



HAL
open science

Sur l'analyse de l'ancrage du niveau de Fermi à la surface des composés III-V

A. Ismail, J.-M. Palau, L. Lassabatère

► **To cite this version:**

A. Ismail, J.-M. Palau, L. Lassabatère. Sur l'analyse de l'ancrage du niveau de Fermi à la surface des composés III-V. *Journal de Physique*, 1984, 45 (10), pp.1717-1723. 10.1051/jphys:0198400450100171700 . jpa-00209913

HAL Id: jpa-00209913

<https://hal.science/jpa-00209913v1>

Submitted on 4 Feb 2008

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

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

Classification
 Physics Abstracts
 73.30

Sur l'analyse de l'ancrage du niveau de Fermi à la surface des composés III-V

A. Ismail, J. M. Palau et L. Lassabatère

Laboratoire d'Etudes des Surfaces, Interfaces et Composants (*).
 U.S.T.L., place Eugène Bataillon, 34060 Montpellier Cedex, France

(Reçu le 23 février 1984, révisé le 30 mai, accepté le 18 juin 1984)

Résumé. — Ce travail est consacré à l'analyse de l'ancrage du niveau de Fermi sur les matériaux III-V, en termes de modèle d'état, de charge dans ces états et à la surface. Partant des résultats considérés comme acquis dans la bibliographie, résultats concernant GaAs et à un degré moindre InP, nous montrons qu'un modèle à deux états peut rendre compte de la majorité d'entre eux. En particulier, l'ancrage du niveau de Fermi sur GaAs s'explique bien à condition de positionner l'accepteur au-dessus du donneur. L'interaction de différents métaux conduisant expérimentalement à des ancrages du niveau de Fermi situés, dans tous les cas, dans le tiers inférieur de la bande interdite s'explique bien par ce modèle. Si l'évolution de l'ancrage à très fort recouvrement peut être, comme l'ont fait différents auteurs, interprétée par l'apparition d'un état supplémentaire, on montre que l'hypothèse d'une évolution de la position énergétique des états avec le recouvrement conduit au même résultat. Dans le cas de InP, nous montrons que l'ancrage près de la bande de conduction s'explique en prenant en compte un état donneur positionné au-dessus d'un état accepteur. Nous expliquons les différences de positions de l'ancrage caractéristiques des différents métaux par de légères variations dans le taux de création des états par le métal.

Abstract. — This paper deals with the surface Fermi level pinning on III-V compounds. Recently published experimental results show that the Fermi level pinning resulting from surface defects, metal deposition, occurs in the lower half of the gap for GaAs, in the upper half of the gap for InP. In some cases the pinning is slowly changed when the metal coverage increases. These results have been explained by a two-state model supposing acceptor and donor surface states (donors below acceptors for GaAs, acceptors below donors for InP). However, the analysis of these models and their use to explain some experimental results has to be extended. In this paper, we first analyse a two-state model, the acceptor being above the donor (density N_a) and then the acceptor (N_a) being below the donor. We show that the Fermi level is much more strongly pinned in the second case and study the modification of this pinning resulting from some variation in the (N_a/N_d) ratio. When the acceptors are below the donors, small variations in N_a/N_d are needed to strongly change the Fermi level. Experimental data concerning InP pinning can be explained in this way. Furthermore, we explain results concerning the Fermi level displacement, when increasing the coverage, by using a third surface-state, by supposing a shift in the surface state position induced by the metal. We present numerical calculations corresponding to these two typical state distributions and show how to use them to explain the experimental data concerning GaAs and InP.

1. Introduction.

Des études nombreuses effectuées ces dernières années sur les composés III-V [1-11], il ressort que, lors de l'interaction métal-semiconducteur, le niveau de Fermi E_{F_s} en surface est bloqué dans le gap à une position déjà bien établie pour un recouvrement métallique inférieur à la monocouche.

Dans la plupart des cas, cette position est sensiblement la même que celle que l'on déduit des mesures électriques sur les diodes Schottky obtenues en augmentant l'épaisseur du dépôt. Dans la majorité des cas, ce blocage du niveau de Fermi est attribué à des

défauts induits qui perturbent l'interface, défauts auxquels on associe des niveaux énergétiques. Sur les composés III-V un état accepteur et un état donneur sont ainsi pris en compte pour interpréter les résultats expérimentaux.

Pour caractériser l'ancrage, il faut alors avoir des informations quantitatives sur les différents paramètres caractérisant les états (densité, position énergétique) et analyser le processus de l'ancrage en fonction de ces paramètres.

Les résultats que nous présentons sont obtenus à partir d'un modèle simple à deux états discrets, modèle que nous utilisons pour interpréter des données expérimentales relatives à des structures très fortement étudiées à l'heure actuelle. Nous étudions les distri-

(*) ERA n° 1022.

butions de charge dans les états, la position de E_{Fs} , le rôle des positions relatives des états (états donneurs au-dessus et au-dessous de l'état accepteur) et montrons qu'on peut, à partir de cette étude, expliquer certaines évolutions de E_{Fs} en fonction du traitement de surface (température...) ou lors de l'interaction avec des gaz, des métaux [11-14]. Par exemple, l'évolution de la position du niveau de Fermi avec la quantité de métal déposé, observée sur certains matériaux, peut s'interpréter par l'apparition d'un accepteur supplémentaire situé plus bas que les deux autres états, ou par l'évolution des états en cours de dépôt.

De même, le fait que sur certains matériaux, la position de l'ancrage soit pratiquement indépendante du métal déposé alors que sur d'autres, en fonction de la nature du métal, on puisse obtenir des états de blocage différents peut s'interpréter simplement par l'analyse des résultats du calcul. On montre en effet que si les accepteurs sont au-dessous des donneurs, et dans ce cas seulement, une faible variation du rapport N_a/N_d qui pourrait être relié à la nature du métal, peut conduire à un basculement de la position de l'ancrage de E_{Fs} .

2. Conditions de l'ancrage. Modélisation.

L'expression la plus générale qui rend compte de la distribution des charges à la surface d'un semiconducteur s'écrit sous la forme

$$Q_{sc} + Q_{ss} = Q_i \quad (1)$$

Q_{sc} et Q_{ss} étant respectivement la charge dans la zone de charge d'espace et dans les états et Q_i la charge induite dans le semiconducteur par un champ extérieur, un contact avec un métal de travail de sortie différent de celui d'un semiconducteur.

En l'absence d'états de surface $Q_{ss} = 0$, toute la charge induite se trouve distribuée dans la zone de charge d'espace. On a alors $Q_{sc} = Q_i$. En présence d'états de surface et en l'absence de toute action extérieure ou contact $Q_i = 0$. Alors

$$Q_{sc} + Q_{ss} = 0. \quad (2)$$

Il y a formation d'une zone de charge d'espace due uniquement aux états. Nous allons nous placer dans cette hypothèse pour étudier les conditions de l'ancrage du niveau de Fermi à l'aide d'un modèle simple à deux états discrets schématisés figure 1. On désigne par E_a , E_d , N_a , N_d , Q_{sa} , Q_{sd} les positions énergétiques,

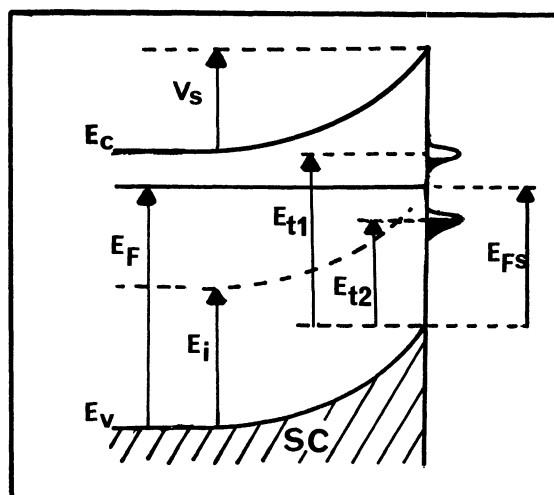


Fig. 1. — Diagramme de bande d'un modèle simple à deux états discrets, un accepteur et un donneur.

[Schematic energy band diagram for a semiconductor with two discrete surface states.]

les densités, les charges respectivement de l'état accepteur et de l'état donneur. Q_{sa} , Q_{sd} sont reliés à la position énergétique de l'état et à celle du niveau de Fermi en surface E_{Fs} par les relations

$$Q_{sa} = -qN_a f_a \quad Q_{sd} = qN_d f_d \quad (3)$$

avec

$$f_a = \frac{1}{1 + \frac{1}{g} \exp\left(\frac{E_a - E_{Fs}}{kT}\right)}$$

$$f_d = \frac{1}{1 + g \exp\left(\frac{E_{Fs} - E_d}{kT}\right)} \quad (4)$$

g facteur de dégénérescence égal à 4 pour les accepteurs et 2 pour les donneurs dans le cas d'InP et GaAs [15].

E_{Fs} est relié à la position E_F du niveau de Fermi en volume et à la hauteur de la barrière de potentiel de surface V_s par la relation

$$E_{Fs} = E_F - qV_s. \quad (5)$$

La charge Q_{sc} du semiconducteur supposé non dégénéré et de densités de porteurs n_b ou p_b est donnée par la relation (6) déduite de l'intégration de l'équation de Poisson [16] :

$$Q_{sc} = \pm \left[2 \varepsilon kT (n_b + p_b) \left(\frac{\text{ch}(u + v_s) - v_s \text{sh} u - \text{ch} u}{\text{ch} u} \right) \right]^{1/2} \quad (6)$$

où ϵ est la permittivité diélectrique du semiconducteur et u et v_s sont donnés par :

$$u = \frac{E_F - E_i}{kT} \quad v_s = \frac{qV_s}{kT}.$$

L'échange de charges entre le semiconducteur et les états de surface courbe les bandes en surface. La neutralité électrique du système se traduit par l'équation :

$$Q_{sa} + Q_{sd} + Q_{sc} = 0. \quad (7)$$

Cette relation contient plusieurs paramètres : N_a , N_d , E_a , E_d , V_s . Sa résolution pour déterminer E_{Fs} s'effectue, après qu'on ait fixé les autres paramètres, par voie numérique ou graphique comme l'illustre la figure 2 où les points d'intersection des réseaux $Q_s(V_s)$ et $Q_{sc}(V_s)$ conduisent à des valeurs très voisines de E_{Fs} . Dans la mesure où les intersections se situent sur la partie verticale des courbes $Q_{ss}(V_s)$, ce qui correspond à des conditions de dopage et de densité d'états bien définis, il en sera toujours ainsi et on aura effectivement ancrage de E_{Fs} . En particulier, si les densités d'états sont élevées ($> 10^{13} \text{ cm}^{-2}$), E_{Fs} sera bloqué sur une position pratiquement indépendante du niveau de dopage du semiconducteur. Cet ancrage est souvent plus fort lorsque des états donneurs et des états accepteurs sont simultanément présents en surface, et ce en raison de la compensation qui résulte du signe opposé des charges qu'ils portent, compensation qui est d'autant plus importante que le niveau de l'accepteur est plus bas et celui du donneur plus haut.

La figure 2 illustre ce point et montre de plus que dans certains cas, lorsqu'il existe plusieurs états de chaque type, le système peut pratiquement se réduire à deux états : l'accepteur qui a l'énergie la plus basse et le donneur qui a l'énergie la plus haute. De même, lorsque trois états donneurs et trois états accepteurs d'énergie par rapport à la bande de valence et densités respectives

$$E_{a1} = 0,6 \text{ eV}, E_{a2} = 0,7 \text{ eV} \text{ et } E_{a3} = 0,8 \text{ eV} \text{ et } E_{d1} = 0,6 \text{ eV} \text{ et } E_{d2} = 0,5 \text{ eV} \text{ et } E_{d3} = 0,4 \text{ eV} \text{ et } N_{a1} = 10^{13} \text{ cm}^{-2}, N_{a2} = 10^{14} \text{ cm}^{-2}, N_{a3} = 10^{14} \text{ cm}^{-2}, N_{d1} = 10^{13} \text{ cm}^{-2}, N_{d2} = 10^{14} \text{ cm}^{-2}, N_{d3} = 10^{14} \text{ cm}^{-2}$$

sont simultanément présents, la position de E_{Fs} est pratiquement la même que si E_{a1} et E_{d1} étaient seuls présents. Dans le cas où seuls les trois accepteurs sont présents en surface tout se passe comme si le plus profond était seul.

Ce raisonnement peut être étendu à une bande d'état de densité uniforme, de bornes E_1, E_2 . La bande peut être remplacée par un état équivalent E_i tel que :

$$E_i = kT \left[\text{Log} \left(\frac{E_2 - E_1}{kT} \right) - \text{Log} \left[\exp \left(\frac{-E_1}{kT} \right) - \exp \left(\frac{-E_2}{kT} \right) \right] \right]. \quad (8)$$

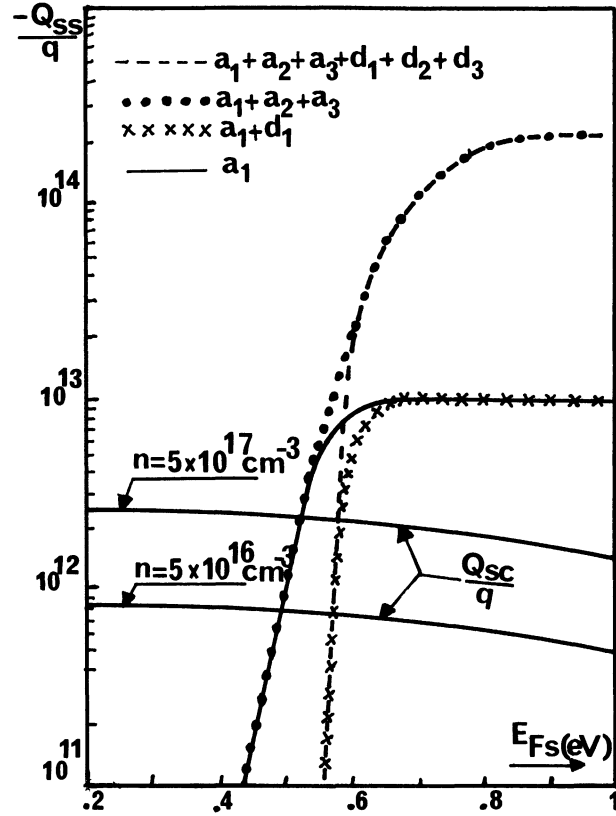


Fig. 2. — (GaAs type n.) Evolution de la densité de charge en surface et dans le semiconducteur en fonction de la position du niveau de Fermi en surface ($E_{Fs} = E_F - qV_s$). Détermination graphique de la position de E_F en surface.

[Surface Q_{ss} and bulk Q_{sc} charge densities versus the surface Fermi level position E_{Fs} for : three discrete acceptor states. Three acceptors and three donors. One acceptor and one donor. One acceptor state. Semiconductor : GaAs n type.]

Cette équivalence est illustrée figure 3, figure qui montre, par ailleurs, qu'elle n'est valable que si l'occupation des états est inférieure à 10^{-1} . Les analyses précédentes peuvent être étendues au cas d'un semiconducteur chargé (charge induite Q_i) par exemple. En effet, lorsque l'ancrage, tel que nous venons de l'étudier, est réalisé, la barrière de surface est pratiquement fixée par les états. Une faible variation de V_s autour de la position d'ancrage entraînerait une très forte variation de Q_{ss} alors que Q_{sc} resterait pratiquement inchangé. La charge Q_i serait donc pour l'essentiel emmagasinée dans les états de surface sans que V_s soit sensiblement modifié.

3. Exemples et discussion.

De nombreuses données expérimentales montrent que sur GaAs, le niveau de Fermi en surface est bloqué dans la moitié inférieure du gap ($|V_{sn}| > V_{sp}$) par des états accepteurs et donneurs. Pour InP, E_{Fs} est également bloqué par des états accepteurs et donneurs, mais cette fois le plus souvent dans la partie supérieure du gap.

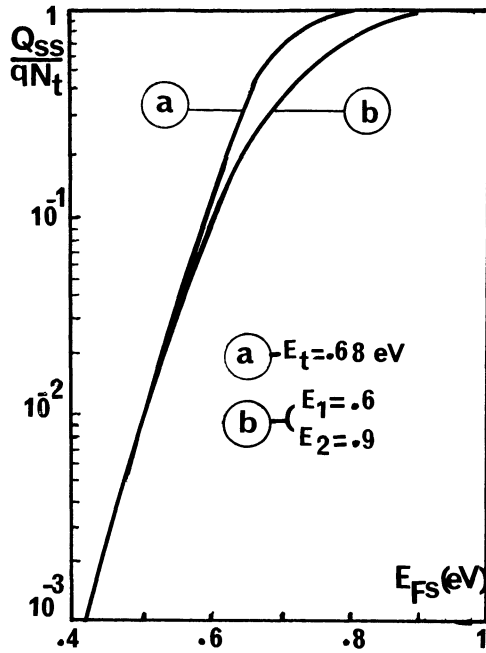


Fig. 3. — Fonction d'occupation d'une bande d'états de surface de densité uniforme et des bornes E_1, E_2 et d'un état discret équivalent E_t tel que :

$$E_t = kT \left(\log \left(\frac{E_2 - E_1}{kT} \right) - \text{Log} \left[\exp \left(\frac{-E_1}{kT} \right) - \exp \left(\frac{-E_2}{kT} \right) \right] \right).$$

[Comparison of the surface charge density variation with E_{Fs} for a discrete state (level position E_t) and a band state (Boundaries E_1, E_2 , density $N_t(E) = \text{constant}$) with

$$E_t = kT \left(\log \left(\frac{E_2 - E_1}{kT} \right) - \text{Log} \left[\exp \left(\frac{-E_1}{kT} \right) - \exp \left(\frac{-E_2}{kT} \right) \right] \right).$$

Par ailleurs, les exemples de l'évolution de E_{Fs} en fonction des paramètres N_a, N_d (E_a et E_d étant fixées) donnés par les figures 4, 5, 6, 7, 8, font nettement apparaître, en particulier lorsque les densités N_a, N_d sont élevées ($> 10^{13} \text{ cm}^{-2}$) des différences de processus de l'ancrage de E_{Fs} selon que $E_a > E_d$ ou $E_d > E_a$. CAS 1 : $E_a > E_d$. — Lorsque le donneur est au-dessous de l'accepteur, l'ancrage du niveau de Fermi en surface n'est pas très fortement énergétique (Fig. 4). L'écart entre les types n et p devient inférieur à 0,1 eV lorsque les densités atteignent 10^{14} cm^{-2} . E_{Fs} est plutôt proche de l'accepteur pour le type n, du donneur pour le type p. La position de l'ancrage est faiblement déplacée par modification du rapport entre les densités de l'accepteur et du donneur. Ces comportements sont dus au fait que lorsque le donneur est en dessous de l'accepteur, les charges que portent les deux états sont faibles par rapport à leurs densités et la quantité de charge mutuellement compensée entre le donneur et l'accepteur est également faible.

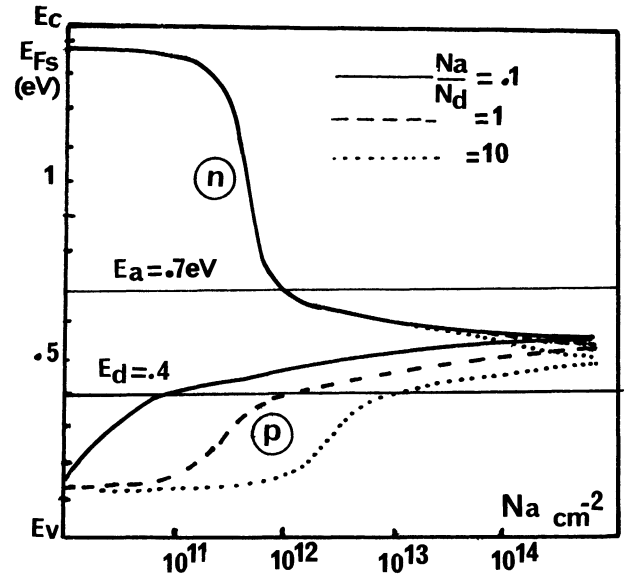


Fig. 4. — GaAs ($n = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}, p = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$). Exemple de variations du niveau de Fermi en surface sur types n et p en fonction des densités N_a et N_d des états accepteur et donneur d'énergie $E_a = 0,7$ eV et $E_d = 0,4$ par rapport à la BV.

[GaAs ($n = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ and $p = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) $E_a > E_d$. Surface Fermi level position versus surface state density N_a, N_d for acceptor and donor surface states.]

Ce résultat, comme nous l'avons montré figure 3, peut être étendu, en première approximation au cas de deux bandes d'états modérément larges.

Partant des conclusions précédentes, on peut expliquer la faible influence de la modification de la surface de GaAs sur le positionnement de E_F en surface, dans des diodes Schottky et par exemple le fait que la modification de la surstructure de la surface de GaAs (qui entraînerait une modification du rapport $\frac{N_a}{N_d}$) ait peu d'action sur la barrière de Schottky [17]. Les récentes observations expérimentales sur certains composés III-V concernant le déplacement de la position de l'ancrage de quelques centaines de meV en fonction du taux de couverture en métaux nobles [11, 12, 14] ou en fonction de la nature du métal [8, 10, 13] peuvent s'interpréter à l'aide de ce même modèle en supposant un déplacement des niveaux des états ou l'apparition d'états différents comme l'ont proposé divers auteurs. Les figures 5 et 6 illustrent ces deux hypothèses.

Dans le cas de la figure 5, nous supposons un glissement monotone des niveaux du donneur et de l'accepteur avec le recouvrement et ce, à partir d'un certain taux de couverture métallique (0,1 mC par exemple). Il en résulte une évolution de E_{Fs} vers le bas suivant le glissement des états. Dans le cas de la figure 6, nous supposons comme suggéré par Skeath *et al.* [14], qu'à partir d'un certain taux de couverture un nouveau mécanisme fait apparaître un niveau

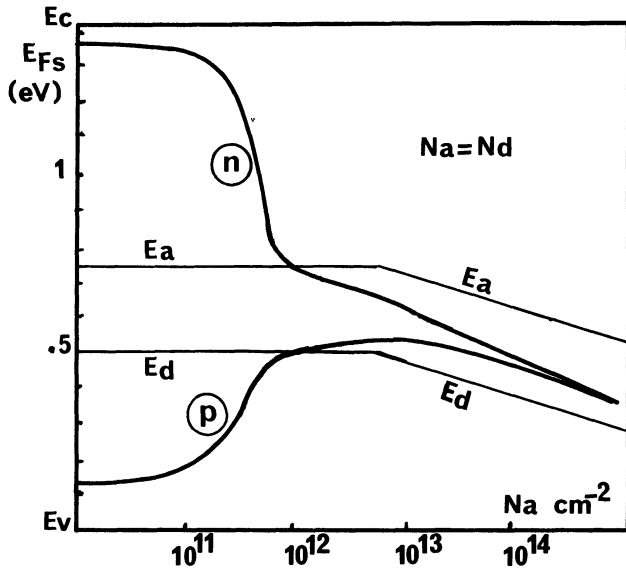


Fig. 5. — GaAs ($n = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $p = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$). Exemple de l'évolution de la position d'ancrage de E_{Fs} en fonction des densités N_a et N_d des états accepteur et donneur d'énergie E_a et E_d , $E_d < E_a < E_g/2$. Cas où les niveaux E_a et E_d évoluent pour $N_a, N_d > 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

[GaAs $n = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $p = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ $E_a > E_d$. Surface Fermi level position versus N_a , N_d . E_a and E_d decrease together when N_a and N_d become higher than 10^{13} cm^{-2} .]

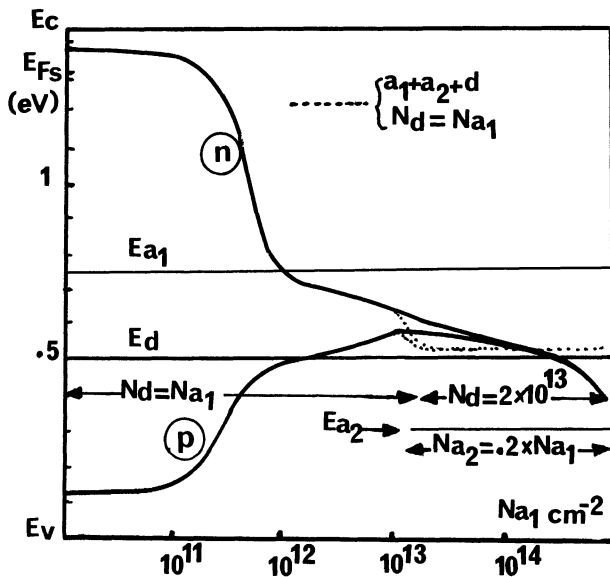


Fig. 6. — GaAs ($n = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $p = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$). Exemple de l'évolution de la position d'ancrage de E_{Fs} en fonction des densités N_a et N_d des accepteurs et donneurs. Cas où un état accepteur d'énergie E_{a2} et de densité N_{a2} apparaît pour N_{a1} et $N_d > 10^{13} \text{ cm}^{-2}$.

[Same as for figure 5 but for $N_a > 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, $N_d > 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, a new acceptor state appears (density N_{a2} , position E_{a2}) and the donor density remains constant equal to $2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$.]

accepteur supplémentaire (situé par exemple à 0,2-0,3 eV de la bande de valence). Le système est alors à trois états : un donneur et deux accepteurs ; E_{Fs} sera, comme le montre la figure 2, fortement influencé par l'état accepteur le plus bas lorsque sa densité est supérieure à Q_{sc} .

Dans l'exemple de la figure 6, nous avons supposé qu'après l'apparition du niveau E_{a2} , la densité de l'état donneur restait constante. S'il n'en était pas ainsi, E_{Fs} serait, en effet, bloqué au voisinage du niveau donneur, car le système est équivalent à un ensemble de deux états, le donneur étant, cette fois, au-dessus de l'accepteur.

CAS 2 : $E_d > E_a$. — Lorsque le donneur est au-dessus de l'accepteur (Fig. 7) on distingue deux types de

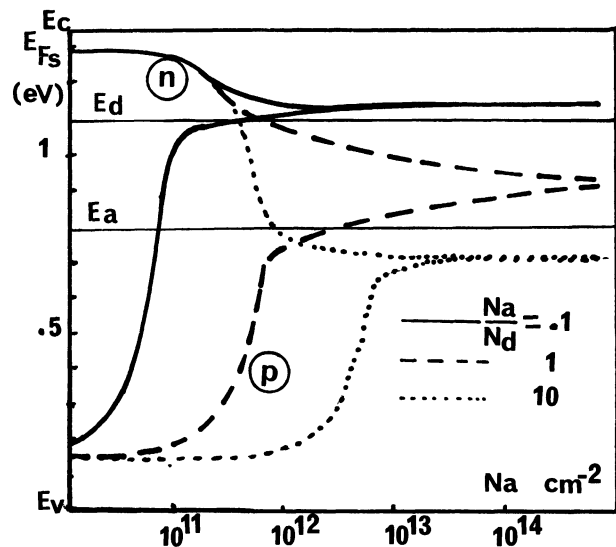


Fig. 7. — InP ($n = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $p = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$). Exemple de variations du niveau de Fermi en surface sur type n et p en fonction des densités N_a et N_d des états accepteur et donneur d'énergie $E_a = 0,8 \text{ eV}$ et $E_d = 1,1 \text{ eV}$ par rapport à la BV.

[InP ($n = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $p = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) $E_d > E_a$. Surface Fermi level position versus surface state densities N_a , N_d .]

comportement du niveau de Fermi. Si N_a et N_d sont rigoureusement égaux, l'ancrage de E_{Fs} n'est pas très fort. Il est semblable à celui obtenu pour $E_a > E_d$. Si au contraire N_a et N_d sont différents, l'ancrage est très net et $E_{Fsn} \approx E_{Fsp}$. Le niveau de Fermi se fixe au voisinage de l'état de plus forte densité. De faibles variations du rapport $\frac{N_a}{N_d}$ de part et d'autre de la valeur 1 suffisent pour faire basculer E_{Fs} d'un état à l'autre (Fig. 8). Ces comportements s'expliquent par le fait que le donneur et l'accepteur sont tous deux fortement chargés, mais leurs charges respectives se compensent presque complètement, ce qui conduit à une charge de surface résultante beaucoup plus

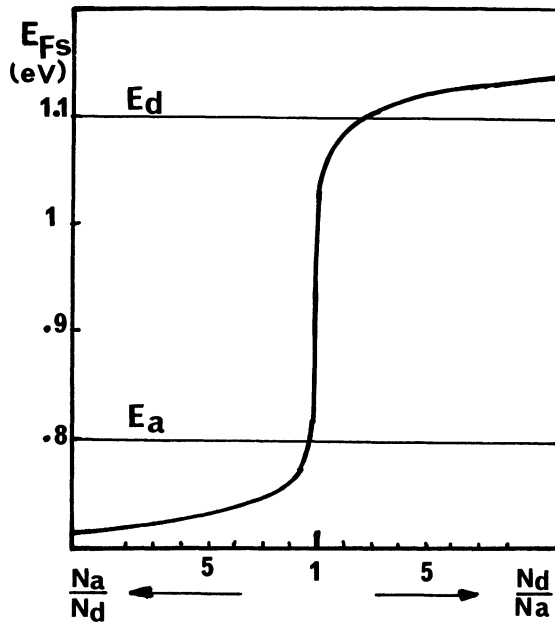


Fig. 8. — InP ($n = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $p = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$), cas où $E_d > E_a$. Position du niveau de Fermi en surface en fonction du rapport N_a/N_d lorsque les densités d'états sont assez grandes pour que $E_{Fsn} \approx E_{Fsp}$.

[InP ($n = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $p = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) $E_d > E_a$. Surface Fermi level position versus N_a/N_d when the surface state density is high enough to pin the Fermi level ($E_{Fsn} \approx E_{Fsp}$).]

faible que celle que portent les états, de l'ordre de 10^{12} cm^{-2} . Si N_a et N_d sont différents, l'état dont la densité est la plus faible est presque complètement chargé; sa charge est fortement compensée.

Ces résultats permettent d'avancer une explication à l'existence de deux positions d'ancrage à l'interface métal-InP par exemple. En effet, si on considère que l'ancrage est dû aux états situés dans le gap d'une façon semblable à celle donnée figure 5, états associés aux lacunes d'In et de P [3-10], on peut s'attendre à ce que la modification de la nature de l'adsorbant ou du métal déposé favorise l'apparition de l'un des défauts par rapport à l'autre, ce qui aurait comme conséquence une modification du rapport $\frac{N_a}{N_d}$ et donc le basculement de E_{Fs} vers l'état de plus forte densité. Il n'en serait pas nécessairement ainsi si le donneur était au-dessous de l'accepteur.

RECHERCHES DES CARACTÉRISTIQUES DES ÉTATS À PARTIR DE DONNÉES EXPÉRIMENTALES. — Dans l'hypothèse de deux états discrets et partant des barrières V_{sn} et V_{sp} expérimentalement déterminées sur les échantillons de type n et p, nous recherchons les différentes combinaisons énergie-densité possibles pour l'accepteur et le donneur. Nous avons pris comme exemple l'interface Al-GaAs. Dans ce cas E_{Fsn} et E_{Fsp} se situent à environ 0,65-0,70 eV de la bande de valence. Si E_{Fs} se bloque plus bas dans le gap, le calcul montre qu'un

simple déplacement de l'accepteur et/ou du donneur vers des niveaux plus bas, peut rendre compte de la nouvelle position de E_{Fs} (voir l'exemple de la Fig. 5).

Les résultats du calcul des paramètres E_a , N_a , E_d , N_d conduisant à cet ancrage sont présentés sous forme de deux abaques correspondant respectivement aux cas $E_a > E_d$ et $E_d > E_a$. Elles peuvent être analysées en distinguant trois zones suivant les positions relatives de E_{Fs} par rapport aux autres états.

CAS 3.1 $E_a > E_d$ (Fig. 9).

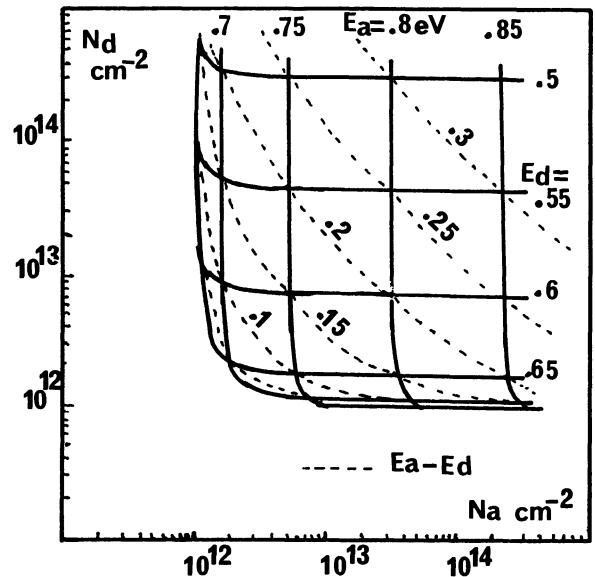


Fig. 9. — GaAs ($n = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $p = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$), cas où $E_a > E_d$. Modèle à deux états accepteur et donneur discrets. Densités (N_a , N_d) et position des états (E_a , E_d) permettant d'obtenir $V_{sn} = -0,7$ volt, $V_{sp} = 0,5$ volt.

[GaAs ($n = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $p = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) $E_a > E_d$. Two-state model. Densities N_a , N_d and surface positions E_a , E_d of two discrete acceptor and donor states needed to give $V_{sn} = -0.7 \text{ V}$, $V_{sp} = 0.5 \text{ V}$.]

Zone a : $E_d < E_a < E_{Fs}$. — Cette zone correspond à la partie extrême gauche de l'abaque. Les accepteurs de densité faible ($N_a \approx 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) et pratiquement indépendante de la position des niveaux sont presque complètement chargés. Au contraire les donneurs sont peu chargés et leur densité peut aller de $3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ à quelque 10^{14} cm^{-2} .

Zone b : $E_a > E_d > E_{Fs}$. — Ceci correspond à la partie inférieure de la courbe située en bas de l'abaque. L'occupation des états est inversée par rapport à la zone (a). $N_a > 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, N_d est faible ($N_d \leq 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) et presque indépendant de E_a et E_d .

Zone c : $E_d < E_{Fs} < E_a$. — $N_a > 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ et $N_d > 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, N_a et N_d augmentent lorsque $E_a - E_d$ augmente. Il existe donc une infinité de possibilités dont l'analyse doit être menée en s'appuyant sur d'autres données.

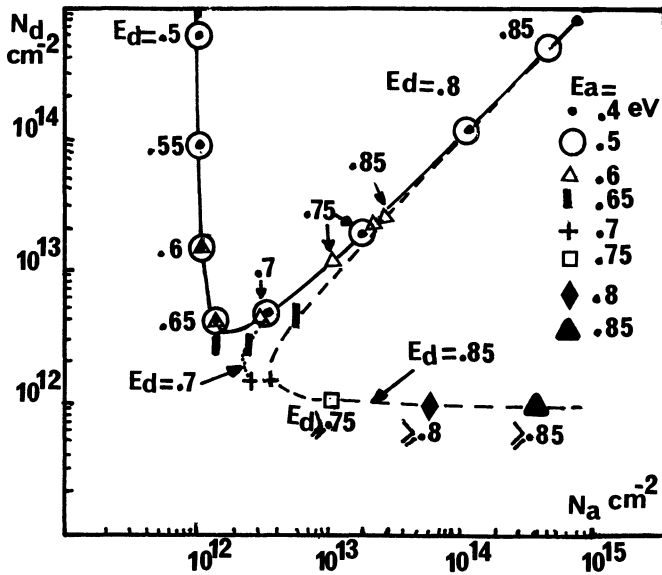


Fig. 10. — GaAs ($n = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $p = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$), cas où $E_a < E_d$. Modèle à deux états accepteur et donneur discret. Densité (N_a , N_d) et position des états (E_a , E_d) permettant d'obtenir $V_{sn} = -0,7$ volt, $V_{sp} = 0,5$ volt.

[Same as for figure 9 but with $E_d > E_a$.]

CAS 3.2 $E_d > E_a$ (Fig. 10).

Zone a : $E_a < E_d \leq E_{Fs}$. — L'occupation des états est semblable au cas (a) ci-dessus. La marge des valeurs possibles de N_a étroite est centrée autour de 10^{12} cm^{-2} et $N_d > 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$.

Zone b : $E_d > E_a \geq E_{Fs}$. — L'occupation des états est semblable au cas (b) ci-dessus $N_a > 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. La marge des valeurs possibles de N_d est étroite; N_d est de l'ordre de 10^{12} cm^{-2} .

Zone c : $E_a \leq E_{Fs} \leq E_d$. — Les deux états sont fortement chargés et leurs charges se compensent. N_a et N_d augmentent avec l'écart $E_d - E_a$.

Les abaques précédentes montrent qu'il existe théoriquement une infinité de possibilités pour obtenir les valeurs de V_{sn} et V_{sp} expérimentalement déterminées. On peut cependant les réduire et localiser une fourchette pour les densités et les positions énergétiques en s'appuyant sur des données expérimentales comme l'ordre de grandeur du recouvrement ou sur des hypothèses physiques raisonnables.

4. Conclusion.

Partant de résultats expérimentaux, nous avons en terme de modèle étudié les principales hypothèses avancées dans la bibliographie pour les expliquer.

La modélisation que nous avons faite, les résultats qu'elle nous a fournis et les analyses qui en découlent nous ont permis de préciser en termes de charge des états de surface, de position relative des états et du niveau de Fermi en surface, différents mécanismes pouvant conduire à l'ancrage du niveau de Fermi.

Nous avons ainsi, sur l'exemple de GaAs et InP, montré que les différences de comportement de ces matériaux pouvaient s'expliquer à l'aide d'un modèle simple à deux états, modèle qui peut aussi moyennant l'hypothèse du déplacement énergétique d'un état rendre compte de l'action du recouvrement. La conclusion globale est donc que si des états accepteurs situés au-dessus des donneurs sont nécessaires pour expliquer l'ancrage sur GaAs, pour InP les positions relatives doivent être inversées. Le fait que sur InP, certaines études expérimentales conduisent à des positions d'ancrage différentes s'explique alors simplement par une légère différence de densité des états. Les différences sensibles entre les ancrages induits par différents métaux s'expliquent de la même façon en admettant que le taux de création de donneurs et des accepteurs est lié à la nature du métal et peut, en fonction des conditions expérimentales de l'interaction, varier autour de la valeur moyenne 1 induisant ainsi des différences dans les rapports $\frac{N_a}{N_d}$ suffisantes pour faire basculer le niveau de Fermi.

Bibliographie

- [1] GRANT, R. W., WALDROP, J. R., KOWALCZYK, S. P., KRAUT, E. A., *J. Vac. Sci. Technol.* **19** (1981) 477.
- [2] SPICER, W. E., CHYE, P. W., GARNER, C. M., LINDAU, I., PIANETTA, P., *Surf. Sci.* **86** (1979) 763.
- [3] SPICER, W. E., EGLASH, S., LINDAU, I., SU, C. Y., SKEATH, P. R., *Thin solid films* **89** (1982) 447.
- [4] BOLMONT, D., CHEN, P., MERCIER, V., SEBENNE, C. A., *Proceeding 16th ICPS Montpellier (1982), Physica* **117B** et **118B** (1983) 816.
- [5] PALAU, J. M., TESTEMALE, E., ISMAIL, A., LASSABATÈRE, L., *J. Vac. Sci. Technol.* **21** (1982) 6.
- [6] PALAU, J. M., ISMAIL, A., TESTEMALE, E., LASSABATÈRE, L., *Proceeding 16th ICPS Montpellier (1982), Physica* **117B** et **118B** (1983) 860.
- [7] MASSIES, J. M., DEVOLDERE, P., LINH, N. T., *J. Vac. Sci. Technol.* **15** (1978) 1353.
- [8] BRILLSON, L. J., *Appl. Surf. Sci.* **11/12** (1982) 249.
- [9] TE XIN ZHA O, DANIELS, R., KATNANI, A. D., MARGARITONDO, G., *J. Vac. Sci. Technol.* **31** (1983) 610.
- [10] WILLIAMS, R. H., *J. Vac. Sci. Technol.* **18** (1981) 929.
- [11] LUDEKE, R., *J. Vac. Sci. Technol. B* **1** (3) (1983) 581.
- [12] PAN, S. H., MO, D., PETRO, W. G., LINDAU, I. et SPICER, W. E., *J. Vac. Sci. Technol. B* **1** (3) (1983) 593.
- [13] ISMAIL, A., PALAU, J. M., LASSABATÈRE, L., *Revue Phys. Appl.* **19** (1984) 205-214.
- [14] SKEATH, P., SU, C. Y., HINO, I., LINDAU, I. et SPICER, W. E., *Appl. Phys. Lett.* **39** (4) (1981) 349.
- [15] SZE, R. M., *Physic of semiconductor devices* (John Wiley and Sons, New York) 1969.
- [16] MANY, A., GOLDSTEIN, Y., GROVER, N. B., *Semiconductor surfaces* (North Holland Pub. Comp., Amsterdam) 1965.
- [17] MASSIES, J., Thèse d'Etat Paris VI (1983).