

TABLE DES MATIERES

Introduction générale

Chapitre I Modélisation des extensions de la Z.CE d'homojonctions réelles

I-1 Introduction

I-2 Solution générale de la diffusion

I-2-1 Diffusion à partir d'une couche infinie épaisse

I-2-2 Diffusion à partir d'une couche infiniment mince

I-3 Profil de dopage gaussien-constant

I-3-1 Positions de la jonction métallurgique

I-3-2 Relation entre les extensions de la zone active

I-3-3 Expression du champ électrique

I-3-4 Barrière de potentiel

I-3-5 Modélisation des extensions de la Z.C.E

I-4 Profil de dopage erfc-constant

I-4-1 Position de la jonction métallurgique

I-4-2 Relation entre les extensions de zone active

I-4-3 Champ électrique

I-4-4 Hauteur de barrière

I-4-5 Modélisation des extensions de la Z.C.E

I-5 Conclusion

Références bibliographiques relatives au chapitre I

Chapitre II Modélisation de la capacité de jonctions abruptes à dopages homogènes

II-1 Introduction

II-2 Equation de Poisson

II-2-1 Cas général

II-2-2 Homojonction abrupte

II-3 Densités d'électrons et de trous.

II-4 Champ électrique.

II-4-1 Champ électrique à l'interface

II-4-2 Champ électrique à la jonction électrique

II-4-3 Résultats et discussions.

II-4-3-1 Champ électrique et densités de charge et de porteurs

II-4-3-2 Potentiel électrique

II-5 Charge et capacité de jonction.

II-5-1 Jonction symétrique

II-5-2 Jonction asymétrique

II-6 Conclusion

Références bibliographiques du chapitre II

Chapitre III Modélisation des offsets de bande de conduction et de valence pour l'interface $Ga_xIn_{1-x}As_{1-y}P_y/InP$

III-1 Introduction

III-2 Le binaire InP

III-2-1 Structure de bande d'énergie

III-2-2 Propriétés intrinsèques

III-2-2-a Cristallographie du binaire InP

III-2-2-b Masses effectives du binaire InP

III-2-2-c Concentration intrinsèque

III-2-3 Effet la température sur le gap

III-3 Gap et paramètre de maille de l'alliage $Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}P_y$

III-3-1 Propriétés intrinsèque

III-3-1-1 Masse effective

III-3-1-2 Constantes diélectriques

III-4 Modèle de base d'Anderson

III-5 Position du niveau de Fermi

III-6 Modèle des affinités électroniques

III-7 Nouveau concept pour les affinités électroniques

III-8 Modèle de Jaros

III-9 Modèle de Van de Walle

III-10 Conclusion

Références Bibliographiques du chapitre III.

Conclusion générale.

Introduction générale

La majorité des chercheurs se penchent sur la simulation numérique de certains problèmes physiques, la modélisation est la seule à être capable de prédire des lois relatives au problème envisagé.

Le travail que nous avons effectué dans le cadre de ce mémoire concerne simulation et modélisation de la caractéristique capacité-tension d'homojonction et la détermination des offset de bande de l'interface semiconducteur GaInAsP/InP.

Le premier chapitre est consacré à la détermination des extensions de la zone de charge d'espace de jonctions p-n à profil de dopage réel de part et d'autre de la jonction métallurgique. Dans ce contexte, un modèle original est proposé.

Dans le second chapitre, le modèle classique mis au point par Shockley présente deux particularités à savoir que la capacité diverge pour une tension appliquée voisine du potentiel de diffusion et non définie pour des tensions appliquées supérieures au potentiel de diffusion.

Ces singularités résultent du de la non contribution des porteurs mobiles (électrons et trous) dans la zone active de la structure.

Dans ce chapitre, nous allons proposer un modèle qui tient compte des densités de porteurs libres dans toute la structure semiconductrice dans un cas particulier où les dopages des régions p et n seront considérés constants.

Le dernier et troisième chapitre est consacré à la modélisation des offsets de bande du système accordé $Ga_xIn_{1-x}As_{1-y}P_y/InP$.

La connaissance des discontinuités de bandes devient alors un paramètre important pour les dispositifs à hétérojonction. Dans ce contexte, la connaissance de certaines grandeurs physiques est nécessaire pour le calcul de ces offsets de bande. Nous rappelons que ces offsets de bande définissent complètement l'hétérojonction.

Des lois d'évolution de ces offsets de bande en fonction des compositions en x et y de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_{1-y}P_y$ peuvent être tirées à partir de certains modèles théoriques de la littérature à savoir le modèle de base proposé par Anderson, le modèle des affinités électroniques, le modèle des affinités électroniques corrigés, le modèle de Jaros et le modèle de Van de Walle.

Modélisation des extensions de la zone de charge d'espace d'homojonctions réelles

I-1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons modéliser les extensions de la zone de charge d'espace de jonctions p-n à profil de dopage réel de part et d'autre de la jonction métallurgique.

La largeur de la zone de charge d'espace peut être obtenue à partir de la caractéristique expérimentale capacité-tension en polarisation inverse.

Dans le cadre de l'approximation de déplétion, la capacité d'une diode à jonction est similaire à un condensateur plan.

I-2 Solution générale de la diffusion

La loi d'évolution spatio-temporelle de la concentration du dopant est solution de la deuxième loi de Fick [1].

Dans les calculs qui vont suivre, nous supposons que la diffusion du dopant est réalisée suivant un axe perpendiculaire à la face avant comme cela est indiqué sur la figure suivante :

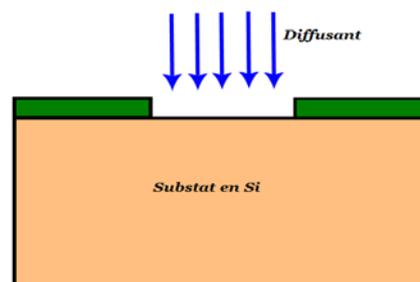


Figure I-1: Schématisation du processus de diffusion des impuretés

Dans le cas unidimensionnel (1-D), la diffusion est régie par l'équation aux dérivées partielles (E.D.P) suivante:

$$\frac{\partial N(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x, t) \frac{\partial N(x, t)}{\partial x} \right) \quad (I-1)$$

où x désigne la distance à partir de la surface de l'échantillon, t le temps de diffusion, $D(x, t)$ le coefficient de diffusion de l'impureté dans le semiconducteur et $N(x, t)$ la concentration du diffusant.

Dans le cas où le coefficient de diffusion de l'impureté $D(x, t)$ est supposé constant de valeur D , l'équation précédente prend la forme suivante :

$$\frac{\partial N(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 N(x, t)}{\partial x^2} \quad (I-2)$$

La solution de cette l'équation peut être déterminée de deux manières différentes à savoir la méthode de séparation des variables [2] ou la méthode basée sur la transformée de Laplace [3].

Dans nos calculs, nous allons nous limiter à la première méthode. Dans ce contexte, la concentration $N(x, t)$ prend la forme suivante :

$$N(x, t) = f(x) \times g(t) \quad (I-3)$$

En injectant l'équation précédente dans l'équation (I-2), nous aboutissons à l'expression suivante:

$$\frac{1}{f(x)} \times \frac{d^2 f(x)}{dx^2} = \frac{d \ln(g(t))}{dt} \quad (I-4)$$

Cette équation exige que les deux membres soient égaux à une même constante négative notée $-\lambda^2$ (solution physique). Mathématiquement, nous pouvons écrire :

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = -\lambda^2 f(x) \quad \text{et} \quad \frac{d \ln(g(t))}{dt} = -\lambda^2 D dt \quad (I-5)$$

La résolution de ces deux équations donne :

$$f(x) = \alpha \cos(\lambda x) + \beta \sin(\lambda x) \quad \text{et} \quad g(t) = \gamma e^{-\lambda^2 D t} \quad (\text{I-6})$$

où les termes α , β et γ sont des constantes d'intégration.

Compte tenu de l'équation (I-6), la concentration $N(x, t)$ s'écrit alors :

$$N(x, t) = [A \cos(\lambda x) + B \sin(\lambda x)] e^{-\lambda^2 D t} \quad (\text{I-7})$$

Notons que l'équation (I-2) est une équation linéaire, alors sa solution générale peut s'écrire comme une combinaison de solutions élémentaires [4] :

$$N(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} [A \cos(\lambda x) + B \sin(\lambda x)] e^{-\lambda^2 D t} d\lambda \quad (\text{I-8})$$

La distribution initiale du soluté est prise sous la forme:

$$N(x, t=0) = h(x) \quad (\text{I-9})$$

Compte tenu des équations (III-8) et (III-9), la fonction $h(x)$ s'écrit comme :

$$h(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} [A \cos(\lambda x) + B \sin(\lambda x)] d\lambda \quad (\text{I-10})$$

Le théorème de Fourier nous permet d'aboutir à la solution de la deuxième équation de Fick, sa solution est donnée par l'équation suivante:

$$N(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D t}} \int_{-\infty}^{+\infty} h(z) e^{-\left(\frac{z-x}{2\sqrt{D t}}\right)^2} dz \quad (\text{I-11})$$

I-2-1 Diffusion à partir d'une couche infinie épaisse

Une source gazeuse de dopant dont la pression reste constante impose, au contact de l'échantillon, une concentration superficielle en dopant constante et égale à N_S pendant toute la durée de la diffusion. Mathématiquement, nous pouvons écrire $N(x, 0) = N_S \Theta(-x)$ où la fonction $\Theta(x)$ désigne la fonction de Heaviside.

Dans ce cas, la solution du problème est donnée par :

$$N(x,t) = \frac{N_S}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_{-\infty}^0 e^{-\left(\frac{z-x}{2\sqrt{Dt}}\right)^2} dz = \frac{N_S}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}}\right) \quad (I-12)$$

où $\operatorname{erfc}(x)$ désigne la fonction erreur complémentaire d'argument x [5].

I-2-2 Diffusion à partir d'une couche infiniment mince

Si nous désignons par Q la quantité d'impuretés déposée à la surface du cristal, la concentration $N(x, t)$ est une gaussienne de la forme :

$$N(x, t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \quad (I-13)$$

I-3 Profil de dopage gaussien-constant

I-3-1 Position de la jonction métallurgique

Pour ce type de jonction, le dopage apparent $N(x)$ est défini par :

$$N(x) = N_D - N_S e^{-\frac{x^2}{L^2}} \quad (I-14)$$

où N_D représente la concentration du substrat (dopage uniforme) et L un paramètre technologique défini par $L = 2\sqrt{(Dt)}$.

La position x_j de la jonction métallurgique correspond au point où le dopage apparent est nul. Mathématiquement, ceci se traduit par la relation suivante :

$$x_j = L \sqrt{\ln\left(\frac{N_S}{N_D}\right)} \quad (I-15)$$

Sur la figure ci-dessous, nous donnons l'allure du dopage effectif $N(x)$ en échelle semi-logarithmique.

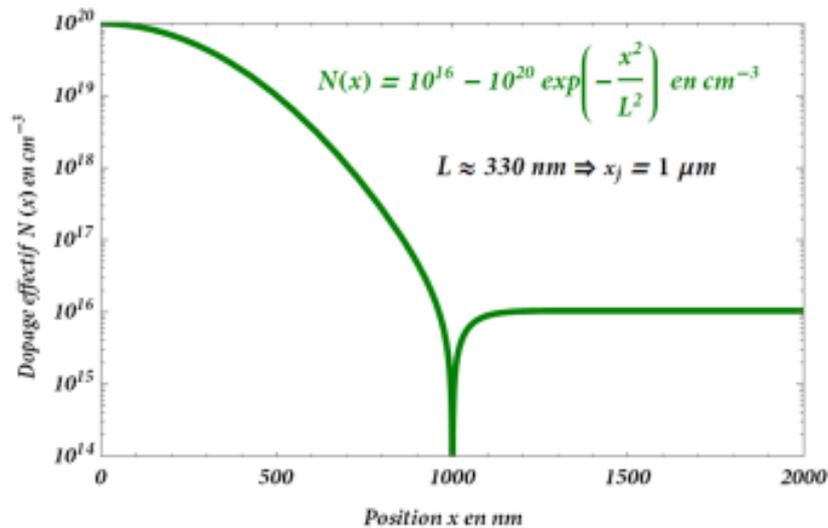


Figure I-2: Profil de dopage gaussien-constant (échelle semi-logarithmique).

I-3-2 Relation entre les extensions de la zone active

Dans la zone de charge d'espace (Z.C.E), la densité de charge est reliée au potentiel électrique via l'équation de Poisson qui s'écrit :

$$\frac{d^2V(x)}{dx^2} = -\frac{q}{\epsilon} \left(N_D - N_S e^{-\frac{x^2}{L^2}} \right) \quad (I-16)$$

où q désigne la charge électrique élémentaire, ϵ est le constant diélectrique du matériau, $V(x)$ le potentiel au point x et $N(x) = N_D - N_S \exp(-x^2/L^2)$ la répartition des impuretés ionisés.

Nous désignons par W_1 et W_2 les abscisses des limites de la Z.C.E de part et d'autre de la jonction métallurgique $x=x_j$ respectivement de la région de type p et celle de la région de type n .

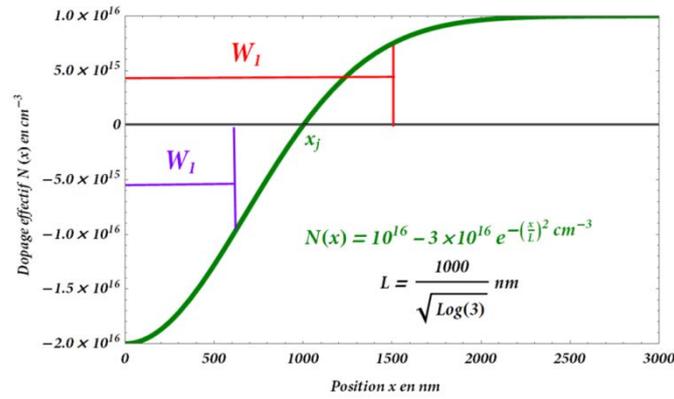


Figure I-3 : Profil de dopage apparent gaussien-constant

Dans les régions neutres, le champ électrique est négligeable devant le champ électrique régnant dans la Z.C.E, ceci se traduit mathématiquement par $E(W_1)=E(W_2)=0$. En d'autres termes, la charge totale de toute la structure est pratiquement nulle, soit :

$$q \int_{W_1}^{W_2} \left(N_D - N_S e^{-\frac{x^2}{L^2}} \right) dx = 0 \quad (I-17)$$

Une simple intégration donne une première relation entre les frontières W_1 et W_2 de la Z.C.E, soit :

$$W_2 - W_1 = L \frac{N_S}{N_D} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{W_2}{L}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{W_1}{L}\right) \right] \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (I-18)$$

Si nous désignons par x_p et x_n les extensions de la Z.C.E de part et d'autre de la jonction métallurgique, nous pouvons écrire :

$$x_p = x_j - W_1 \quad \text{et} \quad x_n = W_2 - x_j, \quad (I-19)$$

le calcul donne une première relation ces deux extensions :

$$x_n + x_p = L \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{x_j + x_n}{L}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{x_j - x_p}{L}\right) \right] \exp(x_j^2/L^2) \quad (I-20)$$

I-3-3 Expression du champ électrique

Le champ électrique étant nul aux frontières de la Z.C.E, le champ électrique au point x peut être calculé de deux façons différentes.

Une première expression du champ électrique est donnée par :

$$E_1(x) = \frac{q}{\varepsilon} \int_{W_1}^x \left(N_D - N_S e^{-\frac{u^2}{L^2}} \right) du = \frac{q}{\varepsilon} \left\{ N_S L \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{W_1}{L}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{L}\right) \right] + N_D (x - W_1) \right\} \quad (I-21)$$

Une deuxième expression du champ électrique donne :

$$\begin{aligned} E_2(x) &= \frac{q}{\varepsilon} \int_{W_2}^x \left(N_D - N_S e^{-\frac{u^2}{L^2}} \right) du \\ &= \frac{q}{\varepsilon} \left\{ N_S L \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{W_2}{L}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{L}\right) \right] + N_D (x - W_2) \right\} \end{aligned} \quad (I-22)$$

Le champ électrique $E(x)$ au point x peut s'écrire aussi :

$$E(x) = \frac{E_1(x) + E_2(x)}{2} \quad (I-23)$$

Après réarrangement, Nous trouvons finalement :

$$E(x) = \frac{q N_D}{2 \varepsilon} \left\{ 2x - W_1 - W_2 + \frac{L\sqrt{\pi}}{2} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{W_1}{L}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{W_2}{L}\right) - 2 \operatorname{erf}\left(\frac{x}{L}\right) \right] e^{\frac{x^2}{L^2}} \right\} \quad (I-24)$$

III-3-4 Barrière de potentiel

La tension appliquée à toute la structure est reportée entièrement à la Z.C.E et engendre une différence entre les hauteurs de barrière de potentiel à l'équilibre V_d et hors équilibre V_b

Le potentiel de diffusion V_d est approximativement égal à $2u_T \ln(N_D/n_i)$.

Pour une polarisation appliquée quelconque, la hauteur de la barrière de potentiel est donnée par :

$$V_b = - \int_{W_1}^{W_2} E(x) dx \quad (I-25)$$

Le calcul donne:

$$V_b = \frac{q N_S}{2 \varepsilon} L^2 \left\{ e^{-\frac{W_2^2}{L^2}} - e^{-\frac{W_1^2}{L^2}} + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(\frac{W_1 + W_2}{L} \right) \left[\operatorname{erf} \left(\frac{W_1}{L} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{W_2}{L} \right) \right] \right\} \quad (I-26)$$

La condition de neutralité nous ramène à la formulation suivante.

$$V_b = \frac{q N_D}{2 \varepsilon} \left[W(2x_j + W - 2x_p) - L^2 e^{\frac{x_p(2x_j - x_p)}{L^2}} \left(1 - e^{-\frac{W(2x_j + W - 2x_p)}{L^2}} \right) \right] \quad (I-27)$$

Une résolution numérique des équations (I-20) et (I-27) conduit aux extensions x_p et x_n .

III-3-5 Modélisation des extensions de la Z.C.E

Une résolution numérique a permis de résoudre le système d'équations régissant les extensions de la Z.C.E et sa largeur W [6].

Les calculs ont été réalisés pour une homojonction Si/Si à température ambiante ($T=300$ K) avec des concentrations $N_S=10^{20} \text{ cm}^{-3}$ et $N_D=10^{16} \text{ cm}^{-3}$ pour des positions x_j prenant respectivement les valeurs 200 nm, 1 μm et 5 μm .

La surface de la jonction est de l'ordre de 10^{-7} m^2 .

Les paramètres utilisés sont : permittivité relative du silicium $\varepsilon_r=11,9$ et concentration intrinsèque $n_i=1,45 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$.

Profil gaussien-constant

$$N_S=10^{20} \text{ cm}^{-3}, N_D=10^{16} \text{ cm}^{-3} \text{ avec } x_j=0,2 \mu\text{m}$$

V_{app} (V)	V_d (V)	x_n (nm)	x_p (nm)	W (nm)	C en pF
0,65	0,7544	101,563	27,913	129,476	82,023
0,625	0,7573	115,080	29,200	144,280	73,607
0,6	0,7595	127,086	30,235	157,320	67,506
0,55	0,7631	148,143	31,856	179,999	59,000
0,5	0,7657	166,562	33,115	199,677	53,186
0,4	0,7697	198,434	35,027	233,461	45,489
0,3	0,7727	225,997	36,473	262,470	40,462
0,2	0,7751	250,670	37,641	288,310	36,835
0,1	0,7771	273,225	38,622	311,847	34,055
0	0,7788	294,139	39,470	333,609	31,834
-0,2	0,7815	332,230	40,885	373,115	28,463
-0,4	0,7838	366,576	42,042	408,618	25,990
-0,6	0,7857	398,116	43,023	441,139	24,074
-0,8	0,7873	427,450	43,876	471,326	22,532
-1	0,7888	454,991	44,630	499,620	21,256
-1,2	0,7901	481,035	45,306	526,341	20,177
-1,4	0,7912	505,804	45,920	551,724	19,249
-1,6	0,7923	529,472	46,482	575,954	18,439
-1,8	0,7932	552,175	47,000	599,175	17,724
-2	0,7941	574,022	47,482	621,504	17,088
-2,2	0,7950	595,105	47,931	643,036	16,515
-2,4	0,7957	615,499	48,352	663,852	15,998
-2,6	0,7965	635,269	48,749	684,018	15,526
-2,8	0,7972	654,468	49,123	703,592	15,094
-3	0,7978	673,144	49,479	722,623	14,696
-3,2	0,7984	691,338	49,816	741,155	14,329
-3,4	0,7990	709,086	50,138	759,224	13,988
-3,6	0,7996	726,418	50,445	776,863	13,670
-3,8	0,8001	743,363	50,740	794,103	13,374
-4	0,8006	759,947	51,022	810,969	13,095
-4,2	0,8011	776,191	51,293	827,484	12,834
-4,4	0,8016	792,115	51,554	843,669	12,588
-4,6	0,8020	807,739	51,806	859,544	12,355
-4,8	0,8024	823,077	52,048	875,126	12,135
-5	0,8029	838,147	52,283	890,430	11,927

Profil gaussien-constant

$$N_S=10^{20} \text{ cm}^{-3}, N_D=10^{16} \text{ cm}^{-3} \text{ avec } x_j=1 \mu\text{m}$$

V_{app} (V)	V_d (V)	x_n (nm)	x_p (nm)	W (nm)	C en pF
0,65	0,702	80	55	135	78,5
0,625	0,710	98	63	161	66,1
0,6	0,714	111	68	179	59,3
0,55	0,718	132	75	207	51,1
0,5	0,724	150	81	231	46,1
0,4	0,729	179	89	268	39,7
0,3	0,732	204	95	299	35,6
0,2	0,735	226	100	326	32,6
0	0,739	265	107	372	28,5
-0,2	0,742	299	113	412	25,7
-0,4	0,744	331	118	449	23,7
-0,6	0,746	359	122	481	22,1
-0,8	0,748	386	126	512	20,7
-1	0,750	412	129	541	19,6
-1,2	0,751	436	132	568	18,7
-1,4	0,752	459	134	593	17,9
-1,6	0,753	481	137	618	17,2
-1,8	0,754	502	139	641	16,6
-2	0,755	523	141	664	16,0
-2,2	0,756	542	143	685	15,5
-2,4	0,757	561	145	706,179	15,0
-2,6	0,758	580	146	726,468	14,6
-2,8	0,758	598	148	746,158	14,2
-3	0,759	616	150	766	13,9
-3,2	0,760	633	151	784	13,5
-3,4	0,760	650	152	802	13,2
-3,6	0,761	666	154	820	13,0
-3,8	0,761	682	155	837	12,7
-4	0,762	698	156	854	12,47
-4,2	0,762	713	157	870	12,197
-4,4	0,763	729	158	887	12,0
-4,6	0,763	743	159	902	11,8
-4,8	0,764	758	161	919	11,6
-5	0,7640	772	162	934	11,4

Profil gaussien-constant

$$N_S=10^{20} \text{ cm}^{-3}, N_D=10^{16} \text{ cm}^{-3} \text{ avec } x_j=5 \mu\text{m}$$

V_{app} (V)	V_d (V)	x_n (nm)	x_p (nm)	W (nm)	C en pF
0,6	0,6474	115,829	102,103	217,932	48,731
0,575	0,6566	140,696	120,951	261,646	40,589
0,55	0,6620	157,729	133,333	291,062	36,487
0,5	0,6689	183,286	151,159	334,445	31,754
0,4	0,6771	220,261	175,471	395,732	26,836
0,3	0,6825	248,689	193,075	441,764	24,040
0,2	0,6864	272,575	207,195	479,770	22,136
0,1	0,6895	293,542	219,116	512,658	20,716
0	0,6921	312,437	229,501	541,938	19,596
-0,2	0,6962	345,860	247,095	592,955	17,910
-0,4	0,6995	375,202	261,778	636,981	16,672
-0,6	0,7021	401,673	274,459	676,131	15,707
-0,8	0,7044	425,986	285,663	711,649	14,923
-1	0,7063	448,606	295,729	744,335	14,268
-1,2	0,7080	469,853	304,886	774,739	13,708
-1,4	0,7095	489,957	313,299	803,256	13,221
-1,6	0,7109	509,093	321,090	830,183	12,792
-1,8	0,7121	527,395	328,351	855,747	12,410
-2	0,7132	544,970	335,158	880,127	12,066
-2,2	0,7143	561,902	341,566	903,468	11,755
-2,4	0,7153	578,263	347,625	925,888	11,470
-2,6	0,7162	594,110	353,374	947,484	11,209
-2,8	0,7170	609,493	358,844	968,337	10,967
-3	0,7178	624,454	364,064	988,519	10,743
-3,2	0,7186	639,029	369,058	1008,087	10,535
-3,4	0,7193	653,248	373,845	1027,094	10,340
-3,6	0,7199	667,140	378,444	1045,584	10,157
-3,8	0,7206	680,728	382,869	1063,597	9,985
-4	0,7212	694,033	387,134	1081,167	9,823
-4,2	0,7218	707,074	391,252	1098,325	9,669
-4,4	0,7223	719,868	395,232	1115,099	9,524
-4,6	0,7229	732,429	399,084	1131,513	9,386
-4,8	0,7234	744,772	402,817	1147,589	9,254
-5	0,7238	756,910	406,438	1163,348	9,129

Sur les figures suivantes, nous donnons une représentation des grandeurs $x_n(V_{app})$ et $x_p(V_{app})$ pour les différentes valeurs de la position x_j à différentes tensions appliquées V_{app} .

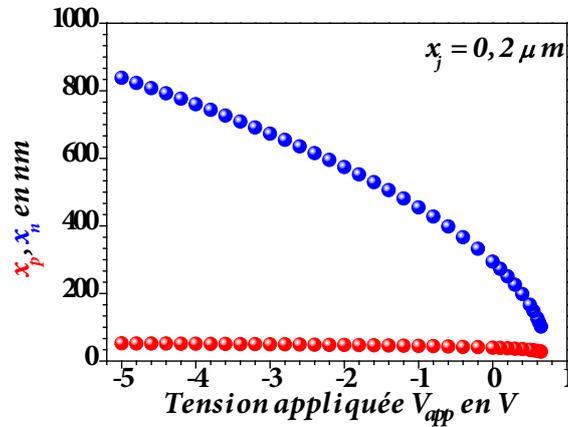


Figure I-4: Extensions x_n et x_p de la Z.C.E pour $x_j=200$ nm

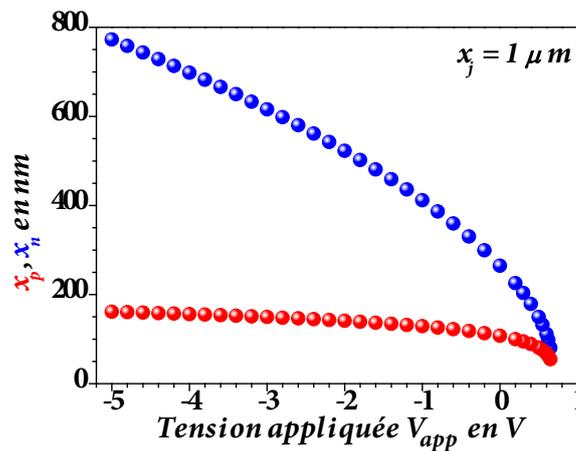


Figure I-5: Extensions x_n et x_p de la Z.C.E pour $x_j=1000$ nm

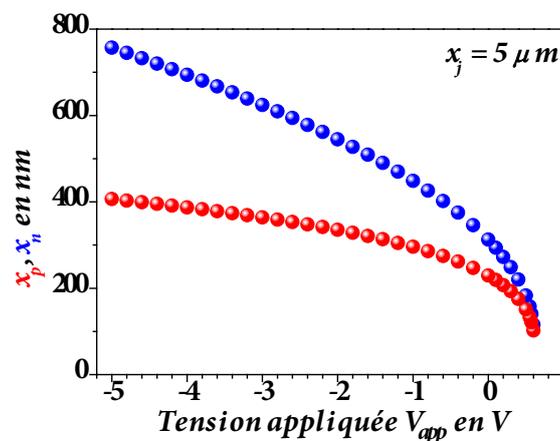


Figure I-6: Extensions x_n et x_p de la Z.C.E pour $x_j=5000$ nm

Sous certaines conditions, la hauteur de la barrière de potentiel hors équilibre sera donnée par :

$$V_b = \frac{q N_D}{2\varepsilon} \left[W(2x_j + W - 2x_p) - L^2 \exp\left(\frac{x_p(2x_j - x_p)}{L^2}\right) \right] \quad (I-27)$$

En polarisation inverse, la zone active se comporte comme un condensateur plan et sa capacité peut s'écrire sous la forme suivante :

$$W = x_n + x_p = \frac{\varepsilon S}{C} \quad (I-28)$$

Dans ce contexte, la caractéristique capacité tension s'exprime alors par :

$$V_b = \frac{q N_D}{2\varepsilon} \left[\frac{\varepsilon S}{C} \left(2x_j + \frac{\varepsilon S}{C} - 2x_p \right) - L^2 \exp\left(\frac{x_p(2x_j - x_p)}{L^2}\right) \right] \quad (I-29)$$

Dans le cas $x_p \ll 2x_j$, l'équation précédente devient :

$$V_b = \frac{q N_D}{2\varepsilon} \left[\frac{\varepsilon S}{C} \left(2x_j + \frac{\varepsilon S}{C} - 2x_p \right) - L^2 e^{-\frac{x_j x_p}{L^2}} \right] \quad (I-30)$$

Dans ce cas, nous trouvons une expression purement analytique du paramètre x_p , soit :

$$x_p = \frac{1}{2} \left[\sigma - \frac{L^2}{x_j} W_0 \left(\frac{C}{\varepsilon S} x_j e^{\frac{x_j \sigma}{L^2}} \right) \right] \quad (I-31)$$

où $W_0(x)$ est la fonction de Lambert d'argument x .

Le caractère condensateur de la jonction nous permet d'écrire x_n sous la forme suivante :

$$x_n = \frac{\varepsilon S}{C} - \frac{1}{2} \left\{ \sigma - \frac{L^2}{x_j} W_0 \left[\frac{x_j C}{\varepsilon S} e^{\frac{x_j}{L^2} \left(\frac{\varepsilon S}{C} + 2x_j - \frac{2C V_b}{q S N_D} \right)} \right] \right\} \quad (I-32)$$

La caractéristique capacité-tension ne peut être spécifiée que dans le cas où x_j n'exède pas une dizaine de micromètres; nous trouvons alors:

$$C = \frac{qSN_D x_j + \sqrt{qS^2 N_D (2 \varepsilon V_b + qN_D x_j^2)}}{2V_b} \quad (I-33)$$

Nous donnons, dans ce qui suit, les caractéristiques capacité-tension pour $N_S = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, $N_D = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et x_j prenant respectivement les valeurs 200, 1000 et 5000 nm

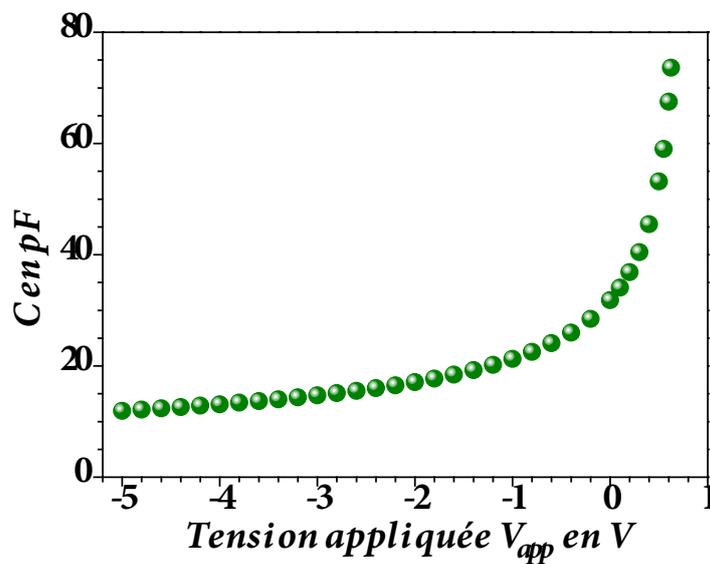


Figure I-7: Caractéristique capacité-tension pour $x_j = 200 \text{ nm}$

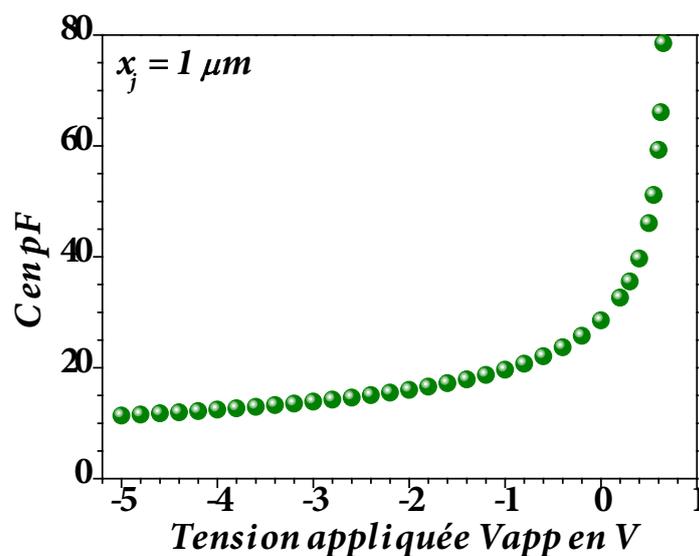


Figure I-8: Caractéristique capacité-tension pour $x_j = 1000 \text{ nm}$

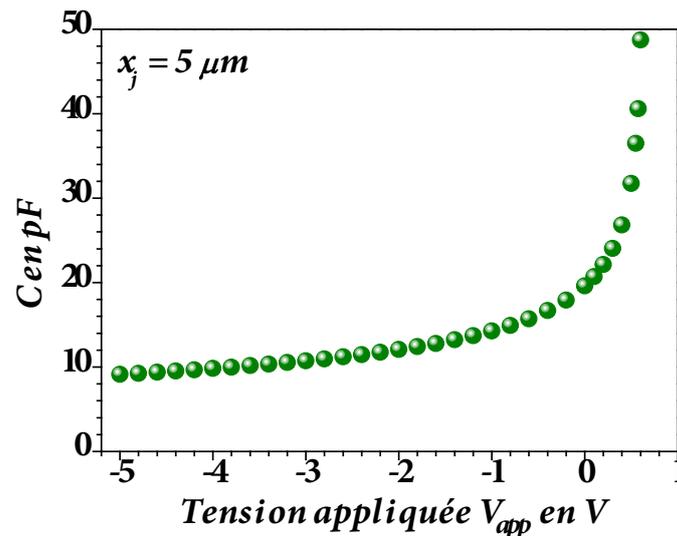


Figure I-9: Caractéristique capacité-tension pour $x_j=5000$ nm

I-4 Profil de dopage erfc-constant

I-4-1 : Position de la jonction métallurgique

Pour ce type de jonction, le dopage apparent $N(x)$ est donné par [7]:

$$N(x) = N_D - \frac{N_S}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{L}\right) \quad (I-34)$$

où N_D représente la concentration du substrat dopé uniformément et L désigne le paramètre technologique défini par $L = 2\sqrt{(D t)}$.

La position x_j de la jonction métallurgique correspond au point où le dopage net est nul.

En première approximation, cette position est donnée par :

$$x_j = L \sqrt{\frac{1}{2} \times W_0\left(\frac{1}{2\pi} \left(\frac{N_S}{N_D}\right)^2\right)} \quad (I-35)$$

où $W_0(x)$ est la fonction de Lambert d'argument x .

Sur la figure ci-dessous, nous donnons l'allure du dopage effectif $N(x)$ en échelle semi-logarithmique pour des concentrations $N_S=10^{20} \text{ cm}^{-3}$ et $N_D=10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et la longueur $L=$ est fixée à 364 nm

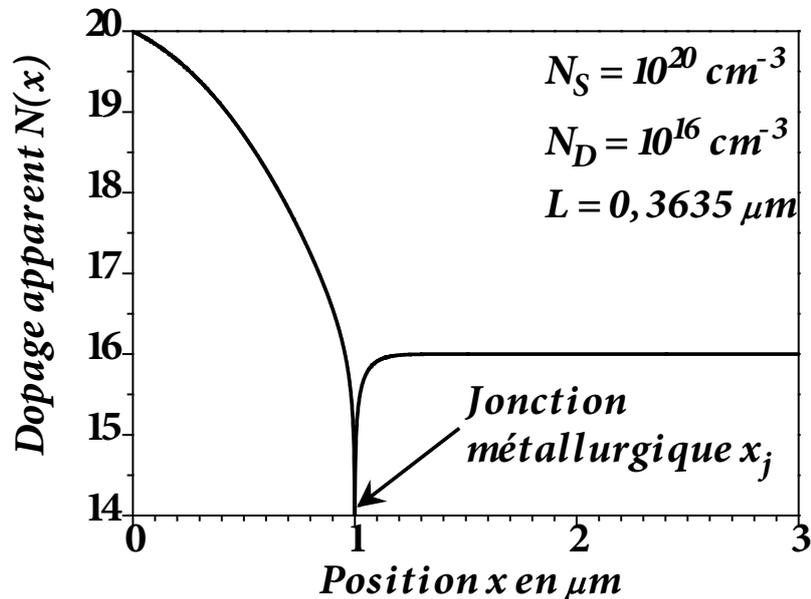


Figure I-10 : Profil de dopage apparent erfc-constant (échelle semi-logarithmique)

I-4-2 Relation entre extensions de zone

Dans la zone de charge d'espace (Z.C.E), la densité de charge est reliée au potentiel électrique via l'équation de Poisson qui s'écrit :

$$\frac{d^2 V(x)}{dx^2} = -\frac{q}{\epsilon} \left[N_D - \frac{N_S}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{L} \right) \right] \quad (\text{I-36})$$

où q désigne la charge électrique élémentaire, ϵ est le constant diélectrique du matériau, $V(x)$ le potentiel au point x et $N(x)=N(x)=N_D-N_S \operatorname{erfc}(x/L)/2$ la répartition des impuretés ionisés u .

Nous désignons par W_1 et W_2 les abscisses des limites de la Z.C.E de part et d'autre de la jonction métallurgique $x=x_j$ respectivement de la région de type p et celle de la région de type n .

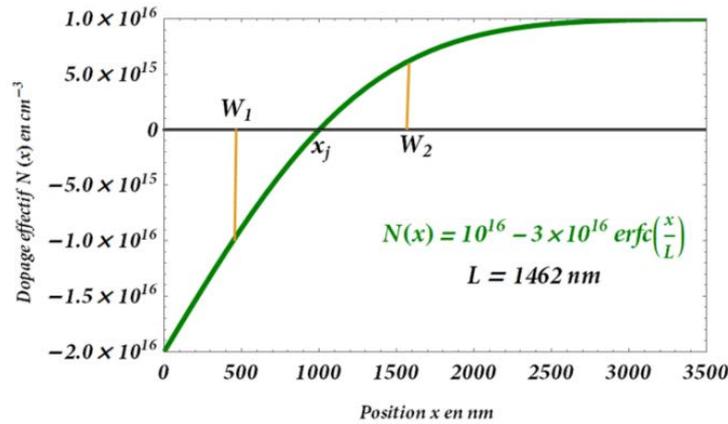


Figure I-3 : Profil de dopage apparent gaussien-constant

Dans les zones neutres, le champ électrique est négligeable devant le champ électrique régnant dans la Z.C.E, ceci se traduit mathématiquement par :

$$E(W_1) = E(W_2) = 0 \quad (I-37)$$

En d'autres termes, la charge totale de toute la structure est pratiquement nulle [8], soit :

$$q \int_{W_1}^{W_2} \left[N_D - \frac{N_S}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{L} \right) \right] dx = 0 \quad (I-38)$$

Une simple intégration donne une première relation entre les positions W_1 et W_2 des frontières de la Z.C.E.

$$\frac{W_2 - W_1}{L} = \frac{N_S}{2 N_D} \left\{ \frac{W_2}{L} \operatorname{erfc} \left(\frac{W_2}{L} \right) - \frac{W_1}{L} \operatorname{erfc} \left(\frac{W_1}{L} \right) + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(e^{-\frac{W_1^2}{L^2}} - e^{-\frac{W_2^2}{L^2}} \right) \right\} \quad (I-39)$$

I-4-3 Champ électrique

Le champ électrique étant nul aux frontières de la zone de charge d'espace, nous le calculons de deux façons différentes afin d'avoir une certaine symétrie dans les équations.

En suivant la même procédure de calcul que celle du profil gaussien-constant, nous aboutissons à l'expression du champ électrique $E(x)$ en tout point x de la zone active de la structure.

Nous trouvons finalement :

$$.E(x) = \frac{q}{2\epsilon} \left\{ N_D(2x - W_1 - W_2) + \frac{N_S}{2} \left[W_1 \operatorname{erfc}\left(\frac{W_1}{L}\right) + W_2 \operatorname{erfc}\left(\frac{W_2}{L}\right) - 2x \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{L}\right) \right] + \frac{L}{\sqrt{\pi}} \left(2e^{\frac{x^2}{L^2}} - e^{-\frac{W_1^2}{L^2}} - e^{-\frac{W_2^2}{L^2}} \right) \right\} \quad (I-40)$$

I-4-3 Hauteur de barrière

La tension appliquée à toute la structure est reportée entièrement à la Z.C.E et engendre une différence entre les hauteurs de barrière de potentiel à l'équilibre V_d et hors équilibre V_b

Le potentiel de diffusion V_d est approximativement égal à $2u_T \ln(N_D/n_i)$

Pour une polarisation appliquée quelconque, la hauteur de la barrière de potentiel est donnée par [9]:

$$V_b = - \int_{W_1}^{W_2} E(x) dx \quad (I-41)$$

Après calculs, nous trouvons la hauteur de la barrière de potentiel. Cette barrière est donnée par :

$$V_b = \frac{q N_S}{4\epsilon} \left\{ W_1 W_2 \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{W_2}{L}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{W_1}{L}\right) + \frac{L}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{e^{-\frac{W_1^2}{L^2}}}{W_1} - \frac{e^{-\frac{W_2^2}{L^2}}}{W_2} \right) \right] + \frac{L^2}{2} \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{W_2}{L}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{W_1}{L}\right) \right] \right\} \quad (I-42)$$

I-3-4 Modélisation des extensions de la Z.C.E

Une résolution numérique a permis de résoudre le système d'équations régissant les extensions de la Z.C.E et sa largeur W .

Les calculs ont été réalisés pour une homojonction Si/Si à température ambiante ($T=300$ K) avec des concentrations $N_S=10^{20}$ cm^{-3} et $N_D=10^{16}$ cm^{-3} pour des positions x_j prenant respectivement les valeurs 200 nm, 1 μm et 5 μm .

La surface de la jonction est de l'ordre de 10^{-7} m^2 .

Les paramètres utilisés sont : permittivité relative du silicium $\epsilon_r=11,9$ et concentration intrinsèque $n_i=1,45 \times 10^{10}$ cm^{-3} .

Profil erfc-constant avec $N_S=10^{20}$ cm^{-3} , $N_D=10^{16}$ cm^{-3} et $x_j=200$ nm

V_{app} (V)	x_n (nm)	X_p (nm)	W (nm)	C en pF	V_{bo} (V)
0,6	122,796	34,648	157,445	67,452	0,7533
0,55	143,853	36,705	180,558	58,818	0,7570
0,5	162,223	38,293	200,516	52,963	0,7597
0,4	193,963	40,696	234,659	45,257	0,7638
0,3	221,387	42,508	263,895	40,243	0,7668
0,2	245,929	43,970	289,899	36,633	0,7692
0	289,164	46,258	335,422	31,662	0,7728
-0,2	327,052	48,029	375,081	28,314	0,7756
-0,4	361,221	49,477	410,698	25,858	0,7779
-0,6	392,603	50,705	443,308	23,956	0,7798
-0,8	421,796	51,772	473,568	22,425	0,7814
-1	449,207	52,717	501,924	21,159	0,7828
-1,2	475,133	53,564	528,697	20,087	0,7841
-1,4	499,793	54,334	554,127	19,165	0,7853
-1,6	523,359	55,038	578,397	18,361	0,7863
-1,8	545,967	55,688	601,655	17,651	0,7873
-2	567,724	56,292	624,016	17,019	0,7882
-2,2	588,723	56,855	645,578	16,450	0,7890
-2,4	609,038	57,384	666,421	15,936	0,7898
-2,6	628,731	57,882	686,613	15,467	0,7905
-2,8	647,858	58,352	706,210	15,038	0,7912
-3	666,466	58,798	725,264	14,643	0,7918
-4	752,963	60,737	813,700	13,051	0,7946
-5	830,908	62,323	893,231	11,889	0,7969

Profil erfc-constant avec $N_S=10^{20} \text{ cm}^{-3}$, $N_D=10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et $x_j=1000 \text{ nm}$

V_{app} (V)	x_n (nm)	X_p (nm)	W (nm)	C en pF	V_{bo} (V)
0,6	111,839	73,979	185,818	57,153	0,7061
0,55	133,676	83,028	216,704	49,007	0,7125
0,5	151,284	89,589	240,873	44,090	0,7167
0,45	166,567	94,831	261,398	40,628	0,7198
0,4	180,321	99,234	279,555	37,989	0,7223
0,35	192,968	103,049	296,017	35,876	0,7243
0,3	204,767	106,424	311,191	34,127	0,7261
0,25	215,886	109,459	325,345	32,642	0,7276
0,2	226,445	112,219	338,664	31,359	0,7289
0,15	236,531	114,753	351,284	30,232	0,7301
0,1	246,210	117,098	363,308	29,231	0,7312
0	264,545	121,325	385,870	27,522	0,7331
-0,2	298,044	128,416	426,460	24,903	0,7362
-0,4	328,423	134,252	462,674	22,954	0,7386
-0,6	356,485	139,224	495,709	21,424	0,7406
-0,8	382,731	143,564	526,295	20,179	0,7423
-1	407,495	147,419	554,914	19,138	0,7438
-1,2	431,019	150,890	581,909	18,250	0,7451
-1,4	453,482	154,048	607,531	17,481	0,7463
-1,6	475,023	156,948	631,971	16,805	0,7474
-1,8	495,753	159,629	655,382	16,204	0,7484
-2	515,760	162,123	677,883	15,666	0,7493
-2,2	535,117	164,455	699,573	15,181	0,7502
-2,4	553,888	166,646	720,534	14,739	0,7510
-2,6	572,124	168,712	740,836	14,335	0,7517
-2,8	589,871	170,667	760,537	13,964	0,7524
-3	607,166	172,522	779,688	13,621	0,7531
-3,2	624,043	174,288	798,332	13,303	0,7537
-3,4	640,534	175,973	816,507	13,007	0,7543
-3,6	656,663	177,585	834,248	12,730	0,7549
-3,8	672,455	179,129	851,584	12,471	0,7554
-4	687,930	180,611	868,541	12,227	0,7559
-4,2	703,107	182,037	885,144	11,998	0,7564
-4,4	718,004	183,410	901,414	11,781	0,7569
-4,6	732,635	184,734	917,369	11,577	0,7574
-4,8	747,015	186,013	933,028	11,382	0,7578
-5	761,157	187,250	948,407	11,198	0,7583

Profil erfc-constant avec $N_S=10^{20} \text{ cm}^{-3}$, $N_D=10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et $x_j=5000 \text{ nm}$

V_{app} (V)	x_n (nm)	X_p (nm)	W (nm)	C en pF	V_{bo} (V)
0,6	110,172	100,016	210,188	50,526	0,6341
0,55	162,834	141,591	304,425	34,885	0,6529
0,5	191,039	162,453	353,491	30,043	0,6605
0,45	212,634	177,816	390,450	27,199	0,6654
0,4	230,717	190,294	421,011	25,225	0,6692
0,35	246,537	200,936	447,472	23,733	0,6722
0,3	260,747	210,283	471,030	22,546	0,6747
0,25	273,739	218,661	492,400	21,568	0,6769
0,2	285,770	226,277	512,047	20,740	0,6788
0,15	297,017	233,280	530,297	20,027	0,6804
0,1	307,610	239,773	547,384	19,401	0,6820
0	327,207	251,532	578,739	18,350	0,6846
-1		326,775	--	13,386	0,6992
-2	563,772	371,903	935,674	11,350	0,7064
-3	643,192	405,182	1048,374	10,130	0,7112
-4	712,268	431,866	1144,135	9,282	0,7147
-5	774,387	454,283	1228,670	8,643	0,7175

Sur les figures suivantes, nous donnons une représentation des grandeurs $x_n(V_{app})$ et $x_p(V_{app})$ pour les différentes valeurs de la position x_j à différentes tensions appliquées V_{app} .

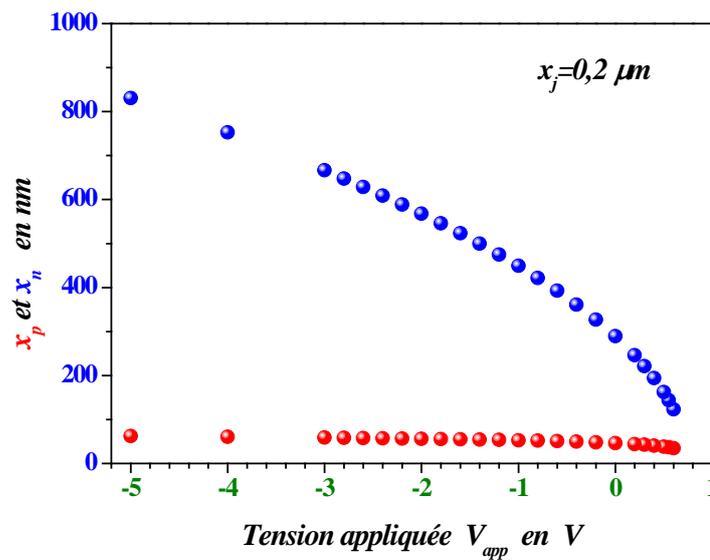


Figure I-12: Extensions x_n et x_p de la Z.C.E pour $x_j=200 \text{ nm}$

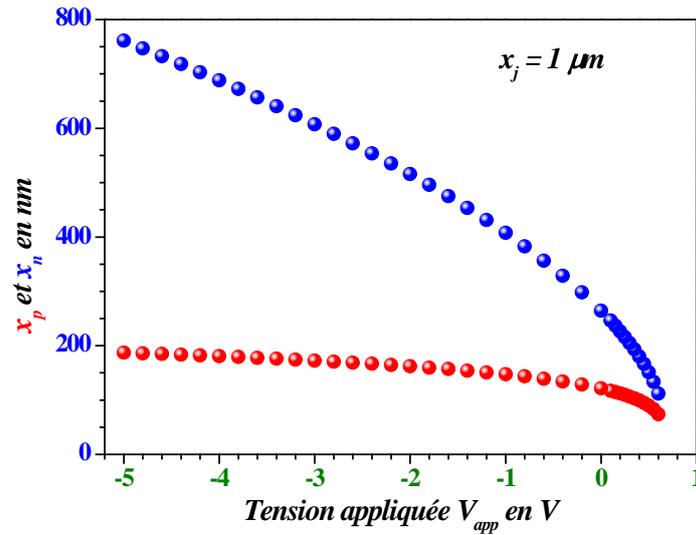


Figure I-13: Extensions x_n et x_p de la Z.C.E pour $x_j=1000$ nm

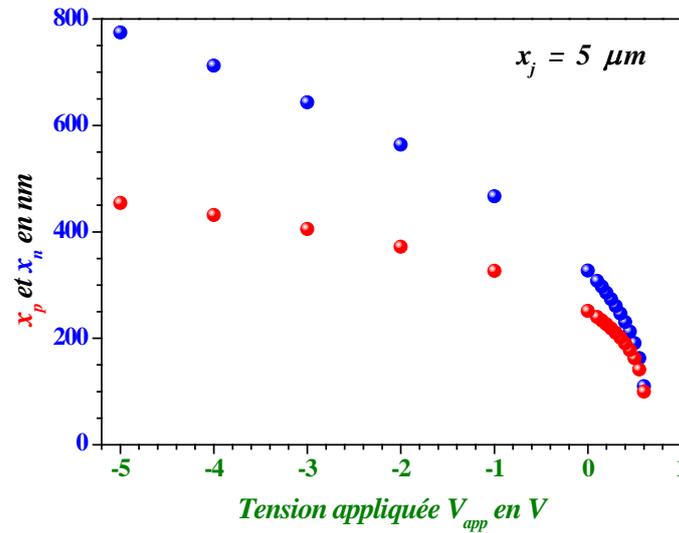


Figure III-14: Extensions x_n et x_p de la Z.C.E pour $x_j=5000$ nm

En polarisation inverse, l'équation de neutralité s'écrit :

$$N_D(W_2 - W_1) = \frac{1}{2} N_s \left[-W_1 \operatorname{erfc} \left(\frac{W_1}{L} \right) + \frac{L}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{W_1^2}{L^2}} \right] \quad (I-43)$$

La hauteur de la barrière de potentiel sera donnée alors par :

$$V_b = \frac{q N_s}{4 \epsilon} \left[W_2 \left(-W_1 \operatorname{erfc} \left(\frac{W_1}{L} \right) + \frac{L}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{W_1^2}{L^2}} \right) + \frac{L^2}{2} \left(-\operatorname{erfc} \left(\frac{W_1}{L} \right) \right) \right] \quad (I-44)$$

ou encore, compte tenu de l'équation (III-7) :

$$V_b = \frac{q N_D}{2 \varepsilon} \left[W_2(W_2 - W_1) - \frac{L^2}{2} \times \frac{\operatorname{erfc}\left(\frac{W_1}{L}\right)}{\operatorname{erfc}\left(\frac{x_j}{L}\right)} \right] \quad (\text{III-45})$$

La caractéristique capacité-tension est donnée par l'équation suivante :

$$V_b = \frac{q N_D}{2 \varepsilon} \left[\left(x_j + \frac{\varepsilon S}{C} - x_p \right) \frac{\varepsilon S}{C} - \frac{L^2}{2} \times \frac{\operatorname{erfc}\left(\frac{x_j - x_p}{L}\right)}{\operatorname{erfc}\left(\frac{x_j}{L}\right)} \right] \quad (\text{I-46})$$

Dans le cas où ce terme est très petit devant x_j , l'expression précédente devient :

$$V_b = \frac{q N_D}{2 \varepsilon} \frac{\varepsilon S}{C} \left(x_j + \frac{\varepsilon S}{C} - x_p \right) \quad (\text{I-47})$$

Dans le cas où cette condition est réalisée, des expressions purement analytique des grandeurs x_p et x_n sont proposées, soit ;

$$x_p = \frac{\frac{2 \varepsilon V_b}{q N_D}}{\frac{\varepsilon S}{C}} - \left(x_j + \frac{\varepsilon S}{C} \right) \quad x_n = \frac{\varepsilon S}{C} - x_p \quad (\text{I-48})$$

Nous donnons, dans ce qui suit, les caractéristiques capacité-tension pour $N_S = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, $N_D = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et x_j prenant respectivement les valeurs 200, 1000 et 5000 nm

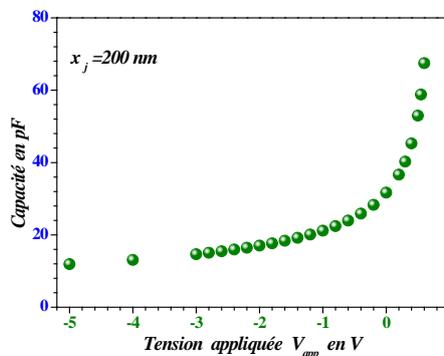


Figure I-15: Caractéristique capacité-tension pour $x_j = 200 \text{ nm}$

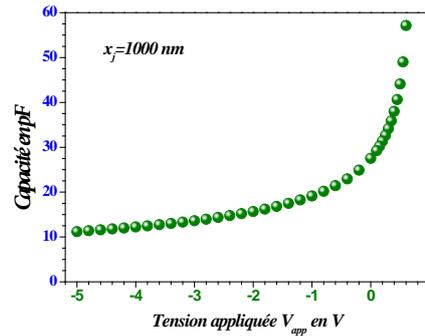


Figure I-16: Caractéristique capacité-tension pour $x_j=1000$ nm

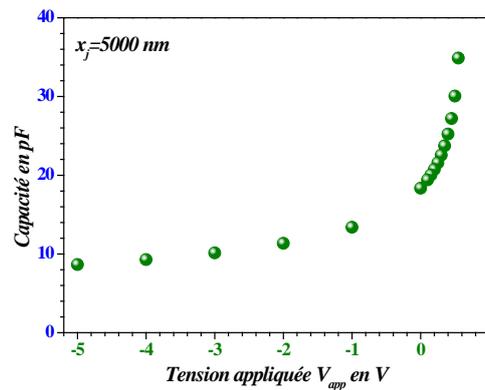


Figure I-17: Caractéristique capacité-tension pour $x_j=5000$ nm

I-5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons modélisé les extensions de la zone de charge d'espace pour deux types de profil à savoir le profil de dopage gaussien-constant et le profil en erreur fonction complémentaire-constant.

Cette modélisation a été conçue dans le cadre de l'approximation de déplétion. Nous avons remarqué que notre modèle est en très bon accord avec les résultats numériques.

Dans le prochain chapitre, nous allons justifier la non-validité de l'approximation de déplétion pour des tensions directes importantes.

Références Bibliographiques du chapitre I

- [1] Helmut Mehrer
Diffusion in Solids, Fundamentals, Methods, Materials, Diffusion-Controlled Processes
Springer Verlag Berlin Heidelberg 2007
- [2] J. Crank
The Mathematics of Diffusion
Clarendon Press Oxford 1975 Second Edition
- [3] Junji Liu, Pingli Li, Cangmin Li and Yumei Wang
Diffusion-controlled adsorption kinetics of aqueous micellar solution at air/solution interface
Colloid & Polymer Science
Volume 287, Number 9, September 2009
- [4] Ronald Bracewell
The Fourier Transform & Its Applications
Edition Lavoisier (2000)
- [5] Sylvain Chevillard
Évaluation efficace de fonctions numériques : Outils et exemples
Thèse de Doctorat en Informatique, Lyon (2009).
- [6] Logiciel Mathematice 7.0
Wolfram Mathematica 7 for Students
- [7] C. A. C. Sequeira; D. M. F. Santos
Hall Effect measurements on p-n-p InP structures
Braz. J. Phys. vol.38 no.1 São Paulo Mar. 2008
- [8] Brendan M. Kayes, Harry A. Atwater and Nathan S. Lewis
Comparison of the device physics principles of planar and radial p-n junction nanorod solar cells
J. Appl. Phys. 97, 114302 (2005).
- [9] D. Boukredimi
Thèse de Doctorat Université d'Oran 2007

Modélisation de la capacité de jonctions abruptes à dopages homogènes

II-1 Introduction

Une jonction est la mise en contact de deux semiconducteurs. Nous distinguons deux types à savoir l'homojonction et l'hétérojonction [1].

L'homojonction constitue l'élément de base de tous les dispositifs à semiconducteurs et sa compréhension permet la conception de dispositifs semiconducteurs plus complexes.

La théorie de la jonction p-n a été établie par Shockley [2]. Le modèle classique mis au point par Shockley présente deux particularités à savoir que la capacité diverge pour une tension appliquée voisine du potentiel de diffusion et non définie pour des tensions appliquées supérieures au potentiel de diffusion.

Ces singularités découlent de la contribution des porteurs mobiles à savoir les électrons et les trous dans la zone active de la structure [3].

Dans ce chapitre, nous allons proposer un modèle qui tient compte des densités de porteurs libres dans toute la structure semiconductrice dans un cas particulier où les dopages des régions p et n sont supposés constants.

La jonction sera étudiée en régime stationnaire et dans le cas unidimensionnel.

II-2 Equation de Poisson.

II-2-1 Cas général

L'équation de Poisson permet de décrire l'évolution du potentiel électrique à travers toute la structure d'un dispositif à semiconducteurs. Dans le cas unidimensionnel (1-D), cette équation prend la forme suivante [4] :

$$\frac{d^2 V(x)}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon} \quad (\text{II-1})$$

où $\rho(x)$ représente la densité de charge au point x , ε la constante diélectrique statique du matériau et $V(x)$ le potentiel électrique au point x .

II-2-2 Homojonction abrupte.

La position de la jonction métallurgique étant prise à l'origine des abscisses $x=0$, l'équation précédente prendra la forme suivante :

$$\frac{d^2 V(x)}{dx^2} = -\frac{q}{\varepsilon} [p(x) - n(x) + N_D \Theta(x) - N_A \Theta(-x)] \quad (\text{II-2})$$

où $\Theta(x)$ est la fonction de Heaviside.

II-3 Densités d'électrons et de trous.

Dans le cadre de l'approximation de Boltzmann et en l'absence de polarisation, les densités d'électrons $n(x)$ et de trous $p(x)$ peuvent être données par [3] :

$$\begin{cases} p(x) = \frac{N_a + \sqrt{N_a^2 + 4n_i^2}}{2} e^{-\frac{V(x)}{u_T}} \\ n(x) = \frac{N_d + \sqrt{N_d^2 + 4n_i^2}}{2} e^{\frac{V(x)-V_d}{u_T}} \end{cases} \quad (II-3)$$

où V_d représente le potentiel de diffusion de l'homojonction, $u_T = kT/q$ le potentiel thermique (≈ 26 mV à 300K) et n_i la concentration intrinsèque du matériau semiconducteur.

Le potentiel de diffusion V_d est donnée par la formulation classique suivante [5]:

$$V_d = u_T \operatorname{Ln} \left(\frac{N_a N_d}{n_i^2} \right) \quad (II-4)$$

Lorsque nous appliquons une tension externe V_{app} à la structure semiconductrice, les densités d'électrons $n(x)$ et de trous $p(x)$ seront reliées via la loi d'action de masse donnée par [3, 5] :

$$p(x) \times n(x) = n_i^2 \exp \left(\frac{V_{app}}{u_T} \right) \equiv N_i^2 \quad (II-5)$$

Compte tenu que la densité de charge est nulle loin de l'interface $x=0$, les densités d'électrons $n(x)$ et de trous $p(x)$ prennent les formes suivantes :

$$\begin{cases} p(x) = \frac{N_a + \sqrt{N_a^2 + 4N_i^2}}{2} e^{-\frac{V(x)}{u_T}} \\ n(x) = \frac{N_d + \sqrt{N_d^2 + 4N_i^2}}{2} e^{\frac{V(x)-V_d^*}{u_T}} \end{cases} \quad (II-6)$$

où V_d^* désigne la hauteur de la barrière de potentiel hors équilibre.

II-4 Champ électrique.

Dans le cadre de l'approximation de Boltzmann, la solution de l'équation de Poisson (II-2) soumise à des conditions aux limites physiques peut être obtenue dans l'espace des potentiels.

Le champ électrique $E(x)$ dérive du potentiel électrique $V(x)$. Dans le cas unidimensionnel, ces deux grandeurs physiques sont reliés par la loi $E(x) = -dV(x)/dx$. Cette loi porte le nom de loi de Faraday

Dans cette situation, l'équation (II-2) peut être subdivisée en deux sous-équations et écrites sous les deux formes suivantes [3]:

$$\begin{cases} dE(x) = \frac{q}{\epsilon} [p(x) - n(x) - N_a] dx & \text{pour } x < 0 \\ dE(x) = \frac{q}{\epsilon} [p(x) - n(x) + N_d] dx & \text{pour } x > 0 \end{cases} \quad (\text{II-7})$$

En multipliant les deux sous-équations précédentes par $E(x)$, nous obtenons :

$$\begin{cases} E(x)dE(x) = -\frac{q}{\epsilon} [p(x) - n(x) - N_a] E(x) dx & \text{pour } x < 0 \\ E(x)dE(x) = -\frac{q}{\epsilon} [p(x) - n(x) + N_d] E(x) dx & \text{pour } x > 0 \end{cases} \quad (\text{II-8})$$

Notons que les densités d'électrons $n(x)$ et de trous $p(x)$ dépendent implicitement du potentiel électrique $V(x)$.

Compte tenu du fait que le champ électrique est nul à l'infini, une première intégration des deux équations précédentes conduit aux expressions suivantes :

$$E(x) = -\frac{u_T}{L_{Dp}} \sqrt{\frac{N_a^{ne}}{N_A} \left(e^{-\frac{V(x)}{u_T}} - 1 \right) + \frac{N_d^{ne}}{N_A} \left(e^{\frac{V(x) - V_d^*}{u_T}} - e^{-\frac{V_b^{ne}}{u_T}} \right) + \frac{V(x)}{u_T}} \quad (\text{II-9})$$

et

$$E(x) = -\frac{u_T}{L_{Dp}} \sqrt{\frac{N_A^{ne}}{N_D} \left(e^{-\frac{V(x)}{u_T}} - e^{-\frac{V_b^{ne}}{u_T}} \right) + \frac{N_D^{ne}}{N_D} \left(e^{\frac{V(x)-V_d^*}{u_T}} - 1 \right) + \frac{V(x)-V_d^*}{u_T}} \quad (II-10)$$

II-4-1 Champ électrique à l'interface.

Le champ électrique $E(x)$ dépend explicitement du potentiel électrique $V(x)$, la quantification du champ électrique à l'interface ($x=0$) nécessite la connaissance du potentiel électrique $V_0=V(x=0)$. Pour ce faire, nous allons tenir compte du fait que le champ électrique est continu au point $x=0$. Mathématiquement, nous pouvons écrire : $E(x=0^+) = E(x=0^-)$. Soit :

$$V_0 = \frac{N_D}{N_A + N_D} V_b^{ne} + \frac{N_A^{ne} - N_D^{ne}}{N_A + N_D} u_T \left[1 - \exp\left(-\frac{V_b^{ne}}{u_T}\right) \right] \quad (II-11)$$

Pour des dopages N_A et N_D supérieurs à 10 fois la concentration intrinsèque n_i et pour une hauteur de barrière $V_b^{ne} > 5u_T$, le potentiel électrique V_0 à l'interface sera donné tout simplement par l'expression suivante :

$$V_{d1} - V_{a1} = V_0 = \frac{N_d}{N_a + N_d} (V_b^{ne} - 2u_T) + u_T \quad (II-12)$$

La tension supportée par la région de type n correspondant aux valeurs positives de la position x est donnée par :

$$V_{d2} - V_{a2} = V_b^{ne} - V_0 = \frac{N_A}{N_A + N_D} (V_b^{ne} - 2u_T) + u_T \quad (II-13)$$

Les deux équations précédentes conduisent à une relation très utile permettant de connaître le rapport entre les tensions supportées par chacune des régions n et p. Nous trouvons alors :

$$\frac{V_{d1}-V_{a1}-u_T}{V_{d2}-V_{a2}-u_T} = \frac{N_D}{N_A} \quad (II-14)$$

La modélisation d'une hétérojonction est très complexe, nous proposons une généralisation de l'équation précédente (sans aucune démonstration) que nous écrivons sous la forme suivante [6]:

$$\frac{V_{d1}-V_{a1}-u_T}{V_{d2}-V_{a2}-u_T} = \frac{\varepsilon_2 N_{d2}}{\varepsilon_1 N_{a1}} \quad (II-15)$$

où les tensions $V_{d1}-V_{a1}$ et $V_{d2}-V_{a2}$ sont tensions appliquées respectivement aux régions p et n pour une polarisation $V_{app}=V_{a1}+V_{a2}$ donnée.

II-4-2 Champ électrique à la jonction électrique.

La position de la jonction électrique nommée aussi jonction physique est définie au point où la grandeur $p(x)-n(x)$ change de signe [7].

En d'autres termes, ce point sera déterminé par résolution de l'équation suivante :

$$p(x_{jp})=n(x_{jp}) \quad (II-16)$$

Nous avons vu précédemment que le champ électrique $E(x)$ est une fonction explicite du potentiel électrique $V(x)$, la connaissance du champ électrique à la jonction physique ($x=x_{jp}$) requiert une information sur le potentiel V_{jp} en ce point.

Les équations (II-9) et (II-5) nous permettent d'aboutir à l'expression du potentiel électrique au niveau de la jonction physique. Le calcul formel donne :

$$V_{jp} = \frac{V_b^{ne}}{2} + u_T \operatorname{Ln} \left(\sqrt{\frac{N_A^{ne}}{N_D^{ne}}} \right) \quad (\text{II-17})$$

Cette équation montre que les jonctions physique et métallurgiques sont identiques pour $N_A = N_D$.

Le champ électrique E_{jp} au niveau de la jonction physique sera donné par :

$$E_{jp} = -\frac{u_T}{L_{Dn}} \sqrt{\operatorname{Ln} \left(\frac{N_d^{ne}}{N_i} \right) - 2 \frac{N_d^{ne} - N_i}{N_d^{ne} + N_i}} \quad (\text{II-18})$$

II-4-3 Résultats et discussions.

II-4-3-1 Champ électrique et densités de charge et de porteurs

Une résolution numérique basée sur la méthode de Hutta qui n'est autre que la méthode de Runge-Kutta d'ordre huit [8] nous a permis de déterminer les variations du potentiel électrique comme cela est indiqué sur la figure II-1.

Dans le même contexte, les densités de charges et de porteurs libres peuvent être évaluées numériquement.

Le traitement numérique a été réalisé pour différents rapports de dopage N_A/N_D entre les régions n et p.

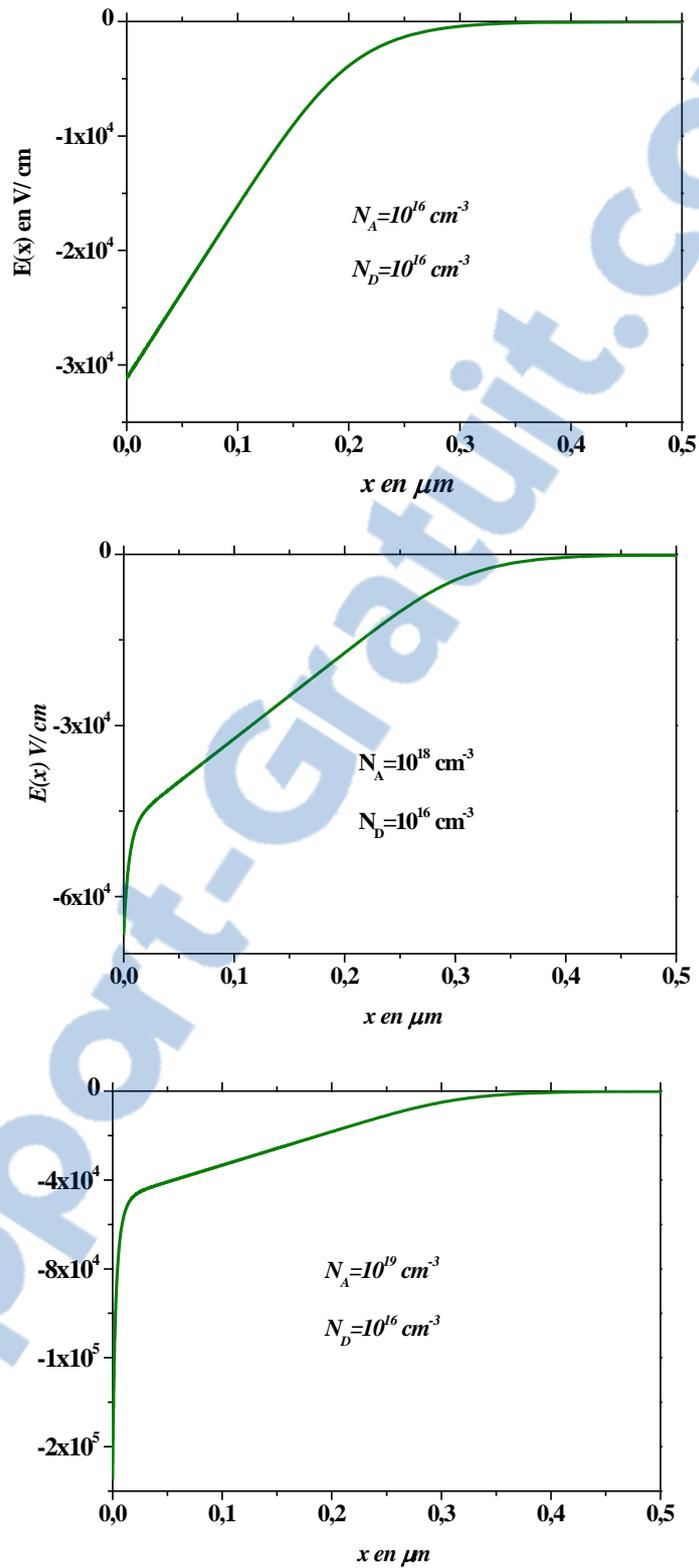


Figure II-1 : Variations du champ électrique $E(x)$ dans la région de faible dopage à polarisation nulle et à température ambiante.

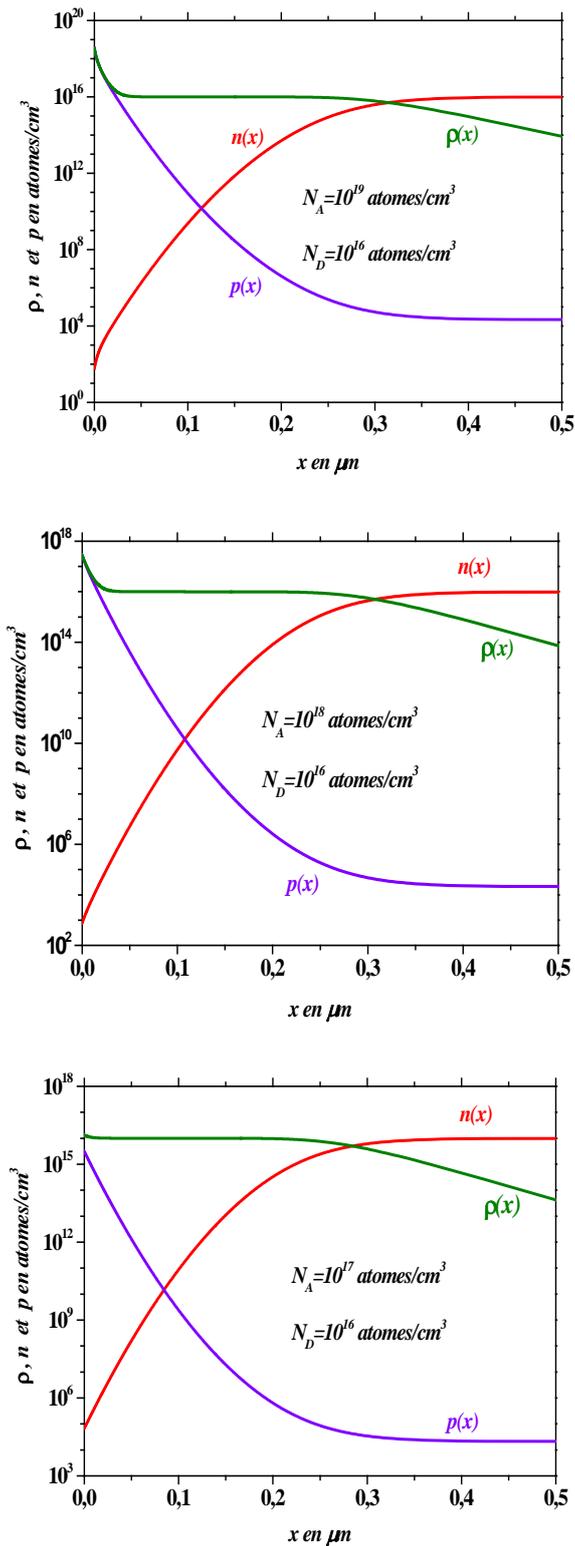


Figure II-2 : Densités de charges et de porteurs libres à température ambiante pour différents rapports de dopage et à polarisation nulle

II-4-3-2 Potentiel électrique

Un traitement numérique nous a montré que le potentiel s'écarte de la loi parabolique dans le cas des jonctions abruptes présentant une dissymétrie supérieur à 10 comme cela est illustré sur la figure suivante.

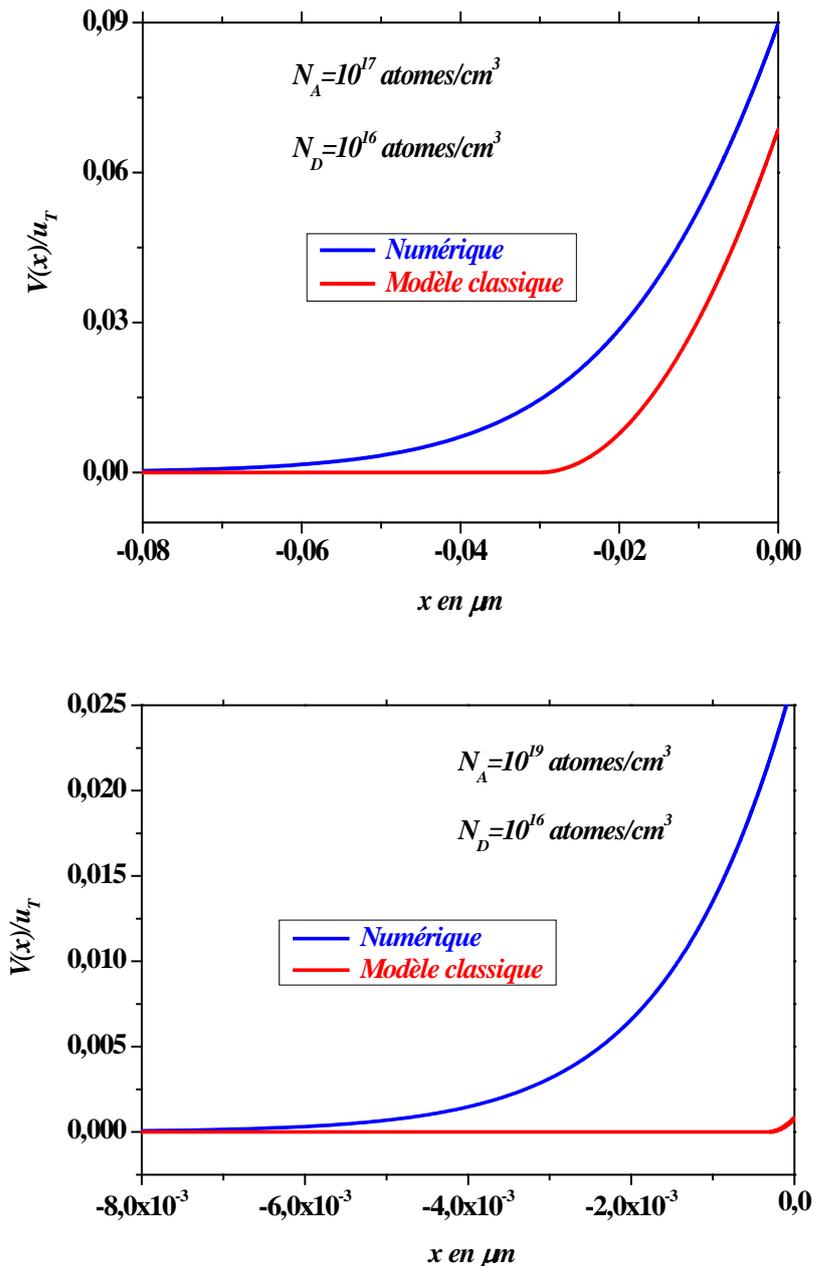


Figure II-3 : Variation du potentiel électrique à température ambiante dans la région de fort dopage pour différents dissymétries et à polarisation nulle.



II-5 Charge et capacité de jonction.

Dans cette partie, nous allons déterminer la caractéristique capacité tension (C-V) d'une homojonction abrupte à dopages uniformes soumise à une polarisation appliquée V_{app} quelconque.

Dans le cas de structure où N_A est supérieur ou égal à N_D , la charge par unité de surface est donnée par l'expression suivante [3, 9]:

$$Q = \int_{x_{jp}}^{\infty} \rho(x) dx + q N_D x_{jp} \quad (II-19)$$

En introduisant l'équation de Poisson, l'expression de la charge électrique Q prendra la forme suivante :

$$Q = -\varepsilon E_{jp} + q N_D x_{jp} \quad (II-20)$$

Compte tenu de l'équation de Faraday, la position de la jonction électrique x_{jp} sera donnée par l'expression suivante (cas $N_A \geq N_D$):

$$x_{jp} = \int_{V_0}^{V_{jp}} \frac{\sqrt{\frac{\varepsilon}{2qu_T}} dV(x)}{\sqrt{N_A^{ne} \left(e^{-\frac{V(x)}{u_T}} - 1 \right) + N_D^{ne} \left(e^{\frac{V(x)-V_b^{ne}}{u_T}} - e^{-\frac{V_b^{ne}}{u_T}} \right) + N_D \frac{V(x)}{u_T}}} \quad (II-21)$$

Nous traiterons dorénavant le cas $N_A \geq N_D$.

Pour le cas inverse ($N_D \geq N_A$), il suffit de permuter les indices A et D dans l'équation précédente.

La capacité de jonction est définie par la relation $C = -dQ/dV_{app}$ et est donnée par la formulation suivante [3]:

$$C = \varepsilon \frac{dE_{jp}}{dV_{app}} - q N_D \frac{dx_{jp}}{dV_{app}} \quad (II-22)$$

où le champ électrique E_{jp} et la position de la jonction physique x_{jp} sont donnés respectivement par les équations (II-18) et (II-21)

II-5-2-1 Jonction symétrique

Pour cette configuration de dopage, les jonctions physique et métallurgique sont identiques. Dans ce contexte, nous avons $x_{jp}=0$ et la capacité de jonction à polarisation quelconque s'écrit tout simplement :

$$C = \varepsilon \frac{dE_{jp}}{dV_{app}} \quad (II-23)$$

Un calcul formel donne une expression purement analytique de la capacité d'une homojonction abrupte à dopages uniformes :

$$C(V_{app}) = \frac{\frac{\varepsilon}{L_{D_n}} \left(\frac{\sqrt{N_d^2 + 4 N_i^2} - 2N_i}{2N_i} \right)}{\sqrt{2 \operatorname{Ln} \left(\frac{N_d + \sqrt{N_d^2 + 4 N_i^2}}{2N_i} \right) - 2 \left(\frac{\sqrt{N_d^2 + 4 N_i^2} - 2N_i}{N_d} \right)}} \quad (II-24)$$

où la concentration N_i a été défini précédemment.

Notons que la capacité présente un pic de valeur finie, ce résultat n'est pas prévu par le modèle classique. Cette valeur est en accord avec d'autres résultats de la littérature [10-12].

De plus des résultats de simulation numérique basés sur la méthode du champ auto-cohérent sont en très bon accord avec notre formulation [13]. les résultats sont donnés par la figure suivante II-8 :

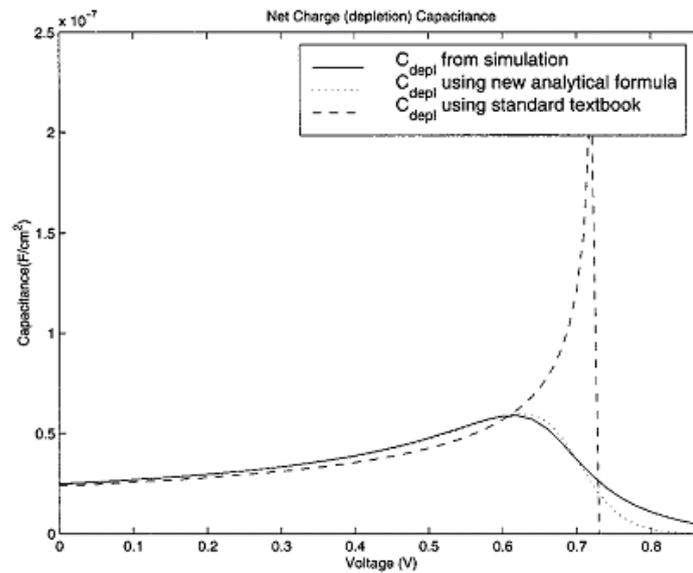


Figure II-4 : Simulation numérique basée sur le champ auto-cohérent [39]

Plusieurs travaux récents ont été consacrés à la caractéristique C-V de structures semiconductrices simples ou complexes [14-15].

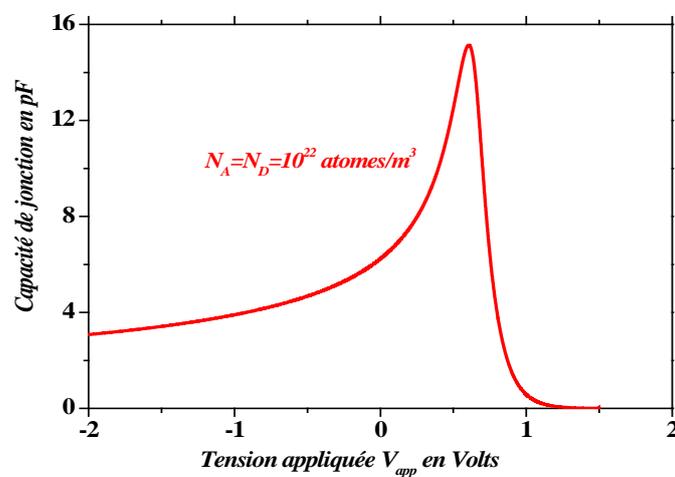
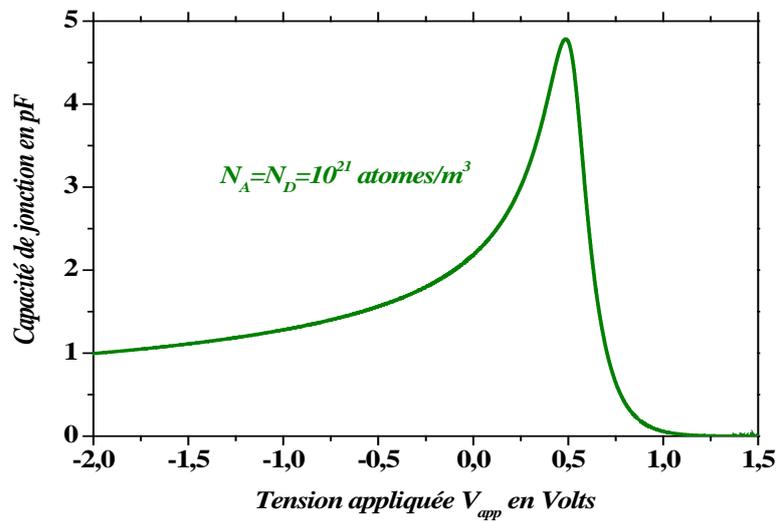
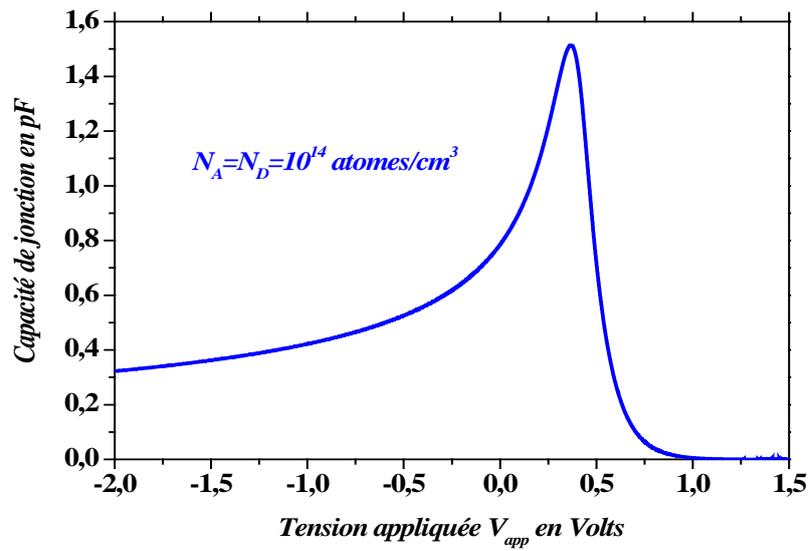
Sous polarisation inverse, l'équation (II-24) devient plus simple et s'écrit tout aisément :

$$C = \sqrt{\frac{\epsilon q N_D}{2}} \frac{1}{\sqrt{2u_T \text{Ln}\left(\frac{N_D}{n_i}\right) - 2u_T - V_{app}}} \quad (\text{II-25})$$

La courbe $1/C^2 = f(V_{app})$ est parfaitement linéaire avec un potentiel d'intercepte $V_{int} = 2u_T \text{Ln}(N_D/n_i) - 2u_T$. Ce résultat est en accord avec d'autres travaux [].

Sur les figures suivantes, nous avons représenté la caractéristique $C(V_{app})$ d'une homojonction symétrique ($N_A = N_D$) à différents dopages allant de 10^{14} à 10^{19} atomes par centimètre cube.

La surface de la jonction est prise égale à 10^{-8} m^2 .



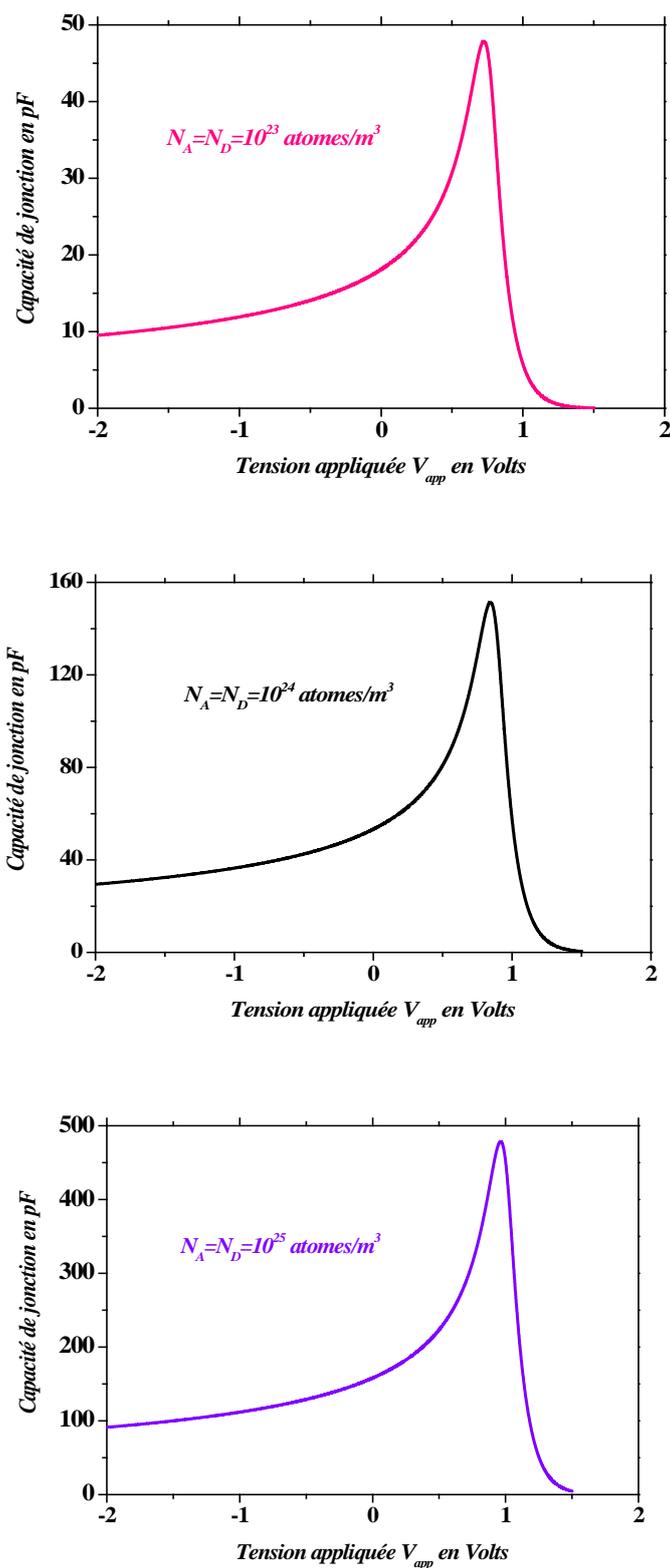


Figure II-5 : Courbes $C(V_{app})$ d'homojonctions symétriques à différents dopage

Le modèle analytique proposé (équation II-24) est en bon accord avec d'autres résultats obtenus numériquement [3, 13].

A polarisation nulle, la capacité $C_0=C(V_{app}=0 \text{ volt})$ est donnée par l'équation suivante :

$$C(V_{app}=0) \cong \frac{\varepsilon}{L_{D_{n \text{ ou } p}} \sqrt{\frac{V_d}{u_T} - 2}} \quad (\text{II-26})$$

L'équation (II-24) peut se réécrire sous la forme suivante :

$$C(V_{app}) = C_0 \frac{\varepsilon}{L_{D_n} \sqrt{\frac{V_d}{u_T} - 2}} \left(\sqrt{1 + 4e^{-x}} - 2e^{-\frac{x}{2}} \right) \quad (\text{II-27})$$

$$\left[x + 2 \operatorname{Ln} \left(\frac{1 + \sqrt{1 + 4e^{-x}}}{2} \right) - 2 \left(\sqrt{1 + 4e^{-x}} - 2e^{-\frac{x}{2}} \right) \right]^{\frac{1}{2}}$$

où le paramètre normalisé x est donné par :

$$x = \frac{V_d - V_{app}}{u_T} \quad (\text{II-28})$$

Notons que la caractéristique capacité-tension $C(V_{app})$ présente deux comportements asymptotiques à savoir aux fortes polarisations inverses et fortes polarisations directes.

Sur la courbe suivante, nous donnons une représentation de la capacité normalisée (la capacité C_0 est prise comme unité) pour différentes valeurs du dopage.

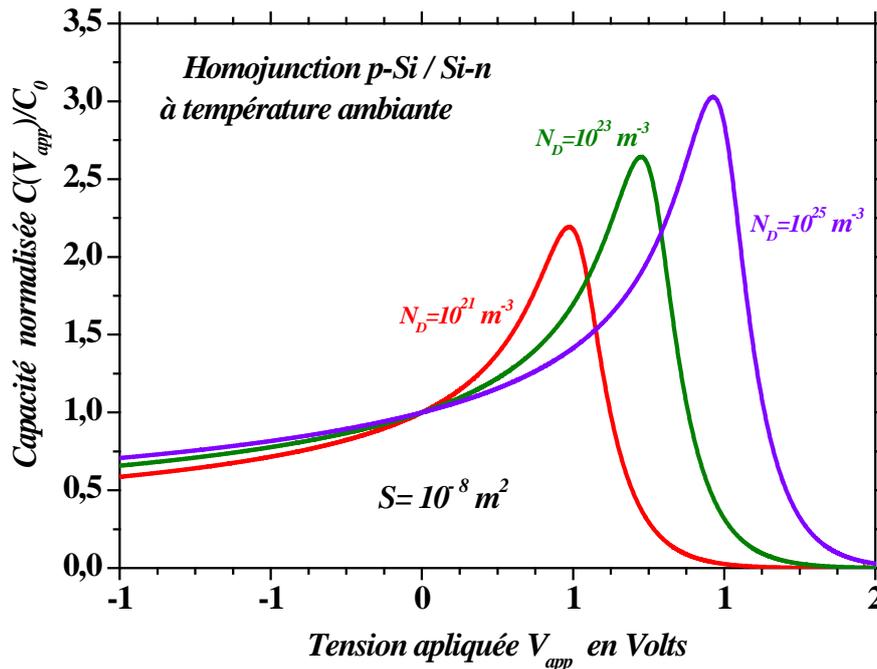


Figure II-6 : Caractéristique capacité-tension normalisée à température ambiante d'une homojonction symétrique à différents dopages N_D

II-5-2-2 Jonction asymétrique

Pour ce type de jonction, la connaissance du shift (décalage) entre la jonction physique et la jonction métallurgique est fondamentale.

Compte tenu de l'équation de Faraday, ce shift est donné par l'équation suivante [3, 6-7]:

$$x_{jp} = L_{Dn} \int_{V_0}^{V_{jp}} \frac{d\left(\frac{V(x)}{u_T}\right)}{\sqrt{\frac{N_a^{ne}}{N_d} \left(e^{-\frac{V(x)}{u_T}} - e^{-\frac{V_b^{ne}}{u_T}} \right) + \frac{N_d^{ne}}{N_d} \left(e^{\frac{V(x)-V_b^{ne}}{u_T}} - 1 \right) - \left(\frac{V(x)-V_b^{ne}}{u_T} \right)}}} \quad (\text{II-29})$$

L'équation précédente est une équation intégrale non soluble : un traitement numérique s'impose. Afin d'évaluer cette intégrale, nous pouvons utiliser la méthode des trapèzes par exemple [16].

L'équation précédente peut être réécrite sous la forme suivante:

$$x_{jp} = \int_{V_0}^{V_{jp}} f(V(x), V_{app}) dV(x) \quad (II-30)$$

où la fonction $f(V, V_{app})$ est donnée par :

$$f(V(x), V_{app}) = \frac{\frac{L_{D_n}}{u_T}}{\sqrt{\frac{N_a^{ne}}{N_d} \left(e^{-\frac{V(x)}{u_T}} - e^{-\frac{V_b^{ne}}{u_T}} \right) + \frac{N_d^{ne}}{N_d} \left(e^{\frac{V(x)-V_b^{ne}}{u_T}} - 1 \right) - \left(\frac{V(x)-V_b^{ne}}{u_T} \right)}}} \quad (II-31)$$

Dans l'équation précédente, les grandeurs électriques V_0 et V_{jp} sont des fonctions implicites de la tension appliquée V_{app} .

En utilisant l'identité $\frac{d}{dy} \int_{x_1}^{x_2} g(x,y) dx = g(x_2,y) \frac{dx_2}{dy} - g(x_1,y) \frac{dx_1}{dy} + \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial g(x,y)}{\partial y} dx$ [17], il est possible d'évaluer le deuxième terme relatif à l'équation (II-20).

Ce terme contribue à la capacité seulement dans le cas de jonctions dissymétriques ($N_A \neq N_D$).

La variation du shift x_{jp} par rapport à la tension appliquée V_{app} est donnée par la formulation suivante :

$$\begin{aligned} \frac{dx_{jp}}{dV_{app}} = & f(V_{jp}, V_{app}) \frac{dV_{jp}}{dV_{app}} - f(V_0, V_{app}) \frac{dV_0}{dV_{app}} \\ & + \int_{V_0}^{V_{jp}} \frac{\partial f(V(x), V_{app})}{\partial y} dV(x) \end{aligned} \quad (II-32)$$

L'équation précédente et l'équation (II-20) montre que la capacité totale est la somme de quatre capacités élémentaires C_1 , C_2 , C_3 et C_4 .

Ces capacités élémentaires sont définies comme suit :

$$\left\{ \begin{array}{l} C_1 = \varepsilon \frac{dE_{JP}}{dV_{app}} \\ C_2 = qN_d f[V_{jp}, V_{app}] \frac{dV_{jp}}{dV_{app}} \\ C_3 = -qN_d f[V_0, V_{app}] \frac{dV_0}{dV_{app}} \\ C_4 = qN_d \int_{V_0}^{V_{jp}} \frac{\partial f[V(x), V_{app}]}{\partial y} dV(x) \end{array} \right. \quad (II-33)$$

Les capacités C_1 , C_2 et C_3 sont quantifiables alors que la capacité C_4 ne peut être déterminée que par des méthodes numériques.

Les capacités élémentaires C_1 , C_2 et C_3 sont donnés par les relations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} C_1 = \varepsilon \frac{dE_{jp}}{dV_{app}} \quad C_2 = \frac{qN_a N_d}{2E_{jp} \sqrt{N_a^2 + 4N_i^2}} \\ C_3 = \frac{qN_d (a+b+c+d)}{4E_0 (N_a + N_d) N_i^2 \sqrt{N_a^2 + 4N_i^2} \sqrt{N_d^2 + 4N_i^2}} \end{array} \right. \quad (II-34)$$

Les termes a , b , c et d figurant dans l'équation précédente sont données par :

$$\left\{ \begin{array}{l} a = -(N_a - N_d) [N_a^2 N_d^2 + 2(N_a^2 + N_d^2) N_i^2] \\ b = \sqrt{N_a^2 + 4N_i^2} (N_a (N_a - N_d) N_d^2 + 2(N_a^2 - N_a N_d - N_d^2) N_i^2 - 16N_i^4) \\ c = \sqrt{N_a^2 + 4N_i^2} (N_d (N_a - N_d) N_a^2 + 2N_d^2 N_i^2 + 16N_i^4) \\ d = N_a N_d (N_a - N_d) \sqrt{N_a^2 + 4N_i^2} \sqrt{N_d^2 + 4N_i^2} \end{array} \right. \quad (II-35)$$

Sur la figure (II-14) suivante, nous donnons une représentation de la caractéristique $C(V_{app})$ pour des jonctions dissymétriques.

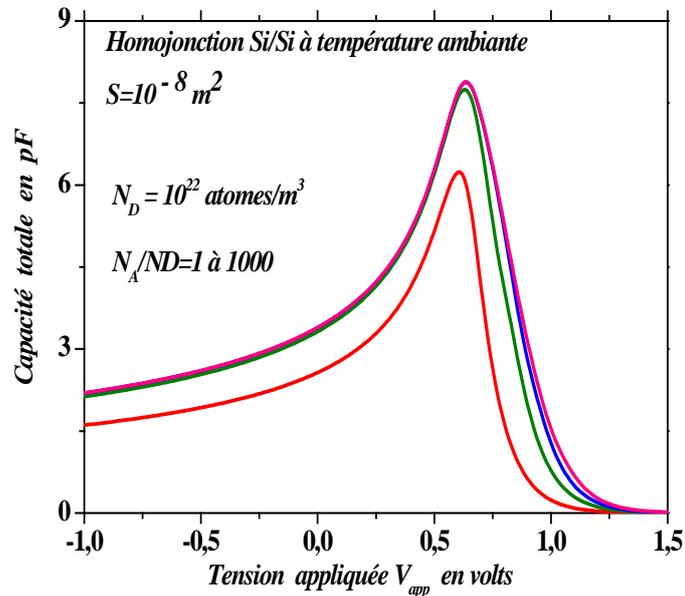


Figure II-7 : Courbes $C(V_{app})$ à température ambiante pour des homojonctions Si/Si

Sur la figure suivante, nous donnons les variations du terme $\alpha = C_{max}L_{Dn}/\epsilon$ en fonction du rapport de dopage $\beta = N_D/N_A$. Nous constatons que le terme α varie entre la valeur 0,24 (jonction symétrique) et la valeur 0,31 (jonction asymétrique).

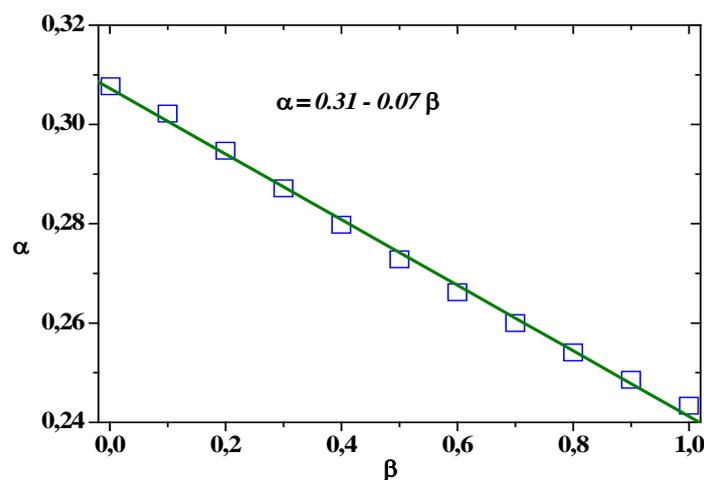


Figure II-8: Variation de $C_{max}L_{Dn}/\epsilon$ en fonction de N_D/N_A



Pour une jonction dissymétrique la capacité totale se comporte comme un groupement de deux capacités en parallèle, la première correspond au terme C_1 et une seconde correspondant au terme $C_{234}=C_2+C_3+C_4$. Les différents termes de la capacité sont schématisés sur la figure suivante :

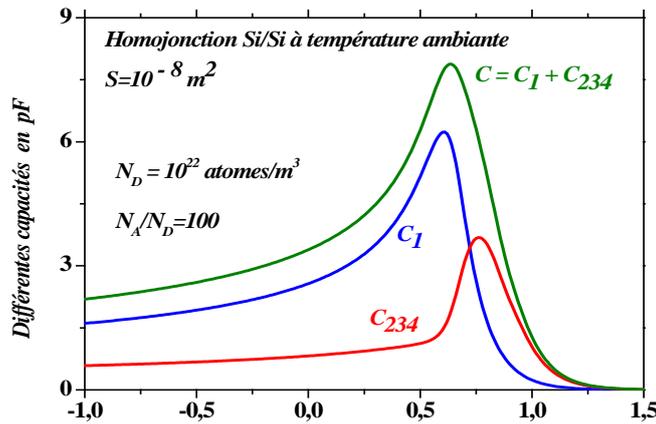


Figure II-9 : Apport de C_{234} à la capacité (jonction asymétrique)

Vu l'impossibilité de trouver un modèle purement analytique de la caractéristique $C(V_{app})$ d'homojonctions dissymétriques pour toute les tensions appliquées, nous proposons une formulation similaire à la jonction symétrique que nous mettant sous la forme suivante :

On propose un modèle de la caractéristique capacité-tension pour toute la gamme des tensions et pour tout rapport de dopage entre les régions n et p :

$$C(V_{app}) = C_0 \frac{\sqrt{\frac{V_{d,eff}}{u_T} - 2 \frac{\epsilon}{L_{Dn}} \left(\sqrt{1 + 4e^{-x_{eff}}} - 2e^{-\frac{x_{eff}}{2}} \right)}}{\sqrt{x_{eff} + 2 \ln \left(\frac{1 + \sqrt{1 + 4e^{-x_{eff}}}}{2} \right) - 2 \left(\sqrt{1 + 4e^{-x_{eff}}} - 2e^{-\frac{x_{eff}}{2}} \right)}} \quad (II-36)$$

où le paramètre x_{eff} est défini comme suit :

$$x_{eff} = \frac{V_{d,eff} - V_{app}}{u_T} \quad (II-37)$$

Sur la figure suivante, nous donnons une comparaison entre notre modèle et les résultats obtenus numériquement :

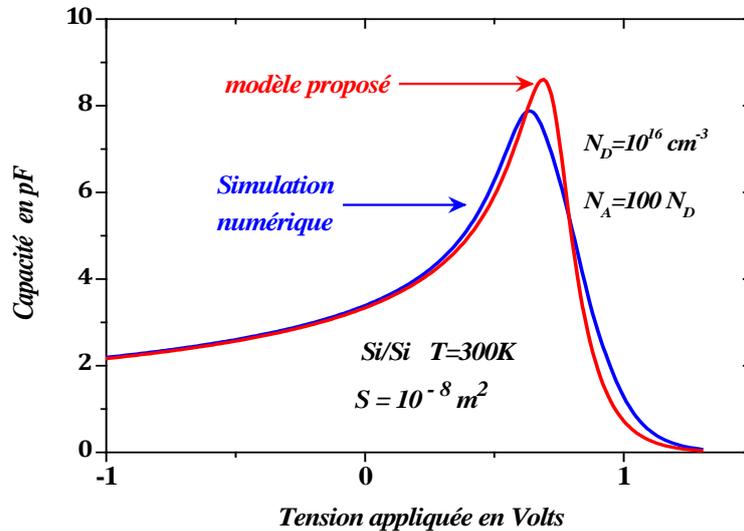


Figure II-10 : Confrontation entre notre modèle théorique proposé et les résultats numériques pour une jonction dissymétrique

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons modélisé la caractéristique capacité tension d'homojonctions abruptes pour une polarisation quelconque.

Nous avons pu constater que le modèle classique reste valable pour les polarisations inverses.

Les divergences du modèle classique ont été levées : la capacité de jonction obtenue à polarisation quelconque est de valeur finie et est définie même pour des tensions supérieures au potentiel de diffusion.

Références Bibliographiques du chapitre II

- [1] Plá, J., Centurioni, E., Summonte, C., Rizzoli, R., Migliori, A., Desalvo, A and Zignani, F.
Homojunction and heterojunction silicon solar cells deposited by low temperature-high frequency plasma enhanced chemical vapour deposition. Thin Solid Films, 405(1), 248-255 (2002).
- [2] Shockley, W.
The theory of p-n junctions in semiconductors and p-n junction transistors. Bell System Technical Journal, 28(3), 435-489 (1949).
- [3] Boukredimi, D and Allouche, H.
Accurate quasi static capacitance for abrupt homojunction under forward and reverse polarization. Bulletin of Materials Science, 36(2), 251-258 (2013).
- [4] De Mari, A.
An accurate numerical steady-state one-dimensional solution of the pn junction. Solid-State Electronics, 11(1), 33-58 (1968).
- [5] Simon M. Sze, S. M. and Ng, K. K.
Physics of Semiconductor Devices, 3rd Edition Edition Wiley, New York (2006)
- [6] Boukredimi, D.
Modélisation électrique d'hétérostructures semiconductrices à base d'antimoine. Thèse de doctorat d'état, Université d'Oran (es-sénia) (2007).
- [7] Murray, H.
Analytic resolution of Poisson-Boltzmann equation in nanometric semiconductor junctions. Solid-State Electronics, 53(1), 107-116 (2009).
- [8] Filippi, S and Gräf, J.
New Runge-Kutta-Nyström formula-pairs of order 8 (7), 9 (8), 10 (9) and 11 (10) for differential equations of the form $y'' = f(x, y)$ Journal of computational and applied mathematics, 14(3), 361-370 (1986).

- [9] Liou, J. J., Lindholm, F. A and Park, J. S.
Forward-voltage capacitance and thickness of pn junction space-charge regions
IEEE Transactions on Electron Devices, 34(7), 1571-1579 (1987).
- [10] Van Halen, P and Habib, M. H.
A new model for the pn junction space charge region capacitance.
In Proceedings of IEEE, University/Government/Industry Microelectronics Symposium, 126-130). (1993).
- [11] Van Halen, P.
A physical charge-based model for the space charge region of abrupt and linear semiconductor junctions.
In Proceedings of IEEE International Symposium on Circuits and Systems-ISCAS'94, 403-406 (1994).
- [12] Schmeits, M. and Sakhaf, M.
Capacitance of abrupt heterojunctions with inversion layers.
Solid-state electronics, 38(5), 1001-1007 (1995).
- [13] Haggag, A and Hess, K.
Analytical theory of semiconductor pn junctions and the transition between depletion and quasineutral region.
IEEE Transactions on Electron Devices, 47(8), 1624-1629 (2000)
- [14] Boukredimi, A.
New capacitance–voltage model for linearly graded junction.
Journal of Computational Electronics, 13(2), 477-489 (2014).
- [15] Boukredimi, A and Benchouk, K.
New improved capacitance-voltage model for symmetrical step junction: a way to a unified model for realistic junctions.
Journal of Computational Electronics, 13(4), 971-982 (2014).
- [16] Chapra, S. C and Canale, R. P.
Numerical methods for engineers (Volume 2).
McGraw-Hill, New York (2012).
- [17] V. Smirnov
Cours de mathématiques supérieures, Tome II
Editions MIR (1975)

Modélisation des offsets de bande de conduction et de valence pour l'interface $Ga_xIn_{1-x}As_{1-y}P_y/InP$

III-1 Introduction :

Ce chapitre est consacré à modélisation des offsets de bande de conduction et de valence du système accordé $Ga_xIn_{1-x}As_{1-y}P_y/InP$. La connaissance des discontinuités de bandes est un paramètre important pour les dispositifs à hétérojonction [1].

Dans ce contexte, la connaissance de certaines grandeurs physiques est nécessaire pour le calcul de ces offsets de bande. Nous rappelons que ces offsets de bande définissent complètement l'hétérojonction.

Notons que ces offsets de bande peuvent former soit une barrière de potentiel, soit un puits de potentiel (spike) pour les porteurs mobiles (electrons ou trous) à travers l'interface entre les deux semiconducteurs [2].

Des lois d'évolution de ces offsets de bande en fonction des compositions en x et y de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_{1-y}P_y$ peuvent être tirées à partir de certains modèles théoriques de la littérature à savoir :

- le modèle de base proposé par Anderson en 1960 [3]*
- le modèle des affinités électroniques [4]*
- le nouveau modèle des affinités électroniques [5]*
- le modèle de Jaros [6]*
- le modèle de Van de Walle [7-9].*

III-2 Le binaire InP

III-2-1 Structure de bande d'énergie :

Les semiconducteurs sont caractérisés par un écart en énergie entre la bande de conduction (BC) et la bande de valence (BV). Cet écart est nommé bande interdite ou gap. Plus ce gap est important, plus le matériau est isolant. Dans le cas inverse, le matériau est conducteur.

Notons que la bande interdite correspond à l'énergie nécessaire au système pour faire passer un électron de la bande de valence à la bande de conduction.

La structure de bande d'énergie du binaire InP est schématisée sur la figure suivante :

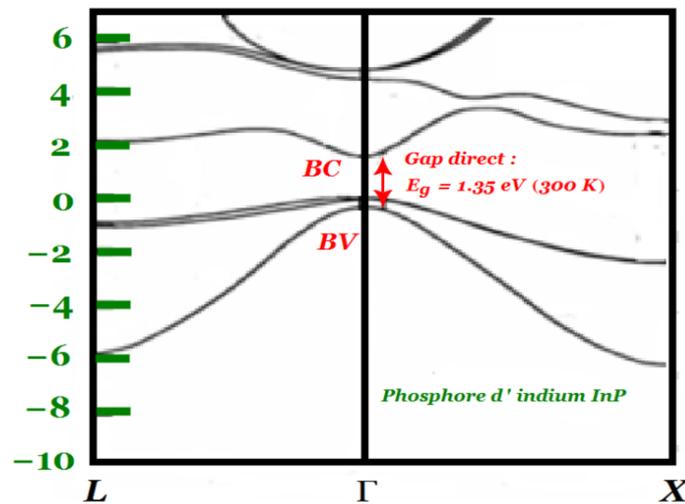


Figure III-1 Structure de bande du composé InP à 300 K [10].

La figure précédente montre que le composé InP présente un gap direct (voir la bande Γ).

Certains semiconducteurs présentent un gap indirect. Dans ce cas, il faut tenir compte soit de la bande L ou la bande X.

III-2-2 Propriétés intrinsèques :

Le phosphore d'indium InP est utilisé dans les applications électroniques à haute fréquence (HF) à cause de sa grande mobilité en comparaison à celle du silicium par exemple.

III-2-2-a Cristallographie du binaire InP

Les semiconducteurs III-V formés à partir d'atomes Ga et In d'une part et d'atomes As et P d'autre part possèdent la structure zinc-blende qui est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrés (CFC).

La structure zinc-blende du composé binaire InP est représentée sur la figure suivante :

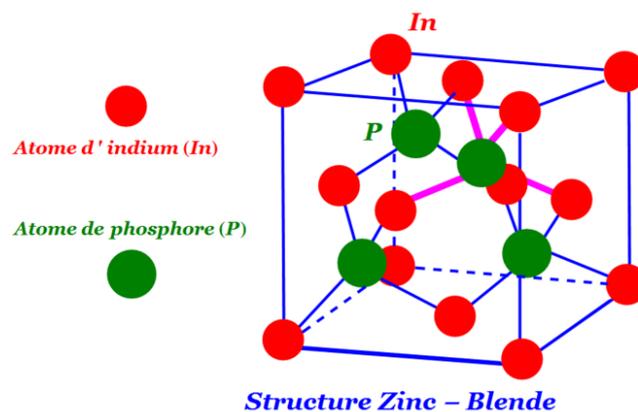


Figure III-2 Structure zinc-blende

La maille conventionnelle comprend quatre molécules du matériau III-V. Chaque molécule est composée de cinq atomes qu'elle partage avec les molécules voisines : autour de chaque atome de la colonne III on trouve quatre atomes de la colonne V et vice versa. La maille conventionnelle est de forme cubique.

La diffraction par rayon X permet la mesure du paramètre de maille. Le paramètre de maille du phosphore d'indium est voisin de 5.8687\AA [11].

III-2-2-c Masses effectives du binaire InP

Pour le binaire InP, les différentes masses effectives sont regroupées sur le tableau suivant [12]:

m_{Γ}/m_0	m_L/m_0	m_X/m_0	m_{hh}/m_0	m_{lh}/m_0
0.08	0.76	0.64	0.69	0.11

Tableau III-1 Masses effectives relatives au binaire InP

Les grandeurs m_{Γ} , m_L et m_X représentent respectivement les masses effectives relatives aux bandes Γ , L et X alors que les grandeurs m_{hh} et m_{lh} représentent respectivement les masses effectives des trous lourds et légers.

III-2-2-d Concentration intrinsèque

Un des paramètres le plus important pour la description d'un matériau semiconducteur est sa concentration intrinsèque.

Pour un semiconducteur intrinsèque le produit entre les densités de porteurs libres (électrons et trous) $n p = n_i^2$ (loi d'action de masse) est donné par l'expression [13]:

$$n p = N_C N_V \exp \left[-\frac{E_g}{kT} \right] \quad (\text{III-1})$$

L'équation précédente permet d'exprimer la concentration intrinsèque n_i d'un matériau semiconducteur par [13]:

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} \exp \left[-\frac{E_g}{2kT} \right] \quad (\text{III-2})$$

Cette densité de porteurs est une fonction exponentielle du gap du matériau et de la température. Notons que pour des semiconducteurs de gap élevé, la concentration intrinsèque est faible.

Sur le tableau suivant, nous regroupons les paramètres physiques relatifs au composé binaire InP :

Grandeurs physiques	Valeurs pour le binaire InP
E_g (300K) (eV)	1.35
E_g (77K) (eV)	1.41
Δ_0 (eV)	0.11
E_X (eV)	2.21
E_L (eV)	2.05
$\Delta E_{\Gamma L}$ (eV)	0.61
χ (eV)	4.38
a (Å)	5.8687
$\epsilon_{statique}/\epsilon_0$	12.4
$\epsilon_{\infty}/\epsilon_0$	9.6
m_e^*/m_0	0.08
m_{hh}^*/m_0	0.69
m_{lh}^*/m_0	0.11

Tableau III-2 Paramètres relatifs au binaire InP [12].

III-2-3 Effet la température sur le gap

La température entraîne une variation du gap direct des matériaux semiconducteurs selon l'équation suivante nommée loi de Varshni [14]

$$E_g(T) = E_{g_0} - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (\text{III-4})$$

où E_{g_0} désigne le gap du semiconducteur au zéro absolu.

Les paramètres α et β «paramètres de Varshni» sont des valeurs empiriques obtenues expérimentalement pour chaque semiconducteur.

Dans le cas du binaire InP, le gap $E_g(T)$ est donné par [15]:

$$E_g(T) = 1.4236 - \frac{2.5 \cdot 10^{-4} T^2}{T + 75} \text{ (eV)} \quad (\text{III-5})$$

où le domaine des températures absolues T se situe entre 0 et 300 K.

L'évolution du gap du binaire InP en fonction de la température est représentée sur la figure suivante :

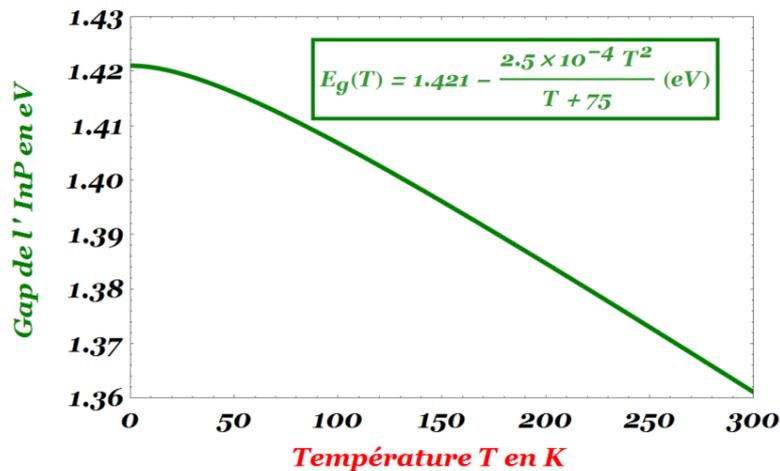


Figure 8 : Gap du binaire InP en fonction de la température absolue T

Nous remarquons que le gap (bande interdite) du binaire InP passe de la valeur 1.42 eV (0 K) à la valeur 1.36 eV (300 K).

III-3 Gap et paramètre de maille de l'alliage $Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}P_y$

Le composé $Ga_{1-x}In_xAs_{1-y}P_y$ a incité un intérêt considérable pour les chercheurs en tant que détecteur dans le moyen infrarouge. Les composés III-V possèdent en général une bande interdite dite directe car le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont situés en Γ . La largeur de cette bande interdite varie aussi en fonction de la composition de l'alliage.

Sur la figure suivante, nous avons représenté l'espace gap-paramètre de maille pour différents composés et alliages semiconducteurs.

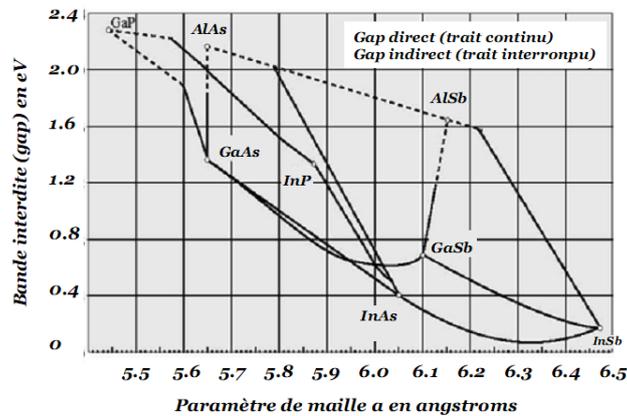
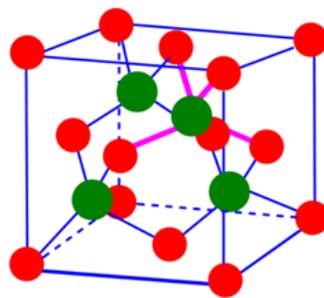


Figure III-3 Bande interdite et paramètres de maille de certains semiconducteurs [12].

Sur la courbe précédente :

- les points indiquent les différents composés binaires.
- les lignes continues pour les semiconducteurs à gap direct.
- les lignes discontinues pour les semiconducteurs à gap indirect.

Notons qu'un alliage ternaire de la forme AB_xC_{1-x} est intermédiaire entre les deux binaires AB et AC. D'autre part, un alliage quaternaire est intermédiaire entre un binaire et un ternaire.



III-3-2 Structure atomique et gap de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_{1-y}P_y$

Le quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_{1-y}P_y$ a la même structure cristalline que les composés binaires GaAs, GaP, InAs et InP : structure de type zinc-blende.

La majorité des composés III-V sont à gap direct [5].

Ce type d'alliage ($Ga_xIn_{1-x}As_{1-y}P_y$) fait intervenir quatre composés binaires et est caractérisé par deux coefficients stœchiométriques x et y [16].

Toutes les grandeurs physiques d'un alliage ternaire ou quaternaire sont déterminées par interpolation linéaire entre les différents composés binaires sauf pour le gap ou il faudra tenir compte d'un paramètre de courbure nommé bowing-parameter.

Cette interpolation linéaire a été introduite par Vegard [17] «loi de Vegard»

La loi de Vegard donne un paramètre de maille d'un quaternaire de la forme $A_xB_{1-x}C_{1-y}D_y$ sous la forme suivante [16]:

$$a_{A_xB_{1-x}C_{1-y}D_y} = x(1-y) a_{AC} + (1-x)(1-y) a_{BC} + xy a_{AD} + (1-x)y a_{BD} \quad (III-6)$$

Les différents paramètres des binaires constituant le quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_{1-y}P_y$ sont récapitulés sur le tableau suivant :

	GaP	InP	GaAs	InAs
a_0 (Å)	5.4512	5.8687	5.6533	6.0583
E_g (eV)	2.76	1.35	1.43	0.359
m_e/m_0	0.114	0.079	0.067	0.024
m_{hh}/m_0	0.52	0.69	0.55	0.36
m_{lh}/m_0	0.17	0.11	0.083	0.026
$\epsilon_{statique}/\epsilon_0$	11.0	12.9	12.90	14.3

Tableau III-3 Paramètre de certains binaires à $T=300$ K [12, 16]

Pour le quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_{1-y}P_y$, le paramètre de maille a_Q est donné par l'expression suivante:

$$a_Q = x(1-y) a_{GaAs} + (1-x)(1-y) a_{InAs} + xy a_{GaP} + (1-x)y a_{InP} \quad (III-10)$$

$$a_Q = 5.6533 x(1-y) + 6.0583 (1-x)(1-y) + 5.4512 xy + 5.8685 (1-x)y$$

Une représentation tridimensionnelle (3D) permet de visualiser le paramètre de maille du quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_{1-y}P_y$ pour toutes les gammes de composition x en gallium et y en phosphore (alliage accordé ou non accordé sur InP).

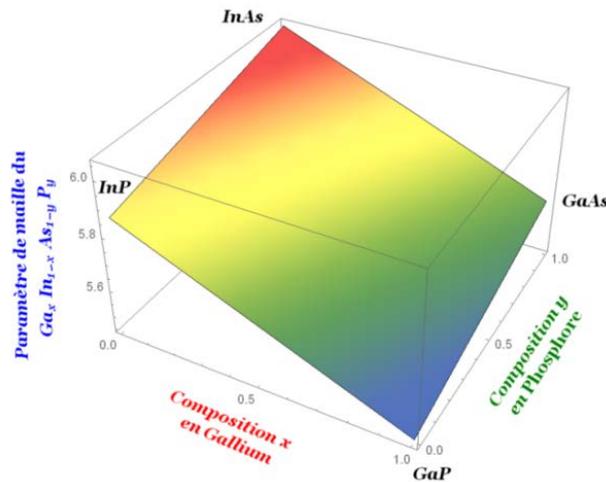


Figure III-10 : paramètre de maille du quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_{1-y}P_y$

La figure précédente montre que la surface $a(x, y)$ est pratiquement plane.

Dans ce contexte, nous proposons une loi de la forme : $a(x,y)=a_1+a_2x+a_3y$ où les paramètres a_1 , a_2 et a_3 peuvent être déterminées par la méthode des moindres carrés dont le principe est basé sur la minimisation de la quantité S pour l'ensemble des trois paramètres a_1 , a_2 et a_3 [18].

En d'autres termes, la quantité S est définie par :

$$S = \int_0^1 \int_0^1 [a_Q(x,y) - (a_1 + a_2x + a_3y)]^2 dx dy \quad (IV.21)$$

doit être minimale

Une analyse montre que ce minimum est atteint lorsque le gradient de la fonction S par rapport aux trois paramètres a_1 , a_2 et a_3 est nul. En d'autres termes, les conditions $\partial S/\partial a_1=0$, $\partial S/\partial a_2=0$, et $\partial S/\partial a_3=0$ doivent être satisfaites.

Ces trois conditions conduisent au système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \int_0^1 \int_0^1 [a_Q(x,y) - (a_1 + a_2x + a_3y)] dx dy = 0 \\ \int_0^1 \int_0^1 [a_Q(x,y) - (a_1 + a_2x + a_3y)] x dx dy = 0 \\ \int_0^1 \int_0^1 [a_Q(x,y) - (a_1 + a_2x + a_3y)] y dx dy = 0 \end{cases} \quad (IV.22)$$

La résolution du système d'équations précédent conduit à une loi de la forme :

$$a(x,y) = \underbrace{5.8656 - 0.4113x + 0.1959y}_{0 \leq x \leq 1 \text{ et } 0 \leq y \leq 1} \quad (III-10)$$

Pour un système $Ga_xIn_{1-x}As_{1-y}P_y/InP$ accordé, la condition d'accord de maille est donnée par:

$$x = \frac{(a_{InAs} - a_{InP}) y}{(a_{InP} - a_{GaP}) - (a_{GaAs} - a_{InAs} + a_{InP} - a_{GaP}) y} \quad (0 \leq y \leq 1) \quad (III-7)$$

$$x \approx \frac{0.454 y}{1 - 0.03 y}$$

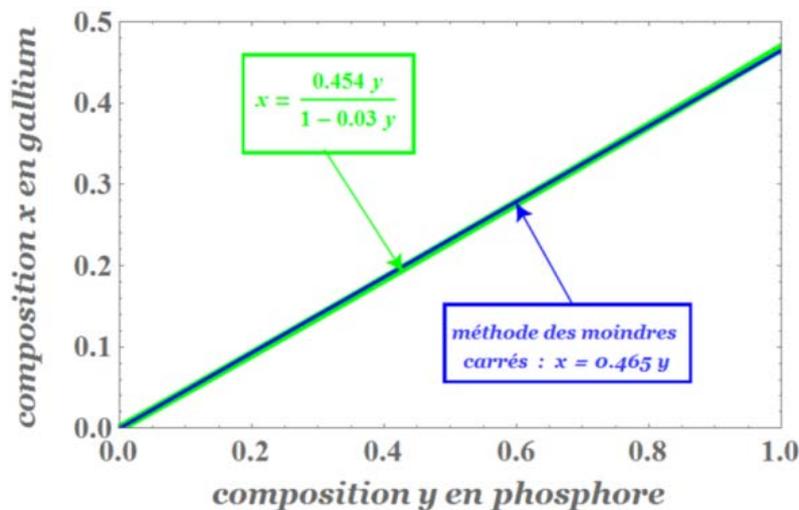


Figure III-10 : Loi $x=f(y)$ pour un système $Ga_xIn_{1-x}As_{1-y}P_y/InP$ accordé

La courbe $x=f(y)$ donnée par l'équation précédente est pratiquement linéaire ; nous proposons une loi de la forme $x=Ay$.

Dans ce contexte, nous allons utiliser la méthode des moindres carrés basée sur la minimisation de l'intégrale suivante :

$$\int_0^1 \left(\frac{0.454 y}{1-0.03 y} - A y \right)^2 = \text{minimum} \Rightarrow \frac{d}{dA} \left[\int_0^1 \left(\frac{0.454 y}{1-0.03 y} - A y \right)^2 \right] = 0 \quad (\text{III-8})$$

Le calcul donne une loi simple de la forme

$$x \approx 0.465 y \quad (0 \leq y \leq 1) \quad (\text{III-9})$$

avec une erreur relative inférieure à 2 %.

Pour un quaternaire $A_x B_{1-x} C_{1-y} D_y$, le gap est donné par la relation suivante [16]:

$$E_g(x,y) = (1-x)(1-y)E_{g[BC]} + (1-x)y E_{g[BD]} + x(1-y)E_{g[AC]} + xy E_{g[AD]} - c(x,y) \quad (\text{III-10})$$

où la courbure $c(x, y)$ porte le nom de bowing-parameter et elle est donnée par l'expression suivante [5]:

$$c(x,y) = x(1-x)(1-y) C_{[ABC]} + x(1-x)y C_{[ABD]} + y(1-x)(1-y) C_{[BCD]} + xy(1-y) C_{[ACD]} \quad (\text{III-11})$$

Les paramètres de courbure c des systèmes ternaires constituant le quaternaire étudié sont reportés dans le tableau suivant :

Ternaire	GaInP	InAsP	GaAsP	GaInAs
Paramètre de courbure c (eV)	0.65	0.10	0.19	0.48

Tableau III-4 Paramètres de courbure de certains ternaires [12].

L'évolution du gap de l'alliage quaternaire $Ga_xIn_{1-x}As_{1-y}P_y$ accordé sur le binaire InP est donnée par la figure suivante :

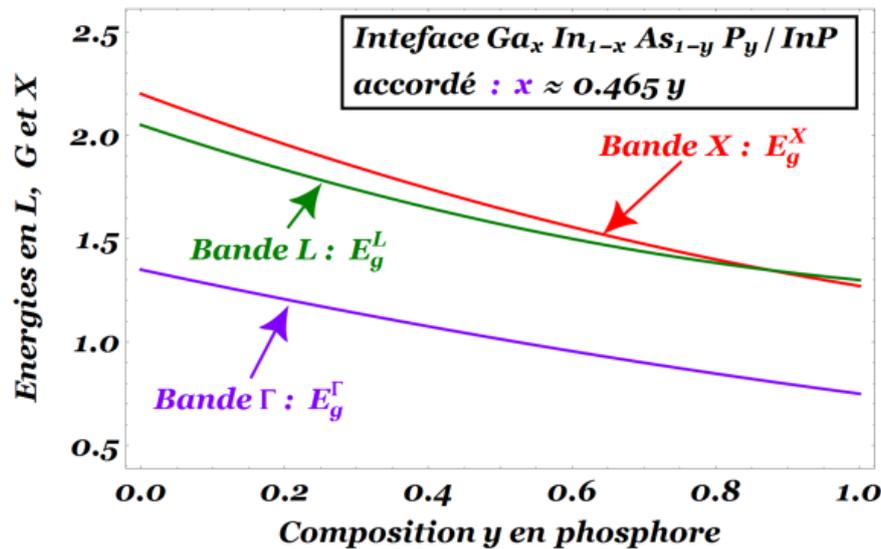


Figure III-5: Gaps du quaternaire GaInAsP accordé sur InP en fonction de la composition y en phosphore.

Le gap est direct au point Γ et ce, dans toute la composition x en phosphore [16].

III-3-3 Propriétés intrinsèque

I-3-3-1 Masse effective

Les masses effectives varient en sens inverse avec la courbure des bandes de conduction ou de valence [19].

Notons m_Γ et m_L les masses effectives des électrons de la bande de conduction, et m_{hh} et m_{lh} celles des trous lourds et des trous légers de la bande de valence.

III-3-3-2 Constantes diélectriques

La constante diélectrique $\varepsilon_Q = \varepsilon_{A_x B_{1-x} C_y D_{1-y}}$ du quaternaire $A_x B_{1-x} C_y D_{1-y}$ peut être interpolée à partir des constantes diélectriques relatives aux différents binaires constituant ce quaternaire [5]:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{A_x B_{1-x} C_y D_{1-y}} = & xy \varepsilon_{AC} + (1-x)y \varepsilon_{BC} + \\ & + x(1-y)\varepsilon_{AD} + (1-x)(1-y)\varepsilon_{BD} \end{aligned} \quad (III-12)$$

Pour le quaternaire $Ga_x In_{1-x} As_{1-y} P_y$ accordé sur InP, la constante diélectrique statique ε_Q est donnée par :

$$\varepsilon_Q = (12.9 - 0.6x - 0.4x^2) \varepsilon_0 \quad (III-13)$$

où $\varepsilon_0 = 8.854 \text{ pF/m}$ représente le constant diélectrique du vide.

III-2 Modèle de base d'Anderson

Dans cette section, nous allons décrire brièvement les caractéristiques physiques importantes d'hétérojonctions semiconductrices. Cette description fait appel à des notions élémentaires de physique du solide [3, 19].

Une hétérojonction est une jonction constituée par deux matériaux semiconducteurs différents. Nous distinguons deux types à savoir l'hétérotype (n-p) et l'isotype (n-n ou p-p).

Pour décrire l'hétérojonction, nous allons considérer en première approche le modèle de base introduit par Anderson [3].

Ce modèle est basé sur l'hypothèse de la continuité du niveau du vide et du niveau de Fermi des électrons dans les deux semiconducteurs au niveau de l'hétérojonction. La figure III-1 schématise le diagramme de bande d'une hétérojonction de type I.

Dans ce contexte, nous supposons que la bande interdite E_g , la constante diélectrique ϵ , le potentiel ϕ_m et l'affinité d'électronique χ sont différents dans les deux semiconducteurs. Le potentiel ϕ_m (respectivement l'affinité électronique χ) est défini comme l'énergie nécessaire pour faire passer un électron du niveau de Fermi E_F (respectivement du fond de la bande de conduction E_C) au niveau du vide.

La différence en énergie dans la bande de conduction entre les deux semiconducteurs est représentée par ΔE_C et celle dans la bande de valence par ΔE_V . La continuité du niveau du vide à l'interface impose alors que :

$$\Delta E_C = \chi_2 - \chi_1 \quad (\text{III-1})$$

La discontinuité dans la bande de valence est donnée par:

$$\Delta E_V = \Delta E_g - \Delta E_C \quad (\text{III-2})$$

avec

$$\Delta E_g = E_{g1} - E_{g2} \quad (\text{III-3})$$

Les discontinuités $\Delta E_C = \chi_2 - \chi_1$ et $\Delta E_V = \Delta E_g - \Delta E_C$ du fond de la bande de conduction et du sommet de la bande de valence sont causées par les discontinuités de l'affinité électronique et du gap.

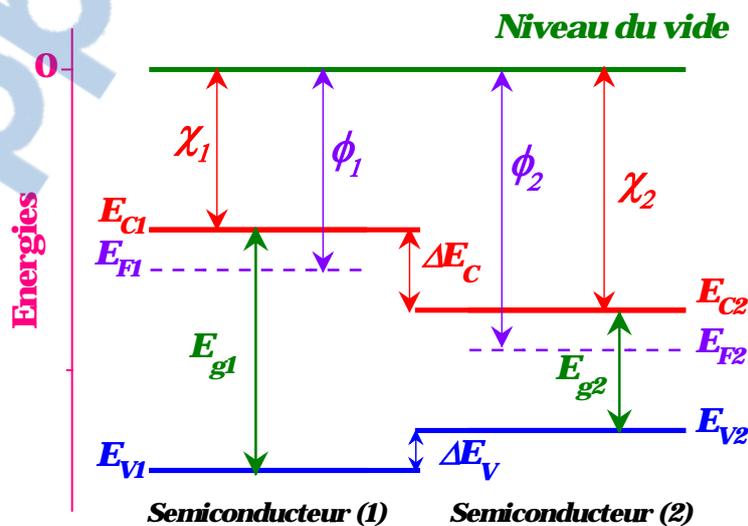


Figure III-1 : Structure de bande de deux semiconducteurs différents.

Ces discontinuités de bandes influent sur les mécanismes de transport puisqu'une barrière plus importante dans une bande que dans l'autre, apparaît et empêche l'un des porteurs à traverser la jonction de l'hétérostructure.

C'est précisément cette propriété caractéristique liée à ΔE_C et ΔE_V (offsets de bande) qui justifie le choix de l'hétérojonction pour certains dispositifs [20-21].

De plus, si les discontinuités de bandes sont importantes, le phénomène de recombinaison devient important et peut être dominant. La connaissance des discontinuités de bandes devient alors un paramètre important pour les dispositifs à hétérojonction.

Lorsque les semiconducteurs sont mis en contact, une diffusion de porteurs se produit au voisinage de la jonction en raison de la différence des niveaux de Fermi dans les semiconducteurs.

Ce mouvement de porteurs crée une charge d'espace à laquelle est associée une barrière de potentiel (la tension de diffusion V_d) qui arrête la diffusion des porteurs et définit l'état d'équilibre, caractérisé par l'alignement des niveaux de Fermi E_{F1} et E_{F2} .

Dans le cas d'une jonction pn, le potentiel de diffusion s'écrit:

$$V_d = \Delta E_g - \Delta E_C - \zeta_n + \zeta_p \quad (\text{III-4})$$

où les quantités ζ_n et ζ_p sont les potentiels chimiques dans les zones n et p.

Les hétérostructures sont classées en différents types suivant le signe des offsets de bande à l'hétérojonction abrupte de semi-conducteurs, comme illustré figure II-3. En effet, nous avons une hétérostructure de type I quand, à l'interface, les discontinuités de la bande de conduction ΔE_C et de la bande de valence ΔE_V ont des signes opposés, c'est à dire, quand la bande interdite du

semiconducteur à petit gap est englobée dans la bande interdite à grand gap (figure III-3). Ceci se traduit par le confinement des porteurs (électrons et trous) dans le matériau à petit gap.

A l'interface, la relation suivante doit être satisfaite :

$$\Delta E_g = |\Delta E_C - \Delta E_V| \quad (\text{III-5})$$

On dit que dans l'hétérojonction de type I (figure III-3), les offsets de bande pour la bande de conduction et de valence agissent comme des barrières de potentiel et confinent les électrons et les trous dans le matériau de plus petit gap.

Les interfaces de type I sont les plus fréquemment rencontrées par exemple GaAs/AlGaAs et InGaAs/InP. Une hétérostructure est dite de type II lorsque les discontinuités des bandes de conduction ΔE_C et la bande de valence ΔE_V ont le même signe (figure III-3). A l'interface la relation suivante doit être satisfaite :

$$\Delta E_g = |E_{g1} - E_{g2}| = |\Delta E_C| - |\Delta E_V| \quad (\text{III-6})$$

On dit aussi que les hétérostructures de type II sont à gap décalé. Comme exemple d'interface de type II, nous pouvons citer InAlAs/InP et Si/Ge.

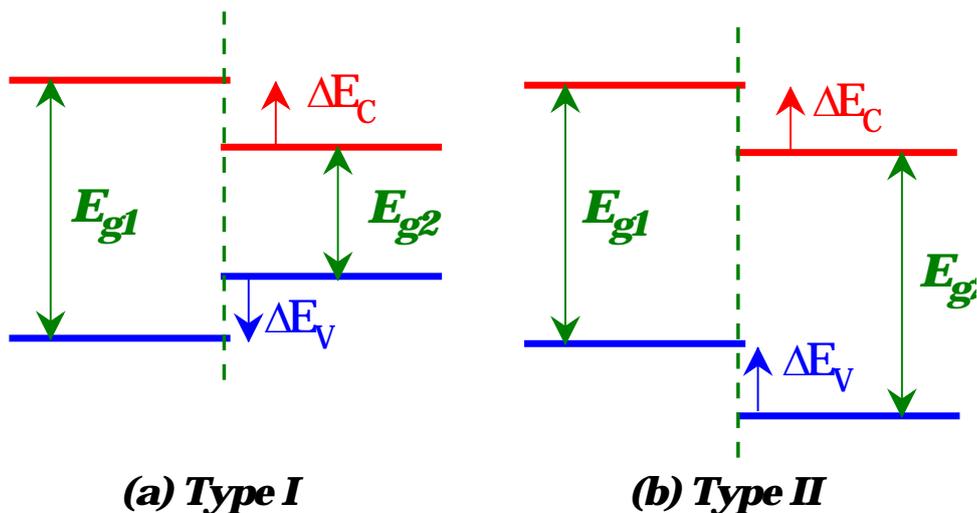


Figure III-3 : Hétérostructure de type I (a) et de type II (b)

Les discontinuités de bandes loin de l'interface sont fonction de propriétés intrinsèques des matériaux (gap et affinité électronique) et des dopages respectifs par l'intermédiaire du potentiel de contact [1].

III-4 Position du niveau de Fermi

La concentration intrinsèque n_i d'un matériau semiconducteur est reliée à la bande interdite E_g de ce matériau et à la température par la relation universelle [13]:

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} e^{-\frac{E_g}{2kT}} \quad (\text{III-16})$$

où les grandeurs physiques N_C et N_V représentent respectivement les densités effectives d'états dans la bande de conduction et de valence.

Ces deux grandeurs physiques (N_C et N_V) sont données respectivement par les équations suivantes [13] :

$$N_C = 2 \left(\frac{2\pi m_{dc}^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad \text{et} \quad N_V = 2 \left(\frac{2\pi m_{dv}^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (\text{III-17})$$

où les masses m_{dc}^* et m_{dv}^* représentent respectivement les masses effectives de densité d'états dans les bandes de conduction et de valence.

Les niveaux de Fermi des trous et des électrons se positionnent dans les zones neutres des couches semiconductrices par rapport au sommet de la bande de valence E_V ou au minimum de la bande de conduction E_C .

Dans le cadre de la statistique de Boltzmann, les équations régissant les positions des niveaux de Fermi E_{Fn} et E_{Fp} s'écrivent [5]:

$$E_{Fn} - E_C = kT \ln \left(\frac{N_d}{N_C} \right) \quad \text{et} \quad E_{Fp} - E_V = kT \ln \left(\frac{N_a}{N_V} \right) \quad (\text{III-18})$$

Pour des semiconducteurs dégénérés, la statistique de Boltzmann n'est plus valable. Dans ce cas, la statistique de Fermi-Dirac s'impose.

II-5 Modèle des affinités électroniques

C'est le modèle de référence. Il a été proposé, pour la première fois, par Anderson [3]. Ce modèle donne une description qualitative des offsets de bande et donne pour certaines interfaces semiconductrices des résultats satisfaisants.

Les grandeurs physiques relatives à un alliage ternaire $A_{1-x}B_xC$ ou quaternaire $A_{1-x}B_xC_yD_{1-y}$ peuvent être obtenues par interpolation linéaire conformément à la loi de Vegard sauf exception pour le gap où un paramètre de courbure est introduit pour corriger la loi de Vegard (interpolation parabolique).

Dans le cas du quaternaire de la forme $A_{1-x}B_xC_{1-y}D_y$, son affinité électronique $\chi_Q(x,y)$ est donnée par [5, 16]:

$$\chi_{A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}} = xy\chi_{AC} + x(1-y)\chi_{AD} + (1-x)y\chi_{BC} + (1-x)(1-y)\chi_{BD} \quad (\text{III-19})$$

Le tableau suivant regroupe les gaps et les affinités électroniques des binaires constituant le quaternaire étudié.

	E_g (eV)	χ (eV)
GaP	2.76	4.30
InP	1.35	4.38
GaAs	1.43	4.07
InAs	0.359	4.90

Tableau III-6 Gap et affinités électronique de quelques binaires [12, 16].

Pour le système accordé GaInAsP/InP, les les offsets de bande ΔE_C et ΔE_V sont données par:

$$\begin{cases} \Delta E_C = \frac{y}{2} \left(1 - \frac{y}{6}\right) \\ \Delta E_V = \frac{y}{4} (1 + y) \end{cases} \quad (\text{III-20})$$

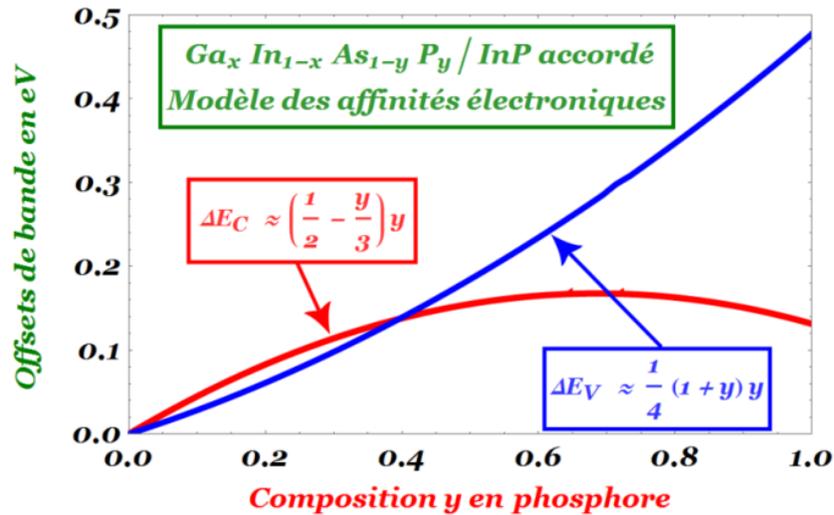


Figure III-8 Variations des offsets de bande ΔE_C et ΔE_V pour différentes compositions y

III-6 Nouveau concept pour les affinités électroniques

Ce modèle a été proposé pour la première fois dans la référence [5] et l'auteur considère que le paramètre de courbure a pour effet une diminution de la bande interdite du quaternaire ou du ternaire.

Pour notre cas, le gap du quaternaire $Ga_x In_{1-x} As_{1-y} P_y$ accordé sur InP est donnée par la formulation semi-empirique suivante :

$$E_g = 1.4 - 0.8y + 0.1y^2 \quad (III-21)$$

Compte tenu des travaux de la référence [5], nous trouvons de nouvelles expressions pour les offsets de bande de l'interface GaInAsP/InP accordé. Ces offsets de bande sont données par :

$$\begin{cases} \Delta E_C \approx \frac{9}{10} y \\ \Delta E_V \approx \frac{1}{3} y \end{cases} \quad (III-22)$$

L'équation précédente montre que $\Delta E_C / \Delta E_V$ est sensiblement égal à 1/3.

L'évolution des offsets de bande de conduction ΔE_C et de valence ΔE_V en fonction de la composition y en phosphore pour l'interface GaInAsP/InP accordé est illustrée sur la figure ci-dessous :

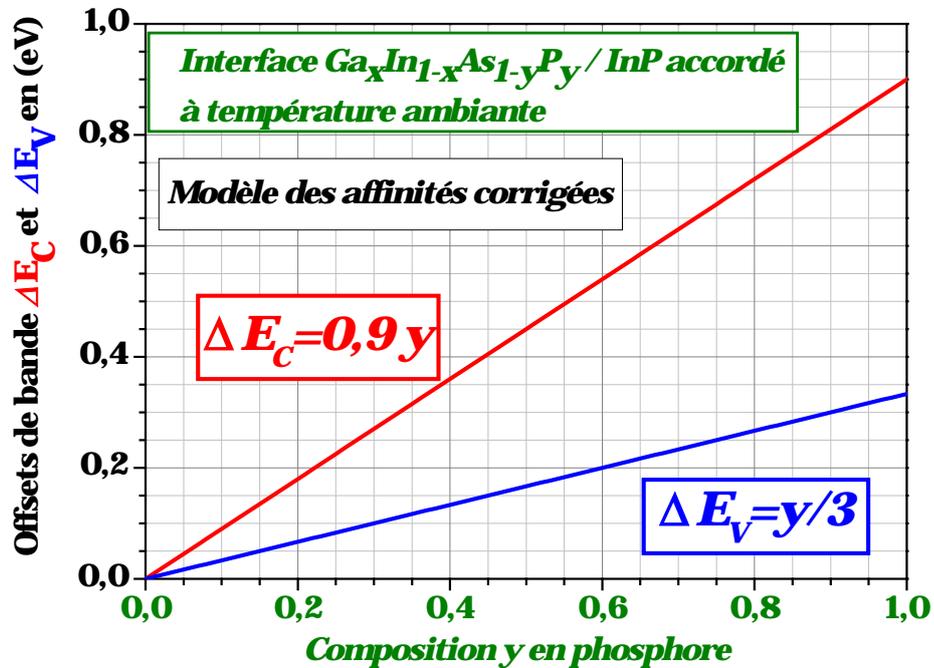


Figure III-9: Variations des offsets de bande ΔE_C et ΔE_V en fonction de la composition y

III-7 Modèle de Jaros

Ce modèle a été proposé par Jaros [6], il exprime les offsets de bande de valence via un modèle analytique simple.

Une application de ce modèle au système accordé Ga_xIn_{1-x}As_{1-y}P_y/InP accordé donne ;

$$\Delta E_V = 0.17y \quad (\text{III-23})$$

Les variations de la bande de valence pour le système étudié sont schématisées sur la figure suivante :

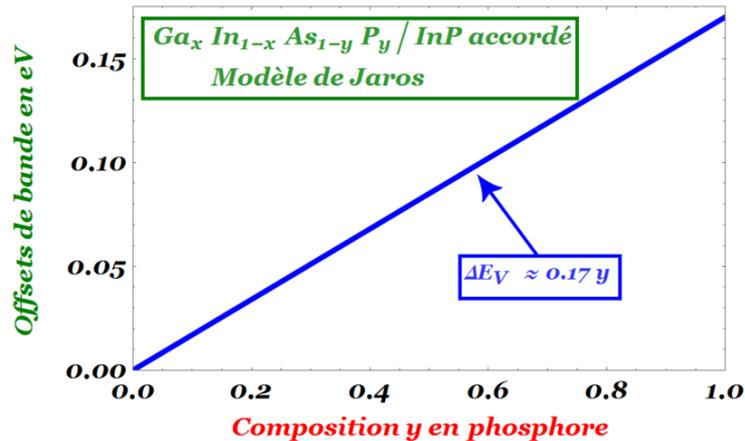


Figure III-10 : Variation de ΔE_V en fonction de la composition y à température ambiante

III-8 Modèle de Van de Walle

Ce modèle purement théorique a été proposé par Van de Walle [7-9]. Il est basé sur la notion de la densité locale (DFT).

Une application de ce modèle au système accordé $Ga_x In_{1-x} As_{1-y} P_y / InP$, donne les résultats suivants:

$$\Delta E_C = 0.95 y \quad \text{et} \quad \Delta E_V = 0.34 y \quad (\text{III-35})$$

Les offsets de bande de conduction et de valence sont représentées sur la figure suivante :

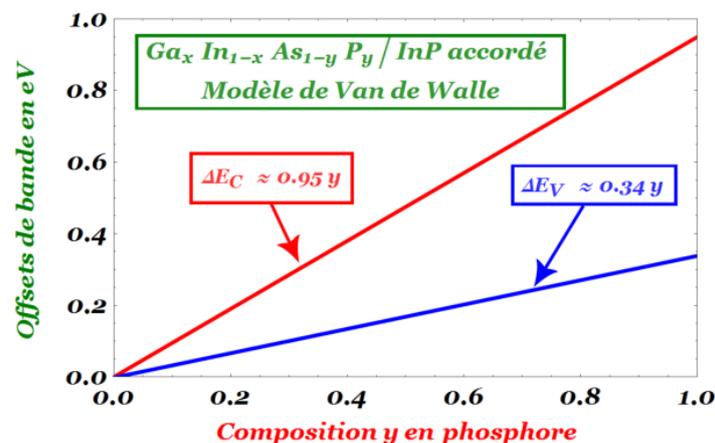


Figure III-11: Offsets de bande via le modèle de Van de Walle à température ambiante

Maintenant, nous allons résumer les différents résultats des offsets de bande pour les différents modèles cités précédemment:

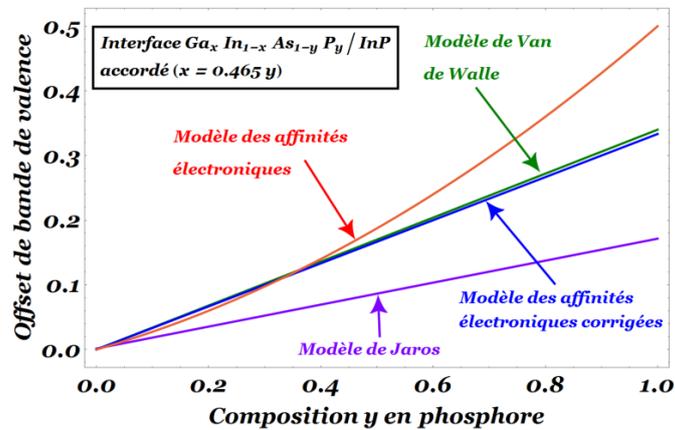


Figure III-11: Offsets de bande de valence pour différents modèles à température ambiante

III-9 Conclusion

Différents modèles théoriques [3], [5-9] nous ont permis de quantifier les offsets de bande de conduction et de valence pour le système Ga_xIn_{1-x}As_{1-y}P/InP accordé. D'autres modèles existant dans la littérature peuvent [22-25] n'ont pas été développés.

De plus, nous avons constaté que le modèle de Van de Walle et le nouveau modèle des affinités électroniques sont en bon accord avec les résultats expérimentaux de la littérature.

Références Bibliographiques du chapitre III

- [1] Mebarki, M., Boukredimi, D., Sadik, S and Lazzari, J. L.
Electrical determination of band offsets in a p-Ga_{0.77}In_{0.23}As_{0.20}Sb_{0.80}/n-GaSb type-II heterojunction.
Journal of Applied Physics, 73(5), 2360-2363 (1993).
- [2] H. Mathieu et Hervé Fanet
Physique des semiconducteurs et des Composants Electroniques
Edition Dunod, sixième édition (2009).
- [3] R. L Anderson
Experiments on Ge-GaAs heterojunctions
Solid-State Electrons, Volume 5, 341-351 (1962).
- [4] Mebarki, M.
Electrical characteristics and energy band offsets in n GaSb-p Ga_{0.83}Al_{0.17}Sb
Journal of Applied Physics 70, 5420 (1991)
- [5] Boukredimi, D.
Modélisation électrique d'hétérostructures semiconductrices à base d'antimoine.
Thèse de doctorat d'état, Université d'Oran (es-sénia) (2007).
- [6] M. Jaros
Simple analytic model for heterojunctions band-offsets.
Physical Review B. Volume 37(12), 7112 (1988).
- [7] C. G. Van de Walle et R. M. Martin
Theoretical calculations of heterojunction discontinuities in the Si/Ge system
Physical Review B, Volume 34, 5621-5634 (1986).
- [8] C. G. Van de Walle et R. M. Martin
Theoretical study of band offsets at semiconductor interfaces
Physical Review B, Volume 35(15), 8154-8165 (1987).
- [9] C. G. Van de Walle
Band lineups and deformation potentiels in the model solid theory
Physical Review B. 39(3), 1871-1883 (1989).
- [10] James, L. W., Van Dyke, J. P., Herman, F. and Chang, D. M.
Band structure and high-field transport properties of InP.
Physical Review B, 1(10), 3998 (1970).
- [11] Nahory, R. E., Pollack, M. A., Johnston Jr, W. D. and Barns, R. L.
Band gap versus composition and demonstration of Vegard's law for In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y} lattice matched to InP
Applied Physics Letters, 33(7), 659-661 (1978).

- [12] Benkoula, S.
Modélisation mathématiques de structures à homojonction et hétérojonction
Thèse de magister, Université d'Oran (es-sénia) (2012).
- [13] Simon M. Sze, S. M. and Ng, K. K.
Physics of Semiconductor Devices, 3rd Edition
Edition Wiley, New York (2006)
- [14] Varshni, Y. P.
Temperature dependence of the energy gap in semiconductors.
Physica, 34(1), 149-154 (1967).
- [15] Beaudoin, M., DeVries, A. J. G., Johnson, S. R., Laman, H. and Tiedje, T.
Optical absorption edge of semi-insulating GaAs and InP at high temperatures.
Applied Physics Letters, 70(26), 3540-3542 (1997).
- [16] Vurgaftman, I., Meyer, J. R. and Ram-Mohan, L. R.
Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys.
Journal of Applied Physics, 89(11), 5815-5875 (2001).
- [17] Denton, A. R. and Ashcroft, N. W.
Vegard's law.
Physical Review A, 43(6), 3161 (1991).
- [18] Powell, M. J. D.
A method for minimizing a sum of squares of non-linear functions without calculating derivatives.
The Computer Journal, 7(4), 303-307 (1965).
- [19] M. Krijn
Heterojunction band offsets and effective masses in III-V quaternary alloys
Semiconductor Science and Technology, 6(1), 27-31 (1991).
- [20] W. A. Harrison
Elementary theory of heterojunctions
Journal of Vacuum Science & Technology, Volume 14, 1016-1021 (1977).
- [21] W. A. Harrison
Theory of band line-ups
Journal of Vacuum Science and Technology, Volume 3, 1231-1238 (1985).
- [22] E. O. Kane
Band structure of indium antimonide
Journal of Physics and Chemistry of Solids, Volume 1, Number 249 (1957).
- [23] K. Shim et H. Rabitz
Theoretical valence band offsets of semiconductor heterojunctions
Journal of Applied Physics, Volume 80, 4543-4546 (2002).

- [24] *S.-H. Wei et A. Zunger*
Calculated natural band offsets of all II-VI and III-V semiconductors : Chemical trends and the role of cation d orbitals
Applied Physics Letters, Volume 72, 16, 2011-2013 (1998).
- [25] *W. R. Frensley et H. Kroemer*
Theory of the energy-band lineup at an abrupt semiconductor heterojunction
Physical Review B, Volume 16, 2642-2652 (1977).

Conclusion générale

Ce travail visait à développer un modèle décrivant les extensions de la zone de charge d'espace pour un profil de dopage gaussien-constant ou un profil en erfc-constant.

Cette modélisation a été développée dans le cadre de de déplétion totale. Nous avons remarqué que notre modèle est en très bon accord avec les résultats obtenus numériquement.

Nous avons apporté une correction au modèle classique afin de modéliser la caractéristique capacité tension d'homojonctions abruptes pour une polarisation quelconque. Nous avons pu constater que le modèle classique reste valable pour les polarisations inverses.

Nous avons exploité différents modèles théoriques afin de quantifier les offsets de bande de conduction et de valence du système $Ga_xIn_{1-x}As_{1-y}P/InP$ accordé.

Accurate quasi static capacitance for abrupt homojunction under forward and reverse polarization

D BOUKREDIMI* and H ALLOUCHE

Laboratoire de Physique des Couches Minces et Matériaux pour l'Electronique, Département de Physique, Faculté des Sciences, Université d'Oran, Es-sénia 31100, Oran, Algérie

MS received 17 October 2010; revised 3 July 2012

Abstract. In this work, we present a new approach to derive the capacitance–voltage characteristic for an abrupt homojunction with uniform doping (N_A in p -region and N_D in n -region) under forward and reverse polarization. Under thermal equilibrium conditions, we show that it is possible to obtain analytically the exact capacitance–voltage characteristic without any simulation for the symmetric case ($N_A = N_D$). We also propose a model of the total capacitance under forward and reverse polarization for the asymmetric case ($N_A \neq N_D$).

Keywords. Homojunction; capacitance–voltage; analytical model; mobile carriers; physical junction; metallurgical junction.

1. Introduction

The p – n junction is the basic structure in a number of semiconductor devices based on electronic and opto-electronic components like diodes, bipolar-junction transistors (BJT), solar cells and detectors. The understanding of the electrical properties and the behaviour of this structure is thus essential for the design and optimization of all these semiconductor devices (Mazhari and Mahajan 2005).

The capacitance–voltage characteristic of a homojunction has been first investigated by Shockley (1949). In this model, it is assumed that in the depletion region there are no mobile carriers (full depletion approximation). For further details, the physics of the p – n junctions are explained by Sze (1981).

Furthermore, other models have been developed taking into account the presence of mobile carriers in the depletion region. For instance, some authors (Van Halen 1988; Van Halen and Habib 1993) have proposed a numerical study that leads to a specific model for the case of any applied voltage for a specified doping profile.

Haggag and Hess (2000) have built a general model for a symmetric homojunction that has been confirmed by numerical simulation, considering some limit of the transition region. This case has been already studied formally in (Van Den Biesen 1985), but for a more general limit of the transition region. In addition, many works have been performed in order to study numerically the C – V characteristic of a homojunction taking into account the presence of free carriers in the depletion region (Laux and Hess 1999).

In this work, our aim is to contribute to the study of this characteristic for any abrupt homojunction with a uniform doping and for any polarization in presence of free carriers

(holes and electrons) in the depletion region. Hereunder, we will present a systematic study of all ranges of the applied voltage.

In our approach, we derive an analytical expression of this characteristic for any symmetric abrupt homojunction with uniform doping under reverse and forward polarization. In addition, we present a new model of this characteristic for the asymmetric case, by means of an introduction of an adapted diffusion potential (called effective diffusion potential) in the expression of C – V characteristic of symmetrical homojunction. Our approach seems to be very satisfactory in the sense that our results are in good agreement with experimental results and with various simulation works.

This work is organized as follows. In §2, we will describe briefly the Shockley's model. In §3, we will present our approach in detail. We will first give the explicit expression of C – V characteristic of symmetric homojunction, and then we deduce a new model for the asymmetric case. Finally, we will report the conclusion and perspectives.

2. Shockley's model

The classical treatment of a p – n junction transition capacitance assumes that a depletion region exists around the metallurgical junction (Schottky 1939, 1942; Shockley 1949; Sze 1981).

The capacitance–voltage characteristic of an abrupt homojunction and its normalized version are given respectively by (Sze 1981):

$$C(V_{\text{app}}) = \frac{\epsilon}{L_{D_{n,p}}} \sqrt{\frac{N_{A,D}}{N_A + N_D}} (2x)^{-1/2}, \quad (1)$$

*Author for correspondence (boukredimidjamel@yahoo.fr)

and

$$\frac{C(V_{\text{app}})}{C_0} = \sqrt{\frac{V_d}{u_T}} x^{-\frac{1}{2}}, \quad (2)$$

where

$$x = \frac{V_d - V_{\text{app}}}{u_T}, \quad (3)$$

and

$$L_{D_{n,p}} = \sqrt{\frac{\varepsilon u_T}{q N_{D,A}}}, \quad (4)$$

is the Debye extrinsic length in p -type and n -type of this structure, ε the permittivity of the semiconductor material, q the magnitude of electric charge, u_T the thermal voltage, V_d the built-in potential (diffusion potential), V_{app} an external applied voltage and C_0 the capacitance at zero bias; N_A and N_D are the acceptor and donor concentrations in the p and n regions, respectively (all donor and acceptor impurities are ionized). In this context, the built-in potential takes the form, (Pota 2004):

$$V_d = u_T \ln \left(\frac{N_A N_D}{n_i^2} \right). \quad (5)$$

A major problem within this model is the singularity which occurs when $V_{\text{app}} = V_d$ characterizing an infinite capacitance (first anomaly). This is essentially due to the fact that it is assumed that there are no free carriers in the depletion region. The neglect of mobile carriers gives rise to significant errors in the calculation of electric field, potential distributions and depletion layer thicknesses (Kennedy 1975; Mohammadi and Selvakumar 1996). In the Shockley's model, the capacitance has not been defined for $V_{\text{app}} > V_d$ (second anomaly).

3. Our approach

3.1 Equilibrium case

The equations governing the potential (or the electric field) distribution, the electron and the hole densities are given in the case of one space dimension.

The population densities of electrons and holes are governed by the Fermi–Dirac statistical law (Sze 1981). For non-degenerate semiconductors, these densities obey Boltzmann statistics approximation (Ghandi 1968), i.e.

$$n_e(x) = n_i e^{\frac{E_F - E_i}{kT}} = n_i e^{\frac{V_i - V_F}{u_T}} \propto e^{+\frac{V^e(x)}{u_T}}, \quad (6)$$

and

$$p_e(x) = n_i e^{\frac{E_i - E_F}{kT}} = n_i e^{\frac{V_F - V_i}{u_T}} \propto e^{-\frac{V^e(x)}{u_T}}, \quad (7)$$

where n_i represents the intrinsic density, $E_i = qV_i(x)$ the intrinsic energy level, $E_{Fn} = E_{Fp} = qV_i(x)$ the unique

quasi-level Fermi energy (Slotboom 1977) and $V^e(x) = V_i(x) - V_F$ the local potential.

Making use of law of mass action (Sze 1981; Mohammad Asadul Haque and Jalalur Rahman 2009; Jomaa and Macaskill 2010)

$$n_e(x) \times p_e(x) = n_i^2 \quad \forall -\infty < x < +\infty. \quad (8)$$

Noting that the charge density $\rho(x)$ vanishes at the infinities (Adirovich *et al* 1958)

$$\rho(\pm\infty) = 0, \quad (9)$$

and that the potential difference between the ohmic contacts is defining the barrier potential at the equilibrium V_b^e (or equivalently, the diffusion potential V_d)

$$V^e(+\infty) - V^e(-\infty) = V_b^e \cong V_d, \quad (10)$$

the expressions of the free carrier densities reduce to the following expressions:

$$n_e(x) = N_D^e e^{\frac{V^e(x) - V_b^e}{u_T}}, \quad (11)$$

and

$$p_e(x) = N_A^e e^{-\frac{V^e(x)}{u_T}}, \quad (12)$$

where the quantities $N_{A,D}^e$ are given by:

$$N_{A,D}^e = \frac{N_{A,D} + \sqrt{N_{A,D}^2 + 4n_i^2}}{2}. \quad (13)$$

In this case, the total potential V_b^e across this p – n structure becomes:

$$V_b^e = u_T \ln \left(\frac{N_A^e N_D^e}{n_i^2} \right) \cong V_d. \quad (14)$$

Now, we have to determine the electric field:

$$E^e(x) = -\frac{dV^e(x)}{dx}, \quad (15)$$

where the electrostatic potential satisfies the Poisson's equation:

$$\frac{dV^e(x)}{dx} = -\frac{q}{\varepsilon} [p_e(x) - n_e(x) + (-1)^\kappa N_\kappa], \quad (16)$$

where $N_\kappa = \kappa N_A + (1 - \kappa) N_D$ and where $\kappa = 0$ and 1 correspond respectively to the n -type region and the p -type region. This leads to (Nuyts and Overstraeten 1971):

$$\begin{aligned} E^e(x) dE^e(x) &= \frac{q}{\varepsilon} [p_e(x) - n_e(x) + (-1)^\kappa N_\kappa] dV^e(x). \end{aligned} \quad (17)$$

By integration and using the following specific boundary conditions, as follows:

$$E^e(\pm\infty) = 0, \quad (18)$$

$$n_e(-\infty) = N_D^e e^{-\frac{V_b^e}{u_T}}, p_e(-\infty) = N_A^e, \quad (19)$$

$$p_e(+\infty) = N_A^e e^{-\frac{V_b^e}{u_T}}, n_e(+\infty) = N_D^e, \quad (20)$$

and

$$V^e(-\infty) = 0, V^e(+\infty) = V_b^e, \quad (21)$$

we find the following expressions for the electric field in function of the potential in the two regions (n and p), respectively:

$$E_\kappa^e(x) = -\frac{u_T}{L_{D_\kappa}} \sqrt{y_1^e - 4 \frac{n_i}{N_\kappa} \sin h\left(\frac{y_1^e}{2}\right) \sin h(y_2^e)}, \quad (22)$$

where

$$y_1^e = \frac{(1-\kappa)V_b^e - (-1)^\kappa V^e(x)}{u_T}, \quad (23)$$

and

$$y_2^e = \frac{y_1^e}{2} - \text{arc sin } h\left(\frac{N_\kappa}{2n_i}\right), \quad (24)$$

with

$$L_{D_\kappa} = \sqrt{\frac{\varepsilon u_T}{q N_\kappa}}. \quad (25)$$

We note that $\sin h$ corresponds to the sinus-hyperbolic function and $\text{arc sin } h$ its inverse function.

Using the continuity of the electric field at the metallurgical junction point, i.e. $x = 0$, we can deduce the following expressions of the potential and the electric field at this point (the $n-p$ interface):

$$V^e(0) = V_0^e = \frac{N_A}{N_A + N_D} V_b^e + u_T \frac{N_A^e - N_D^e}{N_A + N_D} \left(1 - \frac{n_i^2}{N_A^e N_D^e}\right), \quad (26)$$

and

$$E^e(0) = E_0^e = -\frac{u_T}{L_{D_\kappa}} \sqrt{\frac{V_b^e - V_0^e}{u_T} - 4 \frac{n_i}{N_\kappa} \sin h\left(\frac{V_b^e - V_0^e}{2u_T}\right) \sin h\left(\frac{V_0^e}{2u_T} + \ln\left(\sqrt{\frac{N_D^e}{N_A^e}}\right)\right)}. \quad (27)$$

In this case, the electric field at the metallurgical junction point reduces to the following compact form for $V_b^e \geq 12 u_T$:

$$E^e(0) = -\frac{u_T}{L_{D_\kappa}} \times \sqrt{\frac{N_{(1-\lambda)}}{N_A + N_D} \left(\frac{V_b^e}{u_T} - 2\right) + e^{-\frac{N_{(1-\lambda)}}{N_A + N_D} \left(\frac{V_b^e}{u_T} - 2\right) - 1}}, \quad (28)$$

where $N_\lambda = \lambda N_A + (1-\lambda)N_D$, $N_{(1-\lambda)} = (1-\lambda)N_A + \lambda N_D$ and with $\lambda = 0$ corresponding to the case where $N_A \geq N_D$ and $\lambda = 1$ to the converse case.

At physical junction point, i.e. $x = x_{\text{pj}}^e$, we have (Murray 2009; Thide 2004):

$$n_e(x_{\text{pj}}^e) = p_e(x_{\text{pj}}^e). \quad (29)$$

This permits us to obtain the potential at the physical junction:

$$V_{\text{pj}}^e = V(x_{\text{pj}}^e) = \frac{V_b^e}{2} + u_T \ln\left(\sqrt{\frac{N_A^e}{N_D^e}}\right) = u_T \ln\left(\frac{N_A^e}{n_i}\right). \quad (30)$$

Then, the electric field at this point in the two cases $\lambda = 0$ and $\lambda = 1$, respectively is given by:

$$E_{\text{pj}}^e = E(x_{\text{pj}}^e) = -\frac{u_T}{L_{D_\lambda}} \sqrt{2 \ln\left(\frac{N_\lambda^e}{n_i}\right) - 2 \frac{N_\lambda^e - n_i}{N_\lambda^e + n_i}}, \quad (31)$$

where

$$L_{D_\lambda} = \sqrt{\frac{\varepsilon u_T}{q N_\lambda}}, \quad (32)$$

$$N_\lambda^e = \lambda N_A^e + (1-\lambda) N_D^e. \quad (33)$$

The total charge Q_λ^e per unit area is given by (Nuyts and Overstraeten 1971):

$$Q_\lambda^e = -\varepsilon E_{\text{pj}}^e + (-1)^\lambda q N_\lambda x_{\text{pj}}^e, \quad (34)$$

where x_{pj}^e is deduced from the expressions of the electric field and Faraday's equation (Murray 2009; Thide 2004):

$$x_{\text{pj}}^e = -\int_{V_0^e}^{V_{\text{pj}}^e} \frac{dV^e(x)}{E_\lambda^e(x)}, \quad (35)$$

where $E_\lambda^e(x)$ is the electric field in the weakly doped region, whose expression is given by (22), where κ is replaced by λ .

We note that x_{pj}^e depends only on the fact if N_A is strictly superior or inferior of N_D .

3.2 Non-equilibrium case

Now, in the non-equilibrium case, we can follow the same steps. Hereunder, the only difference by quasi-Fermi levels

for electrons and holes is due to the externally applied voltage, V_{app} (Sze 1981),

$$E_{F_n} - E_{F_p} = qV_{\text{app}}. \quad (36)$$

This implies that the law of mass action will now be rewritten (Adirovich *et al* 1958; Ghandi 1968; Sze 1981) as,

$$n_{\text{ne}}(x) \times p_{\text{ne}}(x) = n_i^2 e^{\frac{V_{\text{app}}}{u_T}}. \quad (37)$$

In order to study the capacitance–voltage characteristic for any homojunction with an uniform doping under any polarization in the presence of mobile carriers in the depletion region, we set:

$$N_i = n_i e^{\frac{V_{\text{app}}}{2u_T}}, \quad (38)$$

as a new ‘effective intrinsic concentration’ for each fixed value of the applied voltage, V_{app} .

In this framework, our mobile carrier densities read as,

$$n_{\text{ne}}(x) = N_D^{\text{ne}} e^{+\frac{V_{\text{ne}}(x) - V_b^{\text{ne}}}{u_T}}, \quad (39)$$

and

$$p_{\text{ne}}(x) = N_A^{\text{ne}} e^{-\frac{V_{\text{ne}}(x)}{u_T}}, \quad (40)$$

where

$$N_{A,D}^{\text{ne}} = \frac{N_{A,D} + \sqrt{N_{A,D}^2 + 4N_i^2}}{2}. \quad (41)$$

Now, the barrier potential becomes:

$$V_b^{\text{ne}} = u_T \ln \left(\frac{N_A^{\text{ne}} N_D^{\text{ne}}}{N_i^2} \right). \quad (42)$$

So, following this reason, we obtain exactly the same expressions as in the case of equilibrium, taking care to change $N_{A,D}^e$ by $N_{A,D}^{\text{ne}}$, V_b^e by V_b^{ne} and n_i by N_i .

Thus the electric fields in κ -region get the following form:

$$E_{\kappa}^{\text{ne}}(x) = -\frac{u_T}{L_{D_{\kappa}}} \sqrt{y_1^{\text{ne}} - 4\frac{N_i}{N_{\kappa}} \sin h \left(\frac{y_1^{\text{ne}}}{2} \right) \sin h \left(y_2^{\text{ne}} \right)}, \quad (43)$$

where

$$y_1^{\text{ne}} = \frac{(1 - \kappa) V_b^{\text{ne}} - (-1)^{\kappa} V_{\text{ne}}(x)}{u_T}, \quad (44)$$

and

$$y_2^{\text{ne}} = \frac{y_1^{\text{ne}}}{2} - \text{arc sin h} \left(\frac{N_{\kappa}}{2N_i} \right). \quad (45)$$

Hence, at the physical junction point, we have:

$$V_{\text{pj}}^{\text{ne}} = V \left(x_{\text{pj}}^{\text{ne}} \right) = \frac{V_b^{\text{ne}}}{2} + u_T \ln \left(\sqrt{\frac{N_A^{\text{ne}}}{N_D^{\text{ne}}}} \right) = u_T \ln \left(\frac{N_A^{\text{ne}}}{N_i} \right), \quad (46)$$

$$E_{\text{pj}}^{\text{ne}} = E \left(x_{\text{pj}}^{\text{ne}} \right) = -\frac{u_T}{L_{D_{\lambda}}} \sqrt{2 \ln \left(\frac{N_{\lambda}^{\text{ne}}}{N_i} \right) - 2 \frac{N_{\lambda}^{\text{ne}} - N_i}{N_{\lambda}^{\text{ne}} + N_i}}, \quad (47)$$

and

$$x_{\text{pj}}^{\text{ne}} = -\int_{V_0^{\text{ne}}}^{V_{\text{pj}}^{\text{ne}}} \frac{dV_{\text{ne}}(x)}{E_{\lambda}^{\text{ne}}(x)} = \int_{V_0^{\text{ne}}}^{V_{\text{pj}}^{\text{ne}}} f [V_{\text{app}}, V_{\text{ne}}(x)] dV_{\text{ne}}(x). \quad (48)$$

Using the continuity of the electric field at metallurgical junction point, i.e. $x = 0$, we can deduce the following expressions of the potential and the electric field at this point:

$$V^{\text{ne}}(0) = V_0^{\text{ne}} = \frac{N_A}{N_A + N_D} V_b^{\text{ne}} + u_T \frac{N_A^{\text{ne}} - N_D^{\text{ne}}}{N_A + N_D} \left(1 - \frac{N_i^2}{N_A^{\text{ne}} N_D^{\text{ne}}} \right), \quad (49)$$

and

$$E^{\text{ne}}(0) = E_0^{\text{ne}} = -\frac{u_T}{L_{D_{\kappa}}} \left[\frac{V_b^{\text{ne}} - V_0^{\text{ne}}}{u_T} - 4\frac{N_i}{N_{\kappa}} \sin h \left(\frac{V_b^{\text{ne}} - V_0^{\text{ne}}}{2u_T} \right) \times \sin h \left[\frac{V_0^{\text{ne}}}{2u_T} + \ln \left(\sqrt{\frac{N_D^{\text{ne}}}{N_A^{\text{ne}}}} \right) \right] \right]. \quad (50)$$

The total charge Q_{λ}^{ne} per unit area, for the case $N_A \geq N_D$, will be written as:

$$Q_{\lambda}^{\text{ne}} = -\varepsilon E_{\text{pj}}^{\text{ne}} + qN_D x_{\text{pj}}^{\text{ne}}. \quad (51)$$

In general, the total capacitance C per unit area is defined as follows (Jomaa and Macaskill 2010):

$$C(V_{\text{app}}) = -\frac{dQ_{\lambda}^{\text{ne}}}{dV_{\text{app}}} = \varepsilon \frac{dE_{\text{pj}}^{\text{ne}}}{dV_{\text{app}}} - qN_D \frac{dx_{\text{pj}}^{\text{ne}}}{dV_{\text{app}}}. \quad (52)$$

This equation gives us the capacitance–voltage characteristic of an abrupt homojunction with uniform doping under any polarization in the presence of free carriers in the depletion region.

Using the following relation (Smirnov 1975),

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dy} \left(\int_{z_1(y)}^{z_2(y)} f[y, z(y)] dz \right) \\ &= f[y, z_2(y)] \frac{dz_2(y)}{dy} - f[y, z_1(y)] \frac{dz_1(y)}{dy} \\ &+ \int_{z_1(y)}^{z_2(y)} \frac{\partial f[y, z(y)]}{\partial y} dz, \end{aligned} \quad (53)$$

for evaluating the last term in the previous relation, i.e.

$$\frac{dx_{pj}^{ne}}{dV_{app}} = \frac{d}{dV_{app}} \left(\int_{V_0^{ne}}^{V_{pj}^{ne}} f[V_{app}, V^{ne}(x)] dV^{ne}(x) \right), \quad (54)$$

we obtain

$$C = C_1 + C_2 + C_3 + C_4 = C_1 + C_{234}, \quad (55)$$

where

$$C_1 = \varepsilon \frac{dE_{pj}^{ne}}{dV_{app}}, \quad (56)$$

$$C_2 = qN_D f[V_{jp}, V_{app}] \frac{dV_{pj}^{ne}}{dV_{app}} = -\frac{qN_A N_D}{2E_{pj}^{ne} \sqrt{N_A^2 + 4N_i^2}}, \quad (57)$$

$$C_3 = -qN_D f[V_0, V_{app}] \frac{dV_0^{ne}}{dV_{app}} = q \frac{N_D}{N_A + N_D} \times \frac{(a + b + c + d)}{4E_0^{ne} N_i^2 \sqrt{(N_A^2 + 4N_i^2)(N_D^2 + 4N_i^2)}}, \quad (58)$$

$$C_4 = qN_D \int_{V_0^{ne}}^{V_{pj}^{ne}} \frac{\partial f[V_{app}, V^{ne}(x)]}{\partial y} dV^{ne}(x), \quad (59)$$

and with

$$C_{234} = C_2 + C_3 + C_4, \quad (60)$$

$$a = -(N_A - N_D) [N_A^2 N_D^2 + 2(N_A^2 + N_D^2) N_i^2], \quad (61)$$

$$b = [N_A(N_A - N_D) N_D^2 + 2(N_A^2 - N_A N_D - N_D^2) N_i^2 - 16N_i^4] \sqrt{N_A^2 + 4N_i^2}, \quad (62)$$

$$c = [N_D(N_A - N_D) N_A^2 + 2N_D^2 N_i^2 + 16N_i^4] \times \sqrt{N_A^2 + 4N_i^2}, \quad (63)$$

$$d = N_A N_D (N_A - N_D) \sqrt{(N_A^2 + 4N_i^2)(N_D^2 + 4N_i^2)}. \quad (64)$$

The quantities C_1 , C_2 and C_3 are easily computed, and the term C_4 can be evaluated using numerical integration (Press *et al* 1988). The case $N_D \geq N_A$ is similar.

For instance, for a symmetric p - n junction, the term C_{234} vanishes and the capacitance is given only by the term C_1 .

For a dissymmetric case, the term C_{234} will be added to the first symmetric one, C_1 .

Hence, in the symmetric case, i.e. $N_A = N_D$, the exact capacitance takes the following expression:

$$C(V_{app}) = \frac{\varepsilon}{L_{Dn}} \times \frac{\sqrt{N_D^2 + 4N_i^2} - 2N_i}{2N_i} \times \frac{1}{\sqrt{2 \ln \left(\frac{N_D + \sqrt{N_D^2 + 4N_i^2}}{2N_i} \right) - 2 \left(\frac{\sqrt{N_D^2 + 4N_i^2} - 2N_i}{N_D} \right)}}. \quad (65)$$

To deduce its expression in the equilibrium case, it is sufficient to evaluate it at $V_{app} = 0$:

$$C_0 = \frac{\varepsilon}{L_{Dn}} \times \frac{\sqrt{N_D^2 + 4n_i^2} - 2n_i}{2n_i} \times \frac{1}{\sqrt{2 \ln \left(\frac{N_D + \sqrt{N_D^2 + 4n_i^2}}{2n_i} \right) - \left(\frac{\sqrt{N_D^2 + 4n_i^2} - 2n_i}{N_D} \right)}} \cong \frac{\varepsilon}{L_{Dn} \sqrt{\frac{V_d}{u_T} - 2}}. \quad (66)$$

The expression of the normalized capacitance for the symmetric case can be rewritten as:

$$\frac{C(V_{app})}{C_0} = \frac{\sqrt{1 + 4e^{-x}} - 2e^{-\frac{x}{2}}}{\sqrt{x + 2 \ln \left(\frac{1 + \sqrt{1 + 4e^{-x}}}{2} \right) - 2 \left(\sqrt{1 + 4e^{-x}} - 2e^{-\frac{x}{2}} \right)}} \times \sqrt{\frac{V_d}{u_T} - 2}, \quad (67)$$

where x is defined by (3).

Finally, the expression of the total capacitance for a homojunction with any uniform doping and under any polarization is given by:

$$C = C_1 + C_{234}. \quad (68)$$

Since it is practically impossible to solve analytically the term C_4 and because this term is important comparatively to the other terms entering in the expression of C_{234} , we can just be able to give an approximated expression of the total capacitance for the asymmetric case. In order to solve this problem, we propose the following new model for the total capacitance:

$$C(V_{app}) = C_0 \frac{\sqrt{1 + 4e^{-x_{eff}}} - 2e^{-\frac{x_{eff}}{2}}}{\sqrt{x_{eff} + 2 \ln \left(\frac{1 + \sqrt{1 + 4e^{-x_{eff}}}}{2} \right) - 2 \left(\sqrt{1 + 4e^{-x_{eff}}} - 2e^{-\frac{x_{eff}}{2}} \right)}} \times \sqrt{\frac{V_{d,eff}}{u_T} - 2}, \quad (69)$$

where

$$x_{eff} = \frac{V_{d,eff} - V_{app}}{u_T}. \quad (70)$$

This new model requires two input parameters, viz. C_0 and $V_{d,eff}$.

The C - V characteristic presents two asymptotic behaviours.

For an applied voltage going up to $V_d - 7u_T$, the capacitance can be written as:

$$C(V_{app}) = -\frac{dQ_{\lambda}^{ne}}{dV_{app}} = \varepsilon \frac{dE_{pj}^{ne}}{dV_{app}} - qN_D \frac{dx_{pj}^{ne}}{dV_{app}}.$$

In figure 1, we give several examples of symmetric abrupt homojunction Si/Si ($\varepsilon \approx 100$ pF/m) at room temperature.

In figures 2 and 3, we treat the case of dissymmetric p - n junction (Si/Si), with $N_D = 10^{21} \text{ m}^{-3}$, $N_D = 10^{22} \text{ m}^{-3}$, respectively. In this case, we note that for important asymmetries the maximum stability at the point is defined by:

$$V_{app,max} \approx 2u_T \ln\left(\frac{N_{\lambda}}{n_i}\right) - 2.29u_T, \quad (71)$$

and

$$C_{max} \approx 0.308 \frac{\varepsilon}{L_{D_{\lambda}}}. \quad (72)$$

In figure 4, we show the contribution of a purely symmetric part C_1 of the capacitance and one of its purely dissymmetric part C_{234} . It appears that in general case, the two terms play the role of two capacitances in parallel, since $C = C_1 + C_{234}$.

We try to present some modeling of the peaks corresponding to different values of C_{max} of various symmetric abrupt homojunction. It is seen to obey the following laws:

$$V_{app,max} \cong 2u_T \ln\left(\frac{N_D}{n_i}\right) - 3.44854275690 u_T, \quad (73)$$

$$C_{max} = C(V_{app,max}) \cong 0.24332401386 \frac{\varepsilon}{L_{D_n}}, \quad (74)$$

and

$$N_i(V_{app,max}) \cong 0.17830291980 N_D. \quad (75)$$

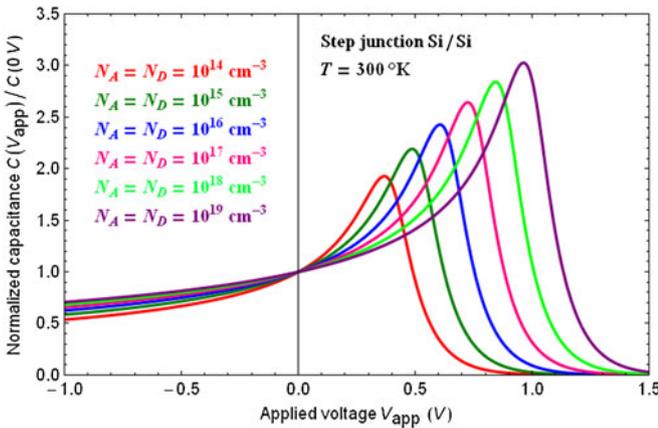


Figure 1. Normalized capacitance–voltage characteristic for symmetric p - n junction (Si/Si) at room temperature.

The analytical methods have the advantage of promoting insight into device behaviour, guiding the interpretation of numerical simulations (Barybin and Santos 2007). Equations (73)–(75) can be used as performance reference for any future numerical simulations for symmetric homojunction.

In general, the peak of $C(V_{app})$ corresponds to an applied voltage:

$$V_{app,max} \approx 2u_T \ln\left(\frac{N_{\lambda}}{n_i}\right) - (2.9 \pm 0.6) u_T. \quad (76)$$

Figure 5 shows maximum C_{max} for different asymmetries. Setting:

$$\alpha = \frac{C_{max} L_{D_{\lambda}}}{\varepsilon}, \quad \beta = \frac{N_{\lambda}}{N_{(1-\lambda)}}, \quad (77)$$

we find that α varies from the value 0.243 in the limit case of non-asymmetry (i.e. symmetrical case) to the stabilized value of 0.308 for higher asymmetries as discussed before.

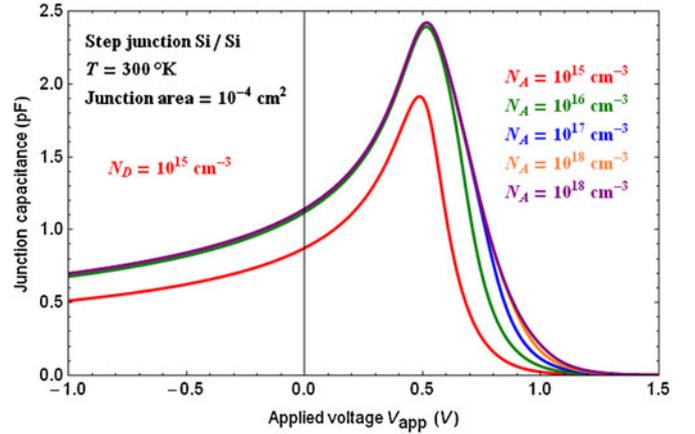


Figure 2. Capacitance–voltage characteristic of dissymmetric p - n junction ($N_D = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$).

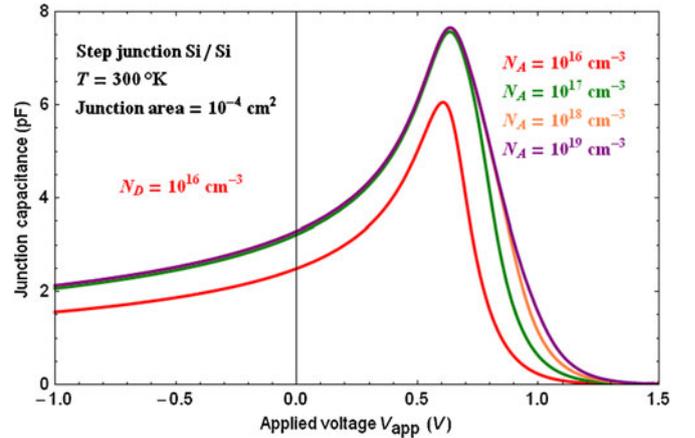


Figure 3. Capacitance–voltage characteristic of dissymmetric p - n junction ($N_D = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$).

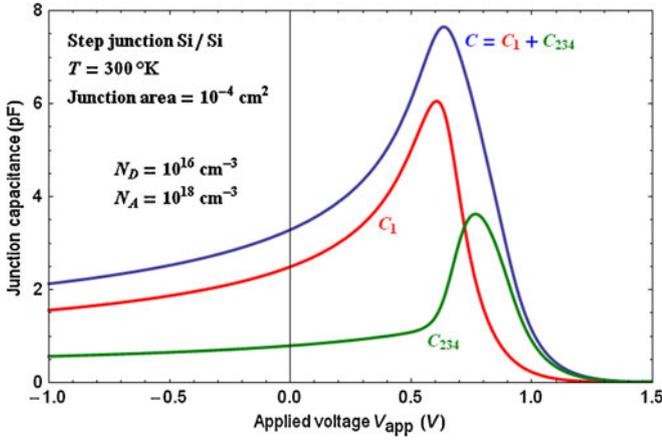


Figure 4. Decomposition of capacitance (dissymmetric $p-n$ junction) into a purely symmetric part C_1 and a purely dissymmetric part C_{234} .

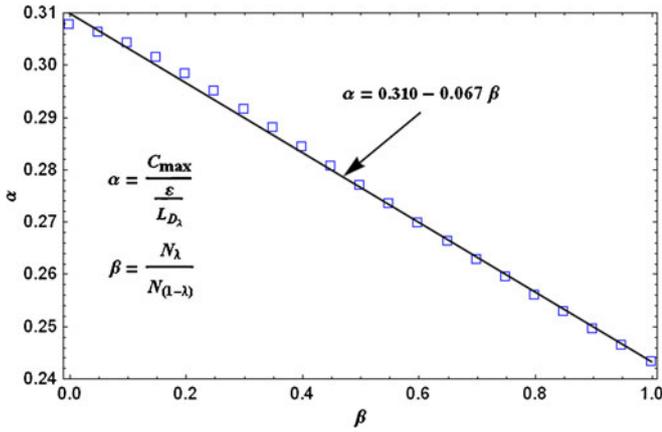


Figure 5. Variation of normalized maximum C_{\max} for different asymmetries.

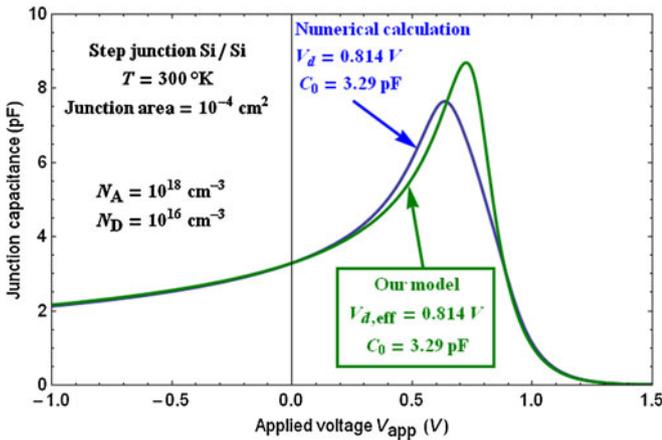


Figure 6. Comparison between our model and numerical calculations for dissymmetric $p-n$ junction (Si/Si, $T = 300^\circ\text{K}$, $N_D = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ and $N_A = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$).

In figure 6, we compare our model (see (69)) with numerical results.

4. Conclusions

Finally, we conclude that our approach appears to be well appropriate to study the $C-V$ characteristic of any abrupt homojunction with uniform doping and under any polarization in comparison with the experimental results (Serra *et al* 1993) and other works (Schmidt *et al* 2007; Kavasoglu *et al* 2008). In fact, our results are not only in good agreement with the other simulation works (Haggag and Hess 2000), but they give an exact expression of the total capacitance in function of the applied voltage in the symmetric case. In the asymmetric situation, our model seems to be accurate since the error at the maximum does not exceed 10% for higher asymmetries. We plan to treat in our future work the characteristic of heterojunctions following the same approach.

References

- Adirovich E I, Riabinkin I S and Temko K V 1958 *Sov. Phys. Tech. Phys.* **3** 49
- Barybin A A and Santos E J P 2007 *Semicond. Sci. Technol.* **22** 312
- Ghandi S K 1968 *Theory and practice of microelectronics* (New York: Wiley)
- Haggag A and Hess K 2000 *IEEE Trans. Electron. Dev.* **47** 1624
- Jomaa Z and Macaskill C 2010 *J. Comp. Phys.* **229** 3675
- Kavasoglu A S, Kavasoglu N and Oktik S 2008 *Solid State Electron.* **52** 990
- Kennedy D P 1975 *IEEE Trans. Electron. Dev.* **22** 988
- Laux S E and Hess K 1999 *IEEE Trans. Electron. Dev.* **46** 396
- Mazhari B and Mahajan A 2005 *IEEE Trans. Edu.* **48** 60
- Mohammad Asadul Haque and Jalalur Rahman 2009 *Bangladesh J. Sci. Ind. Res.* **44** 265
- Mohammadi S and Selvakumar C R 1996 *IEEE Trans. Electron. Dev.* **43** 185
- Murray H 2009 *Solid State Electron.* **53** 107
- Nuyts W and Overstraeten R 1971 *J. Appl. Phys.* **42** 5109
- Pota H R 2004 *IEEE Trans. Edu.* **47** 497
- Press W H, Flannery B P, Teukolsky S A and Vetterling W T 1988 *Numerical recipes in C* (Cambridge, UK: Cambridge University Press)
- Schmidt M, Pickenhain R and Grundmann M 2007 *Solid State Electron.* **51** 1002
- Schottky W 1939 *Zeits. Phys.* **113** 367
- Schottky W 1942 *Zeits. Phys.* **118** 539
- Serra A C *et al* 1993 *IEEE Trans. Electron. Dev.* **40** 353
- Shockley W 1949 *Bell Syst. Tech. J.* **28** 435
- Slotboom J W 1977 *Solid State Electron.* **20** 279
- Smirnov V 1975 *Cours de Mathématiques Supérieures*, Tome II, Editions MIR
- Sze S M 1981 *Physics of semiconductor devices* (New York: Wiley) 2nd ed
- Thide B 2004 *Electromagnetic field theory* (Uppsala: Upsilon Books)

Van Den Biesen J J H 1985 *Philips J. Res.* **40** 88

Van Halen P 1988 *A new semiconductor junction diode space charge layer capacitance model*, in *Proceedings of the bipolar circuits and technology meeting, Minnesota, USA*, p. 168

Van Halen P and Habib M H 1993 *A new model for the p-n junction space charge region capacitance*, in *Proceedings of the tenth biennial university/government/industry microelectronics symposium, Research Triangle Park, North Carolina, USA*, p. 126

Rapport-Gratuit.com

Résumé de thèse de doctorat de Monsieur ALLOUCHE Habib

Résumé

Dans notre travail, nous avons procédé à la modélisation de certaines grandeurs physiques relevant du domaine de la physique des semiconducteurs. Notre mémoire s'articule en trois parties distinctes.

La première partie de la thèse a été consacré à la détermination des extensions de la zone de charge d'espace d'homojonctions à profil de dopage réel de part et d'autre de la jonction métallurgique. Les profils de dopage utilisés sont respectivement le profil gaussien-constant et le profil erfc-constant. Dans ce contexte, des modèles originaux ont été proposés.

La deuxième partie relève de la modélisation de la caractéristique capacité-tension d'homojonctions abruptes à dopages uniformes dans un cadre général.

Enfin, la troisième partie a été consacrée à la modélisation des offsets de bande de conduction et de valence relatives à l'interface GaInAsP/InP via certains modèles théoriques à savoir le modèle de base d'Anderson, le modèle des affinités électroniques, le modèle de Jaros et le modèle de Van de Walle. Les résultats obtenus sont en bon accord avec d'autres travaux (expérimentaux et numériques).

Mots clés : Modélisation, Profil gaussien-constant, Profil erfc-constant, Extensions de la ZCE, Capacité de jonction, Offsets de bande, Modèle d'Anderson, Modèle des affinités électroniques, Modèle de Jaros, Modèle de Van de Walle