHEL and Y. LEROY
Infrared Phys. 18, 99 (1978).
- [24] SHENG S. LI
Solid State Electronics 21, 1109 (1978).
- [25] G. OTTAVIANI et al.
Phys. Rev. B, 12, 3318 (1975).
- [26] R.A. LOGAN and A.J. PETERS
J. Appl. Phys. 31, 122 (1960).

CHAPITRE IV

BANDE DE VALENCE DU SILICIUM ET TRANSITIONS INTERBANDES

Dans le chapitre précédent, nous avons montré que si les mécanismes de collisions permettent de décrire correctement l'évolution en fonction de la fréquence et de la température de la conductivité présentée par le n-Si, et ceci sur tout le domaine de fréquences considéré, il n'en était pas de même dans le cas du p-Si, où un écart important entre valeurs expérimentales et théoriques apparaît, pour des fréquences supérieures à environ 80 cm^{-1} .

Du fait de la structure de bande du Silicium, illustrée figure III.1, nous avons émis l'hypothèse que l'accroissement de conductivité constaté pour $\nu > 80 \text{ cm}^{-1}$ pouvait être attribué à l'existence de transitions de porteurs entre chacune des trois bandes de valence, lorsque le semiconducteur est soumis à un champ électromagnétique.

Pour étayer cette hypothèse, le problème essentiel qui est posé, est de calculer les probabilités de transitions entre deux quelconques des bandes de valence, en fonction du vecteur d'onde, pour toute valeur de ce dernier défini en coordonnées sphériques par $\vec{k}(\theta, \varphi, k)$ (figure IV.1).

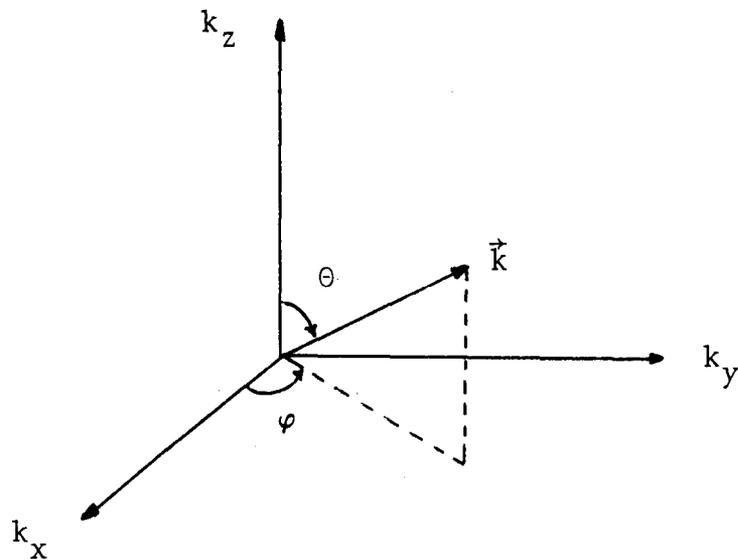


Figure IV.1

En effet, les porteurs occupent l'ensemble de l'espace des \vec{k} et des transitions de porteurs sont par conséquent possibles entre deux niveaux d'énergie correspondant à des valeurs quelconques de \vec{k} (θ, φ, k) tant en module qu'en orientation.

Ce problème, abordé par quelques auteurs, n'a jamais été résolu dans sa généralité. En effet, seules étaient considérées les transitions de porteurs dont le vecteur d'onde était orienté suivant quelques directions privilégiées de l'espace des \vec{k} .

Pour obtenir les probabilités de transitions interbandes dans le cas général, c'est-à-dire pour tout porteur possédant un vecteur d'onde $\vec{k}(\theta, \varphi, k)$, il est nécessaire de calculer les éléments de la matrice optique, eux-mêmes étroitement liés aux relations de dispersion $E_i(\vec{k})$ (l'indice i est relatif à l'une des trois bandes de valence).

De ce fait, il nous semble nécessaire d'explicitement complètement l'hamiltonien du système pour toute valeur de $\vec{k}(\theta, \varphi, k)$ puisque la diagonalisation de cet hamiltonien nous permet d'accéder non seulement aux relations

de dispersion $E_i(\vec{k})$ mais aussi d'obtenir les vecteurs propres de la base dans laquelle sont calculés les éléments de la matrice optique.

La méthode utilisée est une méthode de perturbation ($\vec{k} \cdot \vec{p}$). Dans un premier temps, nous négligerons l'interaction spin-orbite et nous exprimerons l'équation d'onde des états stationnaires (Cf. équation (III.1)) en représentation ($\vec{k} \cdot \vec{p}$) ; par la suite, nous compléterons cette équation de façon à prendre en compte l'interaction spin-orbite.

Les calculs effectués dans cette première partie ayant permis de caractériser chacun des états des bandes de valence, la seconde partie du chapitre sera consacrée au calcul des probabilités de transitions entre deux de ces états, à l'étude des phénomènes d'absorption et de conductivité qui en résultent et à leur interprétation.

IV.I. CALCUL DES ÉNERGIES $E_i(\vec{k})$

IV.I.1. EQUATION D'ONDE DES ETATS STATIONNAIRES EN REPRESENTATION ($\vec{k} \cdot \vec{p}$), SANS INTERACTION SPIN-ORBITE

L'équation d'onde des états stationnaires
(Cf. chapitre III)

$$\left(\frac{p^2}{2m} + U(\vec{r})\right) \Psi = E \cdot \Psi \quad (\text{IV.1})$$

admet pour solutions des fonctions d'onde qui s'expriment sous la forme de fonctions de Bloch :

$$\Psi = \Psi_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r}) \cdot \exp(i \vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (\text{IV.2})$$

où $u_k(\vec{r})$ est périodique et possède la périodicité du réseau cristallin.

La résolution de (IV.1) au voisinage de $k = 0$ est effectuée en utilisant une méthode de perturbation $(\vec{k} \cdot \vec{p})$ [1] [2] s'appliquant à la partie $u_k(\vec{r})$ de la fonction d'onde $\Psi_k(\vec{r})$.

En effet, (IV.1) peut s'exprimer sous la forme :

$$\left[\frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}) + \frac{\hbar}{m} (\vec{k} \cdot \vec{p}) \right] u_k(\vec{r}) = \left[E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right] u_k(\vec{r}) \quad (\text{IV.3})$$

En $k = 0$ cette équation devient :

$$\left[\frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}) \right] u_0(\vec{r}) = E(0) \cdot u_0(\vec{r}) \quad (\text{IV.4})$$

$u_0(\vec{r})$ et $E(0)$ désignant respectivement l'amplitude de la fonction d'onde et l'énergie du système en $k = 0$

On voit alors que le terme $\frac{\hbar}{m} (\vec{k} \cdot \vec{p})$ de (IV.3) peut être considéré comme une perturbation vis à vis du terme $H_0 = \left[\frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}) \right]$ hamiltonien non perturbé en $k = 0$.

Les parties $u_k(\vec{r})$ des fonctions d'onde (vecteurs propres de l'hamiltonien $H = \left[\frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}) + \frac{\hbar}{m} (\vec{k} \cdot \vec{p}) \right]$ et les énergies

$$E'(\vec{k}) = E(\vec{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{IV.5})$$

(valeurs propres de H) pourront donc s'exprimer en fonction des états $u_0(\vec{r})$ et des énergies $E(0)$ du système non perturbé.

IV.1.2. AVEC INTERACTION SPIN-ORBITE

Les particules possèdent un moment magnétique propre

$$\vec{\mu} = \frac{e\hbar}{2m} \vec{S} = \frac{e\hbar}{4m} \vec{\sigma}$$

\vec{S} désignant le moment cinétique de la particule et $\vec{\sigma}$ désignant l'opérateur de spin dont les composantes sont les matrices de Pauli :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{IV.6})$$

Ces particules entrent en interaction avec le champ magnétique

$$\vec{B} = \frac{\vec{\mathcal{E}} \wedge \vec{v}}{c^2}$$

produit par leur mouvement autour du noyau, et l'énergie de cette interaction est égale à $-\vec{\mu} \cdot \vec{B}$.

Ici, $\vec{\mathcal{E}}$ est le champ électrique dérivant du potentiel périodique du réseau, tel que $e \vec{\mathcal{E}} = -\nabla U(\vec{r})$; \vec{v} est la vitesse des particules.



L'hamiltonien d'interaction spin-orbite $H_{s.o}$ représentant cette énergie, s'exprime alors sous la forme [3] :

$$H_{s.o} = \frac{\hbar}{4m^2 c^2} \vec{\sigma} \cdot (\vec{\nabla} U \wedge \vec{p}) \quad (\text{IV.7})$$

Si l'on tient compte de l'interaction spin-orbite, les états stationnaires du système considéré seront déterminés par l'équation matricielle :

$$[H + H_{s.o}] \Psi = E \cdot \Psi \quad (\text{IV.8})$$

où H est l'hamiltonien défini précédemment.

En remarquant que $\vec{\nabla} U$ possède la même périodicité que $U(\vec{r})$ (périodique sur le réseau), l'équation (IV.8) restera invariante dans une translation du réseau. Les fonctions d'onde

Ψ solutions de (IV.8) seront encore des fonctions de Bloch mais elles ne correspondent pas en général à des états de spin pur α et β : ce sont des combinaisons linéaires de fonctions d'onde : en général

$$\Psi_{k\uparrow}(\vec{r}) = u_{k\uparrow}(\vec{r}) \exp(i\vec{k}\vec{r}) = \Psi_{1k\uparrow} \cdot \alpha + \Psi_{2k\uparrow} \cdot \beta$$

(\uparrow désigne l'état de spin).

Dans la représentation (\vec{k}, \vec{p}) , l'hamiltonien d'interaction spin-orbite $H_{s.o}$ se met sous la forme [3] :

$$H_{s.o} = \frac{\hbar}{4m^2 c^2} [(\vec{\sigma} \wedge \vec{\nabla}U) \cdot \vec{p}] + \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} [(\vec{\sigma} \wedge \vec{\nabla}U) \cdot \vec{k}] \quad (IV.9)$$

Cet hamiltonien est un opérateur agissant sur la partie $u_k(\vec{r})$ de la fonction d'onde $\Psi_k(\vec{r})$.

Le premier terme est indépendant de \vec{k} ; quant au second qui dépend de \vec{k} , il représente l'énergie spin-orbite due au moment du cristal. L'influence de ce dernier terme est très faible par rapport au terme $\frac{\hbar}{m} (\vec{k} \cdot \vec{p})$ et il pourra donc être négligé [4].

Dans ces conditions (IV.8) se met sous la forme :

$$\begin{aligned} & \left[\frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m^2 c^2} [(\vec{\sigma} \wedge \vec{\nabla}U) \cdot \vec{p}] + \frac{\hbar}{m} (\vec{k} \cdot \vec{p}) \right] u_k(\vec{r}) \\ & = [E(\vec{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}] u_k(\vec{r}) = E'(\vec{k}) \cdot u_k(\vec{r}) \quad (IV.10) \end{aligned}$$

Ici encore, le terme $\frac{\hbar}{m} (\vec{k} \cdot \vec{p})$ apparaît comme un hamiltonien de perturbation par rapport à l'hamiltonien non

perturbé :

$$\frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m^2 c^2} [(\vec{\sigma} \wedge \vec{\nabla} U) \cdot \vec{p}]$$

en $k = 0$, et les parties $u_k(\vec{r})$ de la fonction d'onde ainsi que les énergies

$$E(\vec{k}) = E'(\vec{k}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

pourront encore être exprimées en fonction des valeurs $u_0(\vec{r})$ et $E(0)$ obtenues en $k = 0$ (système non perturbé).

IV.1.3. CALCUL DES ENERGIES $E_i(\vec{k})$

D'après les calculs d'Herman [5], les trois fonctions d'onde obéissent aux opérations de symétrie du groupe cubique, suivant la représentation Γ'_{25} (notation de Bouckaert, Smoluchowski et Wigner). En particulier, l'inversion est une opération de symétrie du groupe.

Nous choisirons une base de la représentation Γ'_{25} en $k = 0$ en prenant les trois orbitales dégénérées qui se conservent dans les symétries par rapport aux plans :

$$\varepsilon_1^+ \sim yz$$

$$\varepsilon_2^+ \sim zx$$

$$\varepsilon_3^+ \sim xy$$

La détermination des surfaces d'énergie en $k \neq 0$ se fera en appliquant la méthode des perturbations, l'hamiltonien de perturbation étant la partie $\frac{\hbar}{m} (\vec{k} \cdot \vec{p})$ de l'hamiltonien du système.

Nous appliquerons tout d'abord la théorie de la perturbation $(\vec{k} \cdot \vec{p})$ en omettant l'interaction spin-orbite.

★ Corrections du premier ordre au système non perturbé

En $k = 0$, ces corrections sur l'énergie sont les valeurs propres de la matrice :

$$\begin{bmatrix} \langle \epsilon_1^+ | \frac{\hbar}{m} (\vec{k} \cdot \vec{p}) | \epsilon_1^+ \rangle & \langle \epsilon_1^+ | \frac{\hbar}{m} (\vec{k} \cdot \vec{p}) | \epsilon_2^+ \rangle & \langle \epsilon_1^+ | \frac{\hbar}{m} (\vec{k} \cdot \vec{p}) | \epsilon_3^+ \rangle \\ \langle \epsilon_2^+ | \frac{\hbar}{m} (\vec{k} \cdot \vec{p}) | \epsilon_1^+ \rangle & \langle \epsilon_2^+ | \frac{\hbar}{m} (\vec{k} \cdot \vec{p}) | \epsilon_2^+ \rangle & \langle \epsilon_2^+ | \frac{\hbar}{m} (\vec{k} \cdot \vec{p}) | \epsilon_3^+ \rangle \\ \langle \epsilon_3^+ | \frac{\hbar}{m} (\vec{k} \cdot \vec{p}) | \epsilon_1^+ \rangle & \langle \epsilon_3^+ | \frac{\hbar}{m} (\vec{k} \cdot \vec{p}) | \epsilon_2^+ \rangle & \langle \epsilon_3^+ | \frac{\hbar}{m} (\vec{k} \cdot \vec{p}) | \epsilon_3^+ \rangle \end{bmatrix}$$

(IV.11)

Les termes $\langle \epsilon_i^+ | \frac{\hbar}{m} (\vec{k} \cdot \vec{p}) | \epsilon_j^+ \rangle$ de cette matrice sont nuls, par raison de parité. La dégénérescence ne peut donc être levée au premier ordre.

★ Corrections du second ordre

La matrice de perturbation du second ordre, dont les valeurs propres sont les énergies E_1' , E_2' , E_3' en $k \neq 0$ comptées à partir du sommet de la bande de valence est de la forme :

$$\langle \epsilon_i^+ | \mathcal{H} | \epsilon_j^+ \rangle = \sum_n \frac{\langle \epsilon_i^+ | \frac{\hbar}{m} (\vec{k} \cdot \vec{p}) | n \rangle \langle n | \frac{\hbar}{m} (\vec{k} \cdot \vec{p}) | \epsilon_j^+ \rangle}{E_n^{(0)} - E(0)} \quad (\text{IV.12})$$

\sum_n signifie que la sommation est effectuée sur tous les états possibles sauf sur les états $|\epsilon_1^+\rangle$, $|\epsilon_2^+\rangle$ et $|\epsilon_3^+\rangle$.

D'après la relation de fermeture :

$$\langle \epsilon_i^+ | \mathcal{H} | \epsilon_j^+ \rangle \sim \langle \epsilon_i^+ | (\vec{k} \cdot \vec{p})^2 | \epsilon_j^+ \rangle$$

Les fonctions de base étant définies comme

$$\epsilon_1^+ = yz \cdot \varphi(r)$$

$$\epsilon_2^+ = zx \cdot \varphi(r)$$

$$\epsilon_3^+ = xy \cdot \varphi(r)$$

où $\varphi(r)$ est une fonction à symétrie sphérique, on montre aisément que la matrice de perturbation du second ordre se met sous la forme [6] :

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} L k_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) & N k_x k_y & N k_x k_z \\ N k_x k_y & L k_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2) & N k_y k_z \\ N k_x k_z & N k_y k_z & L k_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) \end{bmatrix}$$

(IV.13)

où :

$$\begin{cases} L = \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_n \frac{\langle \epsilon_1^+ | p_x | n \rangle \langle n | p_x | \epsilon_1^+ \rangle}{E_n^{(0)} - E(0)} \\ M = \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_n \frac{\langle \epsilon_1^+ | p_y | n \rangle \langle n | p_y | \epsilon_1^+ \rangle}{E_n^{(0)} - E(0)} \\ N = \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_n \frac{\langle \epsilon_1^+ | p_x | n \rangle \langle n | p_y | \epsilon_2^+ \rangle + \langle \epsilon_1^+ | p_y | n \rangle \langle n | p_x | \epsilon_2^+ \rangle}{E_n^{(0)} - E(0)} \end{cases} \quad \text{(IV.14)}$$

Ces quantités L, M, N exprimées en unités $\hbar^2/2m$ ont été introduites par Dresselhaus, Kip et Kittel [6] et sont liées aux quantités A, B, C déterminées par résonance cyclotron par les relations :

$$A = \frac{L + 2M}{3} + \frac{\hbar^2}{2m}$$

$$B = \frac{L - M}{3} \tag{IV.15}$$

$$C^2 = \frac{N^2 - (L - M)^2}{3}$$

La diagonalisation de \mathcal{H} permet de trouver les énergies $E_i^+(\vec{k})$ de chacune des trois bandes de valence, reliées aux vraies valeurs des énergies $E_i(\vec{k})$ par la relation :

$$E_i^+(\vec{k}) = E_i^-(\vec{k}) + \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \tag{Cf. (IV.5)}$$

Si nous considérons maintenant les interactions spin-orbite, les fonctions de base sont :

$$\left[\begin{array}{l} |\epsilon_1^+\rangle, |\epsilon_2^+\rangle, |\epsilon_3^+\rangle \\ |\epsilon_1^-\rangle, |\epsilon_2^-\rangle, |\epsilon_3^-\rangle \end{array} \right] \tag{+ ou - suivant l'orientation du spin.}$$

Dans ce cas l'hamiltonien de perturbation est une matrice 6 x 6 que nous pouvons écrire schématiquement sous la forme :

$$\begin{bmatrix} \mathcal{H} & & & & & \\ & 0 & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \mathcal{H} \end{bmatrix} \tag{IV.16}$$

où \mathcal{H} est la matrice définie précédemment.

Dans cette représentation, l'hamiltonien d'interaction spin-orbite, indépendant de \vec{k} , s'exprime comme [4] :

$$H_{s.o} = -\frac{\Delta}{3} \begin{bmatrix} 0 & i & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -i & 0 & 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & i & i & 0 & 0 \\ -1 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{IV.17})$$

Δ étant l'énergie spin-orbite, caractérisant le déplacement de la bande 3 par rapport aux bandes 1 et 2 en $k = 0$.

Si l'on rapporte $H_{s.o}$ à une base de Kramers, on obtient une matrice diagonale $H'_{s.o}$ telle que :

$$H'_{s.o} = U^{-1} \cdot H_{s.o} \cdot U$$

où U est la matrice de passage de la base $|\epsilon_i^\pm\rangle$ à la base de Kramers.

Pour obtenir l'hamiltonien total de perturbation, résultant de l'addition de (IV.16) et (IV.17), il faut évidemment appliquer la même matrice de passage U à (IV.16). On obtient alors l'hamiltonien total H_{kp} sous la forme :

$$H_{kp} = \begin{bmatrix} G_{kp} & \Gamma_{kp} \\ -\Gamma_{kp}^* & G_{kp}^* \end{bmatrix} \quad (\text{IV.18})$$

où G_{kp} et Γ_{kp} sont des matrices 3 x 3 dont les éléments sont définis par :

$$G_{kp} = \begin{bmatrix} \frac{H_{11} + H_{22}}{2} & \frac{-H_{13} + i H_{23}}{\sqrt{3}} & \frac{H_{13} - i H_{23}}{\sqrt{6}} \\ \frac{-H_{13} - i H_{23}}{\sqrt{3}} & \frac{H_{11} + H_{22} + 4H_{33}}{6} & \frac{H_{11} + H_{22} - 2H_{33}}{3\sqrt{2}} \\ \frac{H_{13} + i H_{23}}{\sqrt{6}} & \frac{H_{11} + H_{22} - 2H_{33}}{3\sqrt{2}} & \frac{H_{11} + H_{22} + H_{33}}{3} - \Delta \end{bmatrix}$$

(IV.19)

$$\Gamma_{kp} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{-H_{11} + H_{22} + 2i H_{12}}{2\sqrt{3}} & \frac{-H_{11} + H_{22} + 2i H_{12}}{\sqrt{6}} \\ \frac{H_{11} - H_{22} - 2i H_{12}}{2\sqrt{3}} & 0 & \frac{H_{13} - i H_{23}}{\sqrt{2}} \\ \frac{H_{11} - H_{22} - 2i H_{12}}{\sqrt{6}} & \frac{-H_{13} + i H_{23}}{\sqrt{2}} & 0 \end{bmatrix}$$

(IV.20)

Les H_{ij} étant les éléments de la matrice \mathcal{H} de l'équation (IV.13).

Pour calculer les énergies, valeurs propres de (IV.18), il est nécessaire de diagonaliser l'hamiltonien total dans toute direction de $\vec{k}(\theta, \varphi, k)$. Une méthode brutale consisterait bien évidemment à diagonaliser la matrice 6 x 6 de l'équation (IV.18) ;

on remarque cependant que celle-ci possède des propriétés de symétrie et que G_{kp} et Γ_{kp} sont des matrices hermitiques. Il est donc a priori possible de simplifier la résolution de (IV.18) si on peut trouver une matrice de transformation unitaire qui, agissant sur (IV.18) la mette sous la forme simple :

$$\begin{bmatrix} G'_{kp} & 0 \\ 0 & G'^*_{kp} \end{bmatrix}$$

L'énergie étant essentiellement réelle, il sera alors aisé de trouver les valeurs propres de la seule matrice 3 x 3 G'_{kp} .

Il s'agit donc de trouver une matrice de transformation unitaire U de la forme :

$$U = \begin{bmatrix} S & R \\ -R^* & S^* \end{bmatrix} \quad (\text{IV.21})$$

où S et R sont des matrices 3 x 3, telle que l'hamiltonien total se mette sous la forme :

$$H'_{kp} = U^{-1} \cdot H_{kp} \cdot U = \begin{bmatrix} G'_{kp} & 0 \\ 0 & G'^*_{kp} \end{bmatrix} \quad (\text{IV.22})$$

La diagonalisation de (IV.22) permet alors de déterminer les énergies $E'_i(\theta, \varphi, k)$ telles que :

$$E'_i(\theta, \varphi, k) = E_i(\theta, \varphi, k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = X^{-1} \cdot H'_{kp} \cdot X \quad (\text{IV.23})$$

La matrice de transformation que nous utilisons est telle que :

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \exp -i \frac{\varphi + \eta}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp i \frac{\varphi - \eta}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \exp i \frac{\varphi - \eta}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp i \frac{\varphi - \eta}{2} \end{bmatrix} \quad (\text{IV.24})$$

et $R = - S$ (IV.25)

L'angle η est tel que : $\text{tg } \eta = - \frac{L - M}{N} \cotg 2 \varphi$ (IV.26)

Dans ce cas, les éléments de $G'_{kp} = (g_{ij})$ s'expriment sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} g_{11} &= \left(\frac{L - M}{2} \sin^2 \theta + M \right) k^2 \\ g_{22} &= [L + 5M + 3(L - M) \cos^2 \theta] k^2 / 6 \\ g_{33} &= \frac{L + 2M}{3} k^2 - \Delta \\ g_{12} &= - \frac{Nk^2}{2\sqrt{3}} \sin 2\theta + i \frac{\sin^2 \theta}{2\sqrt{3}} [N \sin 2\varphi \cos \eta - (L - M) \cos 2\varphi \sin \eta] k^2 \\ &= g_{12} + ig'_{12} \\ g_{13} &= - \frac{g'_{12}}{\sqrt{2}} + i \sqrt{2} g''_{12} \\ g_{23} &= \frac{L - M}{3\sqrt{2}} (3 \sin^2 \theta - 2) k^2 - i \frac{Nk^2}{2\sqrt{2}} \sin 2\theta \sin (2\varphi - \eta) \end{aligned} \quad (\text{IV.27})$$

et G'_{kp} prend la forme :

$$G'_{kp} = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ * & g_{22} & g_{23} \\ g_{13} & * & g_{33} \end{bmatrix} \quad (\text{IV.28})$$

Nous représentons figure IV.2 les diagrammes $E_i(k^2)$ pour des directions particulières du vecteur d'onde [100], [110] et [111] et pour une direction quelconque. La figure IV.3 représente les diagrammes énergétiques des trois bandes de valence en fonction de l'angle θ , pour $|\vec{k}| = 5 \times 10^8 \text{ m}^{-1}$ et $\varphi = \pi/4$ (section des surfaces d'énergie par le plan [110]).

Ces courbes ont été tracées en supposant que $\Delta = 0.035 \text{ eV}$ et que $L = - 6.69 \text{ } \hbar^2/2m$, $M = - 4.56 \text{ } \hbar^2/2m$, $N = - 8.50 \text{ } \hbar^2/2m$: ces valeurs seront discutées par la suite.

L'ensemble de ces courbes met en évidence le caractère fortement anisotrope des bandes de valence.

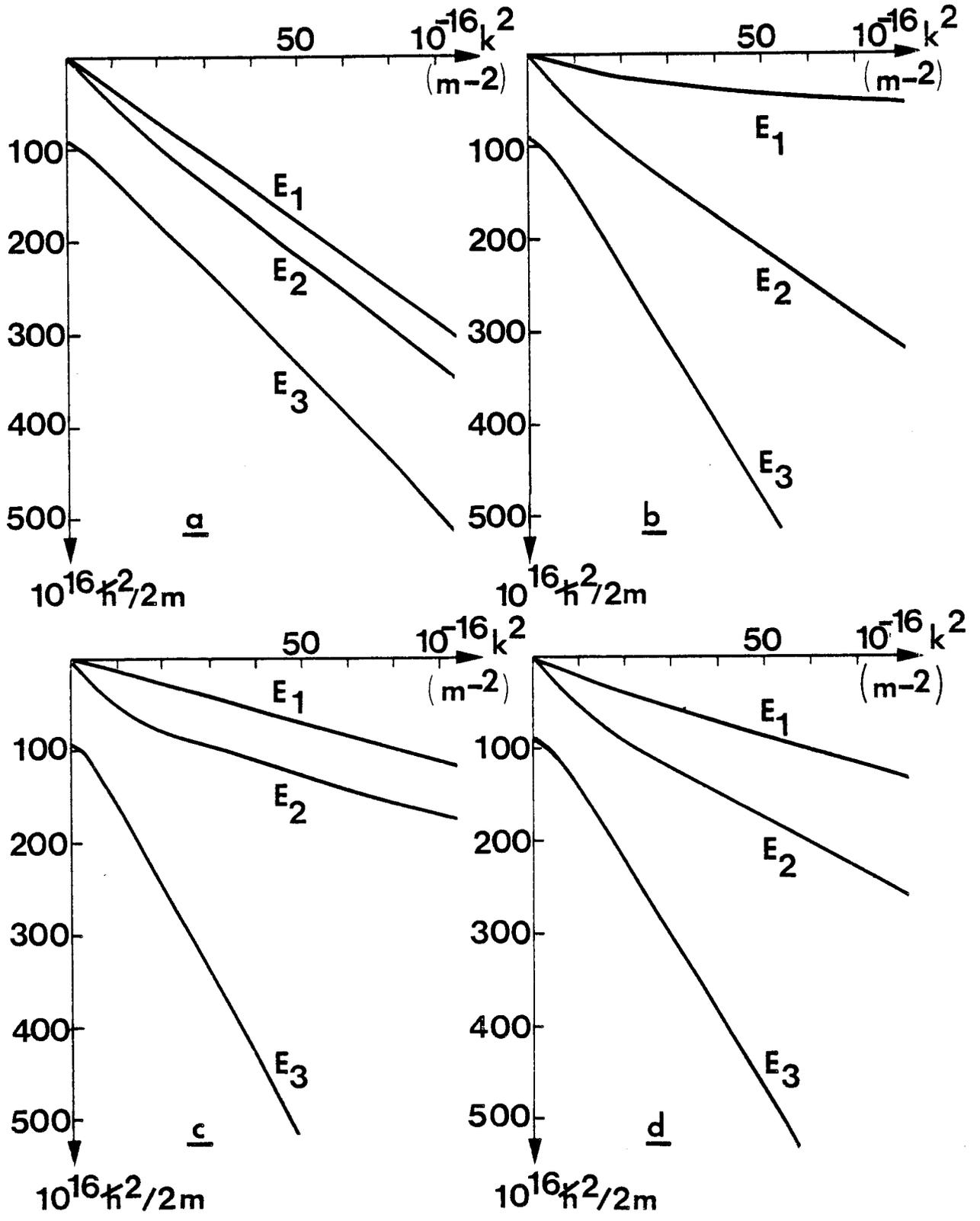


Figure IV.2 : Diagrammes $E_i(k^2)$ pour quelques directions de \vec{k} .

- a : $\vec{k} = [100]$
- b : $\vec{k} = [110]$
- c : $\vec{k} = [111]$
- d : \vec{k} quelconque

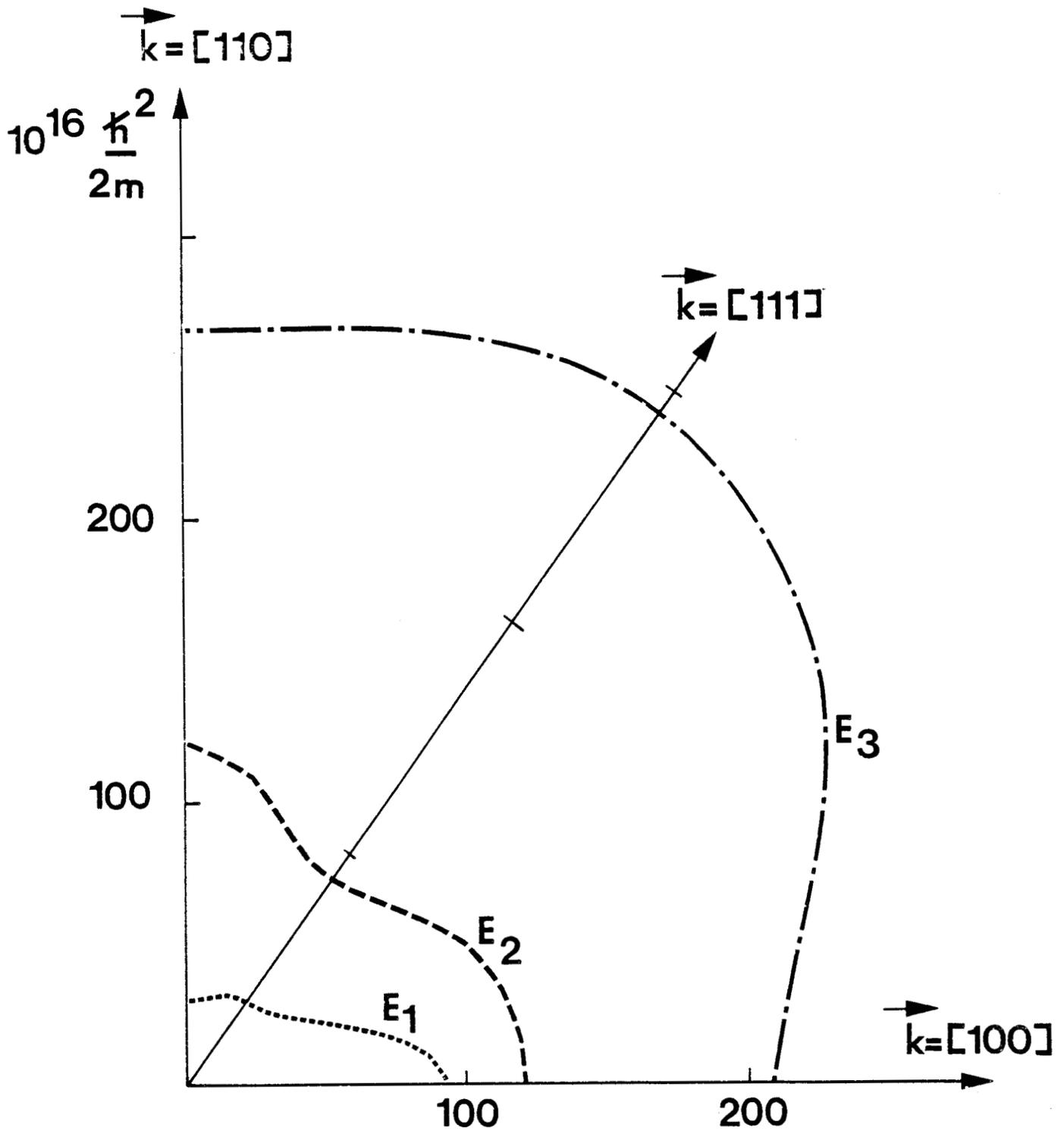


Figure IV.3 : Energie des bandes de valence en fonction de θ , dans un plan [110] pour $|\vec{k}| = 5 \times 10^8 \text{ m}^{-1}$.



IV.2. MÉCANISMES DE TRANSITIONS INTERBANDES

IV.2.1. HISTORIQUE ET INTRODUCTION

La structure de bande du silicium, illustrée figures III.1, IV.2 et IV.3 qui mettent en évidence le caractère anisotrope des trois bandes de valence, ne peut que favoriser des transitions de porteurs entre les bandes de valence, lorsque le semiconducteur est soumis à un champ électromagnétique.

Ces transitions peuvent être, soit directes (verticales), soit indirectes (non verticales). Remarquons qu'une transition directe dépend de la probabilité de rencontre de deux particules : un porteur (appartenant à l'une des bandes de valence) et un photon (cédé par le champ E.M.). Par contre, une transition indirecte va nécessiter une interaction simultanée de trois particules : un porteur, un photon et un phonon. De ce fait, le processus de transitions indirectes apparaît comme moins probable que celui de transitions directes [3]. Pour cette raison, nous ne nous intéresserons dans ce qui suit qu'aux seules transitions directes.

Si on calcule l'énergie $E = h \cdot \nu$ des photons mis en jeu dans le domaine des fréquences $\nu > 60 \text{ cm}^{-1}$, il apparaît qu'elle est du même ordre de grandeur que l'écart d'énergie $|E_i - E_j|$ entre deux bandes de valence i et j .

En effet, en nous reportant à la figure IV.2, nous voyons par exemple que :

$$|E_1 - E_2| \# 7.6 \text{ meV pour } |\vec{k}| = 5 \times 10^8 \text{ m}^{-1} \text{ et } \vec{k} \text{ suivant } [100]$$

$$|E_1 - E_2| \# 9.5 \text{ meV pour } |\vec{k}| = 2 \times 10^8 \text{ m}^{-1} \text{ et } \vec{k} \text{ suivant } [110].$$

Ces valeurs d'énergie sont atteintes respectivement pour des fréquences de 61 cm^{-1} et de 76 cm^{-1}

Sous l'effet de la radiation E.M., des transitions directes de porteurs entre deux bandes i et j sont donc possibles. Ces transitions de porteurs sont la cause de l'existence d'une "absorption interbandes", laquelle peut également être traduite par un accroissement de conductivité : "conductivité interbandes".

De telles transitions ont déjà été observées partiellement dans le cas du Germanium : pour ce semiconducteur, elles se situent dans le domaine de l'infrarouge proche [7] [8].

En ce qui concerne le Silicium, si ces transitions ont été prévues théoriquement [9] [4], elles n'ont jamais été mises parfaitement et totalement en évidence : seuls quelques travaux très parcellaires ont été réalisés sur ce matériau, dans le domaine de l'infrarouge lointain, où ces transitions doivent se manifester.

Citons :

- les mesures de coefficient de transmission entre 40 et $100 \mu\text{m}$ réalisées par Walles [10] sur du p-Si dopé à l'Indium et dont la concentration en porteurs libres est comparable à celles que nous avons utilisées. Cet auteur constate des anomalies dans la transmission mais ne les interprète pas.
- les mesures d'absorption réalisées par Staflin [11] sur du Silicium intrinsèque et également sur du p-Si dopé au Bore et à l'Indium. Ces mesures sont réalisées en infrarouge proche (de 1 à $35 \mu\text{m}$). Staflin attribue une bande d'absorption située à $31 \mu\text{m}$ (322 cm^{-1}) à l'existence de transitions de porteurs entre les bandes 1 et 3. Il ne peut visualiser les transitions 1-2 et

2-3 qui, affirme-t-il, sont situées dans le domaine de l'infrarouge lointain, lequel sort de son domaine de mesures.

- les mesures de réflectivité en infrarouge proche (2 à 20 μm) de Lambert [12]. Cet auteur étudie des monocristaux de p-Si très fortement dopés (concentration en porteurs libres supérieure à $10^{18}/\text{cm}^3$) ; les valeurs expérimentales sont en accord avec les valeurs théoriques si les transitions de porteurs entre bandes 1 et 3 sont prises en compte. Lambert néglige l'influence des transitions 2-3 : leur contribution à la conductivité est faible compte tenu des caractéristiques des matériaux qu'il étudie. Par ailleurs, les transitions 1-2 ne peuvent être mises en évidence, leur domaine d'existence étant principalement situé en infrarouge lointain.
- les mesures de masses effectives de Barta [13], effectuées sur des matériaux très dopés (concentration en porteurs libres supérieure à $10^{19}/\text{cm}^3$) de 0.8 μm à 300 μm . Cet auteur constate que l'accord entre ses valeurs expérimentales et théoriques est correct à condition de tenir compte des transitions 1-3. Elle utilise pour cela le modèle de Lambert.

Nous remarquons que les études expérimentales réalisées antérieurement l'ont été sur un domaine de fréquences trop restreint pour mettre en évidence toutes les transitions interbandes possibles : 1-2, 1-3 et 2-3. Par ailleurs, les transitions 1-2 existent dans un domaine de fréquences où les phénomènes de collisions existent encore dans des proportions non négligeables. Ces derniers phénomènes doivent donc être connus avec précision de façon à permettre une détermination exacte de la contribution des transitions interbandes à la conductivité présentée par le semiconducteur.

A titre d'exemple, la figure IV.4 représente le spectre expérimental de conductivité à $T = 293^\circ \text{ K}$ du monocristal n° 5 ; ce spectre est comparé à deux spectres théoriques de la conductivité de relaxation : en supposant que les mécanismes de collisions décrits au chapitre III existent (courbe 2) et en supposant τ_m indépendant de l'énergie (modèle de Drude-Zener) (courbe 3).

Les premiers travaux relatifs aux mécanismes de transitions de porteurs entre les bandes de valence d'un semiconducteur de type diamant furent réalisés sur le Germanium par Kaiser [7] puis interprétés par Kahn [9].

Kahn utilise une méthode de perturbation au second ordre et suppose que l'énergie spin-orbite Δ est très grande par rapport à l'énergie des porteurs. Le modèle à deux bandes d'énergie -qu'il suppose paraboliques et sphériques- lui permet de trouver un assez bon accord qualitatif entre les valeurs expérimentales et théoriques de la conductivité.

Cependant, l'absorption résultant des transitions de porteurs entre les bandes 1 et 2 est surestimée, particulièrement en haute température. Kahn en attribue l'origine au non respect des relations de dispersion $E \sim k^2$ qu'il utilise. Par ailleurs, cet auteur suppose que la conductivité, due aux phénomènes de collisions, obéit au modèle de Drude-Zener (temps de relaxation indépendant de l'énergie) et commet de ce fait une erreur importante, comme le montre la figure IV.4.

Par la suite, Kane [4] utilise la même méthode de perturbation au second ordre, mais sans faire de restriction sur la valeur de l'énergie spin-orbite Δ . Il montre alors que l'énergie des porteurs ne varie pas de façon parabolique en fonction du vecteur d'onde \vec{k} et que les surfaces d'énergie constante sont déformées. Cet auteur remarque en outre que le fait d'omettre les corrections à l'énergie d'ordres supérieurs à deux, conduit à déterminer une masse effective des porteurs de la bande 3 trop faible. Cette erreur par défaut

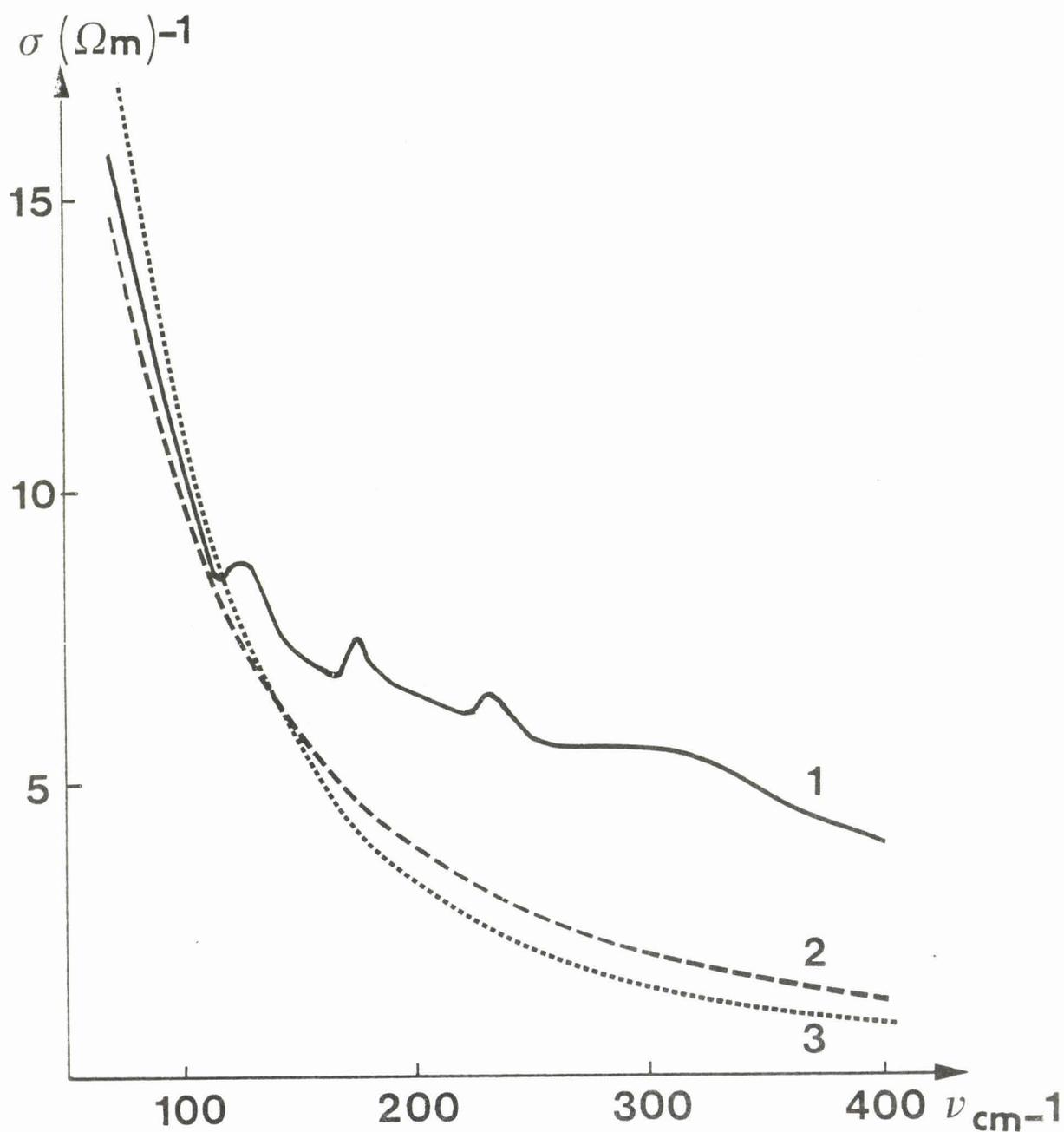


Figure IV.4 : Conductivité en fonction de la fréquence du monocristal n° 5 à 293° K.

- 1 : Courbe expérimentale
- 2 : Conductivité de relaxation théorique, incluant les collisions sur phonons acoustiques, optiques et sur impuretés ionisées.
- 3 : Conductivité de relaxation en supposant τ_m indépendant de l'énergie (modèle de Drude-Zener).



est d'autant plus importante que l'énergie spin-orbite est élevée. Dans le cas du Germanium, où $\Delta \approx 0.3$ eV, la différence est très importante : elle avoisine 30 %. Les énergies sont calculées pour quatre directions particulières du vecteur d'onde : [100], [110], [111] et [γ], où [γ] est une direction moyenne de \vec{k} faisant un angle égal avec les trois directions précédentes. Kane calcule ensuite l'absorption due à des transitions de porteurs entre les trois bandes de valence, en supposant ces bandes sphériques. Ces absorptions sont calculées suivant les quatre directions de \vec{k} [100], [110], [111], [γ], puis sont pondérées afin d'obtenir l'absorption résultante.

Si l'accord entre théorie et expérience sur le p-Ge est relativement bon, il reste cependant des écarts dus, d'une part à la détermination très approchée de la masse effective de la bande 3, d'autre part à la méthode de pondération utilisée qui est assez grossière, et enfin à l'hypothèse des bandes d'énergie sphériques. Ces désaccords apparaissent surtout lorsque des photons d'énergie élevée sont mis en jeu.

Une méthode de calcul beaucoup plus complexe est ensuite élaborée par Fawcett [14]. Elle donne un meilleur accord avec les résultats expérimentaux relatifs au p-Ge de Arthur et Baynham [15].

Fawcett calcule de façon exacte les énergies des porteurs dans la bande de valence en tenant compte des interactions entre la bande de valence et les deux bandes de conduction les plus voisines ; la troisième bande de conduction apparaît dans ses calculs comme une perturbation. Les énergies des porteurs de chacune des bandes de valence sont alors obtenues en diagonalisant un hamiltonien 14×14 .

Il faut remarquer que les calculs de Fawcett, beaucoup plus complexes que ceux de Kane, aboutissent à des résultats similaires en ce qui concerne les énergies des deux premières bandes de valence. Pour la troisième bande, les masses effectives des porteurs calculées par chacune des deux méthodes sont en désaccord important comme l'avait prévu Kane.

Tous ces calculs sont relatifs au p-Ge. Or, dans le cas du p-Si, l'énergie spin-orbite est environ dix fois plus faible que pour le p-Ge : $\Delta = 0.03$ à 0.04 eV au lieu de 0.29 eV. De ce fait, les corrections à l'énergie d'ordre supérieur à deux, seront très faibles [4] et on peut s'attendre à obtenir des résultats très voisins en utilisant l'un ou l'autre des modèles précédents.

Pour notre part, notre but étant d'interpréter quantitativement les variations de conductivité présentées par le p-Si, nous avons choisi d'utiliser, comme base de départ, la méthode de Kane en l'améliorant de façon à tenir compte de la très grande anisotropie des bandes de valence :

- les relations de dispersion $E_i(\vec{k})$ sont calculées en utilisant une méthode de perturbation ;
- les corrections à l'énergie sont limitées au second ordre ;
- les énergies sont calculées en tout point $\vec{k}(\theta, \varphi, k)$ de l'espace des \vec{k} , comme nous l'avons exposé au paragraphe IV.1.

En effet, lorsque l'on calcule les énergies $E_i(\vec{k})$ des porteurs dans chacune des trois bandes de valence, on remarque que dans certaines directions particulières de \vec{k} telles que [100] et [111], les bandes 1 et 2 deviennent asymptotiquement parallèles (Cf. figure IV.2 et IV.5). Ces deux bandes de valence sont alors séparées par une énergie égale à $2\Delta/3$. Lorsque ces deux bandes deviennent parallèles, elles sont encore très peuplées.

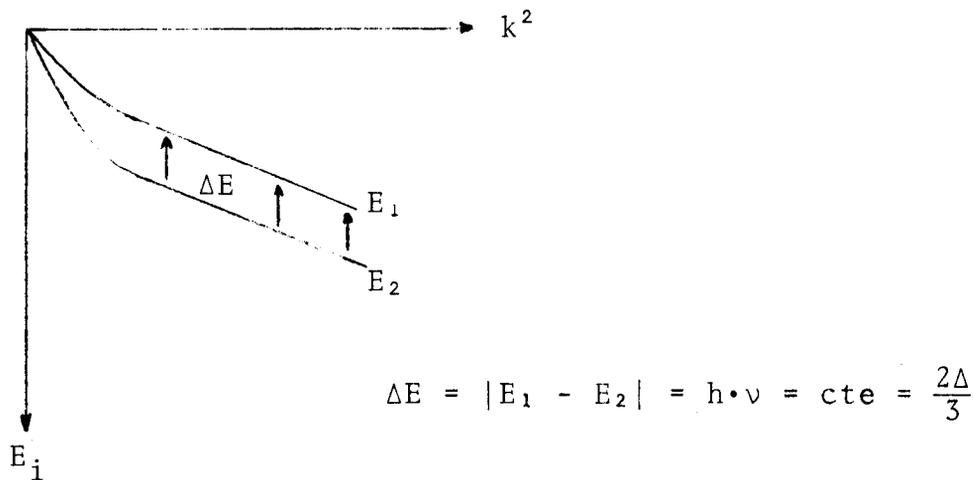


Figure IV.5.

Par conséquent, le diagramme $\alpha_{12}(\nu)$, correspondant à l'absorption résultant des transitions de porteurs entre les bandes 1 et 2, va passer par un maximum avant de tomber brutalement à zéro lorsque l'énergie du photon $h\nu$ sera égale à la différence d'énergie constante $2\Delta/3$ séparant les bandes 1 et 2. Si, comme le fait Kane, nous ne considérons que les absorptions liées aux quatre directions de \vec{k} ([100], [110], [111] et $[\gamma]$), il est évident que le coefficient d'absorption α_{12} lié aux transitions 1-2, obtenu après pondération [4], va également présenter un tel maximum. Or les porteurs sont en fait distribués dans tout l'espace des \vec{k} et non pas localisés suivant les seules directions précédemment évoquées. Cette procédure de calcul ne peut donc rendre compte de la réalité.

En conséquence, nous devons calculer des coefficients d'absorption élémentaires $d\alpha_{12}(\theta, \varphi, k)$ pour chaque direction de \vec{k} ; ces coefficients d'absorption seront ensuite intégrés sur tout l'espace des \vec{k} et nous obtiendrons ainsi α_{12} . Par ailleurs, des transitions de porteurs entre les bandes 1 et 3, 2 et 3 ont également lieu et donnent naissance à des absorptions élémentaires $d\alpha_{13}(\theta, \varphi, k)$ et $d\alpha_{23}(\theta, \varphi, k)$. Le coefficient d'absorption total, dû aux diverses transitions interbandes possibles, à une fréquence donnée, va dépendre

de $d\alpha_{12}$, $d\alpha_{13}$ et $d\alpha_{23}$.

- Dans une première partie, nous exprimerons l'équation d'onde du système de particules en présence d'un champ électromagnétique. Nous en déduirons les expressions des éléments de la matrice optique que nous exprimerons dans la base qui diagonalise l'hamiltonien du système à l'état stationnaire, pour toute valeur de $\vec{k}(\theta, \varphi, k)$.

- Nous exprimerons ensuite dans cette base, les probabilités de transitions directes entre deux bandes de valence pour chaque valeur de $\vec{k}(\theta, \varphi, k)$. Ces probabilités de transitions sont proportionnelles au carré de l'élément de matrice optique. Nous en déduirons les absorptions élémentaires $d\alpha_{ij}(\theta, \varphi, k)$, qui seront ensuite sommées de façon à obtenir l'absorption interbandes résultante, en fonction de la fréquence.

- Dans la troisième partie, nous ajouterons cette absorption interbande à celle qui résulte des collisions (Cf. chapitre III) et nous comparerons les valeurs obtenues aux spectres expérimentaux, en fonction de la fréquence et de la température.

IV.2.2. EQUATION D'ONDE DU SYSTEME EN PRESENCE D'UN CHAMP ELECTROMAGNETIQUE

IV.2.2.1. Equation de Schrödinger dépendant du temps

Le champ E.M., dont l'amplitude est supposée faible, est caractérisé par son potentiel vecteur $\vec{A}(\vec{r}, t)$; il est considéré comme étant une perturbation vis à vis du système de particules et il dépend explicitement du temps t .

Remarquons que l'équation d'onde du système non perturbé par le champ extérieur

$$(H + H_{s.o}) \Psi = E \cdot \Psi \quad (\text{Cf. équation (IV.8)})$$

dont les solutions sont les fonctions d'onde :

$$\Psi = \Psi_{ki}(\vec{r}) = u_{ki}(\vec{r}) \exp(i\vec{k}\vec{r}) \quad (\text{Cf. équation (IV.2)})$$

peut s'écrire sous la forme de l'équation de Schrödinger dépendant du temps :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (H + H_{s.o}) \Psi \quad (\text{IV.29})$$

les solutions étant alors de la forme :

$$\Psi_{ki}(\vec{r}, t) = \Psi_{ki}(\vec{r}) \exp(-i \frac{E_i \cdot t}{\hbar}) \quad (\text{IV.30})$$

L'indice i désigne la i ème bande de valence, dont l'énergie E_i liée à l'état $\Psi_{ki}(\vec{r})$ dépend de \vec{k} .

Chacune des équations (IV.8) et (IV.29) décrit parfaitement le comportement du système en absence de perturbation extérieure, donc permet de déterminer ses états stationnaires, les hamiltoniens H et $H_{s.o}$ ne dépendant pas explicitement du temps.

En présence de la perturbation extérieure, représentée par un hamiltonien H_1 dépendant explicitement du temps, l'équation d'onde devient :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (H + H_{s.o} + H_1) \Psi \quad (\text{IV.31})$$

et nous chercherons sa solution $\Psi(\vec{r}, t)$ en fonction des fonctions d'onde du système non perturbé sous forme d'une somme :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_k a_k(t) \cdot \Psi_k^{(0)}(\vec{r}, t) \quad (\text{IV.32})$$

où $\Psi_k^{(0)}(\vec{r}, t)$ sont les fonctions d'onde du système non perturbé par le champ extérieur et sont définies comme (IV.30).

IV.2.2.2. Hamiltonien de perturbation

L'hamiltonien classique d'une particule dans un champ E.M. dont le potentiel vecteur est $\vec{A}(\vec{r}, t)$ s'exprime sous la forme bien connue [3] [16] :

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} (p - eA)^2 + U(\vec{r}) + H_{s.o} \quad (\text{IV.33})$$

où $U(\vec{r})$ et $H_{s.o}$ ont la signification définie au paragraphe IV.1 et ne dépendent pas explicitement du temps.

En développant (IV.33), en remarquant qu'il est toujours possible de faire une transformation de jauge telle que $\nabla \cdot A = 0$ (jauge de Coulomb), et en tenant compte de l'hypothèse d'une perturbation faible (c'est-à-dire amplitude de l'onde E.M. donc du potentiel vecteur $|\vec{A}|$ négligeable), l'hamiltonien \mathcal{H} s'écrit :

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}) + H_{s.o} - \frac{e \vec{A} \cdot \vec{p}}{m} \quad (\text{IV.34})$$

et nous remarquons que les trois premiers termes de (IV.34) correspondent à l'hamiltonien $H + H_{s.o}$ du système non perturbé par le champ E.M. extérieur.

L'hamiltonien de perturbation est alors défini comme :

$$H_1 = - \frac{e \vec{A} \cdot \vec{p}}{m} \quad (IV.35)$$

ou, ce qui est équivalent :

$$H_1 = \frac{ie\hbar}{m} \vec{A} \cdot \vec{\nabla}_r \quad (IV.36)$$

H_1 dépend explicitement du temps par l'intermédiaire du potentiel vecteur $\vec{A}(\vec{r}, t)$.

IV.2.2.3. Eléments H_{ij} de la matrice optique

L'élément de matrice H_{ij} lié à l'hamiltonien de perturbation H_1 et relatif à des transitions de porteurs entre deux bandes i et j s'exprime sous la forme :

$$H_{ij} = \int \Psi_i^*(\vec{r}) \cdot H_1 \cdot \Psi_j(\vec{r}) \cdot d^3r \quad (IV.39)$$

L'indiciage en k des fonctions d'onde $\Psi_{ki}(\vec{r})$ et $\Psi_{kj}(\vec{r})$ définies par (IV.30) est maintenant omis puisque nous considérons des transitions verticales à \vec{k} constant. Cet élément de matrice peut également être écrit en fonction des seules parties périodiques $u_i(\vec{r})$ et $u_j(\vec{r})$ des fonctions d'onde $\Psi_i(\vec{r})$ et $\Psi_j(\vec{r})$:

$$H_{ij} = \frac{ie\hbar}{m} \int_{\text{cell}} u_i^*(\vec{r}) \cdot \vec{A} \cdot \vec{\nabla}_r \cdot u_j(\vec{r}) d^3r \quad (IV.40)$$

ou sous des formes équivalentes :

$$H_{ij} = \frac{ie\hbar}{m} \langle u_i | \vec{A} \cdot \vec{\nabla}_r | u_j \rangle = - \frac{e}{m} \langle u_i | \vec{A} \cdot \vec{p} | u_j \rangle \quad (IV.41)$$

Nous remarquons que par ailleurs, l'hamiltonien H_1 est indépendant de \vec{k} ; il restera donc invariant lors du passage à la représentation $(\vec{k} \cdot \vec{p})$. Il en sera donc de même pour l'élément de matrice H_{ij} .

La partie périodique $u_{ki}(\vec{r})$ de la fonction d'onde, en représentation $(\vec{k} \cdot \vec{p})$, corrigée au premier ordre, s'écrit :

$$u_{ki}(\vec{r}) = u_{oi}(\vec{r}) + \frac{\hbar}{m} \sum_n \frac{\langle u_{no} | \vec{k} \vec{p} | u_{io} \rangle}{E_i^{(0)} - E_n^{(0)}} |u_{no}\rangle \quad (\text{IV.42})$$

où :

- $u_{oi}(\vec{r})$ est la valeur de la partie périodique de la fonction d'onde en $k = 0$;

- $\frac{\hbar}{m} \sum_n \frac{\langle u_{no} | \vec{k} \vec{p} | u_{io} \rangle}{E_i^{(0)} - E_n^{(0)}} |u_{no}\rangle$ est la correction au

premier ordre de la partie u_k de la fonction d'onde. Le signe \sum_n signifie que la somme est étendue à toutes les valeurs de n , sauf $n = i$.

Compte tenu de (IV.42), nous pouvons écrire :

$$|u_i\rangle = |u_{oi}\rangle + \frac{\hbar}{m} \sum_n \frac{\langle u_{no} | \vec{k} \vec{p} | u_{io} \rangle}{E_i^{(0)} - E_n^{(0)}} |u_{no}\rangle \quad (\text{IV.43})$$

$$|u_j\rangle = |u_{oj}\rangle + \frac{\hbar}{m} \sum_n \frac{\langle u_{no} | \vec{k} \vec{p} | u_{jo} \rangle}{E_j^{(0)} - E_n^{(0)}} |u_{no}\rangle$$

et :

$$\langle u_i | \vec{A} \vec{p} | u_j \rangle = \frac{\hbar}{m} \sum_n \frac{\langle u_{io} | \vec{k} \vec{p} | u_{no} \rangle \langle u_{no} | \vec{A} \vec{p} | u_{jo} \rangle + \langle u_{io} | \vec{A} \vec{p} | u_{no} \rangle \langle u_{no} | \vec{k} \vec{p} | u_{jo} \rangle}{E_i^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad (\text{IV.44})$$

Nous voyons que (IV.44) est de la même forme que la correction $(\vec{k} \cdot \vec{p})$ au second ordre à l'énergie (Cf. équation (IV.12)).

Les éléments H_{ij} de la matrice de perturbation pourront donc être obtenus aisément en utilisant la partie $(\vec{k} \cdot \vec{p})$ de l'hamiltonien H_{kp} (IV.18) où nous substituerons aux termes $k_x k_y$ les termes $k_x A_y + A_x k_y$, où nous ferons $\Delta = 0$, et où nous multiplierons le résultat obtenu par le facteur constant $\frac{m}{\hbar} \frac{e}{m} = \frac{e}{\hbar}$.

Cette matrice doit, de la même façon qu'au paragraphe IV.1, être exprimée dans une base de Kramers. L'hamiltonien de perturbation H_{Ap} prend alors la forme :

$$H_{Ap} = \begin{bmatrix} G_{Ap} & \Gamma_{Ap} \\ -\Gamma_{Ap}^* & G_{Ap}^* \end{bmatrix}$$

où G_{Ap} et Γ_{Ap} sont des matrices 3 x 3 dont les éléments sont définis par les relations (IV.19) et (IV.20) et où les coefficients H_{ij} sont les éléments de (IV.13) auxquels nous faisons subir les transformation indiquées précédemment :

$$\begin{array}{ccc} k_x k_y & \xrightarrow{\bullet} & k_x A_y + A_x k_y \\ \Delta & \xrightarrow{\bullet} & 0 \end{array}$$

Il s'agit maintenant d'exprimer cette matrice dans la base qui diagonalise l'hamiltonien H'_{kp} (Cf. équation (IV.22)) relatif aux états stationnaires.

La matrice unitaire de transformation U définie par les équations (IV.21), (IV.24), (IV.25) et (IV.26) doit donc agir sur H_{Ap} (IV.45).

Nous obtenons alors :

$$H'_{Ap} = U^{-1} \cdot H_{Ap} \cdot U \quad (\text{IV.46})$$

qui doit être exprimée dans la base qui diagonalise H'_{kp} . (IV.46) prend alors la forme :

$$F = X^{-1} \cdot H'_{Ap} \cdot X \quad (\text{IV.47})$$

où

$$X = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} S & S \\ -S^* & S^* \end{bmatrix} \quad (\text{IV.48})$$

est la matrice qui diagonalise H'_{kp} et où $X^{-1} = X_t^*$
 S est une matrice 3 x 3 dont les éléments sont définis comme suit :

$$\left. \begin{aligned} S_{1j} &= \frac{n_{1j}}{(n_{1j}^2 + n_{2j}^2 + n_{3j}^2)^{1/2}} = \frac{n_{1j}}{\sqrt{D}} \\ S_{2j} &= \frac{n_{2j}}{\sqrt{D}} \\ S_{3j} &= \frac{n_{3j}}{\sqrt{D}} \end{aligned} \right\} \quad (\text{IV.49})$$

avec : $n_{1j} = g_{12} \cdot g_{23} - g_{13} (g_{22} - E'_j)$

$$n_{2j} = g_{13} \cdot g_{12}^* - g_{23} (g_{11} - E'_j)$$

$$n_{3j} = (g_{11} - E'_j)(g_{22} - E'_j) - g_{12} \cdot g_{12}^*$$

$$E'_j = E_j - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Les éléments F_{ij} de la matrice optique, exprimés dans la base qui diagonalise H'_{kp} , s'expriment alors sous la forme :

$$F_{ij} = (S_t^* \cdot G'_{Ap} \cdot S)_{ij} + (S_t \cdot \Gamma_{Ap}^* \cdot S)_{ij} \quad (\text{IV.50})$$

IV.2.3. PROBABILITE DE TRANSITIONS DIRECTES ENTRE DEUX BANDES DE VALENCE i ET j

La probabilité par unité de temps de transitions directes de porteurs d'une bande i à une bande j, que nous noterons w_{ij} , s'exprime en fonction de l'élément H_{ij} de la matrice optique :

$$w_{ij} = \frac{2\pi}{\hbar} |H_{ij}|^2 \cdot \delta (E_i - E_j - \hbar\omega) \quad (\text{IV.51})$$

Remarquons que les probabilités de transitions dans le sens $i \rightarrow j$ et dans le sens $j \rightarrow i$ sont égales, la matrice optique étant hermitique.

Cette probabilité de transitions doit être exprimée dans la base qui diagonalise H'_{kp} . Dans cette base, les éléments de la matrice optique sont les éléments F_{ij} définis par l'équation (IV.50). Ces éléments de matrice dépendent non seulement de $\vec{k}(0, \varphi, k)$ mais aussi du potentiel vecteur $\vec{A}(\vec{r}, t)$.

Les propriétés de symétrie d'un cristal cubique nous permettent néanmoins de définir une probabilité de transitions moyenne entre les bandes i et j, en calculant les éléments de matrice F_{ij} dans le cas où \vec{A} est orienté suivant les trois directions [100], [010] et [001].

Nous définissons alors une quantité moyenne W_{ij} telle que :

$$W_{ij} = \frac{|F_{ij}|_{A=[100]}^2 + |F_{ij}|_{A=[010]}^2 + |F_{ij}|_{A=[001]}^2}{3} \frac{1}{A^2 k^2} \frac{\hbar^2}{m^2} \quad (IV.52)$$

Cette quantité est liée aux éléments de matrice $|H_{ij}|^2$ calculés suivant les trois directions précédentes de \vec{A} par :

$$|H_{ij}|^2 = \left(\frac{e}{\hbar}\right)^2 A^2 k^2 W_{ij} \quad (IV.53)$$

Les valeurs de W_{ij} ont été calculées pour toutes les valeurs possibles du vecteur d'onde \vec{k} .

La figure IV.6 montre, à titre d'exemple, les variations de W_{ij} dans un plan [110] ($\varphi = \pi/4$) en fonction de l'angle θ pour trois valeurs de $|\vec{k}|$.

Les valeurs des paramètres de bande L, M, N (définis au paragraphe IV.1, équations (IV.14) et (IV.15)) étant connus à quelques % près, les calculs de W_{ij} ont été effectués pour les jeux de données 1 et 2 (Tableau IV.1) correspondant aux valeurs extrêmes de L, M, N.

	L	M	N
1	- 6.69	- 4.56	- 8.50
2	- 6.37	- 4.72	- 9.00

Les constantes L, M, N sont exprimées en unités $\frac{\hbar^2}{2m}$
 Elles sont déduites des valeurs des constantes A, B, C déterminées par résonance cyclotron : [17]
 $|A| = + 4.27$ $|B| = 0.63 \pm 0.08$ $|C| = 4.93 \pm 0.18$

TABLEAU IV.1

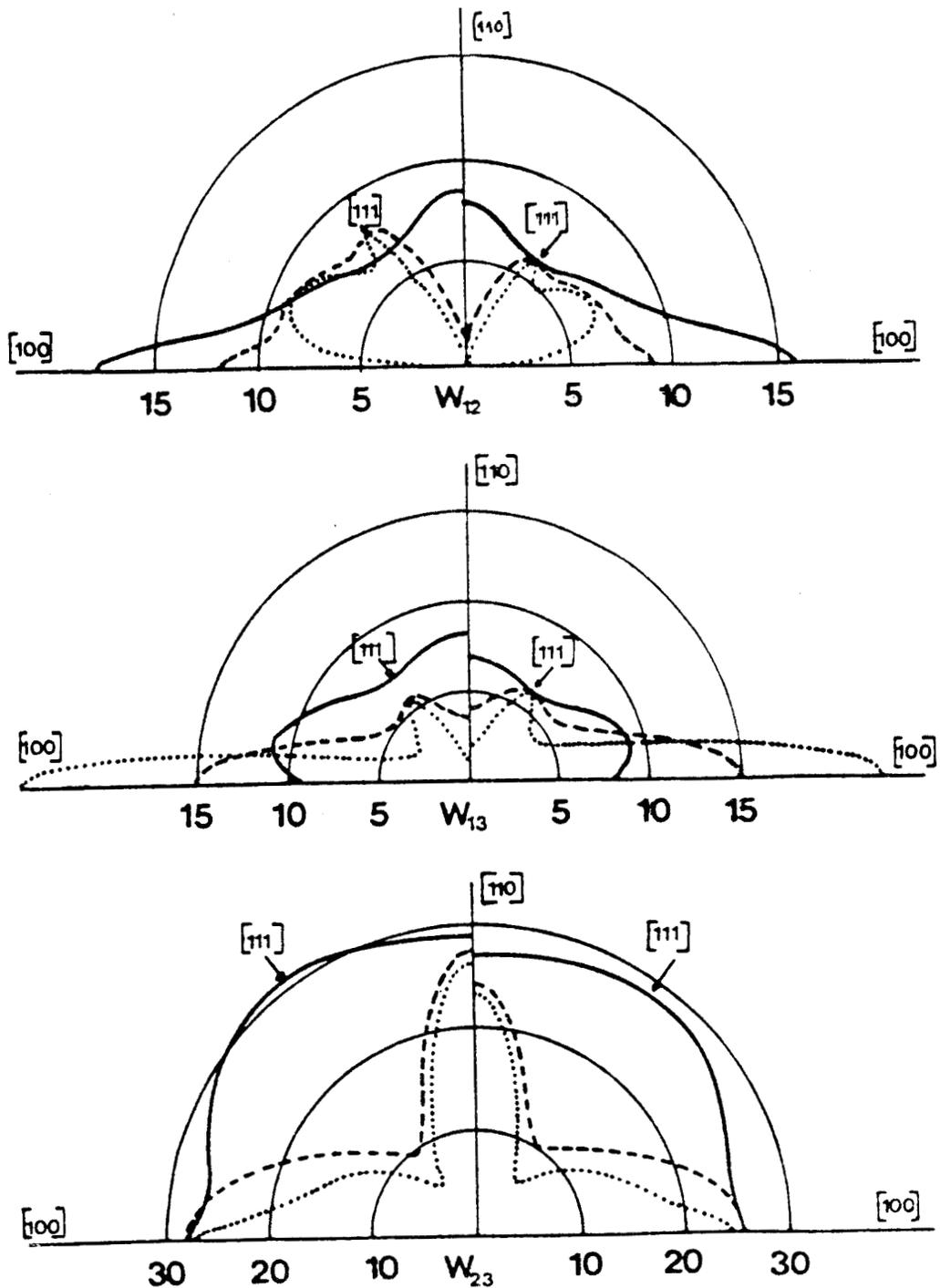


Figure IV.6 : Variations de W_{ij} dans un plan $[110]$ ($\varphi = \pi/4$) en fonction de θ , pour $|\vec{k}| = 10^8 \text{ m}^{-1}$ (—), $5 \times 10^8 \text{ m}^{-1}$ (---) et $10 \times 10^8 \text{ m}^{-1}$ (.....), en supposant $\Delta = 0.035 \text{ eV}$ et $L = -6.69$, $M = -4.56$, $N = -8.50$ (unité $\hbar^2/2m$) (partie droite) ; $L = -6.37$, $M = -4.72$, $N = -9.00$ (unités $\hbar^2/2m$) (partie gauche). [20].



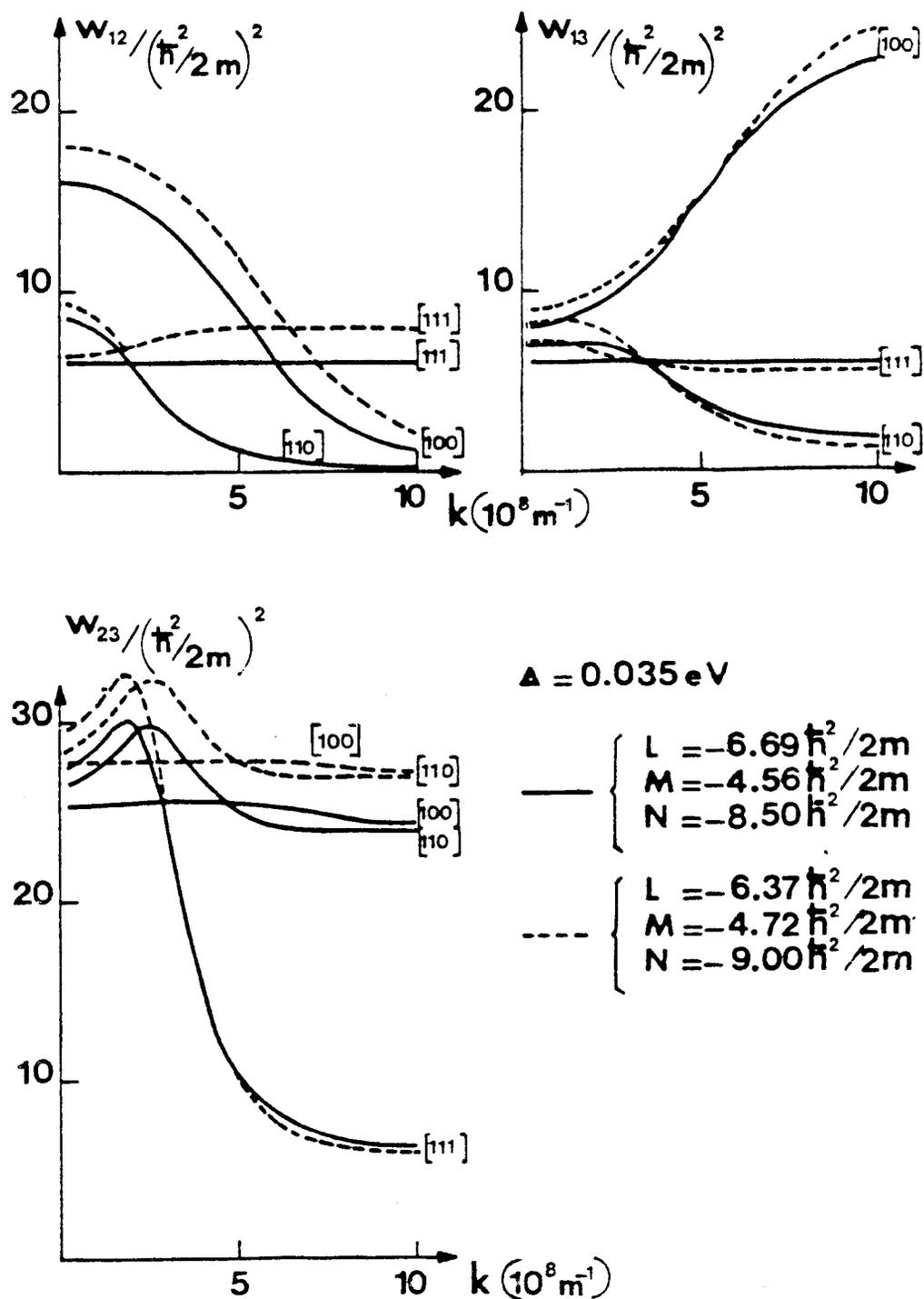


Figure IV.7 : Probabilités de transitions W_{ij} en fonction de $|\vec{k}|$, dans un plan [110] pour $\vec{k} = [100]$, [111] et [110].

De plus, nous avons supposé $\Delta = 0.035$ eV [18] [19] [20].

La figure IV.7 représente les variations de W_{ij} en fonction de $|\vec{k}|$, dans un plan [110] pour $\vec{k} = [100]$, [111] et [110]. Ces deux figures montrent que les probabilités de transition W_{ij} dépendent très fortement de la direction de \vec{k} .

IV.2.4. ABSORPTION ET CONDUCTIVITE INTERBANDE

Le coefficient d'absorption interbandes $d\alpha_{ij}$ résultant des transitions possibles de porteurs entre les bandes i et j , pour un vecteur d'onde \vec{k} (θ, φ, k), est défini par :

$$d\alpha_{ij} = \frac{\text{nombre de quanta d'énergie absorbés par unité de temps et par unité de volume}}{\text{densité de flux de quanta}} \quad (\text{IV.54})$$

Le nombre de quanta d'énergie absorbés par unité de temps et par unité de volume lors des transitions de porteurs entre les bandes d'énergie i et j est égal à :

$$w_{ij} \cdot \rho(E_i - E_j) \cdot \frac{1}{V}$$

où :

- w_{ij} est la probabilité de transition par unité de temps
- $\rho(E_i - E_j)$ est la densité d'états occupés par unité d'énergie dans l'intervalle d'énergie $|E_i - E_j|$
- V est le volume.

Par ailleurs, la densité de flux de quanta n'est autre que le flux d'énergie relatif au champ électromagnétique, divisé par l'énergie d'un photon et par le volume.

Le flux d'énergie est égal à la moyenne temporelle \bar{P} du vecteur de Poynting $\vec{P} = \vec{E} \wedge \vec{H}$ où \vec{E} et \vec{H} dérivent du potentiel vecteur $\vec{A}(\vec{r}, t)$ caractérisant la radiation :

$$\vec{E} = - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (\text{jauge de Coulomb})$$

$$\vec{H} = \frac{1}{\mu_0} \frac{\partial \vec{A}}{\partial r}$$

Le coefficient d'absorption interbandes $d\alpha_{ij}$ se met alors sous la forme :

$$d\alpha_{ij} = \frac{w_{ij} \cdot \rho(E_i - E_j) \cdot h\nu}{\bar{P}} \quad (\text{IV.55})$$

que nous allons maintenant expliciter.

IV.2.4.1. Expression du flux d'énergie \bar{P}

La radiation électromagnétique de pulsation ω étant caractérisée par le potentiel vecteur

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{a} A_0 \cos(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t) \quad (\text{IV.56})$$

où \vec{a} est unitaire et où $|\vec{q}| = 2\pi/\lambda$, le flux d'énergie \bar{P} est égal à :

$$\bar{P} = \frac{A_0^2 \omega^2 \epsilon_0 n c}{2} \quad (\text{IV.57})$$

et la densité de flux de quanta est $\frac{\bar{P}}{h\nu}$.

Dans cette expression, n représente l'indice du semiconducteur à la fréquence ν considérée, et c représente la vitesse de la lumière.

IV.2.4.2. Densité d'états $\rho(E_i - E_j)$

La densité $\rho(E)$ est égale au nombre d'états permis, renfermés dans un volume unité, pour un intervalle d'énergie unité.

Désignons par p_i la concentration en porteurs libres de la bande i (i variant de 1 à 3).

p_i est reliée à la fonction de distribution des porteurs $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ par :

$$p_i = \frac{1}{4\pi^3} \int_{V_{\vec{k}}} f(\vec{r}, \vec{k}, t) \cdot d^3k \quad (IV.58)$$

l'intégration étant étendue à $V_{\vec{k}}$ volume de la première zone de Brillouin.

Le semiconducteur n'étant pas dégénéré, il obéit à la statistique de Boltzmann : la fonction de distribution est de la forme :

$$\left. \begin{aligned} f(\vec{r}, \vec{k}, t) &= \exp\left(\frac{E_V - E_F}{k_B T}\right) \cdot \exp\left(\frac{E' - E_V}{k_B T}\right) \\ &= \exp\left(\frac{E_V - E_F}{k_B T}\right) \cdot \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) = f(E, T) \end{aligned} \right\} \quad (IV.59)$$

où $E = E_V - E'$ dépend de \vec{r} et \vec{k} ; l'origine des énergies est prise au sommet de la bande de valence.

Pour chaque bande i , nous pouvons calculer :

$$p_i = \frac{1}{4\pi^3} \int_{V_{\vec{k}}} \exp\left(\frac{E_v - E_F}{k_B T}\right) \cdot \exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right) \cdot d^3k \quad (\text{IV.60})$$

En coordonnées sphériques $\vec{k}(\theta, \varphi, k)$, l'élément de volume d^3k est égal à $d^3k = k^2 \sin\theta \cdot d\theta \cdot d\varphi \cdot dk$.

Nous obtenons alors :

$$p_i = \frac{\exp\left(\frac{E_v - E_F}{k_B T}\right)}{4\pi^3} \int_{V_{\vec{k}}} \exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right) \cdot k^2 \sin\theta \cdot d\theta \cdot d\varphi \cdot dk \quad (\text{IV.61})$$

Par ailleurs, nous connaissons la valeur de la concentration en porteurs libres p du semiconducteur ; c'est la somme des concentrations en porteurs libres de chacune des bandes de valence :

$$p = p_1 + p_2 + p_3 \quad (\text{IV.62})$$

(IV.61) et (IV.62) permettent alors d'exprimer :

$$\exp\left(\frac{E_v - E_F}{k_B T}\right) = \frac{4\pi^3 \cdot p}{\sum_{i=1}^3 \int_{V_{\vec{k}}} \exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right) \cdot k^2 \sin\theta \cdot d\theta \cdot d\varphi \cdot dk} \quad (\text{IV.63})$$

relation qui permet d'exprimer la densité d'états $\rho(E_i - E_j)$:

$$\rho(E_i - E_j) = \rho(E_i) - \rho(E_j) = \exp\left(\frac{E_v - E_F}{k_B T}\right) \left[\exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right) - \exp\left(-\frac{E_j}{k_B T}\right) \right] \frac{dV}{4\pi^3} \frac{1}{d|E_i - E_j|} \quad (\text{IV.64})$$

dans laquelle nous tenons compte de l'émission induite.

Nous pouvons encore écrire (IV.64) sous la forme :

$$\rho(E_i - E_j) = \frac{p[\exp(-E_i/k_B T) - \exp(-E_j/k_B T)]}{\sum_{i=1}^3 \int \exp(-E_i/k_B T) k^2 \sin\theta \cdot d\theta \cdot d\varphi \cdot dk} \frac{k^2 \sin\theta \cdot d\theta \cdot d\varphi}{\left| \frac{dE_i}{dk} - \frac{dE_j}{dk} \right|} \quad (IV.65)$$

Remarquons qu'il est également possible d'introduire une masse effective de densité d'états m_i^* telle que :

$$\left(\frac{m_i^*}{m}\right)^{3/2} = \left(\frac{\hbar^2}{2\pi m k_B T}\right)^{3/2} \int V_{\vec{k}} \exp(-E_i/k_B T) \cdot d^3k \quad (IV.66)$$

Cette masse effective m_i^* est isotrope et dépend de la température T.

La figure IV.8 représente les variations de m_i^*/m pour chacune des trois bandes de valence, en fonction de la température. Les masses effectives de densité d'états ont été calculées pour les deux jeux de données L, M, N indiqués dans le tableau IV.1, en supposant le couplage spin-orbite $\Delta = 0.035$ eV.

Nous constatons que les paramètres de bande L, M, N n'ont une influence notable que sur la masse effective de densités d'états relative à la bande des trous lourds (masse m_1^*) les masses m_2^* et m_3^* relatives à la bande des trous légers et à la bande "split-off" étant pratiquement confondues pour les deux jeux de données envisagés.

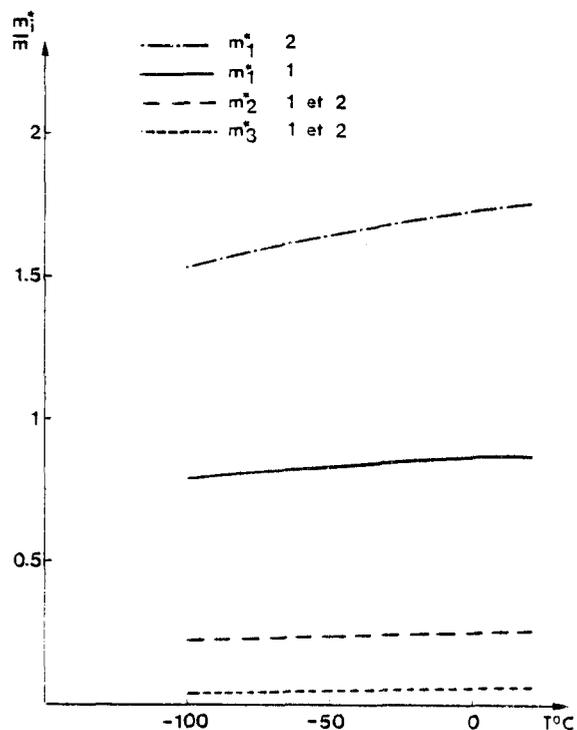


Figure IV.8 : Masses effectives de densité d'états en fonction de la température.

IV.2.4.3. Absorption et conductivité interbandes

Pour chaque valeur du vecteur d'onde $\vec{k}(\theta, \varphi, k)$, l'absorption due à des transitions de porteurs entre deux bandes i et j s'exprime, compte tenu de (IV.51), (IV.53), (IV.55), (IV.57), (IV.65) :

$$d\alpha_{ij} = \frac{2\pi}{\hbar} |H_{ij}|^2 \delta(E_i - E_j - \hbar\omega) \cdot \frac{p[\exp(-E_i/k_B T) - \exp(-E_j/k_B T)]}{\sum_{i=1}^3 \int \exp(-E_i/k_B T) k^2 \sin\theta d\theta d\varphi dk} \cdot \frac{k^2 \sin\theta d\theta d\varphi}{\left| \frac{dE_i}{dk} - \frac{dE_j}{dk} \right|} \cdot \frac{h\nu}{A_0^2 \omega^2 \epsilon_0 n c} \quad (IV.67)$$

ou encore :

$$d\alpha_{ij} = \frac{4\pi^2 e^2}{n\hbar} p k^4 \frac{W_{ij}}{E_i - E_j} \frac{\exp(-E_i/k_B T) - \exp(-E_j/k_B T)}{\left| \frac{dE_i}{dk} - \frac{dE_j}{dk} \right|} \frac{\sin \theta \cdot d\theta \cdot d\varphi}{\sum_{i=1}^3 \int \exp(-E_i/k_B T) k^2 \sin \theta d\theta d\varphi dk} \quad (\text{IV.68})$$

Pour réaliser l'intégration numérique sur tout l'espace des \vec{k} , nous devons déterminer les absorptions élémentaires $\Delta\alpha_{ij}(\theta, \varphi, k)$ qui se produisent en des points discrets (θ, φ, k) de la zone de Brillouin :

$$\Delta\alpha_{ij}(\theta, \varphi, k) = \frac{4\pi^2 e^2}{n\hbar} p k^4 \frac{W_{ij}}{E_i - E_j} \frac{\exp(-E_i/k_B T) - \exp(-E_j/k_B T)}{\left| \frac{dE_i}{dk} - \frac{dE_j}{dk} \right|} \frac{\sin \theta \cdot \Delta\theta \cdot \Delta\varphi}{\sum_{i=1}^3 \int \exp(-E_i/k_B T) k^2 \sin \theta d\theta d\varphi dk} \quad (\text{IV.69})$$

Ces absorptions élémentaires sont calculées en des points régulièrement espacés, le vecteur d'onde étant incrémenté en $\Delta k, \Delta\theta, \Delta\varphi$.

Pour un vecteur d'onde donné $\vec{k}(\theta, \varphi, k)$, les transitions interbandes se produisent à des fréquences ν_m telles que :

$$\nu_m = \frac{E_i(\vec{k}) - E_j(\vec{k})}{h}$$

L'anisotropie des bandes de valence fait en sorte que les fréquences ν_m seront toutes différentes.

L'absorption à une fréquence ν_0 donnée (que nous nous imposons) telle que $\nu_m < \nu_0 < \nu_{m+1}$ sera donc calculée en utilisant une méthode d'interpolation linéaire entre ν_m et ν_{m+1} .

On obtient alors le coefficient d'absorption total :

$$\alpha_{ij}(\nu_0) = \sum \Delta\alpha_{ij}(\nu = \nu_0) \quad (\text{IV.70})$$

Les transitions interbandes étant susceptibles d'exister entre les bandes 1-2, 1-3 et 2-3, l'absorption totale à la fréquence ν_0 sera :

$$\Delta\alpha(\nu_0) = \alpha_{12}(\nu_0) + \alpha_{13}(\nu_0) + \alpha_{23}(\nu_0) \quad (\text{IV.71})$$

La conductivité interbandes $\Delta\sigma(\nu_0)$ est alors :

$$\Delta\sigma(\nu_0) = \epsilon_0 \cdot n \cdot c \cdot \Delta\alpha(\nu_0) \quad (\text{IV.72})$$

Nous présentons, sur les figures IV.9, IV.11 et IV.13, les variations des conductivités interbandes $\Delta\sigma_{12}$, $\Delta\sigma_{13}$, $\Delta\sigma_{23}$ en fonction de la fréquence, calculées en utilisant la méthode que nous venons de décrire.

Les calculs théoriques ont été ici effectués pour le jeu de donnée 1 (voir tableau IV.1) et en supposant une énergie spin-orbite $\Delta = 0.035$ eV [18] [19] [20].

Les calculs sont relatifs au monocristal n° 5 dont les caractéristiques sont résumées dans le tableau IV.2 ; ils ont été effectués en fonction de la température de 293° K à 173° K.

Caractéristiques du monocristal n° 5
<ul style="list-style-type: none"> - Silicium de type p, dopé au Bore ; - Conductivité statique à 293° K : $\sigma_0 = 50(\Omega\text{m})^{-1}$; - Temps moyen de relaxation des moments : $\tau_m = 10^{-13}$ s à 293° K [*] ; - Concentration en porteurs libres à 293° K $p = 6.65 \times 10^{15}$ cm⁻³ [**].
<p>[*] Le temps moyen de relaxation des moments a été déterminé directement en utilisant la méthode décrite au chapitre III.</p> <p>[**] p est déduite des mesures de σ_0 et de τ_m.</p>

TABLEAU IV.2

Nous commenterons séparément les diverses transitions :

- TRANSITIONS 1-2 (figure IV.9)

Elles existent sur tout le domaine de fréquences envisagé. A T = 293° K, leur influence commence à se manifester notablement vers environ 80 cm⁻¹. La conductivité interbande $\Delta\sigma_{12}$ croît avec la fréquence jusqu'à une valeur de ν voisine de 185 cm⁻¹, correspondant à une séparation d'énergie entre les bandes 1 et 2 égale à $2\Delta/3$.

Au delà de $\nu \# 185$ cm⁻¹, $\Delta\sigma_{12}$ décroît relativement lentement.

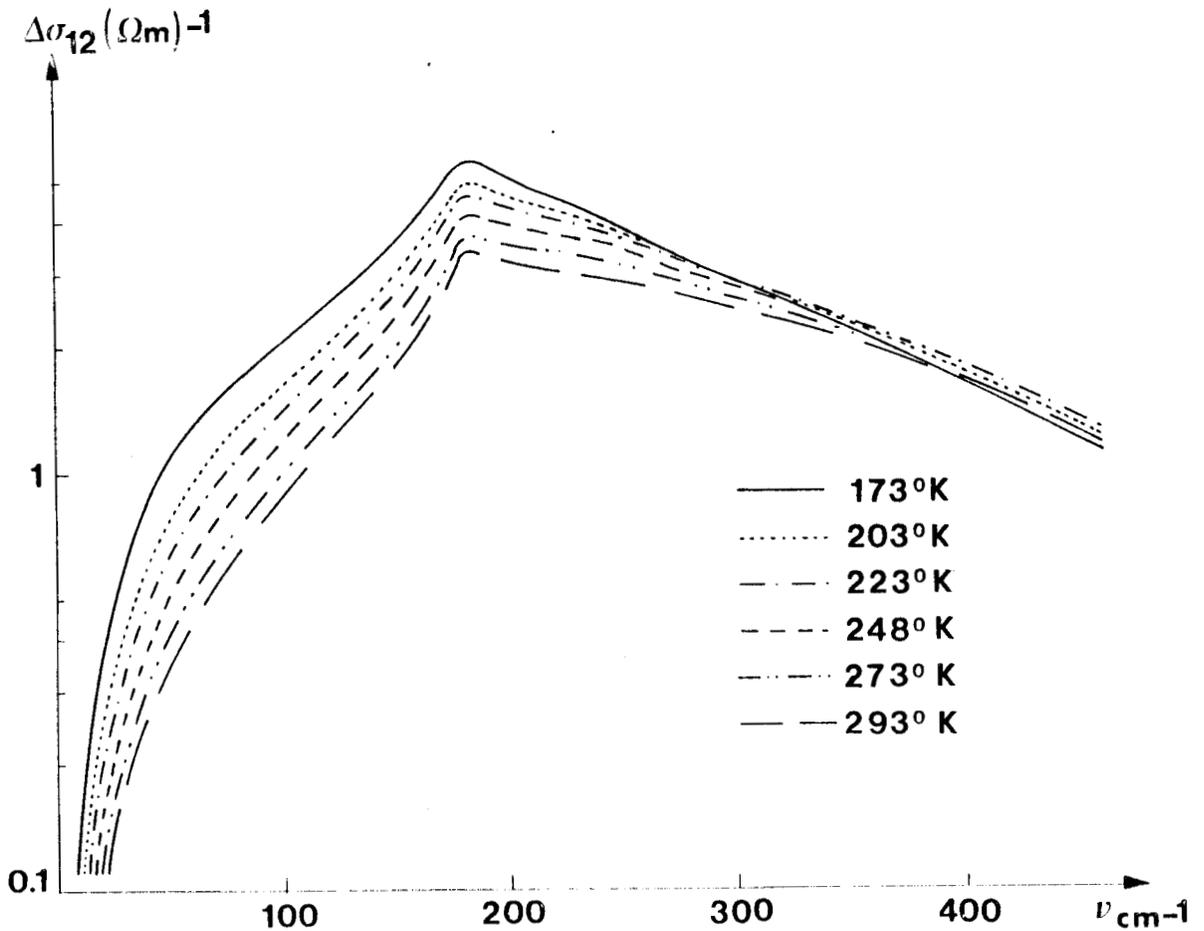


Figure IV.9 : Conductivité interbandes $\Delta\sigma_{12}$ en fonction de la fréquence et de la température.

Le maximum de $\Delta\sigma_{12}$ à $\nu \approx 185 \text{ cm}^{-1}$ correspond au fait que les bandes 1 et 2 deviennent parallèles et sont alors séparées par une énergie égale à $2\Delta/3$, pour des directions particulières du vecteur d'onde, telles que les directions [111] et [100]. Ce fait est mis en évidence sur les diagrammes énergétiques représentés sur la figure IV.2.

Lorsque les bandes 1 et 2 deviennent parallèles -ce qui se produit pour des valeurs de $|\vec{k}|$ proches du sommet de la bande de valence- elles sont encore très

peuplées. L'absorption, donc la conductivité, dans ces directions [111] ou [100] passe de ce fait par un maximum avant de tomber brutalement à zéro.

Nous mettons ceci en évidence sur la figure IV.10 qui représente $\Delta\sigma_{12}(\nu)$ pour $\vec{k} = [100]$, [111] et [γ]

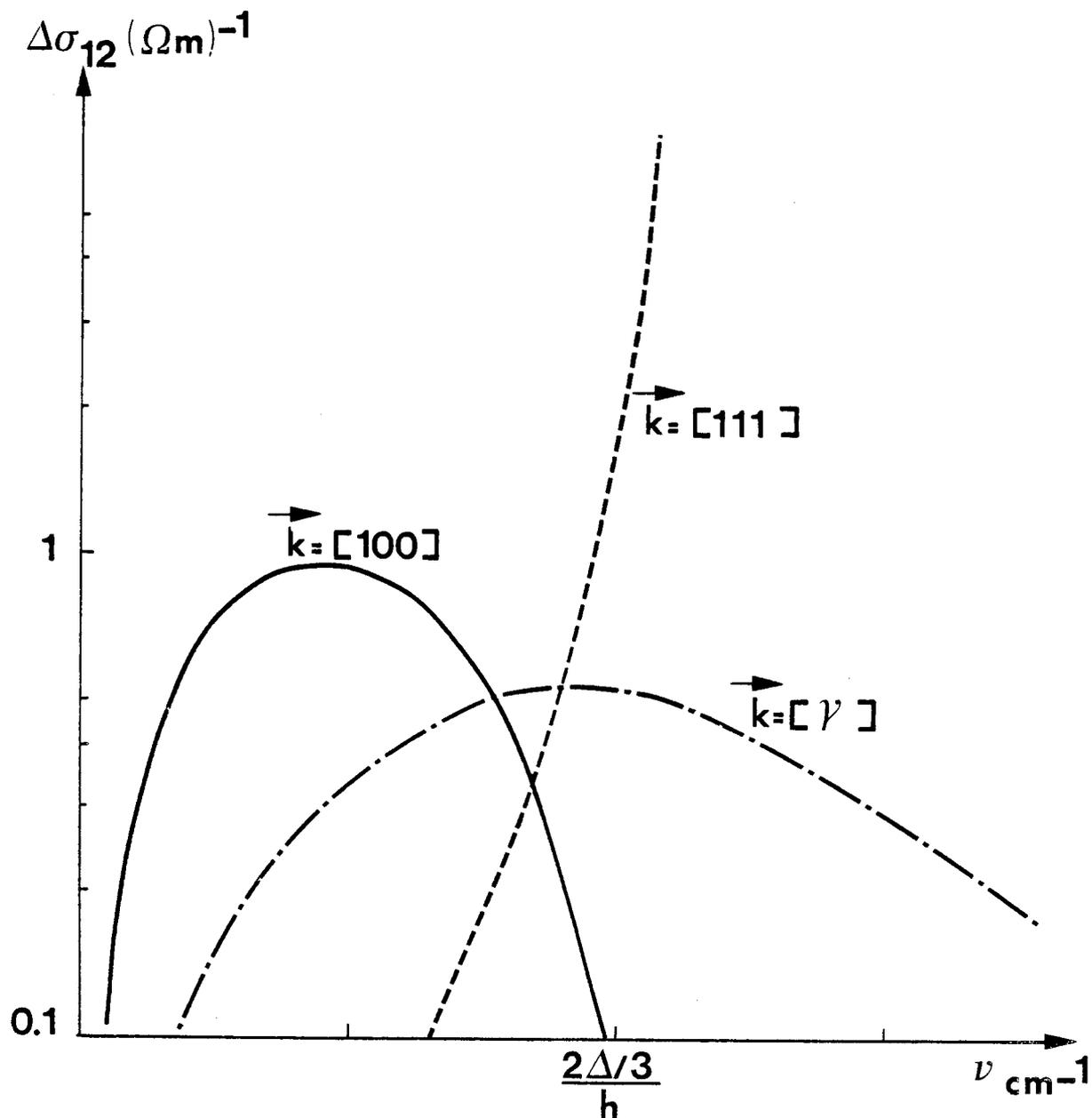


Figure IV.10 : Conductivité interbande $\Delta\sigma_{12}$ pour des directions particulières de \vec{k} .

Les porteurs étant distribués dans tout l'espace des \vec{k} et non pas localisés sur les seules directions [111] ou [100], toutes les absorptions calculées suivant des directions quelconques $\vec{k}(\theta, \varphi, k)$ du vecteur d'onde vont s'ajouter, à une fréquence donnée, et faire en sorte que $\Delta\sigma_{12}$ passera toujours par un maximum mais ne redescendra ensuite plus à zéro.

Nous remarquons par ailleurs que $\Delta\sigma_{12}$ augmente quand la température diminue, ceci dans une très grande partie de la gamme de fréquences envisagée (pratiquement jusqu'à environ 300 cm^{-1}). Ce fait peut être expliqué de la façon suivante : quand la température diminue, les porteurs ont tendance à se grouper au sommet de la bande de valence, là où les énergies sont les plus faibles : la zone de la bande de valence où les porteurs ont une énergie élevée -et qui correspond à des transitions de porteurs se produisant à haute fréquence- se dépeuple au profit de la zone d'énergie avoisinant le sommet de la bande de valence.

Au fur et à mesure que la température décroît, on va donc assister à une augmentation du nombre de porteurs aux environs du sommet de la bande de valence, ce qui entraîne une augmentation du taux de transitions possibles et donc une augmentation de $\Delta\sigma_{12}$. Dans cette zone, les transitions correspondent à des fréquences plus basses, puisque la séparation énergétique entre les bandes est plus faible.

Parallèlement à ceci, le nombre de porteurs situés dans la zone à énergie élevée de la bande de valence décroît et il en est de même pour $\Delta\sigma_{12}$.

• TRANSITIONS 1-3 (figure IV.11)

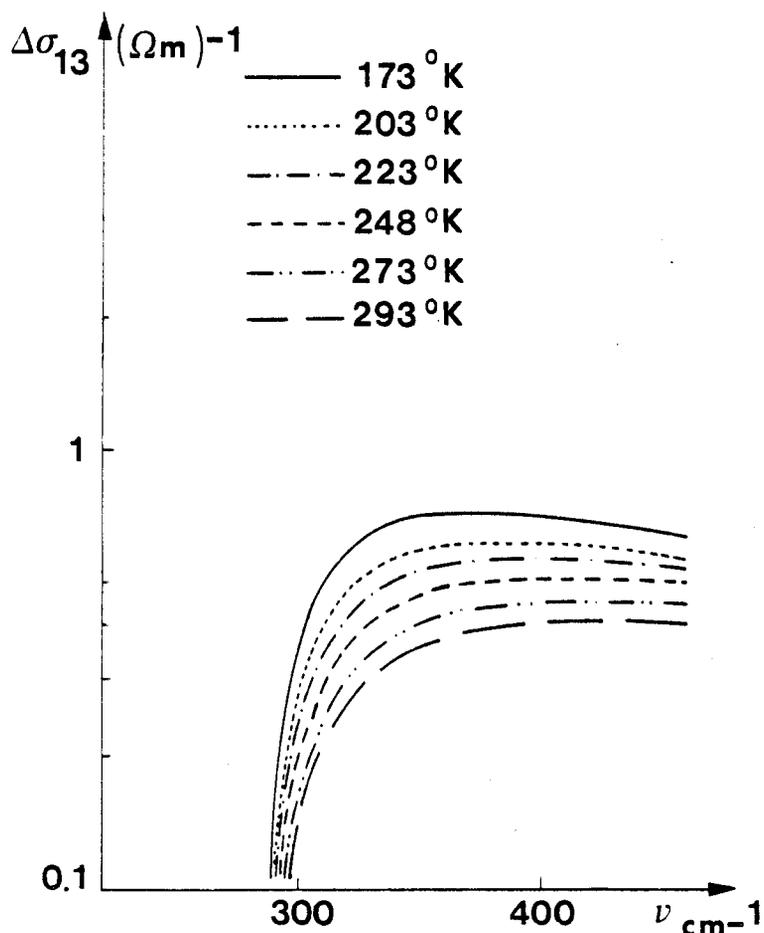


Figure IV.11 : Conductivité interbande $\Delta\sigma_{13}$ en fonction de la fréquence et de la température.

Lorsqu'on calcule les énergies $E_1(\vec{k})$ et $E_3(\vec{k})$, on constate que la séparation énergétique $|E_1 - E_3|$ est toujours supérieure à la valeur de l'énergie spin-orbite Δ . (Ce fait est illustré partiellement sur la figure IV.2).

De ce fait, les transitions 1-3 ne pourront avoir lieu que pour des fréquences ν telles que l'énergie du photon $\Delta E = h\nu \geq \Delta$. Dans le cas présent, où nous avons supposé que $\Delta = 0.035$ eV, ces transitions ne peuvent exister que pour des fréquences ν telles que $\nu \geq 282$ cm^{-1} .

L'accroissement de conductivité $\Delta\sigma_{13}$ résultant de ces transitions est plus faible que celui résultant des transitions 1-2 et tout au moins dans la plage de fréquences que nous envisageons, augmente quand la température diminue. Ce fait est expliqué de la même façon que précédemment.

• TRANSITIONS 2-3 (figure IV.13)

Les diagrammes énergétiques relatifs aux bandes 2 et 3 (figure IV.2) montrent que la séparation d'énergie $|E_2 - E_3|$ peut devenir inférieure à l'énergie spin-orbite Δ . Nous en donnons un exemple figure IV.12.

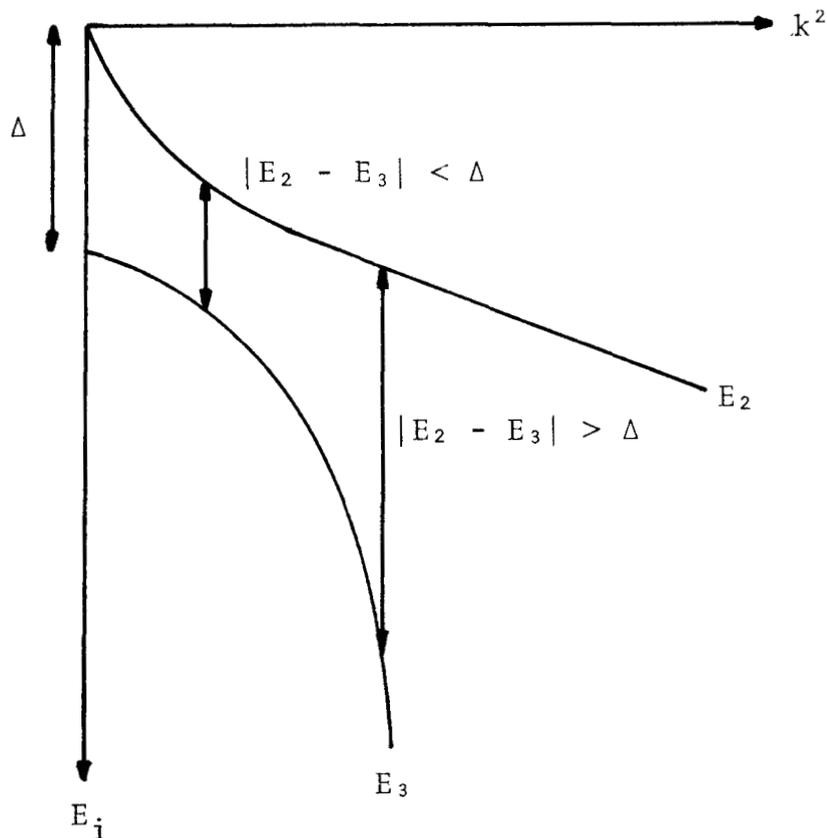


Figure IV.12

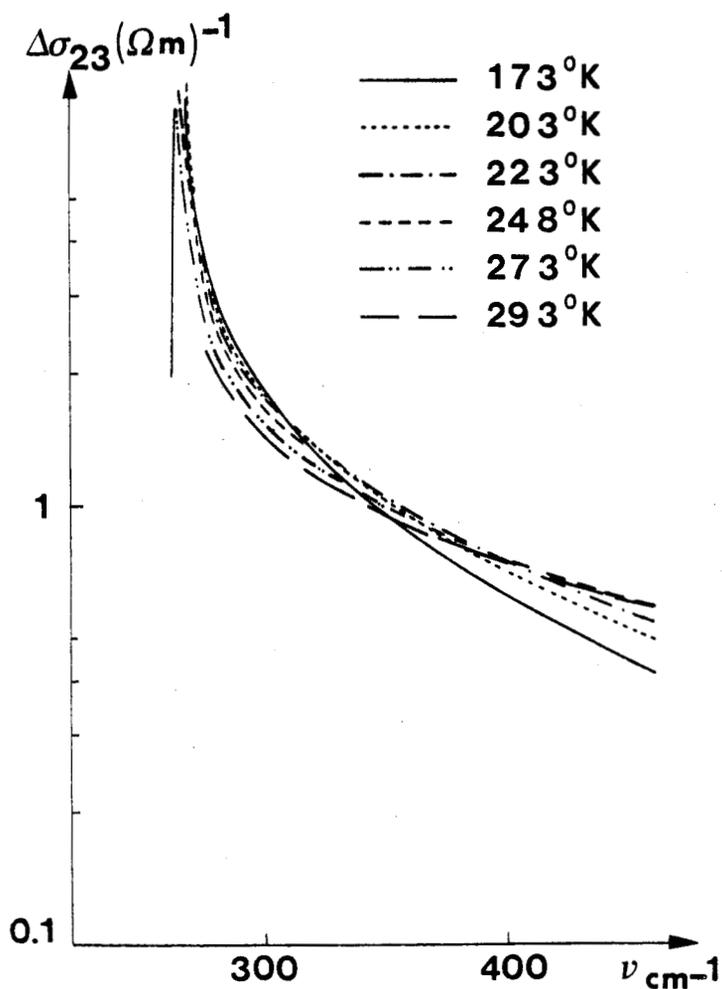


Figure IV.13 : Conductivité interbande $\Delta\sigma_{23}$ en fonction de la fréquence et de la température.

Les transitions 2-3 pourront donc apparaître pour des fréquences ν telles que $h\nu < \Delta$.

Lorsque l'énergie du photon $h\nu$ sera voisine de Δ , on assistera donc à de nombreuses transitions de porteurs entre les bandes 2 et 3 ; celles-ci vont provoquer une absorption donc une conductivité intenses.

Pour des valeurs plus élevées de $h\nu$, et quand $\Delta E = h\nu > \Delta$ l'absorption diminue.

Nous constatons également que l'accroissement de conductivité $\Delta\sigma_{23}$ lié aux transitions 2-3 diminue quand la température diminue à partir d'une fréquence $\nu \# 340 \text{ cm}^{-1}$: ce fait est expliqué pour les mêmes raisons que précédemment, les porteurs se regroupant vers le sommet de la bande de valence quand la température diminue.

La figure IV.14 représente la variation de conductivité globale $\Delta\sigma$, correspondant à l'addition des trois conductivités interbandes $\Delta\sigma_{12}$, $\Delta\sigma_{13}$ et $\Delta\sigma_{23}$.

Nous n'avons fait figurer sur cette figure que les courbes extrêmes $\Delta\sigma(\nu)$ correspondant à $T = 293^\circ \text{ K}$ et $T = 173^\circ \text{ K}$.

L'examen de ces courbes montre qu'il existe une discontinuité dans les valeurs de $\Delta\sigma$, qui est due à l'existence des transitions 2-3 : elle apparaît pour des fréquences voisines de 265 cm^{-1} , valeur qui correspond à des énergies légèrement inférieures à l'énergie $\Delta = 0.035 \text{ eV}$ ($\Delta = 0.035 \text{ eV}$ correspond à 282 cm^{-1}).

Nous mettons également en évidence le maximum de $\Delta\sigma$, dû au maximum de $\Delta\sigma_{12}$, qui se produit à une fréquence ν telle que $h\nu = 2\Delta/3$ (dans le cas présent $\nu \# 185 \text{ cm}^{-1}$).

Par ailleurs, nous notons que la zone de fréquences où les effets des transitions interbandes sont à la fois maximum et où ils causent les variations les plus sensibles de $\Delta\sigma$ en fonction de la température est la région pour laquelle $\nu < 250 \text{ cm}^{-1}$.

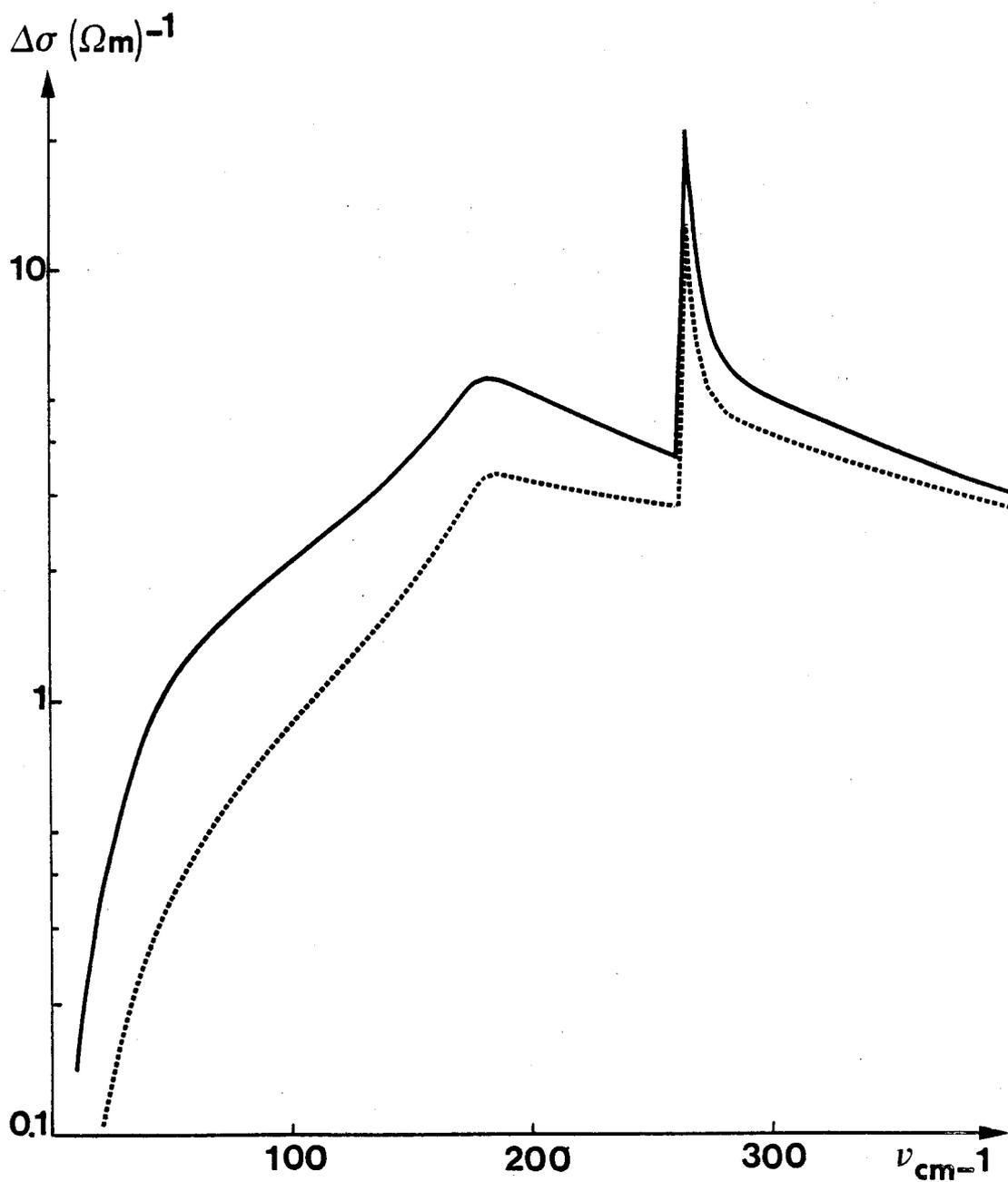


Figure IV.14 : Conductivité interbande totale

$$\Delta\sigma = \Delta\sigma_{12} + \Delta\sigma_{13} + \Delta\sigma_{23} .$$

————— T = 173° K

----- T = 293° K



C'est dans cette plage de fréquences en effet que l'on pourra le plus facilement mettre en évidence la variation de conductivité due aux transitions interbandes en fonction de la température : $\Delta\sigma$ varie d'un facteur 2 quand la température s'abaisse de 293° K à 173° K.

Pour cette raison, nos études expérimentales en fonction de la température ont porté plus particulièrement sur des fréquences inférieures à 250 cm^{-1} . Nous mettons en évidence de cette façon l'effet des seules transitions 1-2.

Cependant, de manière à mettre en évidence l'existence des transitions 1-3 et 2-3, notre étude à température ambiante a été entreprise jusqu'à des fréquences de 400 cm^{-1} .

VI.2.4.4. RESULTATS EXPERIMENTAUX ET INTERPRETATION

IV.2.4.4.1. Etude à T = 293° K

Sur la figure IV.15, relative au monocristal n° 5, nous représentons :

- 1) la variation fréquentielle de la conductivité de relaxation σ_{relax} ainsi qu'elle a été déterminée au chapitre III.
- 2) la variation fréquentielle de la conductivité globale théorique : $\sigma_{\text{total}} = \sigma_{\text{relax}} + \Delta\sigma$.
 $\Delta\sigma$ est calculée pour les deux jeux de paramètres L, M, N (tableau IV.1) de façon à tenir compte de l'incertitude sur ces paramètres.
- 3) la variation fréquentielle de la conductivité expérimentale.

Les courbes $\sigma_{\text{total}} = \sigma_{\text{relax}} + \Delta\sigma$ théoriques ont été calculées en supposant que l'énergie spin-orbite est $\Delta = 0.035$ eV [18] [19] [20].

La figure IV.16, quant à elle, reprend les mêmes courbes que précédemment mais les calculs théoriques de $\Delta\sigma$ donc de σ_{total} ont été effectués en supposant que $\Delta = 0.044$ eV [17] [21] [22].

Quelles sont les conclusions que nous pouvons tirer de ces courbes ?

L'examen des figures IV.15 et IV.16 montre tout d'abord que le pic de conductivité qui apparaît de façon théorique pour des énergies de photon voisines de Δ (et dû aux transitions 2-3) n'est pas mis en évidence de façon expérimentale.

Ceci peut être expliqué par plusieurs raisons :

- nous avons négligé toute cause d'élargissement de raies dans nos calculs théoriques (par exemple : transitions indirectes par phonons induits) ;
- la résolution en fréquence de l'appareillage de mesure n'est pas suffisante pour permettre de mettre en évidence un pic aussi étroit (≈ 2 cm⁻¹).

Il nous a paru intéressant d'étudier un peu plus en détail les différentes raisons qui pourraient provoquer le désaccord entre les valeurs théoriques et expérimentales au voisinage du pic de conductivité.

En particulier, nous avons essayé d'estimer l'influence que pourrait avoir la résolution de l'appareillage sur la conductivité aux environs du pic. Dans ce but, à partir des valeurs de conductivité théoriques précédemment calculées

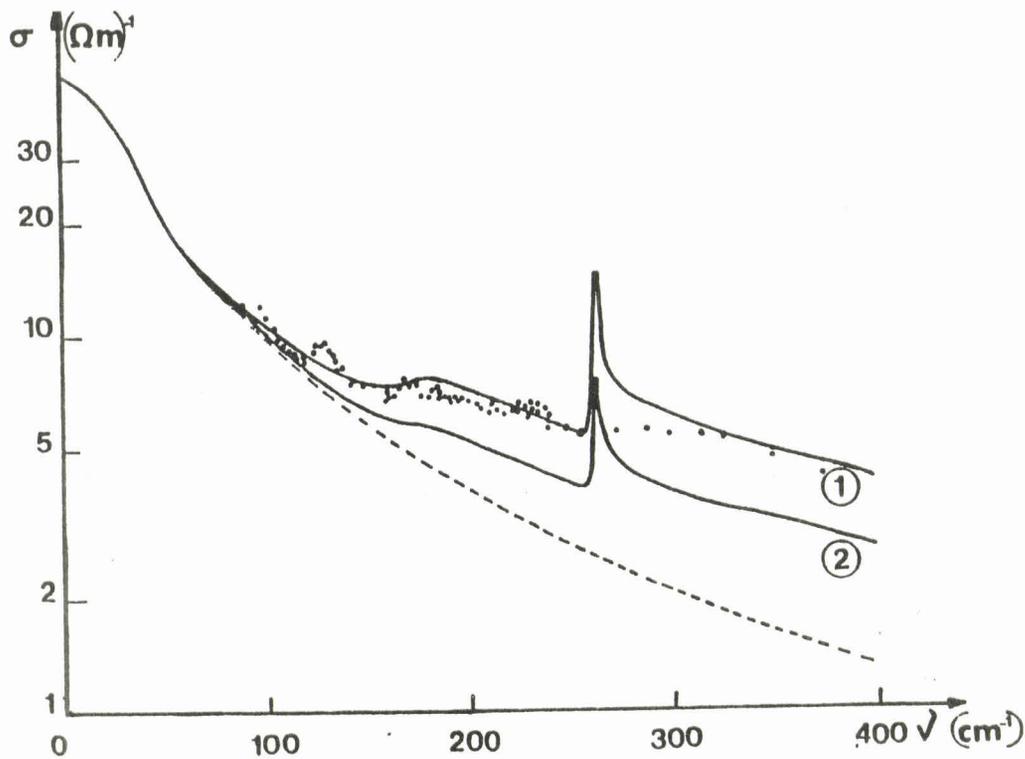


Figure IV.15 : Comparaison de σ_{exp} et σ_{th} ($\Delta = 0.035$ eV)
 ① $\sigma_{\text{théorique}}$ pour le jeu de données n° 1
 ② $\sigma_{\text{théorique}}$ pour le jeu de données n° 2
 --- σ_{Relax} ... nos points expérimentaux.

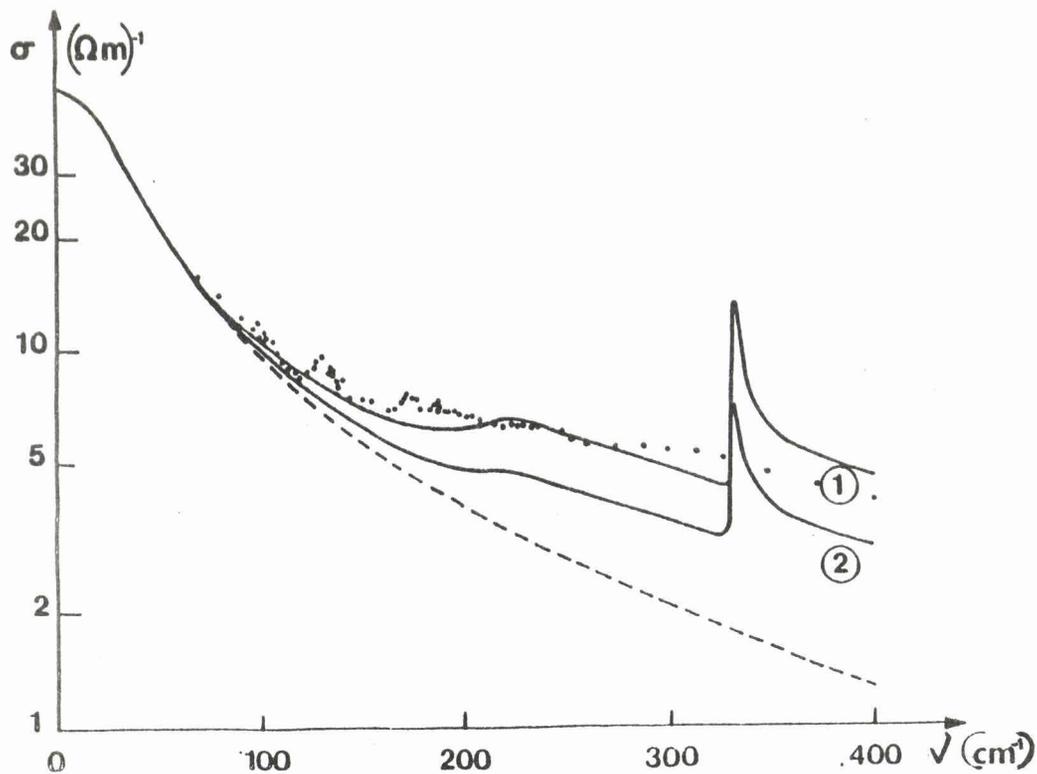


Figure IV.16 : Comparaison de σ_{exp} et σ_{th} ($\Delta = 0.044$ eV)
 ① : $\sigma_{\text{théorique}}$ pour le jeu de données n° 1
 ② : $\sigma_{\text{théorique}}$ pour le jeu de données n° 2
 --- : σ_{Relax} ... : nos points expérimentaux.



(où la résolution d'appareillage est évidemment supposée infinie) nous avons déduit les valeurs du coefficient de transmission théorique, à toutes les fréquences (ce calcul a été effectué dans le cas du jeu de données n° 1 et d'une énergie spin-orbite de 0.035 eV). Nous avons ensuite appliqué à ce spectre de transmission en fonction de la fréquence, un élargissement gaussien de 6 cm^{-1} , correspondant à la résolution fréquentielle des spectromètres dans cette gamme de fréquences. Nous obtenons ainsi un nouveau spectre de transmission en fonction de la fréquence, traduisant le fait que la résolution d'appareillage est limitée. A partir de ce dernier spectre, nous avons recalculé la conductivité, les nouvelles valeurs obtenues traduisent également le fait que la résolution d'appareillage est limitée.

Les résultats ainsi obtenus sont donnés figure IV.17 où nous les comparons aux valeurs initiales de conductivité.

Nous notons une diminution de l'amplitude du maximum d'un facteur voisin de 1.5 mais le maximum de conductivité reste cependant appréciable.

Même en appliquant un élargissement gaussien de 10 cm^{-1} puis de 20 cm^{-1} aux valeurs de transmission, le maximum de conductivité reste perceptible : on ne note une diminution d'amplitude que d'un facteur 2 pour un élargissement de 20 cm^{-1} .

La résolution limitée des appareillages de mesure ne suffit donc pas à expliquer complètement le fait que nous ne mettons pas en évidence expérimentalement le pic de conductivité correspondant à l'effet des transitions 2-3, pour des fréquences légèrement inférieures à Δ/h .

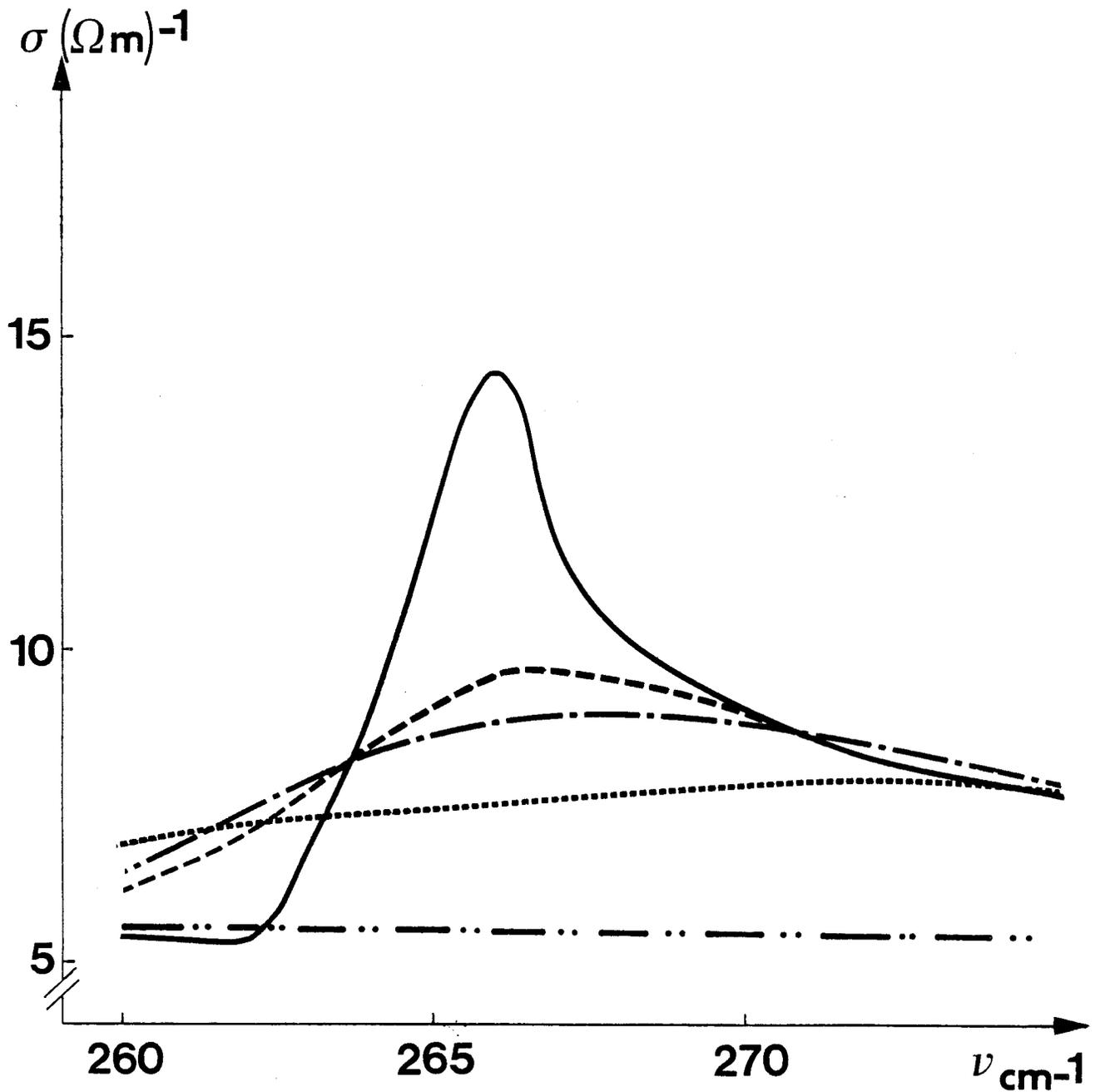


Figure IV.17 : Conductivité autour de 266 cm^{-1} ($\Delta = 0.035 \text{ eV}$ jeu de paramètres de bande n° 1) à $T = 293^\circ \text{ K}$.



- Courbe théorique initiale
- " " en supposant une résolution d'appareil de 6 cm^{-1} .
- · - · - Avec une résolution de 10 cm^{-1}
- · · · · " " 20 cm^{-1}
- · - · - Courbe expérimentale.

Il faut donc tenir compte d'autres mécanismes physiques pour expliquer l'élargissement tels que ceux cités par Arthur [15] : existence de transitions indirectes par phonons induits.

Cet auteur prend en compte les transitions indirectes par phonons induits en leur associant un élargissement gaussien atteignant 70 cm^{-1} dans le cas du Germanium.

De la même façon, nous avons dans le cas du Silicium (et dans le cas où $\Delta = 0.035 \text{ eV}$ et pour le jeu de paramètres n° 1) associé un élargissement gaussien que nous avons évalué être supérieur à 80 cm^{-1} .

Dans ces conditions, l'étude de la courbe de $\sigma_{th} = \sigma_{relax} + \Delta\sigma$ autour du pic de conductivité montre que ce dernier s'évanouit. Ceci est représenté sur la figure IV.18 où nous faisons figurer :

- 1) la courbe de conductivité théorique sans élargissement ;
- 2) la courbe de conductivité théorique après élargissement de 80 cm^{-1} ;
- 3) les points expérimentaux.

Si la conductivité théorique (courbe 2) est encore supérieure aux valeurs expérimentales, le désaccord n'est plus que dans un rapport 1.2 et nous pensons ainsi pouvoir conclure qu'un élargissement gaussien important, d'au moins 80 cm^{-1} (ou en énergie de $\# 10 \text{ meV}$) est nécessaire pour expliquer le fait que l'effet des transitions 2-3 n'est pas observable autour du pic de conductivité théorique situé légèrement en deçà de $\nu = \Delta/h$.

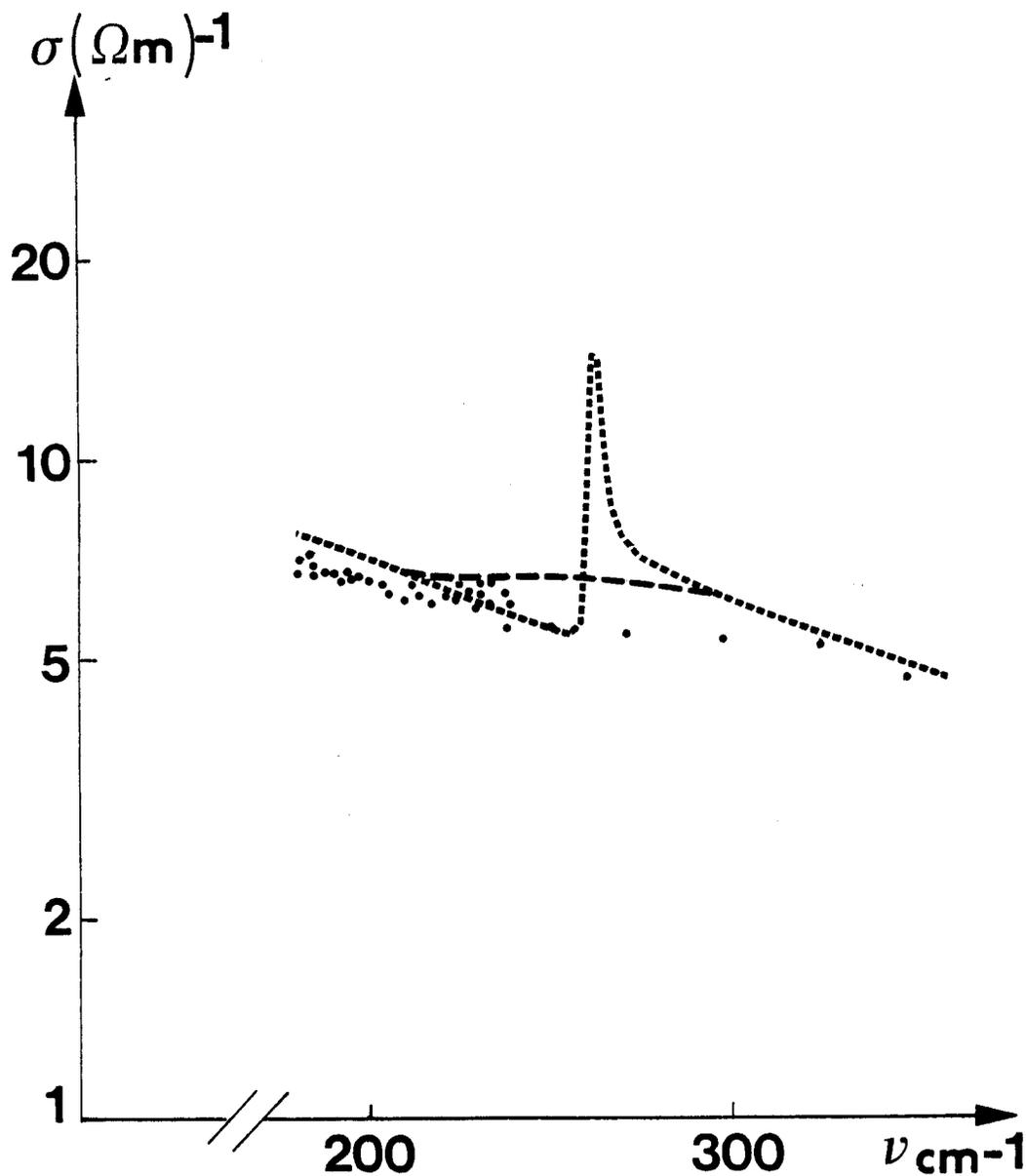


Figure IV.18 : Conductivité en fonction de la fréquence
autour du pic dû aux transitions 2-3,
à $T = 293^\circ K$.

- Courbe théorique calculée pour $\Delta = 0.035 eV$ et le jeu de paramètres de bande n° 1.
- σ théorique après élargissement gaussien de $80 cm^{-1}$ (ou 10 meV)
- Points expérimentaux.



Cependant, nous pouvons tirer les conclusions suivantes :

- le jeu de paramètres de bande n° 1 ($L = - 6.69$, $M = - 4.56$, $N = - 8.50$ (en unités $\hbar^2/2m$)) semble mieux décrire la réalité expérimentale que le jeu n° 2.
- une valeur de l'énergie spin-orbite $\Delta = 0.035$ eV donne un meilleur accord entre théorie et expérience, sur une plus large bande de fréquences : l'accord est réalisé jusque 400 cm^{-1} au lieu de 300 cm^{-1} dans le cas de $\Delta = 0.044$ eV.

En particulier, comme nous le voyons sur la figure IV.15 le maximum de conductivité expérimentale qui apparaît à 180 cm^{-1} et qui correspond à un photon d'énergie $2\Delta/3$ est en excellent accord avec le maximum théorique. De plus, nous pouvons comparer cette valeur de Δ à celle obtenue par Staflin [11] au moyen de mesures d'absorption en infrarouge lointain. Cet auteur trouve une énergie spin-orbite de 0.037 eV à 88° K pour des échantillons de Silicium dopés au Bore. Cette valeur est cependant en désaccord avec la valeur obtenue par Zwerdling [21] qui trouve $\Delta = 0.044$ eV.

Par ailleurs, nous avons comparé notre valeur de $\Delta = 0.035$ eV à celle obtenue par Sérafetinides et Kimmitt [23] : ces auteurs étudient la réponse spectrale (de 303 à $4\ 000 \text{ cm}^{-1}$) de "p-Si photon drag detectors" et en déduisent une valeur de $\Delta \leq 0.0375$ eV.

IV.2.4.4.2. Etude en fonction de la température

L'étude en fonction de la température de la conductivité en fonction de la fréquence, dans une gamme s'étendant jusqu'à 250 cm^{-1} , nous permet d'étayer nos premiers résultats.

Les figures IV.19 à IV.24 représentent les variations des conductivités théoriques $\sigma_{\text{total}} = \sigma_{\text{relax}} + \Delta\sigma$ en fonction de la température et de la fréquence, pour $\nu < 250 \text{ cm}^{-1}$, domaine de fréquence dans lequel on peut s'attendre a priori

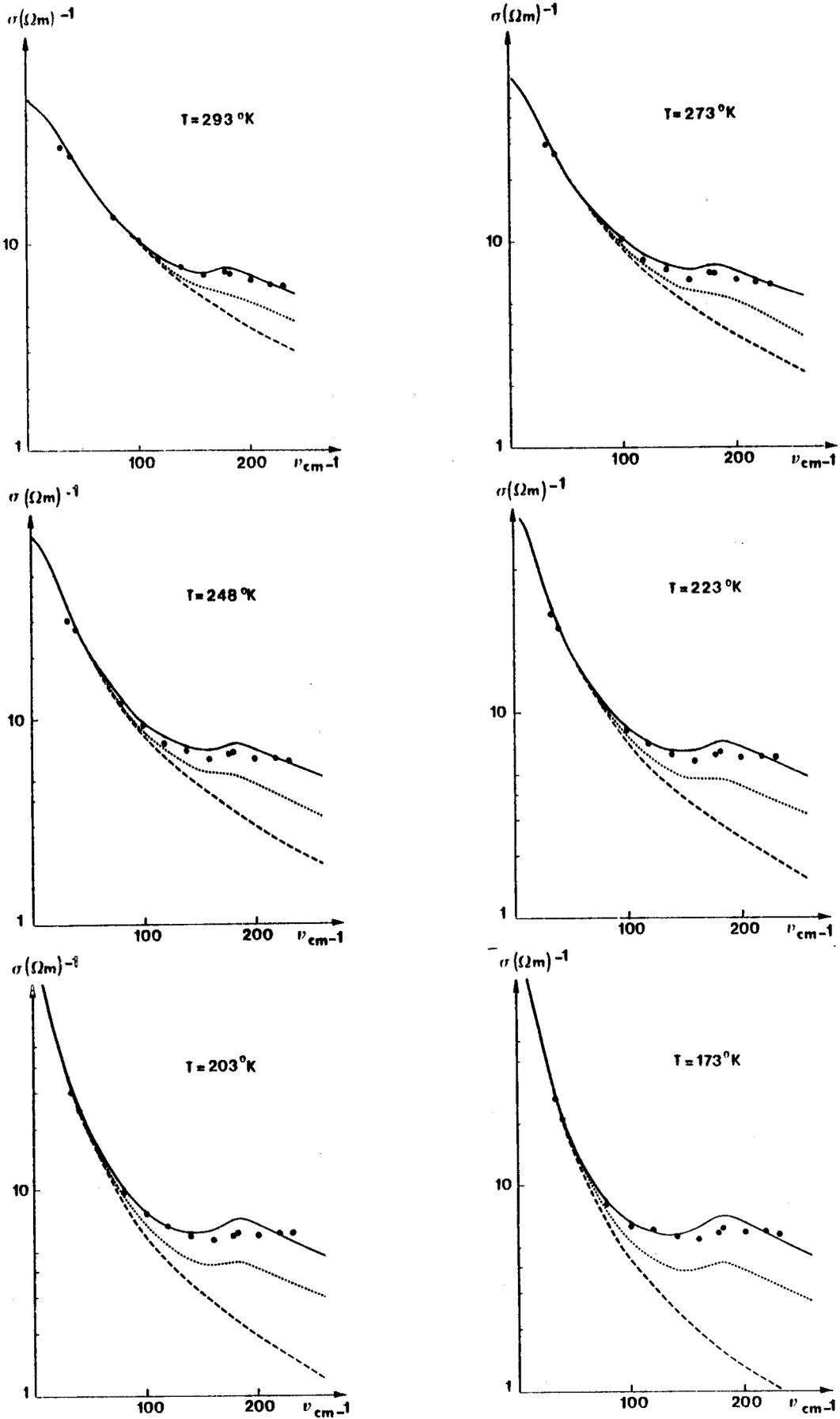
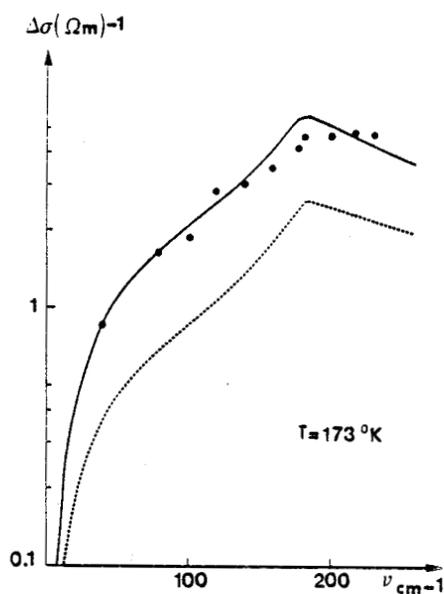
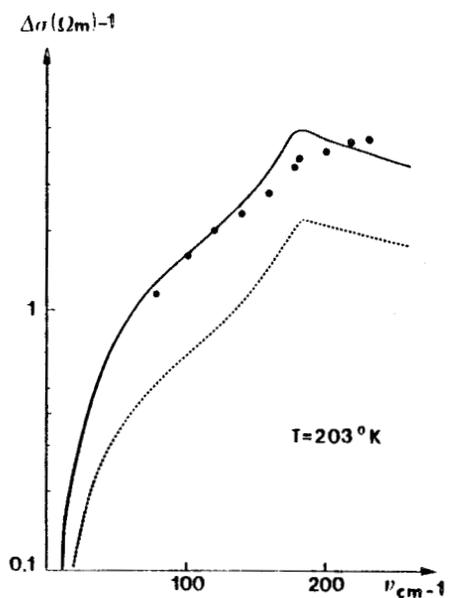
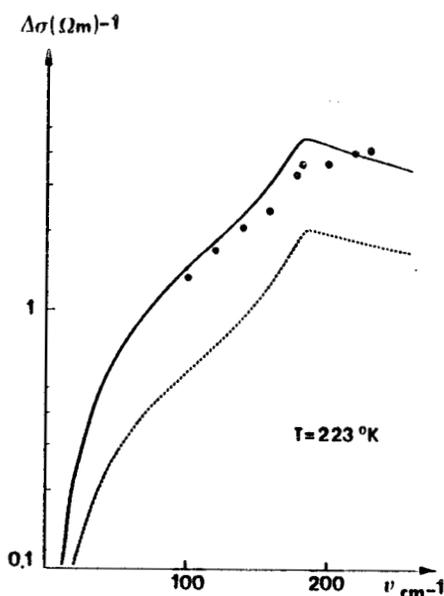
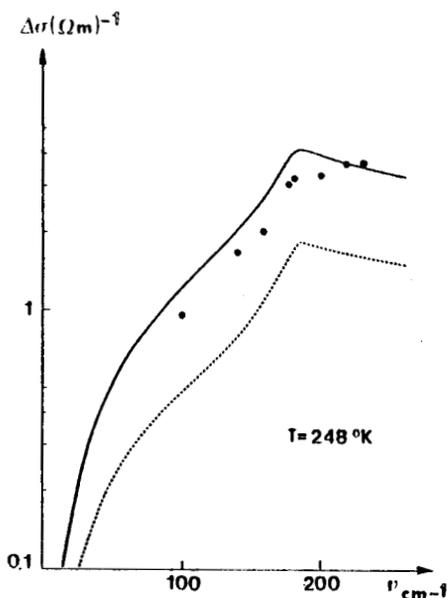
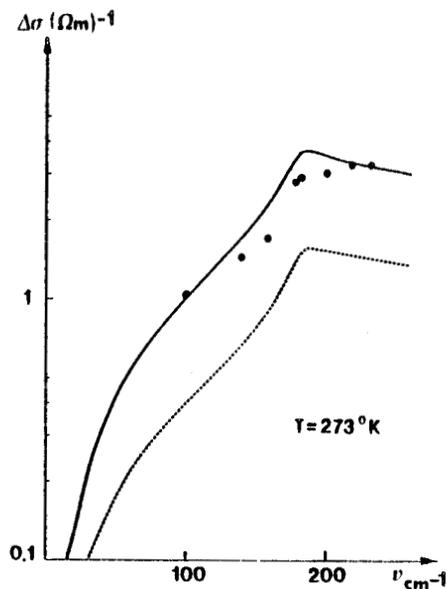
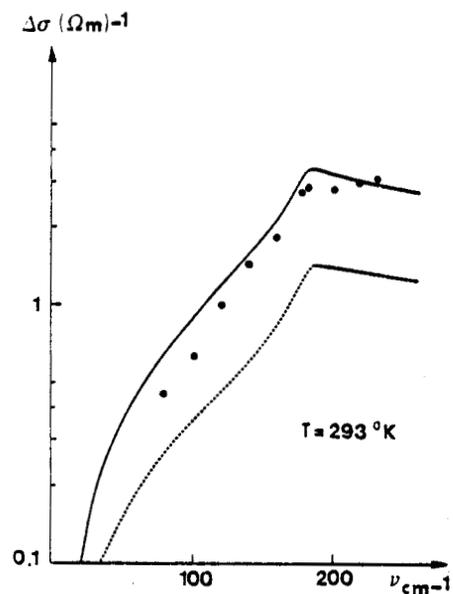


Figure IV.19 à IV.24 : σ théorique calculé pour les jeux de données n° 1 (—) et n° 2 (...) et $\Delta = 0.035\text{ eV}$.

σ_{Relax} : ---- Points expérimentaux : ●



Figures IV.25 à IV.30 :

$\Delta\sigma_{th}$ pour les jeux de données n° 1 (—) et n° 2 (...) et $\Delta = 0.035$ eV.

● Points déduits de l'expérience.



à obtenir les effets maximums des transitions interbandes.

Les courbes théoriques ont été calculées en utilisant :

- les jeux de paramètres L, M, N n° 1 et 2 ;
- une énergie spin-orbite $\Delta = 0.035$ eV ;
- le modèle de relaxation exposé au chapitre III.

Sur chacune des figures, nous avons fait figurer nos points expérimentaux. Les fréquences de mesure ont été choisies de façon à se trouver dans le cas où l'effet des transitions interbandes risquait d'être maximum au vu de la théorie.

Les figures IV.25 à IV.30 représentent quant à elles les variations des conductivités interbandes théoriques $\Delta\sigma$ en fonction de la température et de la fréquence, calculées dans les mêmes conditions que précédemment. Nous comparons de même ces valeurs aux résultats déduits de l'expérience.

Nous pouvons constater que l'accord est quasiment parfait entre théorie et expérience, sur tout le domaine de température envisagé.

Nous avons calculé le rapport $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{théor.}}$, pour toutes les fréquences et toutes les températures envisagées.

Si nous utilisons le jeu de données n° 1, la valeur moyenne de $\sigma_{\text{exp}}/\sigma_{\text{théor.}}$ est de 0.94. Nous pouvons en conclure que le modèle théorique envisagé approche les valeurs expérimentales à 6 % près par excès. Si par contre nous calculons le même rapport pour le jeu de données n° 2, nous obtenons alors une valeur de 1.30 : les valeurs expérimentales sont supérieures aux valeurs théoriques et le jeu n° 2 ne décrit les expériences qu'à 30 % près par défaut.

L'ensemble des résultats prouve a posteriori, que les hypothèses avancées sur les valeurs de L, M, N (validité du jeu de paramètres n° 1) et sur Δ ($\Delta = 0.035$ eV) sont correctes et proches de la réalité.

IV.3. CONCLUSION

Nous avons montré expérimentalement et justifié théoriquement que les variations en fonction de la fréquence et de la température de la conductivité présentée par le Silicium de type p sont dues à deux phénomènes distincts.

En premier lieu, dans une gamme de fréquences s'étendant jusqu'à environ 60 cm^{-1} , les variations de conductivité sont essentiellement dues à des mécanismes de collisions de porteurs sur le réseau cristallin et également à des collisions sur impuretés ionisées. Les collisions sur phonons acoustiques, sur phonons optiques et sur impuretés ionisées, permettent en effet de décrire convenablement les variations de conductivité en fonction de la température de 293° K à 173° K et de la fréquence, de 2.5 à environ 60 cm^{-1} .

En second lieu, au delà de 60 cm^{-1} , ces variations ne peuvent plus être expliquées par les seuls mécanismes précédents : une conductivité que nous avons attribuée à des mécanismes de transitions de porteurs entre les diverses bandes de valence, sous l'effet de la radiation électromagnétique appliquée au semiconducteur, vient s'ajouter à la conductivité due aux collisions ou conductivité de relaxation.

Le calcul complet, en tout point de l'espace des \vec{k} , des valeurs de l'énergie des porteurs répartis sur les trois bandes de valence, puis celui des probabilités de transitions entre deux quelconques de ces bandes, et enfin des conductivités interbandes qui en résultent, nous a permis de prouver que l'excès de conductivité par rapport à la conductivité de relaxation observé expérimentalement dans le domaine des

fréquences supérieures à 60 cm^{-1} était effectivement dû à ces mécanismes de transitions de porteurs.

Pour une loi de variation $E_i(\vec{k})$ donnée, donc dépendant entre autres choses de la valeur de l'énergie spin-orbite Δ , les expressions théoriques des conductivités interbandes $\Delta\sigma_{ij}$ dépendent des paramètres de bande L, M, N.

Leur effet principal est de modifier l'amplitude des diverses conductivités interbandes, alors que celui de Δ est de décaler en fréquence les spectres $\Delta\sigma_{ij}(\nu)$ (décalage vers les fréquences hautes si Δ augmente, et inversement).

Nous avons étudié les effets de ces différents paramètres et nous observons un très bon accord entre théorie et expérience (à 6 % près) en fonction de la fréquence et de la température, lorsque les paramètres de bande sont choisis égaux à $L = -6.69$, $M = -4.56$, $N = -8.50$ (en unités $\hbar^2/2m$) et lorsque l'énergie spin-orbite est choisie égale à $\Delta = 0.035 \text{ eV}$.

Nous avons montré ainsi par une méthode permettant de prendre en compte la très forte anisotropie des surfaces d'énergie que les transitions 1-2 existent dans tout le domaine de fréquences considéré, que leur effet est maximum cependant pour des fréquences $\nu < \nu_1$ (ν_1 étant la fréquence correspondant à une énergie égale à $2\Delta/3$). Au delà de cette fréquence, leur effet diminue mais, jusqu'à des fréquences légèrement inférieures à ν_2 (ν_2 correspond à une énergie égale à Δ), ces transitions sont les seules à exister. La mise en évidence de ces transitions 1-2 n'avait jusqu'à présent jamais été faite pour le Silicium ; elle n'a été rendue possible que parce que nous avons pu définir de la façon la plus précise possible, les conductivités dues à la relaxation des porteurs.

Au delà de ν_2 , les transitions 2-3 puis 1-3 apparaissent (les transitions 1-3 n'étant possibles que pour $\nu > \nu_2$ où ν_2 correspond à l'énergie Δ). L'effet prépondérant reste cependant celui des transitions 1-2, puis vient ensuite l'effet des transitions 2-3, puis enfin celui des transitions 1-3.

L'effet des transitions 1-3 augmente quand la température diminue, alors que c'est l'inverse en ce qui concerne les transitions 2-3 : ces faits sont résumés dans le tableau IV.3, qui décrit les importances relatives des transitions 1-3 et 2-3 par rapport aux transitions 1-2, aux températures de 293° K et 173° K pour quelques fréquences situées dans le domaine d'existence des trois transitions possibles dans le cas où $\Delta = 0.035$ eV.

	$\nu = 300 \text{ cm}^{-1}$	$\nu = 350 \text{ cm}^{-1}$	$\nu = 400 \text{ cm}^{-1}$
$\frac{\Delta\sigma_{13}}{\Delta\sigma_{12}}$ (293° K)	0.05	0.17	0.24
$\frac{\Delta\sigma_{13}}{\Delta\sigma_{12}}$ (173° K)	0.12	0.32	0.44
$\frac{\Delta\sigma_{23}}{\Delta\sigma_{12}}$ (293° K)	0.69	0.46	0.45
$\frac{\Delta\sigma_{23}}{\Delta\sigma_{12}}$ (173° K)	0.65	0.44	0.38

TABLEAU IV.3

Si nous tenons compte non seulement des mécanismes de collisions de porteurs sur le réseau et sur impuretés ionisées mais aussi des mécanismes de transitions de porteurs entre bandes de valence, l'accord entre les valeurs de conductivité expérimentales et théoriques est réalisé à 6 % près, en fonction de la fréquence et de la température, à condition de choisir :

- une énergie spin-orbite $\Delta = 0.035$ eV ;

- des paramètres de bande L, M, N tels que :

$$L = - 6.69 \hbar^2/2m$$

$$M = - 4.56 \hbar^2/2m$$

$$N = - 8.50 \hbar^2/2m$$

BIBLIOGRAPHIE

CHAPITRE IV

- [1] W. SCHOCKLEY
Phys. Rev. 78, 173 (1950).
- [2] M. CARDONA and F.H. POLLAK
Phys. Rev. 142, 530 (1966).
- [3] P. KIREEV
"Physique des Semiconducteurs" Mir - Moscou (1975).
- [4] E.O. KANE
J. Phys. Chem. Solids 1, 82 (1956).
- [5] F. HERMAN
Physica 20, 801 (1954).
- [6] G. DRESSELHAUS, A.F. KIP and C. KITTEL
Phys. Rev. 98, 368 (1955).
- [7] W. KAISER et al.
Phys. Rev. 91, 1380 (1953).
- [8] R. NEWMANN and W.N. TYLER
Phys. Rev. 105, 885 (1957).
- [9] A.H. KAHN
Phys. Rev. 97, 1647 (1955).

- [10] S. WALLEES
Ark. Fysik 25, 33 (1963).
- [11] T. STAFILIN
J. Phys. Chem. Solids 27, 65 (1966).
- [12] L.M. LAMBERT
Phys. Stat. Sol. (a) 11, 461 (1972).
- [13] E. BARTA
Infrared Phys. 17, 111 (1977).
- [14] W. FAWCETT
Proc. Phys. Soc. 85, 931 (1965).
- [15] J.B. ARTHUR et al.
Phys. Rev. 152, 740 (1966).
- [16] K. SEEGER
"Semiconductor Physics" Springer-Verlag
Wien (1973).
- [17] G. OTTAVIANI et al.
Phys. Rev. 12, 3318 (1975).
- [18] F. HERMAN
Proc. IRE 43, 1703 (1955).
- [19] W. KOHN
Solid State Phys. 5, 257 (1957).
- [20] J. VINDEVOGHEL and M. VINDEVOGHEL
Phys. Stat. Sol. (b) 96, 717 (1979).
- [21] S. ZWERDLING et al.
Phys. Rev. Letters 4, 173 (1960).

- [22] P. LAWAETZ
Phys. Rev. B 4, 3460 (1971).
- [23] A.A. SERAFETINIDES and M.F. KIMMITT
J. Phys. D 11, L 97 (1978).

CONCLUSION

L'étude des variations en fonction de la fréquence et de la température, de la conductivité présentée par des échantillons de Silicium homogène de type n et de type p dans le domaine des ondes millimétriques et de l'infrarouge lointain a été entreprise dans le but de préciser la dynamique des porteurs libres dans ce semiconducteur.

Le paramètre important qu'est le temps de relaxation des moments a pu être mesuré expérimentalement, à partir des spectres de conductivité réduite $\sigma'(\nu)/\sigma_0$ déterminés sur une très large bande de fréquences (2.5 à 400 cm^{-1}). La méthode de détermination expérimentale de τ_m , qui ne nécessite pas la connaissance préalable de la concentration en porteurs libres, ni celle de leur masse effective, permet d'accéder directement aux lois de variation de la mobilité des porteurs en fonction de la température du réseau. Par ailleurs, les mesures de la conductivité statique σ_0 en fonction de la température T, utilisées conjointement aux résultats $\tau_m(T)$, permettent de trouver l'évolution de la concentration en porteurs libres avec la température.

Une étude théorique des mécanismes de collisions, menée à la fois sur le Silicium de type n et de type p, nous a permis par comparaison avec l'expérimentation, de préciser

les importances respectives des différents types de collisions.

La méthode de mesure de τ_m que nous utilisons nous a permis par ailleurs de déterminer des valeurs originales des constantes de couplage porteurs-phonons acoustiques ainsi que, dans le cas du p-Si, du potentiel de déformation acoustique.

Nous montrons que le comportement fréquentiel de la conductivité présentée par le n-Si est correctement décrit par ces mécanismes de collisions à condition de tenir compte à la fois des collisions sur phonons acoustiques, sur phonons optiques et sur impuretés ionisées. Ces dernières interviennent surtout en basse température.

Dans le cas du p-Si, les mécanismes de collisions ne suffisent pas à eux seuls pour expliquer l'importante conductivité qui subsiste en hautes fréquences ($\nu > 60$ à 80 cm^{-1}) alors qu'aux fréquences inférieures à 60 cm^{-1} , ces mécanismes décrivent correctement les variations de conductivité.

Cet accroissement de conductivité a été attribué à l'existence de transitions de porteurs entre bandes de valence, qui se produisent lorsque le semi-conducteur est irradié par le champ électromagnétique. L'étude théorique de ces mécanismes de transitions interbandes a été alors entreprise de façon à tenir compte du caractère fortement anisotrope des bandes de valence et de la répartition des porteurs dans l'ensemble de l'espace des \vec{k} . Les énergies des porteurs dans chacune des trois bandes de valence ont été calculées en tout point de l'espace des \vec{k} , en utilisant une méthode de perturbation ($\vec{k} \cdot \vec{p}$).

Nous avons ensuite élaboré une formulation analytique des probabilités de transitions et des conductivités interbandes, que nous calculons en tout point de l'espace des \vec{k} de façon à prendre en compte l'anisotropie des bandes d'énergie.

La conductivité interbandes est calculée en considérant que des transitions de porteurs peuvent avoir lieu entre deux quelconques des trois bandes de valence.

L'étude expérimentale détaillée du p-Si en hautes fréquences de 60 à 400 cm^{-1} , nous a permis de mettre en évidence pour la première fois, l'existence des transitions 1-2 dans le Silicium. En effet, ces dernières se manifestant dans un domaine de fréquences où les phénomènes de relaxation ont encore une grande importance, elles nécessitent pour être mises en évidence et chiffrées quantitativement, de connaître avec la meilleure précision possible, les valeurs de conductivité de relaxation, dues aux diverses collisions subies par les porteurs

Nous avons également montré que les transitions 1-3, qui interviennent à partir d'une fréquence ν_0 correspondant à l'énergie spin-orbite Δ , et les transitions 2-3 intervenant à des fréquences légèrement inférieures à ν_0 , existent. Leur effet commence à se manifester alors que celui des transitions 1-2 diminue. Nous avons pu chiffrer leur importance par rapport aux transitions 1-2 et par rapport aux phénomènes de relaxation.

L'accord entre théorie et expérience est correct sur tout le domaine de fréquences envisagé, sauf dans la zone où existe le pic de conductivité provoqué par les transitions 2-3.

Nous n'avons pas pu mettre en évidence expérimentalement, l'accroissement très élevé de conductivité dû aux transitions 2-3 qui apparaît théoriquement pour des

fréquences légèrement inférieures à $\nu_0 = \Delta/h$. La résolution des appareils de mesure ne suffit pas à expliquer ce fait. Un élargissement gaussien d'au moins 80 cm^{-1} traduisant l'effet de transitions indirectes par phonons induits améliore cependant quelque peu l'accord théorie-expérience dans cette zone.

La comparaison des résultats théoriques et expérimentaux nous permet de conclure par ailleurs que l'énergie spin-orbite Δ est voisine de 0.035 eV , rejoignant en cela les conclusions de Serafetinides et Staflin. De plus, nous concluons que les paramètres de bande L, M, N ont des valeurs très voisines de :

$$L = - 6.69 \hbar^2/2m ;$$

$$M = - 4.56 \hbar^2/2m ;$$

$$N = - 8.50 \hbar^2/2m.$$

