

République Algérienne Démocratique et Populaire Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique Université de Ghardaïa



Faculté des Sciences et de la Technologie Département d'Automatique et d'Electromécanique

COURS DE PHYSIQUE DES SEMICONDUCTEURS

Troisième année licence Science de la Matière

Spécialité physique énergétique

Par : Dr. SEBA Hadj Yahia

Avant-propos

Ce manuel de cours est principalement destiné aux étudiants de troisième année licence spécialité physique, du domaine sciences de la matière, il traite la base de la physique des semi-conducteurs et les composants électroniques.

L'objectif de ce cours est d'aborder la physique du semi-conducteur et du dispositif électronique afin de comprendre les bases de fonctionnement des composants microélectroniques qui constituent les briques des circuits intégrés, les détecteurs et les cellules solaires. La connaissance de principe de base, comprenant la physique du solide, la statistique et la physique du semi-conducteur, qui constituent des atouts et une nécessité au niveau licence.

L'étude du fonctionnement des différents types de composants électroniques passe par une maîtrise préalable des phénomènes physiques régissant les propriétés des électrons dans les semi-conducteurs. En outre, la physique des semi-conducteurs est une branche de la physique du solide. Une introduction de la physique du solide fait l'objet du premier chapitre.

Dans le chapitre 2, nous expliquons en détails les propriétés essentielles permettant la compréhension d'un dispositif à base de semi-conducteur.

La jonction PN, qui résulte de la juxtaposition dans un même semiconducteur de deux régions de types différents, constitue une structure de base dont l'étude est développée dans le chapitre 3. Aussi, la jonction PN constitue l'élément de base des cellules solaires. Pour cela, la compréhension de la physique des semi-conducteurs permet à l'étudiant de comprendre le fonctionnement d'une cellule solaire photovoltaïque.

Canevas officiel de la matière physique des semi-conducteurs

Semestre : 5

Unité d'enseignement : UE découverte

Matière : D513 Physique des semi-conducteurs

Crédits : 02

Coefficient : 02

Objectifs de l'enseignement : l'objectif est de comprendre les notions sur les semiconducteurs et les matériaux de ce type. Ces notions permettent à l'étudiant de comprendre la méthode de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque.

Connaissances préalables recommandées : Electricité (S1, S2)

Contenu de la matière :

Chapitre 1 : Notions de base sur la physique du solide

- 1.1. La structure cristalline
- 1.2. Etats électroniques
- 1.3. Notion de bande d'énergie
- Chapitre 2 : Semi-conducteurs
- 2.1. Densités de porteurs dans les bandes permises
- 2.2. Semi-conducteur intrinsèque (extrinsèque) à l'équilibre thermodynamique
- 2.3. Semi-conducteur hors équilibre
- 2.3 Phénomènes de Génération Recombinaison
- Chapitre 3 : Jonction PN
- 3.1. Jonction à l'équilibre thermodynamique
- 3.2. Jonction hors équilibre

Mode d'évaluation : (type d'évaluation et pondération)

Note d'examen 100%

Table des matières

Chapitre 1 : Notions de base sur la physique du solide	1
1.1. La structure cristalline	2
1.1.1. Introduction	2
1.1.2. Les familles de solides cristallins	2
1.1.3. Géométrie du réseau cristallin	3
1.1.4. Système cristallin et réseaux de Bravais	4
1.1.5. Structure cristalline des semi-conducteurs	5
1.1.6. Plan réticulaire-indices de Miller	7
1.1.7. Réseau réciproque et zone de Brillouin	8
1.2. Etats électronique	9
1.2.1. Orbitales atomiques	9
1.3. Notion de bande d'énergie	12
1.3.2. Bande d'énergie électrique et bande interdite	12
1.3.3. Statistique de remplissage des niveaux	13
1.3.4. Semi-conducteur à une température $T \neq 0$	15
Chapitre 2 : Semi-conducteurs	17
2.1. Densités de porteurs dans les bandes permises	18
2.1.1. Porteurs de charge	18
2.1.2. Concentrations des porteurs quasi-libres dans les bandes d'énergie	21
2.2. Semi-conducteur intrinsèque (extrinsèque) à l'équilibre thermodynamique	25
2.2.1. Concentration intrinsèque	26
2.2.2. Position du niveau de Fermi dans un matériau intrinsèque	27
2.2.3. Semi-conducteur extrinsèque	28
2.3. Semi-conducteur hors équilibre	40
2.3.1. Conductivité – Dérive dans un champ électrique	40

2.3.2. Diffusion des porteurs
2.3.3. Densités de courant totales dans un semi-conducteur
2.4. Phénomènes de Génération – Recombinaison
2.4.1. Génération-recombinaison thermique47
2.4.2. Génération-lumineuse
2.4.3. Niveaux pièges dans un semi-conducteur
2.4.4 Résultats de la théorie simplifiée de Schockley-Read-Hall
Chapitre 3 : Jonction PN
3.1. Constitution de la jonction PN53
3.1.1. Réalisation physique et définitions53
3.1.2. Concentrations et types de porteurs dans la jonction
3.2. Jonction à l'équilibre thermodynamique55
3.2.1. Mouvement de charges au contact
3.2.2. Tension de contact ou tension de diffusion
3.2.3. Diagramme d'énergie
3.2.4. Champ électrique et dimension de la zone de charge d'espace
3.3. Jonction hors équilibre61
3.3.1. Analyse physique du problème61
3.3.2. Polarisation directe et inverse
3.3.3. Profils de concentrations des porteurs dans les zones quasi-neutres 63
3.3.4. Capacité de la jonction

Chapitre 1 : Notions de base sur la physique du solide

1.1. La structure cristalline

1.1.1. Introduction

Il existe deux types d'état solide, l'état dans lequel l'arrangement des atomes est aléatoire et celui dans lequel les atomes sont arrangés régulièrement aux nœuds d'un réseau.

Le premier état est dit amorphe, les matériaux qui se solidifient dans un état amorphe sont généralement appelés des verres. Le deuxième état, qui nous intéresse plus particulièrement ici, est l'état cristallisé, caractérisé par le fait que les atomes sont rangés aux nœuds d'un réseau périodique.

Le résultat est un ensemble ordonné de noyaux et d'électrons liés entre eux par des forces essentiellement coulombiennes. Ces forces sont en principe connues mais leurs interactions sont tellement complexes que l'on ne peut pas les calculer en détail. En fait, nous associons les électrons des couches internes des atomes avec leur noyau, ce qui représente un ion positif et nous traitons les électrons périphériques comme des particules plus ou moins libres dans le champ des ions.

1.1.2. Les familles de solides cristallins

Nous distinguons, à partir du type de liaison qui existe entre deux atomes, essentiellement quatre familles de solides cristallisés : les cristaux ioniques, les cristaux covalents, les métaux et les cristaux moléculaires.

Les cristaux ioniques résultent de l'association d'un élément fortement électropositif et d'un élément fortement électronégatif. L'élément électropositif a généralement un seul électron périphérique (métaux alcalins : Li, Na, K, Rb, Cs), qu'il cède facilement pour devenir un ion positif avec une configuration électronique stable de couches saturées. L'élément électronégatif a généralement sept électrons périphériques (halogènes : F, Cl, Br, I), il accepte facilement un huitième électron pour devenir un ion négatif avec une configuration électronique stable. Les deux ions ainsi créés sont liés par attraction coulombienne, d'où le nom de cristaux ioniques que l'on donne aux cristaux tels que LiF, NaCl ou KBr. L'électron libéré par le métal alcalin est fortement fixé sur l'halogène de sorte qu'aucun électron n'est libéré dans le réseau du matériau, ces cristaux sont des isolants. En outre, l'énergie de liaison entre les atomes est très importante de sorte que ces cristaux sont généralement très durs.

Les cristaux covalents peuvent être construits avec des éléments de la colonne IV du tableau périodique (C, Si, Ge, Sn). Ces éléments ont quatre électrons périphériques qu'ils mettent en commun avec quatre voisins pour établir des liaisons covalentes.

Les métaux sont caractérisés par une forte conductivité électrique ; dans un métal un grand nombre d'électrons doivent être libres de se déplacer. Ces électrons sont appelés électrons de conduction. Les électrons de valences de l'atome deviennent les électrons de conduction du métal.

L'énergie de liaison d'un cristal métallique alcalin (Li,Na,..) est considérablement plus faible que celle d'un cristal d'halogénure d'alcalin (Nacl, Kcl) : la liaison due à un électron de conduction n'est pas très forte. Les distances interatomiques sont relativement élevées dans les métaux alcalins car l'énergie cinétique des électrons de conduction est plus faible pour de grandes distances interatomiques. Ceci conduit à une liaison faible.

Dans les métaux de transition, il peut y avoir des effets additionnels dus aux interactions entre les couches électroniques internes. Les éléments de transition et les métaux qui les suivent immédiatement dans la classification périodique ont des couches d incomplètes et sont caractérisés par de fortes énergies de liaisons.

Les cristaux moléculaires, comme leur nom l'indique, sont bâtis sur une unité de base qui n'est plus l'atome mais la molécule. Les forces de liaison sont grandes à l'intérieur de la molécule mais du type Van der Waals entre molécules et par conséquent faibles. Ces matériaux sont peu résistants et fondent à basse température. Aussi, le graphite est un matériau solide formé par des liaisons mixtes, il est composé de feuillets plans d'atomes de carbone (C). Dans un feuillet, les atomes de carbone sont liés par des liaisons covalentes alors qu'entre feuillets les liaisons sont de type van der Waals.

1.1.3. Géométrie du réseau cristallin

Un cristal est construit à partir d'un groupe de n particules qui constituent la cellule de base. Ce groupe est répété périodiquement, en un réseau défini par trois vecteurs de translation fondamentaux, **a**, **b**, **c**, appelés vecteurs primitifs (figure 1.1). On dit que l'on effectue une translation du réseau lorsque l'on déplace le cristal parallèlement à lui-même par un vecteur de translation du cristal.

Figure 1.1 : la maille élémentaire 3

La position de chaque cellule du cristal est définie par un vecteur du réseau T

$$T = n_1 a + n_2 b + n_3 c$$

Où n_1 , n_2 et n_3 sont des nombres entiers. L'ensemble des points définis par les vecteurs **T** pour toutes les valeurs de n_1 , n_2 , n_3 constitue le réseau. Le parallélépipède construit sur les trois vecteurs primitifs constitue la maille primitive ou *maille élémentaire*. On remplit tout l'espace en appliquant à la maille élémentaire les opérations de translation définies par les vecteurs **T**. Le volume de la maille élémentaire est défini par le produit mixte. Le symbole (x) désigne le produit vectoriel et le symbole (.) désigne le produit scalaire.

$$V = |a.(b \times c)|$$

Il existe une maille élémentaire par nœud du réseau, ce qui s'exprime en disant que la maille élémentaire contient un seul nœud. En fait, la maille élémentaire contient huit nœuds mis en commun avec huit mailles adjacentes.

1.1.4 Système cristallin et réseaux de Bravais

Selon les longueurs des trois vecteurs de base **a**, **b**, **c**, les angles entre eux et le nombre de points de réseau dans une maille élémentaire, le réseau spatial peut être divisé en sept systèmes cristallins et quatorze réseaux de Bravais. Les sept systèmes cristallins et quatorze réseaux de Bravais générés par les six paramètres a, b, c, α , β et γ , sont présentés dans le tableau 1.1 et la figure 1.2.

Réseau cristallin	Vecteurs de base et angles	Réseau de Bravais		
Triclinique	a≠b≠c, α≠β≠γ	simple		
Monoclinique	a≠b≠c, α=β=90°≠γ	simple, base centrée		
Orthorhombique	a≠b≠c, α=β=γ=90°	Simple, base centrée, centré, faces centrées		
Tétragonale	a=b≠c, α=β=γ=90°	Simple, corps centré		
Trigonale	a=b=c, α=β=γ≠90°	simple		
Hexagonale	a=b≠c, α=β, γ=120°	simple		
Cubique	a=b=c, α=β=γ	simple, centré, faces centrées		

Tableau 1.1 : les sept systèmes cristallins et les quatorze réseaux de Bravais

Les quatorze réseaux de Bravais et qui existent réellement dans la nature, sont construits en utilisant toutes les dispositions possibles des points de réseau dans chaque maille élémentaire (figure 1.1). Chacun des réseaux de Bravais est unique de tel sorte qu'il ne peut être généré par aucun des treize autres réseaux de Bravais.



Figure 1.2 : les quatorze réseaux de bravais

Ils sont plutôt générés par toute combinaison d'un réseau simple, d'un réseau centré, d'un réseau centré sur la base et d'un réseau centré sur la face. Un simple réseau de Bravais contient des points de réseau aux sommets d'un parallélépipède. Un réseau de Bravais centré sur la base a des points de réseau situés au centre des faces supérieure et inférieure ainsi qu'aux sommets de la maille élémentaire. Dans un réseau de Bravais à faces centrées, en plus des points de réseau de sommets, il a des points de réseau situés au centre des six faces. Enfin, pour le corps centré le réseau de Bravais a un point de réseau supplémentaire situé au centre du volume de la cellule unitaire.

1.1.5 Structure cristalline des semi-conducteurs

De nombreux métaux et semi-conducteurs ont une structure cristalline simple avec des degrés de symétrie élevés. Par exemple, les métaux alcalins tels que le lithium, le sodium et le

potassium ont la structure cubique à face centrée (CFC), tandis que les semi-conducteurs élémentaires et composés ont la structure diamant ou zinc-blende, wurtzite ou hexagonale compacte. La figure 1.3 montre les quatre structures cristallines les plus fréquemment observées dans un semi-conducteur. La structure en diamant représentée sur la figure 1.3a est en fait formée de deux réseaux cubiques interpénétrés à face centrée avec l'atome de sommet d'un sous-réseau CFC situé à (0, 0, 0) et l'atome de sommet d'un autre sous-réseau CFC situé à (a/4, a/4, a/4), où *a* est le paramètre de maille.



Figure 1.3 : les plus importante structure cristalline pour les semi-conducteurs : (a) diamant, (b) zinc-blende, (c) wurtzite, (d) hexagonale compacte.

Dans la structure de la maille diamant, la base primitive de deux atomes identiques situés en (0, 0, 0) et (a/4, a/4, a/4) est associé à chaque point de réseau du réseau CFC. Les semiconducteurs élémentaires tels que le silicium et le germanium appartiennent à cette structure cristalline.

La structure zinc-blende illustrée à la figure 1.3b est similaire à la structure diamant, sauf que les deux sous-réseaux CFC sont occupés alternativement par deux types d'atomes différents (par exemple, Ga et As comme dans un cristal GaAs). Les semi-conducteurs composés III-V tels que GaAs, InP et InSb ont la structure zinc-blende.

La structure en wurtzite illustrée à la figure 1.3c est formée de deux structures hexagonales compactes interpénétrées occupées alternativement par deux types d'atomes différents. Les semi-conducteurs composés II-VI tels que CdS, CdTe, ZnS et ZnSe ont ce type de structure cristalline. Les structures diamant et zinc-blende appartiennent à la phase

tétraédrique, chaque atome est entouré de quatre atomes équidistants qui sont les plus proches voisins occupant les sommets d'un tétraèdre.

La figure 1.3d montre une structure hexagonale compacte. Il convient de noter que certains des semi-conducteurs composés III-V et II-VI, y compris GaP, ZnS et CdSe, peuvent être cristallisés soit dans une structure de zinc-blende ou de wurtzite.

1.1.6 Plan réticulaire-indices de Miller

Pour définir un plan réticulaire du cristal, on utilise 3 indices déterminés de la manière suivante : soient x, y, z les coordonnées des intersections du plan à définir avec les axes soustendus par les vecteurs primitifs **a** , **b** , **c** (Fig. 1.4), soient 1/x, 1/y et 1/z leurs inverses, soient enfin h, k, l les trois entiers les plus petits possibles proportionnels à 1/x, 1/y et 1/z.



Figure 1.4 : indices de Miller

On définit le plan réticulaire par les indices (h, k, l) appelés indices de Miller. Sur la figure 1.4 par exemple, les valeurs de x, y, z sont respectivement 4, 1, 2, donc celles de 1/x, 1/y, 1/z sont 1/4, 1, 1/2 et par suite celles de h, k, l sont 1, 4, 2. Le plan représenté sur la figure est le plan (1, 4, 2).

La figure 1.5 représente les plans (100), (110) et (111). L'ensemble des plans (100), (010), (001), c'est-à-dire l'ensemble des faces du parallélépipède, s'écrit {100}. La direction perpendiculaire à un plan (h k l) s'écrit [h k l]. Le plan ($1\overline{10}$) correspond au plan qui passe par x=1, y= -1 et z=1.



Figure 1.5 : indices des principaux plans réticulaires

1.1.7 Réseau réciproque et zone de Brillouin

Le réseau réciproque prend toute son utilité dans l'étude des phénomènes de propagation électromagnétique dans le réseau cristallin ; en effet, l'analyse des réseaux depuis le début de la cristallographie s'effectue essentiellement par analyse d'un faisceau de photons diffractés. L'interaction photon-atome transforme le faisceau et aboutit à une transformée de Fourrier du faisceau de photon incident. L'image du réseau n'est plus dans ce cas une image directe, mais une image transformée. Cette nouvelle image du réseau, qui sera celle observée par les cristallographes est appelée réseau réciproque. En d'autres termes, l'image d'un réseau cristallin, donne aussi un réseau contenant des nœuds, mailles etc..., mais qui sera de type différent de celui du réseau dit direct.

De même qu'à un réseau direct linéaire de périodicité *a* correspond un réseau réciproque linéaire de périodicité *A* tel que $A.a=2\pi$, à un réseau direct à trois dimensions de vecteurs de base **a**, **b**, **c** correspond un réseau réciproque à trois dimensions de vecteurs de base **A**, **B**, **C** tels que : $A.a=2\pi$, $B.b=2\pi$, $C.c=2\pi$

Les vecteurs du réseau réciproque sont définis par les relations précédentes et de plus par les conditions : A.b=A.c=0, B.a=B.c=0, C.a=C.b=0, soit

$$A = 2\pi \frac{b \times c}{a.(b \times c)} \qquad \qquad B = 2\pi \frac{c \times a}{a.(b \times c)} \qquad \qquad C = 2\pi \frac{a \times b}{a.(b \times c)} \qquad (1-1)$$

Le vecteur de translation du réseau réciproque est donne par a relation :

$$K = hA + kB + lC \tag{1-2}$$

Avec h, k et l des nombres entiers, il en découle une importante relation entre le réseau direct et le réseau réciproque, qui est :

$$KT = 2\pi \times entier \tag{1-3}$$

Le point d'abscisse $n \frac{2\pi}{a}$ est un point de l'espace de Fourier du cristal, que l'on appelle aussi *espace réciproque*, *n* étant un nombre entier cet espace est périodique de période $2\pi/a$. Ainsi, au réseau de périodicité *a* que l'on appellera désormais réseau direct ou *réseau de Bravais*, correspond un réseau de périodicité $A = 2\pi/a$ que l'on appelle *réseau réciproque*. La zone comprise entre -a/2 et +a/2 dans le réseau direct constitue la maille élémentaire du réseau direct, la zone comprise entre $-\pi/a$ et $+\pi/a$ dans le réseau réciproque constitue la maille élémentaire du réseau réciproque, on l'appelle $1^{\text{ère}}$ zone de Brillouin. Au même titre que le réseau direct est parfaitement défini par la maille élémentaire et la périodicité, le réseau réciproque est parfaitement défini par la $1^{\text{ère}}$ zone de Brillouin et la périodicité.

Les grandeurs physiques d'un cristal sont périodiques dans l'espace direct de sorte qu'il suffit de les représenter dans la maille élémentaire pour les connaître dans tout le cristal. Il en est de même pour leurs images dans l'espace réciproque, il suffira de les représenter dans la 1 ^{ère} zone de Brillouin. Toutes les propriétés des cristaux seront donc étudiées dans cette zone puis étendues à l'ensemble du cristal.

1.2. Etats électronique

1.2.1. Orbitales atomiques

Considérons le plus simple de tous les atomes, l'atome d'hydrogène. Il est constitué d'un électron de charge -e gravitant autour d'un noyau de charge +e. L'Hamiltonien de l'électron dans son mouvement autour du noyau s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 + V(r) \tag{1-4}$$

Où $-\hbar/2m \nabla^2$ représente son énergie cinétique et V(r) son énergie potentielle dans le champ coulombien du noyau. L'opérateur ∇^2 est la somme des dérivées secondes partielles, il est aussi noté Δ et appelé Laplacien. L'équation aux valeurs propres s'écrit :

$$H \Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = E_{nlm} \Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$$
(1-5)

Les fonctions d'onde $\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ sont appelées *orbitales atomiques* par analogie avec la notion classique d'orbite. En raison de la symétrie sphérique du potentiel du noyau, ces orbitales atomiques peuvent se mettre sous la forme d'un produit d'une fonction de la distance $R_{nl}(r)$ appelée *fonction radiale* par une fonction angulaire $y_{lm}(\theta, \varphi)$ appelée *harmonique sphérique*, comme suit :

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)y_{lm}(\theta,\phi)$$
(1-6)

n est le nombre quantique principal, *l* est le nombre quantique azimutal, il représente le moment angulaire de l'électron dans son mouvement autour du noyau. *m* représente la projection du moment angulaire sur un axe choisi comme axe de quantification. Les valeurs possibles de *n* sont n=1,2,..., pour chaque valeur de *n* il existe n valeurs de *l*, l = 0,1,..., n-1, pour chaque valeur de *l* il existe 2l+1 valeurs de m, m = -l, -(l-1),..., l-1, l. Dans la terminologie courante les états correspondant aux différentes valeurs de *l* portent des noms spécifiques.

Etat s
$$l = 0$$

Etat p $l = 1$
Etat d $l = 2$
Etat f $l = 3$

On écrit les différents états électroniques sous la forme 1s ; 2s, 2p ; 3s, 3p, 3d ; ...

A chaque fonction propre $\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ correspond une valeur propre E_{nlm} . Dans le cas de l'atome isolé, en raison de la symétrie sphérique du potentiel les niveaux correspondant aux mêmes valeurs de *n* et de *l* sont tous confondus $E_{nlm} = E_{nl}$, quel que soit *m*. En outre dans le cas de l'atome d'hydrogène, en raison de la nature en 1/r du potentiel coulombien, les niveaux correspondant aux mêmes valeurs de *n* sont tous confondus, $E_{nl} = E_n$ quel que soit *l*. Si le zéro de l'énergie correspond à l'électron complètement séparé du noyau sans énergie cinétique, les niveaux d'énergie sont donnes par :

$$E_n = -R\frac{1}{n^2} \tag{1-7}$$

Où $R = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13.6 \text{ eV}$ est *la constante de Rydberg*. Les orbitales s (*l*=0) et p (*l*=1) sont représentés sur la figure 1.6.

Remarquons que les énergies sont négatives. En fait, les solutions générales de l'équation de Schrödinger d'une particule soumise à un potentiel s'annulant à l'infini (ce qui est le cas du potentiel électrique auquel est soumis l'électron avec les conditions aux limites généralement choisies) peuvent se classer en deux familles, celles correspondant aux valeurs propres négatives et appelées états lies et celles correspondant aux valeurs propres positives et appelées états de diffusion. Nous ne considérons que les états lies.



Figure 1.6 : orbitales atomique s et p

Dans le cas plus général, un atome de nombre atomique Z est constitué d'un noyau de charge +*Ze* et d'un nuage électronique de Z électrons. Les électrons de la couche externe sont appelés **électrons de valence**, les électrons des couches internes sont appelés **électrons du cœur**. Les électrons de valence jouent un rôle essentiel d'une part dans les propriétés chimiques des matériaux et d'autre part dans leurs propriétés électriques. Le potentiel que voit un électron de valence est le potentiel coulombien du noyau écranté, d'une part par les électrons du cœur et d'autre part par les autres électrons de valence. Le potentiel résultant peut encore être supposé central, c'est-à-dire à symétrie sphérique, mais il ne varie plus en 1/r comme dans le cas unique de l'atome d'hydrogène. Il en résulte que les états correspondant aux différentes valeurs de *l* ont des énergies différentes. La différence d'énergie n_p-n_s augmente à mesure que le potentiel s'éloigne d'une variation en 1/r, c'est-à-dire à mesure que le nombre d'électrons de valence augmente. En d'autres termes, sur une même ligne du tableau périodique, l'écart d'énergie n_p-n_s augmente avec le nombre atomique. Sur la ligne du Lithium par exemple, les valeurs sont les suivantes (W.A. Harrison, 1980).

	Li	Be	В	С	Ν	0	F
$E_{2p} - E_{2s}$	-	4.04	5.88	8.52	11.52	15.04	18.84

En ce qui concerne les valeurs des éléments de la colonne IV qui jouent un rôle essentiel dans les semi-conducteurs, cette différence est (en eV) :

C
$$E_{2p} - E_{2s} = 8.52 \text{eV}$$

Si $E_{2p} - E_{2s} = 7.04 \text{ eV}$
Ge $E_{2p} - E_{2s} = 8.04 \text{ eV}$
Sn $E_{2p} - E_{2s} = 6.52 \text{ eV}$
Pb $E_{2p} - E_{2s} = 6.32 \text{ eV}$

1.3. Notion de bande d'énergie

1.3.1 Bande d'énergie électrique et bande interdite

Les électrons d'un atome isolé prennent des niveaux discrets d'énergie, qui sont en fait constitués de sous niveaux ; mais lorsque deux atomes se rapproche ces sous niveaux vont se dédoubler. En étendant ce raisonnement à N atomes, cette dégénérescence fait apparaître des bandes d'énergie permises, qui peuvent s'interpénétrer et se séparer à nouveau lorsque la distance interatomique diminue (figure I.7), donnant une bande d'énergie interdite, de largeur Eg (Gap).



Figure I.7 : apparition de bandes de valence, de conduction et interdite avec la diminution de la distance interatomique pour le silicium, quand on rapproche N atomes identiques

La figure I.7 illustre le cas du silicium : la bande supérieure est appelée, bande de conduction (BC), et à 0 °K ne contient pas d'électrons contrairement à la bande de valence (BV), qui contient 4N électrons. Entre ces bandes se trouve une zone de largeur Eg interdite aux électrons et appelée bande interdite ou Gap. Pour une température différente de 0 °K un électron de la BV peut recevoir suffisamment d'énergie pour passer à la BC (un trou apparait alors dans la BV) et rendre possible la conduction électrique. Le matériau n'est plus isolant ; mais plus Eg sera grand plus le nombre de porteurs libres (électrons dans la BC ou trous dans la BV) sera faible, et plus le matériau sera isolant.

1.3.2 Statistique de remplissage des niveaux

Lorsque nous élevons la température du matériau cristallin, en particulier du semiconducteur, nous donnons statistiquement une énergie cinétique aux électrons. Certains électrons peuvent quitter leur état lié et se déplacer dans le cristal. Ces électrons peuvent alors avoir des interactions avec les atomes du réseau. Nous créons ainsi des interactions entre les électrons et les phonons engendrés par les vibrations des atomes du réseau cristallin. Pour connaître la distribution des états énergétiques des électrons, il faut analyser l'effet de ces collisions.

- Statistique de Fermi-Dirac

Nous allons rappeler la probabilité pour un électron d'occuper un niveau d'énergie E. En considérant la statistique de collision entre les électrons et les atomes, en supposant qu'à l'équilibre thermodynamique le processus direct, départ d'un électron de la bande de valence, vers la bande de conduction, est égal au processus inverse, retour de la bande de conduction vers la bande valence, et en tenant compte du fait que les électrons sont des Fermions qui obéissent au principe d'exclusion de Pauli, nous pouvons démontré que la statistique de transfert s'exprime par :

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp(\frac{E - E_f}{kT})}$$
(1-8)

Dans laquelle *E* est le niveau d'énergie considéré, E_F est le niveau particulier appelé niveau de Fermi. E_F correspond au niveau statistique moyen occupé à l'équilibre thermodynamique par l'ensemble des porteurs. K est la constante de Boltzmann et T la température. La représentation de f(E) est celle donnée par la figure 1.9. Si la température décroît, la variation autour de E_F est d'autant plus abrupte. f(E) tend très rapidement vers 1 pour les énergies inférieures à E_F et très rapidement vers 0 pour les énergies supérieures à E_F . Notons que si $E = E_F$, $f(E) = \frac{1}{2}$



Figure 1.9 : statistique de Fermi-Dirac : variations de f(E) en fonction de E pour différentes températures. A OK, la fonction est en escalier.

Nous verrons dans la suite que pour faire des calculs analytiques il est nécessaire de faire des approximations de la fonction de Fermi que nous rappelons ici.

Analysons le terme en $\frac{E-E_f}{kT}$; Si $E - E_f \gg qqkT$, exp $\left(\frac{E-E_f}{kT}\right) \gg 1$, $f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E-E_f}{kT}\right)} \approx f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-E_f}{kT}\right)}$ $\approx \exp\left(-\frac{E-E_f}{kT}\right)$ (1-9) Si $E - E_f \ll qqkT$, exp $\left(\frac{E-E_f}{kT}\right) \ll 1$, $f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E-E_f}{kT}\right)}$ $\approx 1 - \exp\left(\frac{E-E_f}{kT}\right)$ (1-10)

Nous voyons ainsi que dès que la différence énergétique est de quelques kT par rapport à E_{F} , la fonction de Fermi tend vers 0 ou vers 1 très rapidement.

En première approximation (grossière), nous dirons que tous les **niveaux d'énergie** situés **au-dessous** du niveau de Fermi sont **remplis** alors que tous ceux **au-dessus** sont **vides**. Mais attention, une variation même apparemment très faible de la quantité de porteurs libres peut complètement changer le comportement électrique du matériau considéré. Il faudra donc connaître

parfaitement le nombre absolu d'électrons dans les couches et leur variation relative pour appréhender les phénomènes de conduction.

1.3.2. Semi-conducteur à une température $T \neq 0$

L'acquisition d'énergie thermique permet à certains électrons de peupler des niveaux d'énergie supérieurs au niveau de Fermi au détriment des niveaux inférieurs. Dans le cas d'un matériau isolant à T = 0K, cette modification peut apporter une grande différence de comportement.

Considérons les deux bandes de valence et de conduction et considérons que le niveau de Fermi, E_{F} , se situe à l'intérieur de la bande interdite du matériau. La figure 1.10 montre comment un électron quittant la bande de valence peut atteindre la bande de conduction en respectant la statistique de remplissage des niveaux énergétiques. Il crée simultanément un déficit dans la bande de valence et un excès dans la bande de conduction. Les électrons situés à cette température dans la bande de conduction peuvent participer à la conduction du matériau ; dans la suite nous verrons que le déficit en électrons dans la bande de valence peut aussi contribuer à des phénomènes de conduction.



Figure 1.10 : influence de la température sur la distribution des électrons dans les bandes de valence et de conduction. Les électrons ayant quitté la bande de valence, et donc leur état lié, atteignent la bande de conduction.

Si la distance énergétique $E_g = E_C - E_V$ est grande (E_C représentant le bas de la bande de conduction et E_V le sommet de la bande de valence), la variation du nombre d'électrons dans la bande de conduction décroissant exponentiellement en fonction de la largeur de la bande interdite, le nombre des électrons dans cette bande de conduction restera négligeable et le matériau restera isolant même à la température ambiante. Par contre, si E_g est inférieur à 2,5 eV, le nombre de porteurs de charge n'est plus vraiment négligeable et le matériau devient semi-conducteur.

Chapitre 2 : Semi-conducteurs

2.1. Densités de porteurs dans les bandes permises

- 2.1.1. Porteurs de charge
 - A. Notion de trous

L'agitation thermique a créé un déficit d'électrons dans la bande de valence. En réalité, cette absence d'électrons va permettre un mécanisme de conduction au niveau de la bande de valence. En effet, un électron de cette bande va pouvoir se déplacer vers un emplacement libéré par un électron voisin qui est parti vers la bande de conduction. Nous pouvons aussi dire que l'électron qui est parti vers la bande de conduction a laissé une vacance ou lacune d'électron derrière lui, cette lacune pouvant être occupée par un électron de valence voisin, situé donc dans la même bande d'énergie. Cet électron de la bande de valence venant occupé la lacune a lui-même laissé derrière lui une lacune en faisant disparaître la première. Un nouvel électron de valence peut venir occuper cette nouvelle lacune et ainsi de suite. La figure 2.1 donne une idée du mécanisme mis en jeu. On retrouve un mécanisme similaire à celui des pièces d'un jeu de taquin ou « pousse-pousse ». On peut noter que si les électrons se déplacent de la droite vers la gauche, les **lacunes se déplacent** de la gauche vers la droite, c'est-à-dire dans le **sens inverse**.



déplacement global de la lacune

Figure 2.1 : représentation symbolique du mécanisme de déplacement des électrons dans la bande de valence. C'est en pratique un déplacement de lacunes d'électrons. Le premier électron a laissé sa place qui est prise par le second.

En faisant le bilan, cela revient à avoir déplacé la lacune d'électron. L'absence d'électron dans la bande de valence va s'appeler un trou et le phénomène s'appeler conduction par trous. En effet, sous l'action d'un champ électrique extérieur, l'électron va se déplacer dans le sens inverse du champ électrique. Ainsi, dans la bande de conduction, les électrons « remontent » le champ électrique. Dans la bande de valence, le matériau étant globalement neutre, l'absence d'un électron confère à la zone de départ (environnement de la lacune) une charge équivalente positive qui provient de la non-compensation de la charge du noyau due aux protons.

Sous l'action du champ électrique, les électrons liés vont avoir tendance à se déplacer dans le sens de la remontée du champ électrique, en laissant derrière eux une charge positive correspondant à la lacune. Ainsi, les lacunes vont se déplacer dans le sens du champ et correspondent donc au déplacement d'une charge positive dans le même sens que le champ électrique.

En conclusion, la conduction par champ électrique dans le matériau pourra se faire à deux niveaux :

- pour les électrons de la bande de conduction qui remontent le champ électrique appliqué,

- par les trous de la bande de valence qui se déplacent dans le même sens que le champ électrique.

Notons que du fait que les charges équivalentes sont de signe opposé, les courants équivalents résultants seront dans le même sens en s'ajoutant. La figure 2.2 décrit très simplement ce phénomène.



Figure 2.2 : représentation symbolique du mécanisme de conduction dans les bandes de valence et de conduction. Les densités de courant résultantes sont dans le même sens.

B. Masse effective des porteurs de charge

Les électrons ou les trous qui participent à la conduction doivent se déplacer dans le matériau. Intuitivement, le déplacement dans le matériau ne pourra se faire de la même façon que dans le vide en raison de l'interaction des porteurs avec les différents atomes constituant le réseau cristallin. Il apparaît aussi intuitif que suivant les directions de déplacement à l'intérieur du cristal les interactions seront différentes (pas la même périodicité des atomes par exemple) et donc que le comportement électrique sera différent. Si nous analysons le diagramme d'énergie dans l'espace des phases (vecteurs d'onde ou réseau réciproque). De façon habituelle, à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger, les variables relatives aux vecteurs d'onde s'expriment par :

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \longrightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$
 (2-1)

En considérant *m* constante $\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = \frac{\hbar^2}{m}$ *et* la masse *m* peut s'exprimer par :

$$m = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}}$$
(2-2)

Si nous analysons le bas de la bande de conduction, la concavité est orientée vers le haut, c'est-à-dire que le terme $\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$ est positif. Ainsi, *m* est positif et dépend du rayon de courbure de la courbe E(k) au point considéré. Suivant l'axe cristallographique considéré, la forme de la courbe est différente, la courbure aussi et donc *m* pourra varier. La figure 2.3 donne un exemple de diagramme de phase pour le silicium. Les courbures peuvent être différentes et les masses effectives associées aussi. Si on analyse le sommet de la bande de valence, le terme $\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$ est négatif et la masse effective calculée de l'électron est alors négative. En réalité, il faut corriger ce propos en se rappelant le principe fondamental de la dynamique : $F_{ext}=q\zeta=m\gamma$. Changer le signe de *m* revient tout simplement à changer le signe de la charge électrique ; autrement dit, le déplacement d'un électron au sommet de la bande de valence, correspond au déplacement d'une charge positive.



Figure 2.3 : représentation schématique du diagramme des phases pour le silicium. Nous pouvons remarquer que suivant les orientations cristallographiques, les concavités sont différentes et donc les masses effectives. Dans le cas du silicium, le gap, E_g est indirect, c'est-àdire que le bas de la bande de conduction et le sommet de la bande de valence ne coïncident pas (*d'après Chelikowski and Cohen*).

Dans le silicium, pour un déplacement des charges électrons et trous dans la direction <111>, la masse de l'électron au repos étant m_e , les masses effectives sont les suivantes :

- électrons : $m_n^* = 0,9 m_e$
- trous : $m_{p}^{*} = 0,5 m_{e}$

2.1.2. Concentrations des porteurs quasi-libres dans les bandes d'énergie.

Dans le cas de l'approximation parabolique des courbes E(k) au voisinage des extrema, c'est-à-dire au minimum de la bande de conduction et au maximum de la bande de valence, les densités d'états énergétiques (densité d'électrons ou de trous), les densités d'états par unité d'énergie, N_C et N_V , sont données par la dérivée de $\frac{dN}{dE}$, soit :

BC
$$N_C(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_C^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} (E - E_C)^{1/2}$$
 (2-3)

$$BV \qquad N_V(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_V^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} (E_V - E)^{1/2}$$
(2-4)

Pour les électrons

et

$$N = \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \pi \left(\frac{2m_c^*}{\hbar^2} (E - E_C) \right)^{3/2}$$
(2-5)

pour les trous
$$N = \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \pi \left(\frac{2m_V^*}{\hbar^2} (E_V - E) \right)^{3/2}$$
(2-6)

en se rappelant que nous avons fait un changement d'origine pour les énergies, E_c pour la bande de conduction et E_v pour la bande de valence, et que le nombre total de places disponibles pour les électrons dans les bandes tient compte du fait que sur un même niveau d'énergie on peut placer deux électrons de spin différents.

Ces densités d'états énergétiques correspondent au nombre total de places disponibles dans chacune des bandes par unité de volume et par niveau d'énergie. Pour connaître le nombre effectif de porteurs qui occuperont les bandes, il faut tenir compte de la probabilité d'occupation de ces niveaux par les porteurs.

A. Cas de la bande de conduction

Ainsi, pour la bande de conduction, nous pouvons calculer la concentration en électrons (nombre d'électrons par unité de volume exprimé en général en cm⁻³) ;

$$n = \int_{E_C}^{\infty} N_C(E) . f(E) . dE$$

Où f(E) est la fonction de distribution de Fermi.

$$n = \int_{E_C}^{\infty} \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_c^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} (E - E_c)^{1/2} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} dE$$

Comme dans l'intégration, $E > E_C$ et qu'en général $E_V < E_F < E_C$, on peut simplifier f(E) sous la forme :

$$f(E) = \frac{1}{1 + exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} \approx \frac{1}{exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} \approx exp\left(-\frac{E - E_F}{kT}\right)$$
$$f(E) = exp\left(-\frac{E - E_C}{kT}\right) \cdot exp\left(-\frac{E_C - E_F}{kT}\right)$$

Ce qui donne pour *n* :

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_C^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right) \int_{E_C}^{\infty} (E - E_C)^{1/2} exp\left(-\frac{E - E_C}{kT}\right) . dE$$
$$n = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_C^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right) \int_{E_C}^{\infty} (E - E_C)^{1/2} exp\left(-\frac{E - E_C}{kT}\right) . d(E - E_C)$$

Remarque : sans la simplification de f(E), la résolution aboutit sur des fonctions elliptiques de Fermi qui ne sont pas intégrables analytiquement et qui sont tabulées. La démonstration est alors beaucoup plus complexe. C'est ce qui se passera quand les simplifications ne seront plus acceptables, par exemple lorsque E_F devient égal ou supérieur à E_C .

En posant $x = \frac{E - E_c}{kT}$ avec x = 0 pour $E = E_c$, l'équation ci-dessus devient :

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_c^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right) \cdot (kT)^{3/2} \int_0^\infty x^{1/2} \exp(-x) \, dx$$

L'intégrale peut aussi s'écrire :

$$I = \int_0^\infty u . \exp(-u^2) . 2u . du = \int_0^\infty 2u^2 . \exp(-u^2) . du$$

On peut remarquer que cette dernière intégrale est aussi le résultat de l'intégration par partie de :

$$I = \int_0^\infty \exp(-u^2) \, du = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

En remplaçant ce résultat dans l'expression de n on obtient :

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_c^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right) \cdot (kT)^{3/2} \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$
$$n = 2\left(\frac{kTm_c^*}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right)$$

Expression que l'on note aussi sous la forme :

$$n = N_C \cdot \exp(-\frac{E_C - E_F}{kT})$$
(2-7)

Avec N_c correspondant au nombre total de place par unité de volume effectivement occupées par les électrons au niveau d'énergie équivalent E_c . N_c est appelé densité d'états électroniques dans la bande de conduction et s'exprime donc par :

$$N_{C} = 2 \left(\frac{kTm_{C}^{*}}{2\pi\hbar^{2}}\right)^{3/2}$$
(2-8)

B. Cas de la bande de valence

Nous allons nous intéresser au nombre de trous dans cette bande d'énergie, puisque nous avons vu que les porteurs de charges utiles pour la conduction étaient les trous dans cette bande. Or les trous correspondent, comme nous l'avons vu, à une absence d'électrons. Nous allons donc considérer la probabilité de non-occupation d'un état énergétique par un électron pour déterminer la probabilité de présence d'un trou.

La probabilité de non-occupation correspond au complément à 1 de la probabilité d'occupation. Ainsi, nous pouvons exprimer la densité de trous dans le matériau, *p*, par :

$$p = \int_{-\infty}^{E_V} N_V(E) \cdot (1 - f(E)) \cdot dE$$
$$p = \int_{-\infty}^{E_V} \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_V^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} (E_V - E)^{1/2} \left(1 - \frac{1}{1 + \exp(\frac{E - E_F}{kT})}\right) dE$$

Comme dans l'intégration, $E < E_V$ et qu'en général $E_V < E_F < E_C$, on peut simplifier f(E) sous la forme :

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp(\frac{E - E_F}{kT})} \approx 1 - \exp(\frac{E - E_F}{kT})$$

et donc

$$1 - f(E) \approx \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) = \exp\left(-\frac{E_V - E}{kT}\right)\exp\left(-\frac{E_F - E_V}{kT}\right)$$

En remplaçant 1-f(E) par son expression ainsi que NV(E) nous obtenons :

$$p = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_V^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{kT}\right) \int_{-\infty}^{E_V} (E_V - E)^{1/2} \exp\left(-\frac{E_V - E}{kT}\right) dE$$

En menant le calcul de la même façon que pour *n*, nous déduisons l'expression de *p*, après le changement de variable : $x = -\frac{E_V - E}{kT}$

$$p = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_V^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{kT}\right) (kT)^{3/2} \int_0^\infty x^{1/2} \exp(-x) \, dE$$

Nous retrouvons ainsi exactement la même intégrale que précédemment, et donc nous arrivons au résultat suivant :

$$p = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_V^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{kT}\right) (kT)^{3/2} \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$
$$p = 2\left(\frac{kTm_V^*}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{kT}\right)$$

Expression que l'on note aussi sous la forme :

$$p = N_V \cdot \exp(-\frac{E_F - E_V}{kT})$$
(2-9)

Avec N_V correspondant au nombre total de places par unité de volume effectivement occupées par les trous au niveau d'énergie équivalent E_V . N_V est appelé densité d'états électroniques dans la bande de valence et s'exprime donc par :

$$N_{V} = 2 \left(\frac{kTm_{V}^{*}}{2\pi\hbar^{2}}\right)^{3/2}$$
(2-10)

Nous pouvons remarquer que les densités d'états électroniques dans les bandes ne dépendent que de la température et de la masse effective des porteurs électrons ou trous. Comme ces masses effectives ont toujours le même ordre de grandeur, cela signifie que N_C et N_V seront toujours du même ordre de grandeur à une température donnée quel que soit le matériau semi-conducteur. En pratique, ces densités d'états ont une valeur de quelques 10^{19} cm⁻³ à 300K.

Remarque : il ne faut pas confondre densités d'états énergétiques et densités d'états électroniques, ces dernières en tenant compte de l'occupation des niveaux d'énergie par les électrons.

2.2. Semi-conducteur intrinsèque (extrinsèque) à l'équilibre thermodynamique

Dans le matériau semi-conducteur à une température non nulle, on peut considérer la création de porteurs électrons et trous comme le résultat de la réaction chimique :

$$e^- + h^+ \leftrightarrow 0$$

qui peut donc se produire dans les deux sens, c'est-à-dire création d'une paire électron-trou ou disparition d'une telle paire.

Comme pour toute réaction chimique, on peut associer à cette réaction, une constante d'équilibre, K, mettant en jeu les concentrations des espèces, en l'occurrence, n et p:

$$k = n.p \tag{2-11}$$

En remplaçant n et p par leur expression (2-7) et (2-9), nous obtenons :

$$K = N_C N_V \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{kT}\right) \cdot \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{kT}\right)$$
(2-12)

Soit encore

$$K = N_C N_V \exp\left(-\frac{E_C - E_V}{kT}\right)$$
(2-13)

Comme E_{C} - E_{V} est égal au gap du matériau, E_{g} , nous pouvons aussi exprimer K par :

$$K = N_C N_V \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right) \tag{2-14}$$

 E_g correspond dans ce cas à l'énergie de création d'un électron et d'un trou (c'est-à-dire à la transition d'un électron lié de la bande de valence vers la bande de conduction).

2.2.1. Concentration intrinsèque

Dans un semi-conducteur parfait, pour T \neq 0, chaque fois qu'un électron part de la bande de valence, et passe dans la bande de conduction, un trou apparaît dans la bande de valence. La quantité d'électrons est ainsi rigoureusement égale à la quantité de trous ; leur concentration commune est appelée concentration intrinsèque, n_i. Le matériau est dit dans ce cas <u>intrinsèque</u>.

$$p = n = n_i$$

$$K = n.p = n_i^2 = N_C N_V exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right) et donc$$

$$p.n = n_i^2$$
(2-15)
(2-16)

Notons que cette relation reste toujours valable dans le matériau semi-conducteur tant que celui-ci est à l'équilibre thermodynamique ; cette relation sera utilisée en permanence dans la suite. Nous pouvons donc exprimer la concentration intrinsèque par :

$$n_i = \sqrt{N_c N_V} \cdot \exp(-\frac{E_g}{kT})$$
(2-17)

Dans cette relation nous constatons que la concentration intrinsèque dépend très fortement de la température. C'est la loi exponentielle qui l'emporte largement sachant que les densités d'états ne dépendent de la température qu'avec une puissance 3/2. Pour avoir des ordres de grandeur, dans le cas du silicium, à T = 0K, n_i= 0 cm⁻³, à T = 300K, n_i = 1,6.10¹⁰ cm⁻³ et à T = 1300K, n_i = 2,5.10¹⁷ cm⁻³. Les variations sont donc très importantes ce qui explique le très grand changement de comportement électrique de ces matériaux en fonction de la température. En pratique, dans les calculs, on utilise plus souvent le carré de la concentration intrinsèque, relation qu'il vaut mieux savoir en permanence et qui est la suivante :

$$n_i^2 = N_C N_V \cdot exp(-\frac{E_g}{kT})$$
(2-18)

2.2.2. Position du niveau de Fermi dans un matériau intrinsèque

Pour déterminer la position du niveau de Fermi on repart des équations (2.7) et (2.9) donnant les concentrations d'électrons et de trous :

$$n = N_C \cdot \exp(-\frac{E_C - E_F}{kT}) \qquad p = N_V \cdot \exp(-\frac{E_F - E_V}{kT})$$

puisque p = n, à partir de ces deux équations nous obtenons :

$$N_{C} \cdot \exp(-\frac{E_{C} - E_{F}}{kT}) = N_{V} \cdot \exp(-\frac{E_{F} - E_{V}}{kT})$$

$$ln\left(\frac{N_{C}}{N_{V}}\right) = \frac{1}{kT}(-E_{F} + E_{V} + E_{C} - E_{F}) = \frac{1}{kT}(E_{V} + E_{C} - 2E_{F})$$

$$E_{F} = \frac{E_{V} + E_{C}}{2} + kTln\left(\frac{N_{V}}{N_{C}}\right)$$
(2-19)

Ainsi, le niveau de Fermi intrinsèque (correspondant au matériau intrinsèque), se trouve à peu près au milieu de la bande interdite du matériau (figure 2.4), théoriquement au milieu à T = 0K. Pour $T \neq 0K$, on peut déterminer le terme correctif à partir des expressions de N_c et de N_v (relations (2.8) et (2.10)).

$$E_F = \frac{E_V + E_C}{2} + \frac{3}{4} kT ln \left(\frac{m_V^*}{m_C^*}\right)$$

Puisque $k = 8,85.10^{-5} eV/K$, à T = 300K, kT = 26meV. Pour le silicium, à 300K, $E_g=1,12$ eV, et le rapport des masses effectives est de 0,55. Dans ce cas, $E_F = 560$ meV-11meV, ce qui est encore très proche du milieu de la bande interdite.

Il peut être noté que le niveau de fermi se trouve dans la bande interdite, c'est-à-dire à un niveau énergétique non accessible aux électrons. Le niveau de fermi traduit un niveau statistique et non pas un niveau effectivement occupé.



Figure 2.4 : position du niveau de Fermi intrinsèque dans un monocristal parfait. Il se situe approximativement au milieu de la bande interdite à température ambiante.

2.2.3. Semi-conducteur extrinsèque

Nous pouvons modifier de façon considérable la concentration de porteurs de charge d'un semi-conducteur intrinsèque en lui ajoutant de faibles quantités d'atomes astucieusement choisis et que nous appelons impuretés dopantes ou tout simplement dopants. Nous obtenons alors un semi-conducteur extrinsèque ou dopé.

Selon la nature des atomes introduits, soit le nombre d'électrons devient très supérieur au nombre de trous et le semi-conducteur est appelé de type n, soit le nombre de trous devient très supérieur à celui des électrons et le semi-conducteur est appelé de type p. Cette différence sera exploitée judicieusement dans la suite. Dans l'immédiat, nous allons expliquer le phénomène de dopage et ses conséquences sur le nombre d'électrons et de trous ainsi que sur la position du niveau de Fermi (niveau statistique moyen) dans le semi-conducteur.

A. Notion de dopage

Dans un cristal semi-conducteur, il est possible d'introduire des atomes étrangers de valence 3 ou 5 par exemple (colonne III ou V du tableau de Mendéléev). Si tout va bien technologiquement (*cf. cours de technologie microélectronique intégrée*), les atomes vont prendre la place des atomes du réseau, c'est-à-dire se mettre en site substitutionnel comme représenté figures 2.5 et 2.6. Nous allons voir que cet apport va transformer considérablement l'état électronique du monocristal.

✓ Dopage de type n ou donneur

Prenons le cas d'un atome de la colonne V, par exemple du phosphore. La couche externe de cet atome comporte, *a priori*, 5 électrons, comme représenté sur la figure 2.5. Inclus dans le réseau cristallin, cet atome va se retrouver avec 9 électrons sur sa couche externe. Dès que l'énergie thermique sera suffisante, cet électron va quitter son orbite pour circuler dans le cristal. Il rejoint dans ce cas la bande de conduction du cristal. Le noyau de l'atome de phosphore ayant une charge (due à ses protons) qui n'est plus compensée, cet atome va s'ioniser positivement. Cet atome a ainsi un comportement dopant et puisqu'il a fourni un électron au cristal (dans sa bande de conduction), Nous l'appelons atome donneur. Notons que la charge totale du cristal reste nulle, le cristal étant globalement neutre.



Figure 2.5 : dopage d'un monocristal de silicium par un atome de phosphore. L'électron excédentaire autour de l'atome de phosphore, vis-à-vis de la situation la plus stable qu'est l'octet, quitte l'atome pour rejoindre la bande de conduction et ioniser l'atome positivement. Nous constituons un dopage donneur de type n.

Pour résumer, un atome dopant de type donneur :

- donne un électron au réseau cristallin,
- s'ionise positivement,
- crée un dopage de type n.

✓ Dopage de type p ou accepteur

Prenons le cas d'un atome de la colonne III, par exemple l'atome de bore. La couche externe de cet atome comporte, *a priori*, 3 électrons, comme représenté sur la figure 2.6. Inclus dans le réseau cristallin, cet atome va se retrouver avec 7 électrons sur sa couche externe. Dès que l'énergie thermique sera suffisante, un électron de valence voisin va quitter son orbite pour venir créer un octet autour de l'atome de bore. Il crée dans ce cas une lacune dans la bande de

valence du cristal, c'est-à-dire qu'il crée un trou. Le noyau de l'atome de bore ayant une charge due à ses protons insuffisante, cet atome va s'ioniser négativement. Cet atome a ainsi un comportement dopant et puisqu'il a fourni un trou au cristal (dans sa bande de valence), on l'appelle atome accepteur, puisqu'il accepte un électron. Notons que la charge totale du cristal reste toujours nulle, le cristal étant globalement neutre.



Figure 2.6 : dopage d'un monocristal de silicium par un atome de bore. L'électron déficitaire autour de l'atome de bore, vis-à-vis de la situation la plus stable qu'est l'octet, sera apporté par le réseau qui créera simultanément un trou. Nous constituons un dopage accepteur de type p.

Pour résumer, un atome dopant de type accepteur :

- donne un trou au réseau cristallin,
- s'ionise négativement,
- crée un dopage de type p.
- B. Concentration des porteurs quasi-libres dans un semi-conducteur dopé
- ✓ concentration des atomes ionisés

Dans le cas d'un atome donneur, à condition que la température soit « suffisamment » élevée comme nous le verrons dans la suite, nous pouvons écrire la relation de dissociation suivante :

$$D \leftrightarrow D^+ + e^-$$

Du point de vue statistique, si cette réaction se produit facilement dans le matériau considéré, c'est que l'énergie d'ionisation de l'atome donneur est relativement faible. En

d'autres termes, l'écart énergétique entre un électron lié à l'atome donneur et ce même électron quasi-libre dans le cristal, c'est-à-dire situé dans le bas de la bande de conduction, sera relativement faible. On peut alors exprimer le nombre d'atomes ionisés ou plus exactement leur concentration, en fonction du nombre total d'atomes ou de leur concentration, N_D , introduits dans le cristal. Cette concentration tient compte de la statistique d'occupation d'un niveau d'énergie par un fermion et des échanges possibles entre le niveau de l'électron lié et celui de la bande de conduction. Cette concentration d'atomes donneurs ionisés, N_D^{+} s'exprime par :

$$N_{D}^{+} = N_{D} \frac{1}{1 + 2exp\left(\frac{E_{F} - E_{D}}{kT}\right)}$$
(2-20)

 E_D est le niveau d'énergie donneur, c'est-à-dire le niveau d'énergie statistique auquel se trouve l'électron lié à l'atome dopant. Le facteur pré-exponentiel, 2, est appelé facteur de dégénérescence et provient du choix possible ou non de spins différents dans l'échange énergétique : dans le cas d'un départ de l'atome, le spin de l'électron peut être quelconque, alors que pour le retour, le spin est imposé par le nuage électronique existant.

Dans le cas d'un atome accepteur, nous pouvons mener un raisonnement analogue, et nous pouvons écrire la relation d'ionisation suivante :

$$A + e^- \leftrightarrow A^-$$

Du point de vue statistique, si cette réaction se produit facilement dans le matériau considéré, c'est que l'énergie d'ionisation de l'atome accepteur est relativement faible. En d'autres termes, l'écart énergétique entre un électron lié à l'atome accepteur et ce même électron lié au cristal de semi-conducteur, c'est-à-dire situé au sommet de la bande de valence, sera relativement faible. Nous pouvons alors exprimer la concentration des atomes ionisés en fonction de la concentration totale d'atome dans le cristal, N_A . Cette concentration tient compte de la statistique d'occupation d'un niveau d'énergie par un fermion et des échanges possibles entre le niveau de l'électron lié et celui de la bande de valence. Cette concentration d'atomes donneurs ionisés, N_A s'exprime par :
$$N_A^- = N_D \frac{1}{1 + 2exp\left(\frac{E_A - E_F}{kT}\right)}$$
(2-21)

 E_A est le niveau d'énergie accepteur, c'est-à-dire le niveau d'énergie statistique auquel se trouve l'électron lié à l'atome dopant. Le facteur pré-exponentiel, 2, est toujours le facteur de dégénérescence et provient du choix possible ou non de spins différents dans l'échange énergétique.

✓ cas d'un semi-conducteur de type n

Le semi-conducteur est globalement neutre : la somme des charges positives est égale à celle des charges négatives. En faisant le bilan des charges présentes, il n'y a que des électrons, des trous et des ions donneurs.

$$N_D^+ + p_n = n_n \tag{2-22}$$

En raisonnant à température ambiante, si l'élément ajouté a effectivement le comportement de dopant, pratiquement tous les atomes de cet élément sont ionisés, c'est-àdire $N_D^{+} \approx N_D$. Par ailleurs, nous avons vu que le produit *p.n* était toujours égal au carré de la concentration intrinsèque, n_i^2 , à l'équilibre thermodynamique. Nous avons donc :

$$p_n \cdot n_n = n_i^2$$

L'équation de neutralité devient :

$$N_D + \frac{n_i^2}{n_n} = n_n$$

Charge+ charge-

D'où :
$$n_n^2 - N_D \cdot n_n - n_i^2 = 0$$

Equation qui admet une solution de type :

$$n_n = \frac{N_D + \sqrt{N_D^2 + 4n_i^2}}{2} \tag{2-23}$$

Ainsi, si
$$N_D \gg n_i$$
 alors : $n_n = N_D$ et $p_n = \frac{n_i^2}{N_D}$ (2-24)

Pour donner un exemple classique à 300K, nous supposons une concentration de dopant de 10^{17} cm⁻³, la concentration intrinsèque étant de 1,6 10^{10} cm⁻³ et la concentration totale d'atomes de silicium étant de 5. 10^{22} cm⁻³, ce dernier calcul se fait à partir du nombre d'Avogadro, de la masse molaire et de la densité du silicium (2,7g/cm³). La concentration en électrons est alors de 10^{17} cm⁻³ et la concentration en trous de 1,6. 10^3 cm⁻³. Nous voyons bien dans ce cas que le décalage des concentrations est énorme puisque les électrons sont cent trillions de fois plus nombreux que les trous alors qu'ils étaient en quantité identique au départ.

En conclusion, dans un semi-conducteur de type n affirmé,

- les électrons sont majoritaires,
- la concentration en électrons est pratiquement égale à la concentration de dopant,
- les trous sont minoritaires.
- \checkmark cas d'un semi-conducteur de type p

Le semi-conducteur est globalement neutre : la somme des charges positives est égale à celle des charges négatives. En faisant le bilan des charges présentes, il n'y a que des électrons, des trous et des ions accepteurs.

$$N_A^- + n_p = p_p \tag{2-25}$$

En raisonnant à température ambiante, si l'élément ajouté a effectivement le comportement de dopant, pratiquement tous les atomes de cet élément sont ionisés, c'est-àdire $N_A^{-} \approx N_A$. Par ailleurs, nous avons vu que le produit *p.n* était toujours égal au carré de la concentration intrinsèque, n_i^2 , à l'équilibre thermodynamique. Nous avons donc :

$$p_p \cdot n_p = n_i^2$$

L'équation de neutralité devient :

D'où :

$$N_{A} + \frac{n_{i}^{2}}{p_{p}} = p_{p}$$
Charge+ charge-
$$p_{p}^{2} - N_{A} \cdot p_{p} - n_{i}^{2} = 0$$

équation qui admet une solution du type :

$$p_p = \frac{N_A + \sqrt{N_A^2 + 4n_i^2}}{2} \tag{2-26}$$

Ainsi, si $N_A \gg n_i$ alors : $p_p = N_A$ et $n_p = \frac{n_i^2}{N_A}$ (2-27)

En conclusion, dans un semi-conducteur de type p affirmé,

- les trous sont majoritaires,
- la concentration en trous est pratiquement égale à la concentration de dopant,
- les électrons sont minoritaires.
 - ✓ Cas général

Dans le cas général, les deux types de dopants peuvent exister simultanément dans le matériau. C'est en fait ce qui se passe en pratique pour des raisons purement technologiques. Le semi-conducteur est toujours globalement neutre et la somme des charges positives est égale à celle des charges négatives. En faisant le bilan des charges présentes, il y a des électrons, des trous et des ions accepteurs et donneurs.

$$N_A^- + n = p + N_D^+$$
Charge- charge+
(2-28)

Le semi-conducteur sera de type n ou de type p, si à la température considérée, la concentration en donneurs ionisés ou en accepteurs ionisés respectivement est la plus grande (le plus nombreux l'emporte).

Si N_D>N_A
$$n_n = \frac{(N_D - N_A) + \sqrt{(N_D - N_A)^2 + 4n_i^2}}{2}$$
 (2-29)

Si N_A>N_D
$$p_p = \frac{(N_A - N_D) + \sqrt{(N_A - N_D)^2 + 4n_i^2}}{2}$$
 (2-30)

Nous pouvons remarquer que si les concentrations des donneurs et accepteurs sont identiques, le matériau à un comportement intrinsèque. Si mathématiquement ce résultat est facilement accessible, physiquement il est quasi impossible puisqu'il faudrait des précisions énormes sur les concentrations des atomes dopants pour espérer avoir un comportement intrinsèque. Puisque la concentration d'atomes de silicium est de 5.10^{22} cm⁻³, pour avoir un comportement intrinsèque il faut que la différence des concentrations soit inférieure à n_i, c'est-à-dire à 10^{10} cm⁻³. Il faut donc une précision ou une pureté chimique du silicium supérieure à mille milliardièmes pour espérer contrôler le procédé, ce qui n'est jamais atteint !

C. Position du niveau de Fermi – Diagrammes d'énergie

✓ cas d'un semi-conducteur de type n, affirmé

Pour déterminer la position du niveau de Fermi à l'équilibre thermodynamique, il faut partir des relations (2-7) et (2-9), c'est-à-dire :

$$n = N_C \cdot \exp(-\frac{E_C - E_F}{kT})$$
 (2-7) et $p = N_V \cdot \exp(-\frac{E_F - E_V}{kT})$ (2-9)

Dans le cas d'un matériau de type n affirmé, à température ambiante, $n \approx N_D$, et l'équation (2-7) devient :

$$N_D = N_C \exp(-\frac{E_C - E_F}{kT})$$

D'où nous déduisons aisément :

$$E_C - E_F = kT ln \frac{N_C}{N_D}$$
(2-31)

En appelant E_i , la position du niveau de Fermi dans le cas où le matériau serait intrinsèque, nous aurions la relation suivante :

$$n_{i} = N_{C} \cdot \exp\left(-\frac{E_{C} - E_{i}}{kT}\right) \quad \text{et} \quad E_{C} - E_{i} = kT ln \frac{N_{C}}{N_{i}}$$
$$E_{C} - E_{i} + E_{i} - E_{F} = kT ln \frac{N_{C}}{N_{D}} = kT ln \frac{N_{C}}{n_{i}} + E_{i} - E_{F}$$
$$E_{F} - E_{i} = kT ln \frac{N_{D}}{n_{i}}$$

Le niveau de Fermi se décale donc progressivement du milieu de la bande interdite vers la bande de conduction lorsque le dopage de type n augmente comme représenté sur la figure 2.7. Il faut se rappeler qu'à 300K, kT=26meV, et que le niveau de Fermi se décale donc de 60meV chaque fois que le dopage est multiplié par 10 (nous dirons que la variation est de 60 meV par décade).



Figure 2.7 : position du niveau de Fermi et valeur correspondante des concentrations de dopants de type n à température ambiante. E_F est d'autant plus proche de la bande de conduction que le dopage est élevé. Nous se limiterons dans ce cours aux cas pour lesquels E_F reste situé dans la bande interdite. A température ambiante (300K) le décalage est de 60meV par décade de concentration.

✓ cas d'un semi-conducteur de type p, affirmé

Dans le cas où le matériau est de type p affirmé de concentration de dopant accepteur, N_{A} , à partir de la relation (2-9), nous obtenons :

$$N_A = N_V \exp(-\frac{E_F - E_V}{kT})$$

D'où nous pouvons déduire aisément :

$$E_F - E_V = kT ln \frac{N_V}{N_A}$$
(2-32)

Ainsi, dans le cas d'un semi-conducteur dopé de type p, le niveau de Fermi se trouvera d'autant plus près du sommet de la bande de valence, que le matériau sera plus dopé (Figure 2.8).

Il peut être noté que dans ce cours, nous nous limiterons au cas où le niveau de Fermi reste dans la bande interdite, c'est-à-dire que le dopage reste inférieur à la densité d'états

électroniques dans les bandes ($N_c et N_v$); dans le cas contraire, on dit que le semi-conducteur est dégénéré.



Figure 2.8 : position du niveau de Fermi et valeur correspondante de la concentration des dopants dans un semi-conducteur de type p affirmé, à température ambiante. Au plus le dopage est fort, au plus le niveau de Fermi s'approche de la bande de valence.

 \checkmark cas général en fonction de la température

Dans un cas plus général, il faut tenir compte du fait que les atomes dopants sont ionisés en fonction de la température, cette température d'ionisation intervenant aux environs de la température de liquéfaction de l'azote liquide, et que l'activité de création de porteurs dans le semi-conducteur devient très importante à des températures de plusieurs centaines de degrés Celsius. Si nous souhaitons comprendre les phénomènes physiques dans les dispositifs dans une large gamme de température d'utilisation, il faut analyser ces effets.

Nous pouvons réécrire l'équation d'électro-neutralité (2-33) en tenant compte de toutes les charges en présence (équations 2-7, 2-9, 2-20 et 2-21).

$$n = N_C \cdot \exp(-\frac{E_C - E_F}{kT})$$

$$p = N_V \cdot \exp(-\frac{E_F - E_V}{kT})$$

$$N_D^+ = N_D \frac{1}{1 + 2\exp(\frac{E_F - E_D}{kT})}$$

$$N_{A}^{-} = N_{A} \frac{1}{1 + 2\exp(\frac{E_{A} - E_{F}}{kT})}$$

$$N_{A}^{-} + n = p + N_{D}^{+}$$
(2-33)

La détermination de $E_{_F}$ peut alors se faire graphiquement dans un diagramme semilogarithmique pour aller rapidement, sachant qu'un calcul analytique est toujours possible.

Les équations ci-dessus s'écrivent aussi :

$$\ln(p) = \ln N_V - \frac{E_F - E_V}{kT}$$
$$\ln(n) = \ln N_C - \frac{E_C - E_F}{kT}$$
$$\ln(N_D^+) = \ln(N_D) - \ln(1 + 2exp \frac{E_F - E_D}{kT})$$
$$\ln(N_A^-) = \ln(N_A) - \ln(1 + 2exp \frac{E_A - E_F}{kT})$$

Dans ce diagramme, l'échelle étant semi-logarithmique, on raisonne comme dans le cas d'un diagramme de Bode (somme des courbes asymptotiques). Les pentes des courbes résultantes dans les domaines où elles varient exponentiellement sont en 1/kT et dépendent donc directement de la température. Nous pouvons résoudre l'équation de neutralité directement sur le graphe en cherchant l'intersection des courbes de la somme des charges positives (p et ND) et de la somme des charges négatives (n et NA). Nous constatons aisément que la position de EF dépendra de la température, les pentes variant en 1/kT.



Figure 2.9 : détermination graphique de la position du niveau de Fermi dans un semi-conducteur. En vérifiant l'équation d'électro-neutralité, on détermine facilement E_{F} . Les droites inclinées ont une pente proportionnelle à 1/kT

Nous pouvons noter que si le dopage de type N est prépondérant, c'est le cas de la figure 2.9, le niveau de Fermi se trouve proche de la bande de conduction. Le niveau de Fermi se retrouvera au niveau E_D lorsque la température sera égale à la température de Fermi, T_F , située autour de 100K. Pour des températures élevées, plusieurs centaines de degrés Celsius (autour de 1000K), les pentes diminuant, le niveau de Fermi se déplace vers le milieu de la bande interdite. Lorsque n et p atteignent la valeur supérieure de N_D et N_A , le matériau retrouve un comportement intrinsèque (température T_i). Cet aspect sera très important dans la fabrication des circuits intégrés mais aussi dans les dispositifs fonctionnant à très haute température.

 ✓ Variations du niveau de Fermi en fonction du type de dopage à température ambiante





Figure 2.10 : évolution du nombre de porteurs dans les bandes d'énergie en fonction de la nature du dopage et de la concentration des porteurs. La première figure correspond semi-conducteur au intrinsèque, la deuxième au dopage de type n et la dernière au dopage de type p. Lorsque le niveau de Fermi est près de la bande de conduction, la concentration des électrons augmente et celle des trous diminue. Le phénomène est contraire du côté de la bande de valence. La distribution des porteurs dans les bandes obéit toujours à la statistique de Fermi-Dirac.

Sur la figure 2.10, nous présentons les différentes situations obtenues lorsque le matériau est intrinsèque ou dopé de type n puis de type p. Pour les besoins de la figure, les représentations des concentrations dans les bandes d'énergie ne sont absolument pas à l'échelle, les variations pouvant être de 10 ordre de grandeurs. Le niveau de Fermi se déplace vers la bande de valence lorsque le matériau est de type p, vers la bande de conduction lorsqu'il est de type n.

2.3. Semi-conducteur hors équilibre

- 2.3.1 Conductivité Dérive dans un champ électrique
 - A. Mobilité Conductivité

De façon générale, lorsque nous appliquons un champ électrique, nous avons tendance à déplacer les porteurs de charge, électrons et trous. En réalité, le mécanisme physique d'entraînement par un champ électrique se produit sur des porteurs qui se déplacent de façon aléatoire, dans toutes les directions de l'espace, dans le matériau, en raison de l'agitation thermique (aux températures normales de fonctionnement) et qui effectuent un libre parcourt moyen sans choc. L'ordre de grandeur de ce libre parcourt moyen est de 200 Å, soit environ une centaine de distances atomiques. Au niveau du choc, un échange d'électrons peut se produire, comme dans le cas d'un relais. Le champ électrique va agir entre ces chocs. La vitesse thermique est très grande (10⁷ cm.s⁻¹ à 300K). Les porteurs ont ainsi une vitesse thermique moyenne, orientée dans toutes les directions de l'espace qui est légèrement modifiée en imposant une direction statistique préférentielle par la présence du champ électrique.

La figure 2.11 montre de façon très schématique ces phénomènes. Nous ne rentrerons pas dans les détails au niveau phénoménologique et microscopique et nous n'allons considérer dans la suite que l'aspect de moyenne statistique.



Figure 2.11 : déplacement statistique des électrons dans le semi-conducteur et effet du champ électrique sur ces déplacements. Le mouvement erratique est perturbé par la présence du champ. Le déplacement effectif peut être de plusieurs ordres de grandeurs plus faible que le déplacement réel des électrons.

La densité de courant d'électrons s'exprime de façon la plus simple par :

$$\overrightarrow{J_n} = (-q).\,n.\,\overrightarrow{v_n}$$

avec, n, concentration des électrons,

q, charge de l'électron $q=1.6 \ 10^{-19} \ coulomb$

 $\overrightarrow{v_n}$ vitesse moyenne des électrons,

 $\vec{J_n}$ densité de courant exprimée en général en Ampères par cm².

Si, dans un semi-conducteur, nous traçons la vitesse des électrons en fonction du champ électrique, nous obtenons alors la courbe présentée sur la figure 2.12. Pour les forts champs électriques, la vitesse sature et tend en pratique vers la vitesse thermique. L'explication simplifiée de cette limite est que les trajectoires entre chocs sont suffisamment incurvées pour prendre la direction du champ mais que l'énergie apportée entre ces chocs (et donc sur le libre parcourt moyen) est négligeable par rapport à l'énergie thermique. Pour les très forts champs électriques, nous verrons que d'autres phénomènes interviennent.



Figure 2.12 : variation de la vitesse des électrons dans le silicium et l'arséniure de gallium. Pour les champs faibles, la pente correspond à la mobilité. Pour les champs forts, la vitesse tend vers une limite qui est la vitesse thermique. Il peut être noté que le GaAs présente une meilleure mobilité (rapport 5 environ) et une survitesse qui est exploitée dans certains composants très rapides (HF) (*d'après Jacobini et al., Smith et al., Ruch et al.*).

Pour les faibles champs électriques, la courbe réelle est linéarisée et la pente définit la mobilité des électrons, μ_{n} .

$$\vec{v}_n = -\mu_n . \vec{E}$$

Ainsi,

$$\vec{J_n} = qn\mu_n \vec{E} \tag{2-34}$$

De façon tout à fait analogue, il est possible de définir la mobilité des trous (déplacement des électrons liés). L'expression de la densité de courant de trous est alors la suivante en se rappelant que les trous se déplacent dans le même sens que le champ électrique :

$$\vec{J_p} = qp\mu_p \vec{E} \tag{2-35}$$

Ces deux densités de courant sont en fait des <u>courants de dérive</u> dans le champ électrique. Dans certains ouvrages, ces densités de courant sont appelées *courant de conduction*, ce qui est un pléonasme et une terminologie non appropriée pour traduire le phénomène. Nous verrons dans ce chapitre que d'autres phénomènes permettent la conduction.

Il peut être noté que nous retrouvons la loi d'Ohm, $\vec{j} = \sigma \vec{E}$ pour chacun des deux types de porteur. Avec σ est la conductivité.

On peut donc définir une conductivité pour les électrons, σ_n , et une conductivité pour les trous, σ_p , comme suit :

$$\sigma_n = qn\mu_n$$

Puisque la mobilité est liée au libre parcourt sans choc, il est évident que toute perturbation du réseau cristallin va entraîner une modification de la mobilité. Tout particulièrement, l'ajout d'atomes dopants crée des distorsions dans le cristal et affecte la mobilité qui diminue lorsque le niveau de dopage augmente. La figure 2.13 montre la variation des mobilités des électrons et des trous en fonction du niveau de concentration d'impureté ou de dopage, dans le silicium. Notons que c'est la quantité totale d'atomes dopants qui intervient et non pas le dopage effectif (après compensation éventuelle). Dans un cristal de silicium quasipur, à 300K, la mobilité des électrons est de 1350 cm²/Vs et la mobilité des trous de 480 cm²/Vs.



Figure 2.13 : variation de la mobilité des électrons et des trous dans le silicium à 300K en fonction de la concentration d'impuretés ou de dopants. (*D'après Beadle, Plummer, and Tsai*).

B. Densité totale de courant de dérive dans un champ électrique. Résistivité

L'application d'un champ électrique au semi-conducteur induit la <u>conduction des deux</u> <u>types de porteurs</u>, simultanément. Les électrons se déplacent au niveau de la bande de conduction, les trous (et donc les électrons liés) au niveau de la bande de valence. La densité de courant totale est donc la somme des deux densités de courant.

$$\vec{J}_{d\acute{e}r} = \vec{J}_n + \vec{J}_p$$

$$\vec{J}_{d\acute{e}r} = qn\mu_n \vec{E} + qp\mu_p \vec{E}$$

$$\vec{J}_{d\acute{e}r} = (qn\mu_n + qp\mu_p) \vec{E} = \sigma \vec{E}$$
(2-36)

Puisque $\rho = \frac{1}{\sigma}$, la résistivité du matériau s'exprime par :

$$\rho = \frac{1}{q(n\mu_n + p\mu_p)} \tag{2-37}$$

Cette résistivité dépend très fortement de la concentration de dopant puisque celle-ci varie jusqu'à 6 ordres de grandeur. Les mobilités, quant à elles, bien que dépendantes du niveau de dopage, seront donc beaucoup moins influentes sur l'amplitude de variation de la résistivité.

Exemples numériques :

Pour du <u>silicium intrinsèque</u>, $\mu_n = 1350 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, $\mu_p = 480 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, $n_i = n = p = 1,5.10^{10} \text{ cm}^{-3}$, alors $\sigma = 2,9.10^{-6} \Omega^{-1}.\text{cm}^{-1}$ et $\rho = 3,4.10^5 \Omega.\text{cm}$

Pour du <u>silicium dopé</u>, $n_{no} = N_D = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $p_{no} = 2,2.10^2 \text{ cm}^{-3}$, $\mu_n = 280 \text{ cm}^2/\text{V.s}$, $\mu_p = 90 \text{ cm}^2/\text{V.s}$, alors $\sigma = 48 \Omega^{-1}$.cm⁻¹ et $\rho = 2,2.10^{-2} \Omega$.cm (avec n_{no} et p_{no} sont les concentrations des électrons et des trous, respectivement, à l'équilibre thermodynamique).

Il peut être noté, que même pour des très forts dopages, la résistivité du semi-conducteur, bien qu'ayant fortement diminué, reste très supérieure à celle d'un métal dont l'ordre de grandeur est le $\mu\Omega$.cm.

La figure 2.14 montre la variation de la résistivité en fonction du niveau de dopage. L'écart à la linéarité en échelle logarithmique est dû à la variation des mobilités en fonction du niveau de dopage. Lorsque le dopage atteint le niveau 10¹⁶ cm⁻³, la probabilité d'une interaction avec un atome dopant durant le libre parcourt moyen augmente fortement ; en effet, à ces niveaux, on trouve un atome dopant à peu près tous les 100 atomes du réseau soit autour de 200 Å, qui est l'ordre de grandeur du libre parcourt moyen.



Figure 2.14 : variation de la résistivité en fonction du niveau de dopage pour le silicium à 300K. La non-linéarité en échelle logarithmique est due à la modification des mobilités lorsque le dopage atteint 10¹⁶cm⁻³ (*d'après Beadle, Plummer, and Tsai*).

2.3.2. Diffusion des porteurs

A. Loi de Fick. Coefficient de diffusion

Le phénomène de diffusion dans son sens le plus général, est un phénomène thermodynamique résultant de l'accroissement de l'entropie ; ceci signifie que la nature tend toujours vers la désorganisation maximale, globalement. Si nous considérons des porteurs de charges, leur mouvement s'effectuera dans une direction qui a tendance à uniformiser leur distribution spatiale ; ce phénomène est équivalent à celui de l'équilibre de la pression d'un gaz dans une enceinte, par exemple. La loi de Fick traduit cette tendance ; cette loi s'écrit dans un repère mono-dimensionnel correspondant à la direction de l'étalement par :

La loi de Fick
$$F = -D\frac{dC}{dx}$$
(2-38)

F, est le flux de l'espèce considérée,

C, la concentration de l'espèce,

D, coefficient de proportionnalité aussi appelé coefficient de diffusion,

ce qui s'énonce par : *le flux est proportionnel au gradient de concentration*. Le signe moins vient du fait que pour qu'il y ait étalement, le gradient doit être négatif, comme cela est indiqué sur la figure 2.15.



Cette loi est très générale et s'applique aussi bien aux électrons et trous qu'aux atomes ou aux ions (*cf. cours de technologie microélectronique intégrée*)

B. Densités de courant de diffusion

En considérant macroscopiquement la diffusion des électrons et des trous, leur déplacement est équivalent à un courant. Nous pouvons ainsi exprimer les densités de courant des électrons et des trous en multipliant le flux des porteurs par la charge élémentaire, négative pour les électrons et positive pour les trous.

- Cas des électrons :

La figure 2.16 met en évidence le déplacement des électrons par diffusion.



Figure 2.16 : mouvement des électrons par mécanisme de diffusion. La densité de courant est de sens opposé à celui des électrons.

$$F = -\frac{1}{q}j$$

La densité de courant s'exprime par :

$$j_n = +qD_n \frac{dn}{dx} \tag{2-39}$$

 D_n est le coefficient de diffusion des électrons. Ce coefficient est positif. Par convention, la densité de courant est de sens opposé au déplacement des électrons.

Les électrons se déplaçant vers les x positifs, la charge étant négative, et le gradient de concentration étant négatif, la densité de courant est négative.

- Cas des trous :

La figure 2.17 met en évidence le déplacement des trous par diffusion. La densité de courant s'exprime par :

$$j_p = -qD_p \frac{dp}{dx}$$
(2-40)

 D_p est le coefficient de diffusion des trous. Ce coefficient est positif. Par convention, la densité de courant est de même sens que celui du déplacement des trous. Les trous se déplaçant vers les x positifs, le gradient de concentration étant négatif, et la charge étant positive, la densité de courant résultante est positive.



Les coefficients de diffusion, D_n et D_p , s'expriment en général en cm²/s. Dans ces unités, elles sont de l'ordre de grandeur de l'unité, D_n étant toujours un peu supérieur à D_p . Densités de courant totales dans un semi-conducteur

Nous avons vu que dans un semi-conducteur nous pouvions avoir des courants de dérive d'électrons et de trous et que la diffusion concernait aussi ces deux types de porteurs. Nous pouvons ainsi exprimer, dans un modèle unidimensionnel, la densité de courant totale d'électrons, la densité de courant totale de trous et la densité de courant totale (incluant les deux types de porteurs de charge).

$$j_n = +qD_n\frac{dn}{dx} + qn\mu_n.E$$
(2-41)

$$j_p = -qD_p \frac{dp}{dx} + qp\mu_p.E$$
(2-42)

$$j = j_n + j_p \tag{2-43}$$

Remarques : ces équations restent valables tant que le matériau semi-conducteur reste homogène, et la température constante à travers la structure. Elles sont modifiées quand le dopage, le gap ou la température varient. Le modèle est ici unidimensionnel ; il permet des calculs analytiques pas trop complexes. Il est bien évidemment possible de créer un gradient vectoriel.

2.4. Phénomènes de Génération – Recombinaison

2.4.1. Génération-recombinaison thermique

Nous avons vu qu'à 0K, il n'y avait aucun porteur libre (ou quasi-libre) dans le semiconducteur. Le fait de chauffer le matériau permet de donner une énergie suffisante à une fraction des électrons de valence pour quitter l'état lié et atteindre la bande de conduction. Ce départ d'un électron correspond à la création simultanée d'une paire électron-trou, phénomène appelé génération thermique d'une paire électron-trou. Si ce processus n'était pas réversible, au bout d'un certain temps, tous les électrons de valence se retrouveraient dans la bande de conduction. Or nous savons que leur nombre est limité à ni, ce qui signifie que statistiquement, il y a autant de création que de disparition de ces paires, l'équilibre étant atteint, à température fixée à la valeur de ni correspondante. Le processus global s'appelle génération-recombinaison thermique. A l'équilibre thermodynamique, ce phénomène se traduit par la constance du produit p.n.

2.4.2. Génération-lumineuse

En envoyant des photons d'énergie suffisante, au moins égale à celle du gap, on peut créer une paire électron-trou. Nous pouvons alors définir un terme de génération lumineuse par G_L , qui est une concentration de porteurs créés par unité de volume et unité de temps (cm⁻³.s⁻¹). Nous allons ainsi imposer un excès de porteurs dans le cristal par rapport à l'équilibre thermodynamique tant que cette génération se produira. En stoppant l'envoi de photons, le matériau aura tendance à retourner progressivement à l'équilibre thermodynamique. Dans un élément de volume donné, si ce phénomène est seul à intervenir, nous pouvons écrire :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = +G_L \qquad (2-44) \qquad \qquad \frac{\partial p}{\partial t} = +G_L \qquad (2-45)$$

2.4.3. Niveaux pièges dans un semi-conducteur

Dans un cristal parfait, il n'existe aucun état électronique dans le gap (bande interdite). Mais tout cristal perd son aspect idéal dès que nous y introduisons des impuretés, qu'elles soient dopantes ou non dopantes, ou dès que le matériau présente des défauts cristallographiques (dislocations, distorsion des angles de liaisons).

Ces perturbations détruisent la périodicité parfaite du cristal et entraînent la création d'états énergétiques dans le gap qui vont pouvoir être électriquement actifs, c'est-à-dire permettre des échanges entre les bandes de valence et de conduction et ces états. La figure 2.18 met en évidence que ces états peuvent servir d'intermédiaire entre la bande de valence et la bande de conduction et vont modifier en particulier la cinétique de ces échanges par rapport à l'effet thermique pur.





La figure 2.19 montre de façon détaillée les différents mécanismes possibles. Un piège peut capturer un électron de la bande de conduction ou émettre un électron vers cette bande. Un piège peut capturer un trou en envoyant un électron vers la bande de valence ou émettre un trou en récupérant un électron de valence qui laisse un trou derrière lui. Ces échanges se font en obéissant à la statistique de Fermi-Dirac. Le processus complet de génération met en jeu une émission d'un trou et une émission d'un électron (transit de la bande de valence vers la bande de conduction) alors que la recombinaison met en jeu la capture d'un électron puis d'un trou (transit de la bande de conduction vers la bande de valence).

2.4.4 Résultats de la théorie simplifiée de Shockley-Read-Hall

Tels que représentés figure 2.19, les niveaux pièges vont servir d'étapes intermédiaires pour les phénomènes de génération et recombinaison. La statistique des porteurs obéit à une loi exponentielle de la probabilité de transfert entre deux niveaux d'énergie ; pour avoir une transition complète entre les bandes de valence et de conduction, le trajet se fera par les niveaux pièges puisque la probabilité de transiter entre les bandes et les pièges est sans commune mesure supérieure à la transition directe bande à bande. Les niveaux pièges vont donc servir de *marche-pied* aux porteurs. La position la plus efficace pour les pièges pour permettre cette transition sera située en milieu de bande interdite ; pour comprendre simplement ceci, 2 marches de moyenne hauteur sont plus faciles à gravir par un être humain qu'une très petite et une très grande, cette dernière représentant la difficulté !



Figure 2.19 : mécanismes de génération-recombinaison assistés par pièges. La transition s'effectue via un piège qui échange un électron avec la bande de conduction ou avec la bande de valence. Dans ce dernier cas l'électron se recombine avec un trou ou crée un trou en quittant la bande de valence. Ces échanges sont conditionnés par la statistique de Fermi-Dirac. Pour avoir une probabilité importante de transfert, le niveau piège doit être situé en milieu de bande interdite. Pour déterminer le taux de recombinaison génération, il faut exprimer les quatre processus présentés, émissions et captures des trous et électrons.

Ainsi, en ne considérant que les pièges situés en milieu de bande interdite, qui seront les plus efficaces, on peut déterminer le taux de recombinaison-génération résultant, *U*, qui traduit la variation de la concentration de porteurs (électrons ou trous) par unité de temps ; il faut pour cela exprimer les quatre processus présentés, émissions et captures des trous et électrons. Nous ne donnons ici que les résultats de ce calcul relativement long qui suppose des simplifications supplémentaires et qui aboutit à :

$$U = \frac{1}{\tau_0} \frac{p.n - n_i^2}{p + n + 2n_i}$$
(2-46)

Avec τ_0 , durée de vie des porteurs,

p, concentration des trous,

n, concentration des électrons,

ni, concentration intrinsèque.

Nous allons analyser dans ce qui suit les différentes situations rencontrées dans le semiconducteur qui aboutissent à des comportements différents.

A. Cas d'un semi-conducteur à l'équilibre thermodynamique

Nous avons vu qu'à l'équilibre thermodynamique, l'activité thermique imposait $p.n = n_i^2$. En reportant ce résultat dans l'équation (2-40), on aboutit à :

$$U = 0$$

Cela signifie que la génération thermique est compensée par la recombinaison et donc que le bilan de la recombinaison-génération est nul.

B. Cas d'un excès d'électrons et de trous dans le matériau

Nous allons analyser le cas d'un matériau de type n, à température ambiante. En utilisant les relations : $n_n = N_D$ et $P_{n0} = \frac{n_i^2}{N_D}$ et en supposant un excès de paires électron-trou,

$$\Delta p_n = \Delta n_n \text{ tel que } N_D \gg \Delta p_n \gg p_{n0}, \text{ alors } n_n \approx N_D \text{ et } p_n \gg p_{n0} \text{ puisque } p_n = \Delta p_n + p_{n0}$$

Ainsi, d'après la relation (2-46) :

$$U = \frac{1}{\tau_0} \frac{p_n \cdot N_D - n_i^2}{p_n + N_D + 2n_i}$$

Comme $N_D \gg p_n et N_D \gg n_i$

$$U = \frac{1}{\tau_0} \left(p_n - \frac{n_i^2}{N_D} \right) \text{ ou encore } U = \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_0}$$
(2-47)

Ceci signifie que la disparition des porteurs en excès est proportionnelle à l'écart des concentrations par rapport à l'équilibre thermodynamique. Nous pouvons donner un exemple pratique :

$$N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}, \tau_0 = 10^{-7} \text{ s}, n_i^2 = 2.10^{20} \text{ cm}^{-6}, p_{no} = 2.10^3 \text{ cm}^{-3}, p_n = 10^{10} \text{ cm}^{-3},$$

alors $U = 10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$

C. Déficit d'électrons et de trous dans le matériau

Dans certaines conditions que nous verrons plus loin, le semi-conducteur peut être déserté par les électrons et les trous. En supposant, pour simplifier que : $n \ll n_i$ et $p \ll n_i$:

$$U = -\frac{n_i^2}{2.\tau_0.n_i}, ou \ encore \quad U = -\frac{n_i}{2\tau_0}$$
(2-48)

Dans cette expression, le signe moins (U négatif) traduit le phénomène de génération de paires électron-trou alors que dans la formule (2-41) le signe plus (U positif) traduit un phénomène de recombinaison.

Chapitre 3 : Jonction PN

3.1. Constitution de la jonction PN

3.1.1. Réalisation physique et définitions

La jonction PN est physiquement la juxtaposition de deux régions dopées différemment dans un même cristal semi-conducteur. La zone frontière de passage de la région de type n à la région de type p s'appelle la jonction métallurgique. Lorsque le matériau semi-conducteur est le même pour les deux zones dopées différemment, par exemple du silicium, cette jonction est appelée homojonction. Quand les matériaux sont différents, c'est le cas dans des composants à base de composés semi-conducteur III-V, on parle d'hétérojonction. Dans ce dernier cas, il faut une compatibilité des réseaux cristallins, paramètres de maille voisins, pour considérer qu'il y ait continuité du cristal. Nous nous limiterons dans le cadre de ce cours aux homojonctions.

Nous supposerons dans ce qui suit que :

- les dopages sont constants de part et d'autre,
- la transition du type n au type p est brutale,

- il n'y a pas de rupture du réseau cristallin ; nous définirons dans ce cas une jonction dite abrupte (variation de profil abrupte), les profils étant de plus constants dans chacune des zones. La figure 3.1 montre un schéma simplifié d'une telle structure.



Figure 3.1 : structure schématique d'une jonction pn. La jonction métallurgique est la zone frontière entre les deux types de dopage réalisés en pratique dans un même cristal.

Bien évidemment cette hypothèse est simplificatrice et permettra de mener des calculs analytiques pas trop compliqués.

Nous retrouvons dans notre structure les quatre types de charges que sont les électrons et les trous ainsi que les atomes dopants ionisés accepteurs et donneurs. Nous pourrons considérer un modèle unidimensionnel pour déterminer les grandeurs physiques et électriques, l'axe d'étude étant perpendiculaire à la jonction physique, c'est-à-dire à la jonction métallurgique. La jonction a donc une surface indéterminée dans les calculs.

3.1.2. Concentrations et types de porteurs dans la jonction

Nous considérons la jonction abrupte et donc les concentrations constantes de part et d'autre de la jonction métallurgique. N_D est la concentration de dopant dans la zone n, N_A , la concentration de dopant de la zone p. Nous avons vu précédemment que dans des conditions normales de fonctionnement, autour de la température ambiante, tous les atomes dopants sont ionisés et que les concentrations des porteurs libres dans les zones dopées de type affirmé (vraiment n ou vraiment p), étaient quasiment égales aux concentrations des atomes dopants ionisés.

Ainsi, à l'équilibre thermodynamique,

<u>Région n</u> : les électrons sont les porteurs majoritaires, $n_{n0} = N_D$,

les trous sont les porteurs minoritaires, $p_{n0} = n_i^2/N_D$,

les dopants sont ionisés positivement,

<u>Région p</u> : les trous sont les porteurs majoritaires, $p_{p0} = N_A$,

les électrons sont les porteurs minoritaires, $n_{po} = n_i^2/N_A$,

les dopants sont ionisés négativement.

La figure 3.2 fait apparaître ces concentrations, au moment de la mise en contact fictive et met en évidence qu'une analyse approfondie doit être effectuée au niveau de la jonction métallurgique. Nous allons analyser dans un premier temps l'effet de la présence de charges de signe opposé au niveau de la jonction métallurgique, à l'équilibre thermodynamique, c'està-dire sans aucune application d'un champ électrique extérieur. Nous dirons dans ce cas que la jonction n'est pas polarisée.



Figure 3.2 : charges en présence dans la jonction pn. Les électrons sont majoritaires en zone n minoritaires en et zone p. Les trous sont majoritaires en zone p et minoritaires en zone n

3.2. Jonction à l'équilibre thermodynamique

3.2.1. Mouvement de charges au contact

En adoptant le modèle abrupt, la juxtaposition de deux zones dopées différemment entraînerait un phénomène de diffusion infini puisque le gradient des concentrations de porteurs serait infini. La structure va évoluer instantanément vers une situation acceptable physiquement. Il y a donc obligatoirement un phénomène de diffusion des porteurs depuis les zones où ils sont majoritaires vers les zones où ils sont minoritaires, le rapport étant immense, c'est-à-dire départ des électrons de la région n vers la région p et réciproquement pour les trous. Mais tout départ des porteurs libres entraîne une modification de charge locale puisque les ions qui ont engendré ces porteurs sont fixes dans le cristal à température ambiante. Dans la zone de contact, les électrons vont laisser derrière eux des ions positifs alors que les trous des ions négatifs, comme représenté sur la figure 3.3. Ces charges non compensées de part et d'autre de la jonction créent deux régions spatialement chargées et simultanément un champ électrique orienté depuis la région n vers la région p, obligatoirement. Cette zone, s'appelle zone de charge d'espace de la jonction ou zone de transition. Nous créons de la sorte un champ électrique qui va avoir tendance à renvoyer les électrons de la zone p vers la zone n et les trous de la zone n vers la zone p. Très rapidement, le système va tendre vers un équilibre entre le phénomène de diffusion et le phénomène de dérive. Si cela n'était pas le cas, il serait possible de créer un courant sans apport d'énergie, et cela serait exploité depuis longtemps !



Figure 3.3 : mouvement des charges au niveau de la jonction. Les électrons très nombreux en zone n diffusent vers la zone p ou ils sont minoritaires. Les trous de la zone p diffusent vers la zone n. Les ions immobiles de part et d'autre de la jonction ne sont plus compensés électriquement par les porteurs libres. Ils créent une zone de charge d'espace.

En supposant que dans la zone de charge d'espace, la concentration de porteurs libres est négligeable devant la concentration des atomes dopants ionisés, et en appelant x_n et x_p les abscisses des limites auxquelles on retrouve le matériau neutre (type n coté n et type p coté p), la neutralité globale de la structure permet d'écrire :

$$Q^+ = q.S.N_D^+.x_n$$
$$Q^- = -q.S.N_A^-.x_p$$

en appelant S, la surface de la jonction étudiée,

Q+, la charge totale de la zone de charge d'espace coté n,

Q-, la charge totale de la zone de charge d'espace coté p,

Comme la charge totale est nulle, $Q^+ + Q^- = 0$

C'est-à-dire que :

$$N_D. x_n = N_A. x_p \tag{3-1}$$

Cette relation fait apparaître clairement que l'extension de la zone de charge d'espace de part et d'autre de la jonction métallurgique est dans le rapport inverse des concentrations de dopants. Ainsi, si la jonction est dissymétrique (dopages de niveau différent), ce qui est très fréquent dans les dispositifs, la zone de charge d'espace s'étend principalement du côté le moins dopé.

A l'équilibre thermodynamique, le courant total pour chaque type de porteur est nul. Les relations (2-41) et (2-42) donnent :

$$j_n = +qD_n\frac{dn}{dx} + qn\mu_n.E = 0$$
(3-2)

$$j_p = -qD_p \frac{dp}{dx} + qp\mu_p. E = 0$$
(3-3)

Pour chaque type de porteur, la composante de diffusion compense la composante de dérive.

Rappelons aussi qu'en limite de zone de charge d'espace, la concentration des électrons du côté n, n_{no} , est égale à N_D , et que la concentration du côté p, n_{po} , est égale à n_i^2/N_A . Par analogie, nous déduisons facilement les concentrations des trous aux limites.

3.2.2. Tension de contact ou tension de diffusion

A partir des formules (3-2) et (3-3), en considérant soit les électrons, soit les trous, on peut déduire la variation du potentiel induit correspondant à l'intégrale du champ électrique dans la zone de charge d'espace.

$$D_n \frac{dn}{dx} = -n\mu_n \cdot E \quad \Rightarrow \frac{dn}{n} = \frac{\mu_n}{D_n} (-\xi \cdot dx) = \frac{\mu_n}{D_n} \cdot dV$$
$$\int_{ZCE} dV = \frac{D_n}{\mu_n} \int_{(n)}^{(p)} \frac{dn}{n} \quad \Rightarrow V = V_T \left[\ln(n) \right]_{nn_0}^{np_0} = V_T \ln \frac{np_0}{nn_0}$$
$$V = -V_T \ln \frac{N_A \cdot N_D}{n_i^2}$$

La tension calculée, est la tension de diffusion ou tension de contact, non mesurable extérieurement, que nous donnons habituellement sous la forme de sa valeur absolue (ne dépend donc pas de l'orientation choisie pour l'axe des x). Cette tension est toujours orientée de la zone n vers la zone p. Dans le cas de notre calcul, le signe négatif provient du choix de l'orientation initiale de la zone n vers la zone p.

$$|V_{D}| = |V_{bi}| = V_{T} \ln \frac{N_{A} \cdot N_{D}}{n_{i}^{2}}$$
(3-4)

Nous pouvons déduire bien évidemment la même tension de diffusion en partant du calcul du courant de trous.

Remarque : compte tenu des ordres de grandeurs de n_i , N_A , N_D , et sachant que V_T est égal à 26 mV à 300K, cette tension est comprise en 0,7V et 1,1V dans le silicium. La notation $V_{_{bi}}$ vient de l'anglais « built-in potential ».

3.2.3. Diagramme d'énergie

L'analyse du diagramme d'énergie est en pratique un élément très pratique et très puissant pour comprendre ou prédire le fonctionnement d'un dispositif. Ceci plus particulièrement dans l'étude des transistors (voir cour de l'électronique approfondie).



Figure 3.4 : diagramme d'énergie de la jonction à l'équilibre thermodynamique. L'écart énergétique entre les deux zones, ou hauteur de barrière, est égal à la tension de contact multipliée par la E_v charge élémentaire. Cette hauteur de barrière dans ce cas simple (homojonction) est identique pour les électrons et pour les trous.

A l'équilibre thermodynamique, le niveau de Fermi est toujours constant ou plat. C'est donc E_F la première grandeur à tracer et qui va servir de référence pour les autres niveaux (figure 3.4). L'écart entre les bandes de conduction et de valence reste dans notre modèle en permanence égal au gap. Il suffit donc de tracer la variation de E_C à travers la structure pour en déduire E_V , par exemple. Puisque nous avons vu qu'il existait une différence de potentiel à l'équilibre thermodynamique, l'écart entre la position de la bande de conduction de part et d'autre (et donc de la bande de valence) est égal à qV_D . Le diagramme de la figure 3.4 fait apparaître la hauteur de barrière d'énergie pour les deux types de porteurs, qui correspond à qV_D et qui devront être franchies par les porteurs. Intuitivement, si nous souhaitons créer un régime de conduction, il faudra abaisser la barrière d'énergie pour chacun des types de porteur.

3.2.4. Champ électrique et dimension de la zone de charge d'espace

Nous pouvons déterminer en tout point de la zone de charge d'espace le champ électrique à partir de la forme locale du théorème de Gauss dans un modèle unidimensionnel.

$$div\,\vec{\xi} = \frac{\rho}{\varepsilon}$$

Comme $\varepsilon = \varepsilon_r \varepsilon_0$

$$\frac{d\xi}{dx} = \frac{\rho}{\varepsilon_r \varepsilon_0} = \frac{q}{\varepsilon_r \varepsilon_0} [p - n + N_D - N_A]$$

Pour intégrer cette équation différentielle, nous allons nous placer successivement du côté n et du côté p dans la zone de charge d'espace. A la limite de cette zone, la neutralité étant assurée, le champ électrique est nul (pas de champ extérieur).

Comme représenté sur la figure 3.5, nous supposons que dans la zone de charge d'espace coté n, ne subsistent que les charges apportées par les ions donneurs, toutes les autres étant négligeables, et que du côté p, ne subsistent que les ions accepteurs. Ceci ne peut être qu'une approximation, puisqu'il n'y a pas de gradient infini de concentration de porteurs libres et qu'en limite de zone de charge d'espace le passage se fait progressivement.

La figure 3.5 fait apparaître la répartition des charges dans la zone de charge d'espace appelée aussi zone désertée.



Figure 3.5 : charges de la zone de charge d'espace. La neutralité électrique globale est respectée, les charges en vis-à-vis étant de même valeur absolue mais de signe opposé.

Coté n :

$$\frac{d\xi}{dx} = \frac{\rho}{\varepsilon_r \varepsilon_0} = +\frac{qN_D}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \implies \xi(x) = +\frac{qN_D}{\varepsilon_r \varepsilon_0}x + cte$$

Puisque $\xi(-X_n)=0$

$$\xi(x) = +\frac{qN_D}{\varepsilon_r\varepsilon_0}(x+x_n)$$
(3-5)

Coté p :

$$\frac{d\xi}{dx} = \frac{\rho}{\varepsilon_r \varepsilon_0} = -\frac{qN_A}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \implies \xi(x) = -\frac{qN_A}{\varepsilon_r \varepsilon_0} x + cte$$

Puisque
$$\xi(+X_{\rm P})=0$$

$$\xi(x) = -\frac{qN_A}{\varepsilon_r \varepsilon_0} (x - x_p) \qquad (3-6)$$

A partir du profil de charge de la figure 3.5, la figure 3.6 montre la variation du champ électrique qui, dans ce cas simplifié, varie linéairement dans chacune des deux zones.

En x = 0, à la jonction métallurgique, le champ électrique est maximal.

$$\xi(0) = \frac{qN_A x_p}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \qquad \qquad \xi(0) = \frac{qN_D x_n}{\varepsilon_r \varepsilon_0}$$

Comme $N_A x_p = N_D x_n$, les deux valeurs calculées sont égales :

$$\xi max = \frac{qN_D x_n}{\varepsilon_r \varepsilon_0} = \frac{qN_A x_p}{\varepsilon_r \varepsilon_0}$$
(3-7)



Figure 3.6 : variation du champ électrique dans la zone de charge d'espace de la jonction pn. Le champ est maximum à la jonction métallurgique.

L'intégrale du champ électrique correspond à une différence de potentiel qui est en fait la tension de diffusion, V_D .

$$V_D = -\int_{-x_n}^{+x_p} \xi \, dx$$

Ainsi, en remplaçant ξ des équations (3.5) et (3.6) dans l'expression, nous obtenons :

$$\begin{split} V_{D} &= \frac{qN_{D}}{\varepsilon_{r}\varepsilon_{0}} \bigg[x_{n} \cdot x + \frac{x^{2}}{2} \bigg]_{-x_{n}}^{0} + \frac{qN_{A}}{\varepsilon_{r}\varepsilon_{0}} \bigg[x_{p} \cdot x - \frac{x^{2}}{2} \bigg]_{0}^{x_{p}} \\ |V_{D}| &= \frac{qN_{D}}{\varepsilon_{r}\varepsilon_{0}} \frac{x_{n}^{2}}{2} + \frac{qN_{A}}{\varepsilon_{r}\varepsilon_{0}} \frac{x_{p}^{2}}{2} \quad avec \ N_{A} \cdot x_{p} = N_{D} \cdot x_{n} \\ |V_{D}| &= \frac{qN_{D}}{2\varepsilon_{r}\varepsilon_{0}} x_{n}^{2} \left(1 + \frac{x_{p}}{x_{n}} \right) = \frac{qN_{A}}{2\varepsilon_{r}\varepsilon_{0}} x_{p}^{2} \left(1 + \frac{x_{n}}{x_{p}} \right) \end{split}$$

Nous en déduisons aisément :

$$\begin{aligned} x_p &= \sqrt{\frac{2\varepsilon_r \varepsilon_0}{q N_A} \frac{1}{1 + \frac{N_A}{N_D}} |V_D|} \\ x_n &= \sqrt{\frac{2\varepsilon_r \varepsilon_0}{q N_D} \frac{1}{1 + \frac{N_D}{N_A}} |V_D|} \end{aligned}$$

L'extension de la zone de charge d'espace totale, W, est égale à la somme des deux zones en vis-à-vis. W peut être exprimé en fonction de x_p et des dopages :

$$W = x_p + x_n = x_p \left[1 + \frac{x_n}{x_p} \right] = x_p \left[1 + \frac{N_D}{N_A} \right]$$

$$W = \sqrt{\frac{2\varepsilon_r \varepsilon_0}{q} \frac{N_A + N_D}{N_A N_D}} |V_D|$$
(3-8)

Si $N_D \gg N_A$, $x_n \ll x_p$, alors :

$$W = \sqrt{\frac{2\varepsilon_r \varepsilon_0}{q} \frac{1}{N_A} |V_D|} \ avec \quad W \approx x_p \quad et \quad x_n \approx W. \frac{N_A}{N_D}$$
(3-9)

L'expression (3.9) ci-dessus, montre qu'il est possible de faire une évaluation rapide de l'extension de la zone de charge d'espace en ne considérant que la zone la moins dopée. L'erreur est simplement dans le rapport des concentrations de dopants (par exemple 1%). Une évaluation rapide montre qu'en fonction du niveau de dopage qui varie entre 10¹⁴ et 10²⁰ cm⁻³, W varie à l'équilibre thermodynamique entre une centaine d'Angström et quelques microns.

Notons que si une tension, V_{app} , est appliquée aux bornes de la jonction, la tension aux bornes de la zone de charge d'espace devient la somme algébrique de la tension appliquée et de la tension de diffusion, V_D + V_{app} . Pour connaître la nouvelle extension de la zone de charge d'espace, il suffit alors de remplacer dans les expressions (3.8) ou (3.9) / V_D | par / V_D / - V_{app} , sachant que V_{app} sera négatif si l'on applique une tension positive sur la zone n et négative sur la zone p (tendance à augmenter le champ électrique).

3.3. Jonction hors équilibre

3.3.1. Analyse physique du problème

L'application d'une différence de potentiel sur les contacts aux extrémités des couches n et p, va se reporter au niveau de la zone de charge d'espace qui s'étend de part et d'autre de la jonction métallurgique, la conduction des zones dopées étant suffisante. En d'autres termes, cela signifie que les couches quasi-neutres n et p se comportent comme des équipotentielles. Cela sera vrai tant que la densité totale de courant drainée restera "faible" vis-à-vis de la résistance des couches. Autrement dit, tant que la chute de potentiel dans les couches quasineutres reste négligeable vis-à-vis de la tension appliquée.

Si la différence de potentiel appliquée a tendance à diminuer le champ électrique existant à l'équilibre thermodynamique, elle facilitera le phénomène de diffusion aux dépens du phénomène de dérive dans le champ électrique. Le gradient de concentration de part et d'autre de la zone de charge d'espace est alors important et le courant de diffusion correspondant peut être important. Une autre façon de présenter le phénomène consiste à considérer que la barrière de potentiel est abaissée celle-ci s'opposant moins au transfert des porteurs par diffusion.

Dans le cas où la différence de potentiel aurait tendance à augmenter le champ électrique, le phénomène de diffusion est défavorisé aux dépens du phénomène de dérive dans le champ électrique. Mais le champ électrique, même de très grande amplitude, ne draine que des porteurs minoritaires depuis les couches quasi-neutres (électrons dans la zone p et trous dans la zone n), qui sont comme nous l'avons vu précédemment en quantité extrêmement plus faible que celle des majoritaires. Les densités de courants résultant ne pourront donc qu'être très faibles, toute autre considération mise à part.

En conclusion :

- une diminution du champ électrique par application d'une tension positive sur la zone p, peut créer un courant important : la jonction est polarisée en direct

- une augmentation du champ électrique par application d'une tension positive sur la zone n, ne crée qu'un très faible courant : la jonction est polarisée en inverse.

3.3.2. Polarisation directe et inverse

De l'analyse précédente, nous pouvons représenter sur la figure 3.7 les conditions de polarisation directe : pour la polarisation inverse, il suffit d'inverser le sens du générateur continu.



Figure 3.7 : polarisation directe de la jonction pn. Une tension positive est appliquée sur la zone p. Le champ interne à la jonction est alors diminué. Le courant peut devenir important en raison de la possibilité de diffusion des porteurs.

Polarisation directe : borne + sur la zone p,

borne – sur la zone n,

le champ électrique appliqué diminue le champ interne initial,

moyen mnémotechnique : positif sur p, négatif sur n

Polarisation inverse : borne - sur la zone p,

borne + sur la zone n,

le champ électrique appliqué augmente le champ interne initial.

3.3.3. Profils de concentrations des porteurs dans les zones quasi-neutres

A l'équilibre thermodynamique, nous avons vu que les concentrations des porteurs dans chacune des deux zones étaient :

$$\underline{C\hat{o}t\acute{e} n}: n_{n0} \approx N_D; \ p_{n0} \approx \frac{n_i^2}{N_D} \qquad \qquad \underline{C\hat{o}t\acute{e} p}: p_{p0} \approx N_A; \ n_{p0} \approx \frac{n_i^2}{N_A}$$

A. Approximation de Boltzmann

Si nous polarisons en direct la jonction, nous favorisons le phénomène de diffusion et donc, intuitivement, nous augmentons la concentration de porteurs de part et d'autre de la jonction. En effet, un transit important de porteurs impose une augmentation de niveau (telle une rivière au pied d'un barrage lorsque le débit de celui-ci augmente). L'augmentation ne sera prépondérante que pour les porteurs minoritaires, la variation de la concentration des porteurs majoritaires ne pouvant être que négligeable dans un régime de fonctionnement *normal* (le niveau supérieur du barrage n'est pas modifié sensiblement lorsque les turbines fonctionnent).

Le problème va consister à évaluer les concentrations de porteurs minoritaires en limite de zone de charge d'espace, sous polarisation. Pour cela, nous allons de nouveau partir des équations des densités de courant (3-2) et (3-3) valables à l'équilibre thermodynamique.

$$j_n = +qD_n\frac{dn}{dx} + qn\mu_n.E = 0$$
(3-2)

$$j_p = -qD_p \frac{dp}{dx} + qp\mu_p. E = 0$$
(3-3)

Analysons par exemple les deux termes intervenant dans l'équation de la densité de courant d'électrons en effectuant une évaluation numérique simplifiée.

$$j_{nDiff} = +qD_n \frac{dn}{dx}$$
 et $j_{ndir} = qn\mu_n E$

Il suffit de calculer l'un des deux termes. Supposons la jonction en silicium telle que :

$$N_A = 10^{17} \text{ cm}^{-3}, N_D = 10^{19} \text{ cm}^{-3}, D_n = 10 \text{ cm}^2/\text{s}, \mu_n = 260 \text{ cm}^2/\text{Vs},$$

 $n_i^2 = 2.10^{20} \text{ cm}^{-6}, \epsilon_r \epsilon_o = 10^{-12} \text{ F/cm}$

Nous déduisons des différentes relations : $V_D = 0.96V$, $W = 0.11 \mu m$, $\xi_{max} = 1.6.10^4 V/cm$.

En supposant que le gradient de concentration soit le gradient moyen entre $-x_n$ et $+x_p$:

$$dn/dx \# \Delta n/\Delta x = (N_D - n_{po})/W$$

mais $(N_D - n_{po})/W \# N_D/W = 10^{19}/1, 1.10^{-5} = 9.10^{23} \text{ cm}^{-4}$

dans ces conditions :

$$J_{ndiff} = 1,5.10^{6} \,\mathrm{A/cm}^{2} = J_{nde}$$

Nous constatons ainsi que les composantes de diffusion et de dérive, qui sont antagonistes, sont *énormes*. Un très léger déséquilibre entre les deux composantes peut entraîner un courant résultant important à travers la structure. Nous pouvons alors faire une approximation qui est appelée approximation de Boltzmann :

Le courant résultant reste négligeable devant les composantes de chacun des courants de porteurs en régime de conduction.

Même sous polarisation les équations (3-2) et (3-3) restent ainsi valables :

$$j_n = +qD_n\frac{dn}{dx} + qn\mu_n. E \approx 0$$
(3-10)

En conclusion

$$j_p = -qD_p \frac{dp}{dx} + qp\mu_p. E \approx 0$$
(3-11)

3.3.4. Capacité de la jonction

Nous avons vu précédemment que l'extension de la zone de charge d'espace s'exprimait en fonction de la tension de diffusion et de la tension appliquée lorsque celle-ci existe. La présence des deux charges de type opposé situées de part et d'autre de la jonction métallurgique crée un effet équivalent à celui de deux plaques d'un condensateur dont la distance correspond à l'extension de la zone de charge d'espace, W.

$$W = \sqrt{\frac{2\varepsilon_r \varepsilon_0}{q} \frac{1}{N_A} (|V_D| - V_F)} \quad ou \ encore \ W = \sqrt{\frac{2\varepsilon_r \varepsilon_0}{q} \frac{1}{N_A} |V_D| + V_R}$$

 V_F et V_R étant, respectivement, la tension appliquée en direct ou en inverses (la lettre F est l'initial du mot anglais 'Forward' et le mot R est l'initial du mot 'Reverse').

Lorsque la tension appliquée est inverse et pour une zone p moins dopée. Nous définissons alors la capacité par unité de surface par :

$$C_{S} = \frac{\varepsilon_{r}\varepsilon_{0}}{W} = \sqrt{\frac{1}{2}qN_{A}\varepsilon_{r}\varepsilon_{0}\frac{1}{\sqrt{|V_{D}| + V_{R}}}} \qquad \text{en F/cm}^{2} \quad (3-12)$$

Bibliographie

- C.Kittel, Physique de l'état solide, 7^e édition, ed. DUNOD (1998).
- J. Hladik, M.Chrysos, P-Emmanuel Hladik, L.U. Ancarani, Mécanique quantique (atomes et noyaux, applications technologiques), 3^e Edition, Ed. DUNOD.
- S.M. Sze, Gwork K. Ng, physics of semiconductor devices, Third edition, Ed. JOHN WILEY & SONS, JNC (2007).
- Sheng S. Li, Semiconductor physical electronics, second edition, Ed. Springer (2006).
- H.Y. Seba, R. Cherfi, In: Advances in Materials Science Research. Volume 18, ISBN: 978-1-63463-495-3 (2015) 229-239.
- N.W.Ashcroft, et N.D. Mermin, Physique des solides, Ed. EDP sciences (2002).
- J.P.Colinge, F.Van de Wiele, Physique des dispositifs semi-conducteurs, Ed. De Boeck université (1996).
- A. Chovet, P. Masson, Physique des semi-conducteurs, Ecole polytechnique universitaire de Marseille.