

Chapitre 1 : Rappels sur les semiconducteurs :

I.1. Rappel : Cristaux et types de liaisons

Les cristaux sont classés selon la nature des liaisons établies entre les différents atomes ou molécules. Il existe quatre types de liaisons différentes : les liaisons de van der Waals, les liaisons covalentes, les liaisons ioniques et les liaisons métalliques.

a. Les liaisons de Van der Waals : Ces liaisons sont responsables de la formation des **cristaux moléculaires**. Dans ce type de cristaux, les forces d'interaction sont importantes à l'intérieur de la molécule mais très faibles entre elles (force de type Van der Waals). En conséquence, ces cristaux sont peu résistants et leurs températures de fusion et d'ébullition sont très basses.

b. Les liaisons covalentes : Ces liaisons s'établissent entre les éléments de la colonne IV de la classification périodique (C, Si, Ge, Sn...) et forment ainsi des **cristaux covalents**. Les éléments de la colonne IV possèdent quatre électrons périphériques appelés électrons de valence. Ces électrons de valence forment quatre liaisons avec quatre autres atomes voisins. L'énergie de liaison dans le cas du carbone de forme allotropique diamant (**isolant**) est très importante que celle dans l'étain (conducteur et l'énergie de liaison nulle). Dans le cas du silicium et du germanium, l'énergie liaison est intermédiaire, c'est le cas des **semi-conducteurs**.

Les cristaux covalents sont aussi formés par la liaison de métalloïdes (éléments non métalliques ; B, C, N...) ou par un métalloïde et un autre élément peu électropositifs (BN, AlN, SiC, SiO₂...). En conséquence, les cristaux formés ont une grande dureté résultant de fortes liaisons covalentes et conductibilités électrique et ionique faibles.

c. Les liaisons ioniques : Elles sont responsables de la formation des cristaux ioniques. L'association de l'un des éléments alcalins de la colonne I de la classification périodique (élément fortement électropositif ; Li, Na, K, Rb, Cs) avec l'un des éléments halogènes de la colonne VII de la classification périodique (élément fortement électronégatif ; F, Cl, Br, I) permet la formation par attraction coulombienne de cristaux ioniques tels que LiF, NaCl et KBr. La propriété physique la plus importante de ce type de cristaux résulte de l'importante énergie de liaisons entre atomes, elle forme des cristaux durs.

d. Les liaisons métalliques : Ces liaisons forment les métaux, elles sont formées par des éléments électropositifs ayant un seul électron périphérique. Dans ce type de métaux conducteur, l'électron périphérique, électron libre, est responsable de la conduction électrique. Parmi les métaux, le cuivre (Cu), l'argent (Ag) et l'or (Au) sont des meilleurs conducteurs de courant. En générale, les métaux sont moins durs et fondent à basse température.

I.2. Classification selon la conductivité des milieux matériels :

Selon les propriétés électriques, les matériaux sont classés en trois catégories, conducteurs, isolants et semi-conducteurs, voir schéma.

a. Conducteurs : Les métaux tels que le fer (Fe), le cuivre (Cu), l'or (Au), l'argent (Ag) et l'aluminium (Al) sont des conducteurs de courant électrique. La présence d'électrons libres dans la couche périphérique (densité $n \approx 10^{22}$ à 10^{23} é/cm³) est à l'origine de la conductivité électrique. A température ambiante la résistivité ρ des conducteurs est très faible ($\rho \leq 10^{-5}$ Ω.cm).

b. Isolants : Les matériaux qui ont une résistivité ρ supérieure à 10^8 Ω.cm sont des isolants (matériaux non conducteurs de courant électrique). Parmi ces matériaux ; le verre, le mica, la silice (SiO₂) et le carbone (Diamant)...La conductivité des isolants est donc très faible/.

c. Semi-conducteurs : Cette classe de matériaux se situe entre les métaux (conducteurs) et les isolants (non conducteurs). La résistivité ρ des semi-conducteurs varie de 10^{-3} à 10^{+4} Ω.cm. les électrons libres et les trous mobiles sont les porteurs de charges responsables de la conductivité électrique. Un semi-conducteur peut être soit intrinsèque (pur) ou extrinsèque (dopé) par des impuretés.

- Semi-conducteur intrinsèque : la résistivité du silicium pur est de l'ordre de $\rho \approx 10^3 \Omega \cdot \text{cm}$.
- Semi-conducteur extrinsèque : la résistivité du silicium dopé par le Bore ou le phosphore est de l'ordre de $10^{-2} \Omega \cdot \text{cm}$.

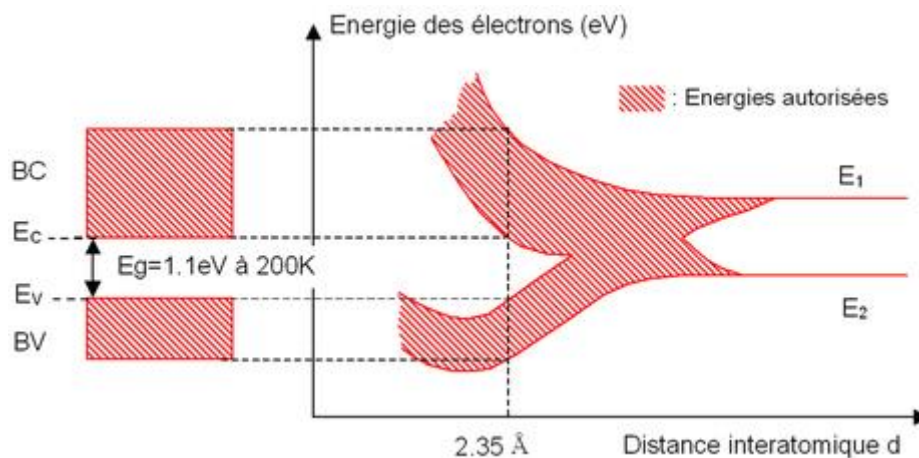
I.2.1 Structure de bandes, bande de conduction (BC) et bande de valence (BV), des semi-conducteurs et concept de la bande interdite (gap).

Considérons un atome de silicium Si isolé, les niveaux énergétiques de ses électrons sont discrets (voir le modèle de Bohr pour l'hydrogène). Lorsque l'on rapproche de ce dernier un atome identique, les niveaux énergétiques discrets de ses électrons se scindent en deux sous l'interaction réciproque des deux atomes. Plus généralement, lorsque l'on approche N atomes, les niveaux énergétiques se scindent en N niveaux. Ces N niveaux sont très proches les uns des autres et si la valeur de N est grande, ce qui le cas pour un cristal, ils forment une bande d'énergie continue. La notion de rapprochement des atomes est donnée par la distance inter-atomique d.

A présent considérons des atomes de silicium Si arrangés aux nœuds d'un réseau périodique, mais avec une maille très grande de telle manière que les atomes puissent être considérés comme isolés. Les deux niveaux les plus énergétiques sont repérés par E_1 et E_2 . Rapprochons homothétiquement les atomes les uns des autres, les états énergétique électronique se scindent et forment deux bandes continues appelées **bande de conduction BC** et **bande de valence BV**. La figure 1 montre la formation de ces bandes en fonction de la distance interatomique d.

Pour les électrons d'un cristal de silicium ($d_0 = 2,35 \text{ \AA}$), on constate qu'il existe deux bandes continues d'énergie (BC et BV) et que ces bandes sont séparées par une bande interdite car d'énergie inaccessible aux électrons. Cette région interdite est appelée « gap » et sa largeur E_g est caractéristique du matériau. Notons que l'énergie du bas de la bande de conduction est notée E_C et que celle du haut de la bande valence est notée E_V ainsi nous avons l'égalité $E_g = E_C - E_V$. Précisons que les bandes continues d'énergie BC et BV ne sont qu'une représentation des énergies accessibles par les électrons, ceci ne présage en rien de l'occupation effective de ces bandes par ces derniers.

Structure de bande dans les semi-conducteurs (cas du silicium: Si), bande de valence, bande de conduction et bande interdite

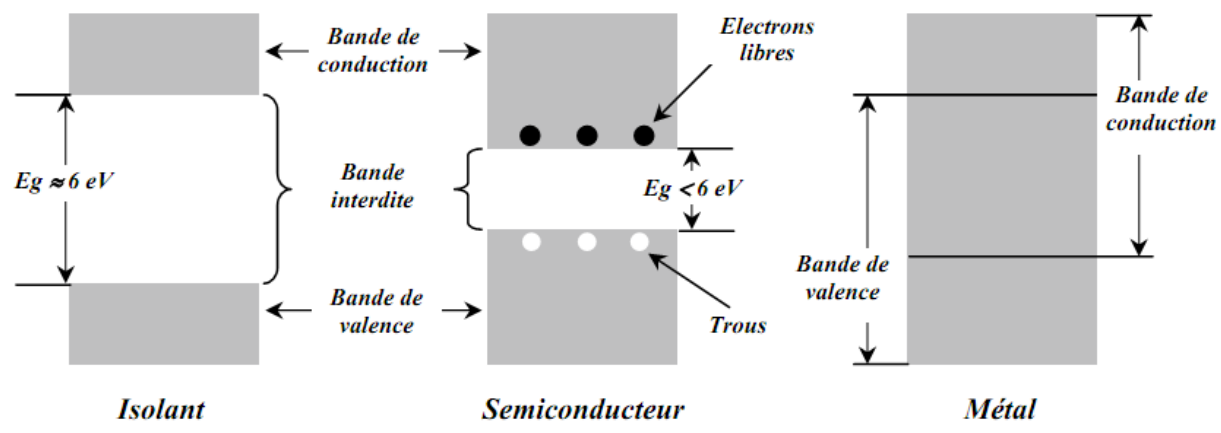


I.2.2. Structure de bandes : métal ; semi-conducteurs ; isolant

Les propriétés électriques d'un matériau sont fonction des populations électroniques des différentes bandes permises. La conduction électrique résulte du déplacement des électrons à l'intérieur de chaque bande. Sous l'action du champ électrique appliqué au matériau l'électron acquiert une énergie cinétique dans le sens opposé au champ électrique. Considérons à présent une bande d'énergie vide, il est évident de par le fait qu'elle ne contient pas d'électrons, elle ne participe pas à la formation d'un courant électrique. Il en est de même pour une bande pleine. En effet, un électron ne peut se déplacer que si il existe une place libre (un trou) dans sa bande d'énergie. Ainsi, un matériau dont les bandes d'énergie sont vides ou pleines est un **isolant**. Une telle configuration est obtenue pour des énergies de gap supérieures à ~ 5.5 eV, car pour de telles énergies, l'agitation thermique à 300K, ne peut pas faire passer les électrons de la bande de valence à celle de conduction par cassure de liaisons électronique. Les bandes d'énergie sont ainsi toutes vides ou toutes pleines.

Un semi-conducteur : est un isolant pour une température de 0K. Cependant ce type de matériau ayant une énergie de gap plus faible que l'isolant (~ 1 eV), aura de par l'agitation thermique ($T=300$ K), une bande de conduction légèrement peuplée d'électrons et une bande de valence légèrement dépeuplée. Sachant que la conduction est proportionnelle au nombre d'électrons pour une bande d'énergie presque vide et qu'elle est proportionnelle au nombre de trous pour une bande presque pleine, on déduit que la conduction d'un semi-conducteur peut être qualifiée de «mauvaise».

Pour **un conducteur** : l'interpénétration des bandes de valence et de conduction implique qu'il n'existe pas d'énergie de gap. La bande de conduction est alors partiellement pleine (même aux basses températures) et ainsi la conduction du matériau est « élevée ».



Structure en bandes d'énergie des matériaux ; Isolants, Semi-conducteurs et Métaux

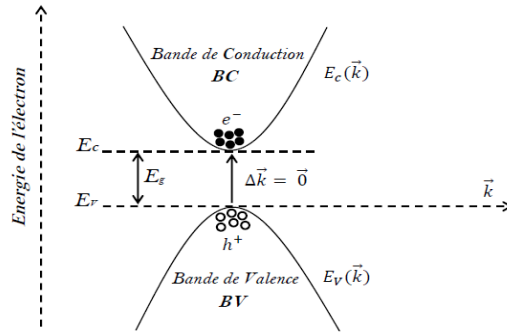
cas des ISOLANTS :

La BdV est totalement pleine (bande saturée)

La BdC est totalement vide.

E_g est telle (plusieurs eV) que ni un champ électrique, ni la température ne peuvent faire passer un électron de la BdV à la BdC.

Les courbes $E(\vec{k})$ dites aussi les relations de dispersion E et \vec{k} est le vecteur d'onde associé à un électron (quantité de mouvement $\vec{p} = \hbar \vec{k}$,



Dans les semi-conducteurs à gap direct le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont au même point (\vec{k}) dans la zone de Brillouin (ZB) ($\Delta\vec{k} = 0$), lorsque $\Delta\vec{k} \neq 0$ le semi-conducteur est à gap indirect

1.2.2.1. Masse effective :

Au voisinage d'un extremum des bandes (BV ou BC), on peut approcher les relations de dispersion $E(k)$ par une approximation parabolique similaire à la relation entre l'énergie cinétique et la quantité de mouvement en mécanique quantique pour l'électron libre de masse m_e

$$E(\vec{k}) \approx E_C + 0 + \frac{1}{2} \frac{d^2 E}{d\vec{k}^2} k^2$$

$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2}{2m_c^*} K^2 \quad (\text{pour l'électron libre } E(k) = \frac{\hbar^2}{2m_e} K^2)$$

Ou $m_c^* = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right)^{-1}$, m^* est la masse effective de l'«électron de la bande de conduction.

Pour la bande de valence $E(k) = E_v - \frac{\hbar^2}{2m_v^*} K^2$

Ou $m_v^* = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right)^{-1}$, m^* est la masse effective des trous de la bande de valence

Interprétation physique de la masse effective.

Soit une particule évoluant dans un cristal de dimensions finies. Elle est soumise à :

- F : la force extérieure appliquée;
- F_i : la résultante de toutes les forces d'interaction entre la particule et la structure.

si m_0 est la masse de la particule, la mécanique classique donne :

$$F + F_i = m_0 \ddot{y} \text{ donc } F = (m_0 - \ddot{y}/F_i) \ddot{y} \text{ et } F = m^* \ddot{y}$$

On introduit une particule fictive :

- de masse m^* (seule intervient la force extérieure)
- dont l'état est identique à celui de la particule réelle (accélération, énergie).

1.2.3. Exemple de semi-conducteur et leurs structures cristallines.

-Semi-conducteurs simples :

Un semi-conducteur simple est constitué d'un seul élément tels que les semi-conducteurs de la colonne IV de la classification périodique par exemple ; le silicium (Si) et de Germanium (Ge).

-Semi-conducteurs binaires de la classe (II-VI) : Les semi-conducteurs binaires de la classe (II-VI) sont constitués d'un élément de la colonne II et d'un autre élément de la colonne VI de la classification périodique. Sulfure de zinc (ZnS), Séléniure de zinc (ZnSe), Tellure de zinc (ZnTe), Sulfure de cadmium (CdS), Séléniure de cadmium (CdSe), Tellure de cadmium (CdTe), Oxyde de zinc (ZnO)...

-Semi-conducteurs binaires de la classe (III-V) : Les semi-conducteurs de la classe (III-V) sont composés d'un élément de la colonne III et d'un autre élément de la colonne V de la classification périodique. Exemples :

Arséniure de gallium (GaAs), Phosphure de gallium (GaP), Antimoniure de gallium (GaSb), Phosphure d'indium (InP), Arséniure d'indium (InAs), Antimoniure d'indium (InSb), Phosphure d'aluminium (AlP), Arséniure d'aluminium (AlAs), Antimoniure d'aluminium (AlSb).

Semi-conducteurs binaires de la classe (IV-VI) : Les semi-conducteurs de la classe (IV-VI) sont composés deux éléments différents de la colonne IV de la colonne V de la classification périodique. Exemples :

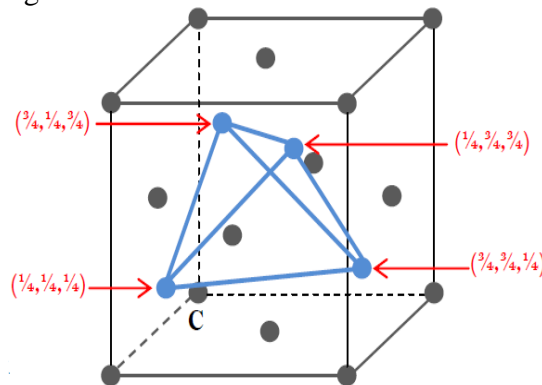
Sulfure de plomb(II) (PbS), Séléniure de plomb (PbSe), Tellure de plomb (PbTe), Tellure d'étain (SnTe), Sulfure de germanium (GeS), Séléniure de germanium (GeSe), Sulfure d'étain (II) (SnS) et Tellure de germanium (GeTe).

En générale, les semi-conducteurs se cristallisent dans l'une des structures suivantes : Structure diamant, structure Zinc blende (Cubique), structure Wurtzite (Hexagonale) et la structure NaCl.

a-Structure diamant :

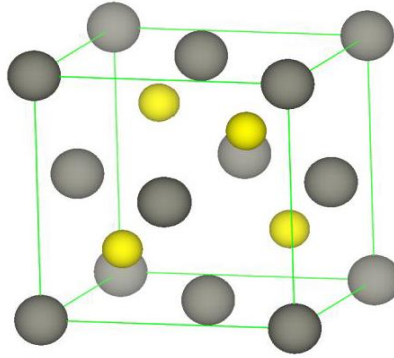
Dans la structure diamant il y a 14 atomes de carbone (C) placés aux noeuds du réseau cfc et 4 autres atomes de carbone placés en $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$, $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$, $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$ et $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})$.

Exemple : Le silicium et le germanium ont la structure du diamant



b. Structure Zinc blende :

Dans la structure zinc blende (appelée aussi sphalérite), les quatre atomes de carbone placés à l'intérieur dans la structure diamant sont remplacés par quatre atomes d'un autre élément. Dans le cas de ZnS (semiconducteurs de la classe II-VI ou III-V) les quatre atomes de soufre S (en jaune) occupent les sites de coordonnées $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$, $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$, $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$ et $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})$.

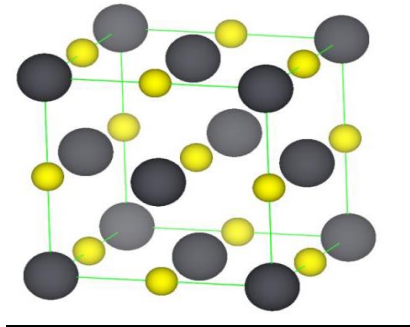


c. Structure Wurtzite (Hexagonale) :

Le ZnS se cristallise aussi sous la forme hexagonale, dite structure Wurtzite (groupe d'espace P63mc ; no 186). Les paramètres de maille sont : $a = b = 3.8100 \text{ \AA}$ et $c = 6.2300 \text{ \AA}$ avec ($c/a = 1.635$) ; $\alpha = \beta = 90^\circ$ et $\gamma = 120^\circ$. Dans cette structure, le motif est constitué de 2 atomes Zn (zinc) et 2 atomes S (soufre). Les deux atomes de Zn occupent les deux positions $(0, 0,0)$ et $(1/3, 2/3, 1/2)$. Comme dans le cas de la structure blende, chaque atome est entouré de 4 atomes de l'autre élément formant des tétraèdres, (semiconducteurs de la classe III-V)

d. Structure NaCl :

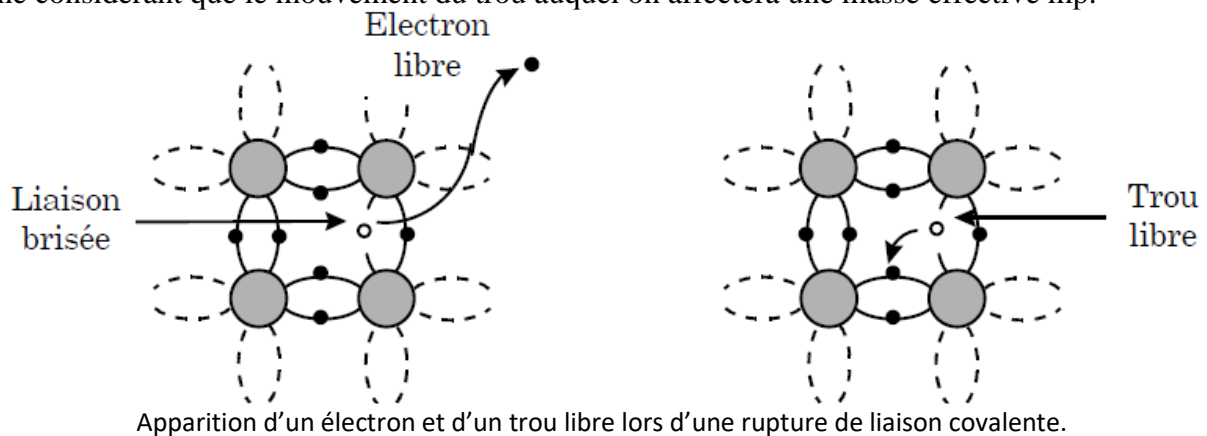
Le Sulfure de plomb(II) (PbS) est un semi-conducteur qui se cristallise dans la structure NaCl. Figure I.5. Dans cette structure les atomes de plomb occupent les noeuds du réseau cfc et les atomes du soufre S occupent le centre de la maille et les milieux des arêtes. Le motif est constitué de l'ion Pb $(0, 0,0)$ et de l'ion S $(1/2, 0,0)$.



I.3. Notion d'électron et de trou

On peut briser une liaison de valence si on apporte une énergie (thermique ou lumineuse) suffisante : on arrache ainsi un ou plusieurs électrons (précédemment engagés dans ces liaisons). Ceci revient, dans le modèle de bandes d'énergie utilisé, à faire passer ce ou ces électrons de la bande de valence à un état situé dans la bande de conduction (à un niveau dépendant de l'apport d'énergie) : l'électron est « libre » (il ne participe plus à une liaison cristalline) et peut, par contre, participer à la conduction électrique. Il se comporte comme une particule « quasi-libre » dans le semi-conducteur car il y subit l'influence du réseau. On représente cette particule (électron) « quasi-libre » par une « quasi-particule » libre en lui affectant une masse « effective » m_n différente de la masse m_0 ($0,91 \cdot 10^{-30} \text{ kg}$) de l'électron libre dans le vide. Dans le même temps qu'apparaît un électron libre dans la bande de conduction (devenu libre en brisant une liaison), apparaît une case (place) vide dans la bande de valence (correspondant à une liaison non assurée) qui peut être occupée par un autre électron de la BV (participant auparavant à une autre liaison covalente). A cette place vide (qu'on appelle trou) est affectée une charge positive $+q$ (son déplacement sera opposé à celui des électrons lors de l'application d'un champ électrique). La bande de valence étant toujours quasi-pleine (de $N-1$

électrons de valence), l'étude du mouvement des particules dans cette bande sera simplifiée en ne considérant que le mouvement du trou auquel on affectera une masse effective m_p .



I.4.1. Semi-conducteur intrinsèque : « non dopé » :

Un semi-conducteur intrinsèque est un matériau pur. En pratique, la préparation de semi-conducteurs purs est un défi technologique. Les méthodes de préparation ne permettent pas une synthèse des semi-conducteurs parfaitement purs et la présence d'impuretés en très faible densité ne change pas considérablement les propriétés électriques des semi-conducteurs.

Pour une température différente de 0 K, des électrons peuvent devenir libres² c'est à dire passer de la bande de valence à la bande de conduction, où leur concentration est notée n . Ces électrons laissent des trous dans la BV (avec une concentration notée p) eux-aussi libres de se déplacer avec, de plus, une égalité entre les concentrations n et p . Pour ce cas particulier, on définit une concentration intrinsèque n_i (égale aux concentrations n et p)

$$n = p = n_i(T)$$

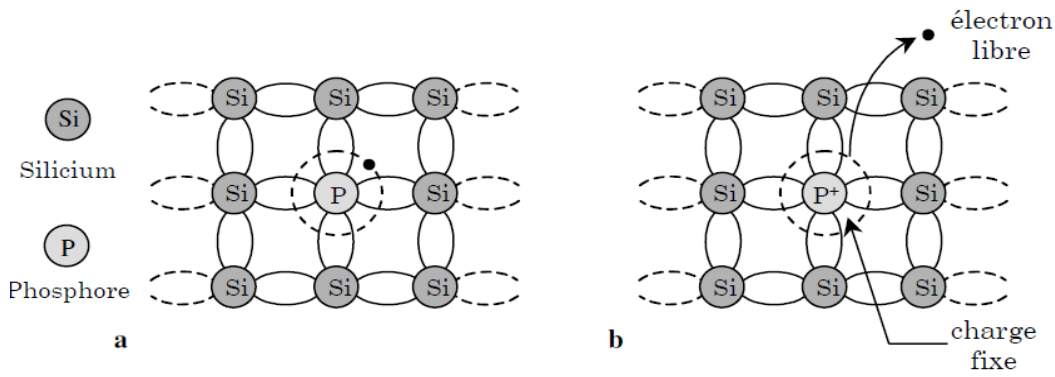
I.4.2. Semi-conducteur extrinsèque : dopage

L'introduction de certaines impuretés dans un matériau semi-conducteur permet d'y modifier le nombre de porteurs libres, de choisir le type de conduction (par électrons ou par trous) et de contrôler la conductivité.

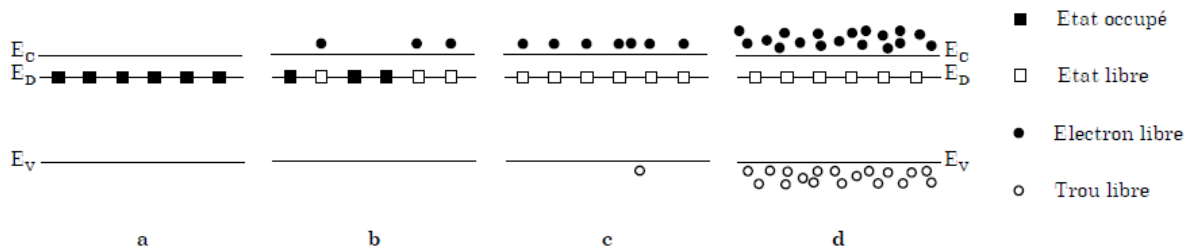
I.4.2.1. Semi-conducteur de type n

Pour un tel matériau, des atomes (ou impuretés) de type donneur (d'électrons) ont été introduits (en général en faible quantité) afin de privilégier la conduction par électrons plutôt que par trous. Les atomes peuvent être de la colonne V si le cristal initial est constitué d'atomes de la colonne IV. La figure (III.2.a) donne l'exemple de silicium dopé au phosphore qui possède cinq électrons sur la couche externe. Le cinquième électron de l'atome de phosphore qui se retrouve alors ionisé positivement (charge fixe) à une température différente de 0 K. Ce phénomène correspond à l'apparition d'un niveau d'énergie ED dans la bande interdite. Dans le cas d'un SC de type n : $n \gg p$

Exemple : Silicium dopé au phosphore. a. $T = 0$ K. b. $T \neq 0$ K.



Diagrammes de bandes faisant apparaître le niveau d'énergie des états de type donneur et leur occupation :



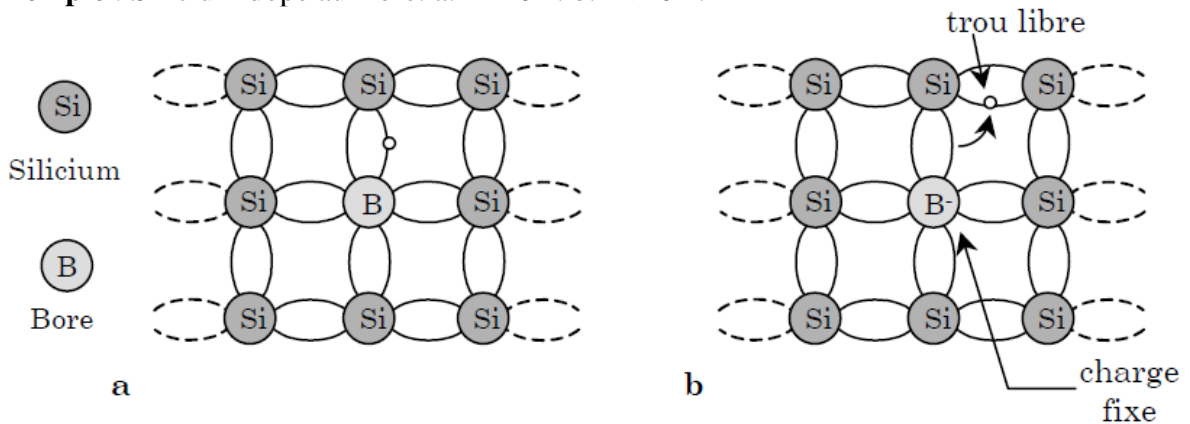
(a) $T_0 = 0\text{ K}$, $n_0 = p_0 = 0$ (b) $0 < T_1 < 50\text{ K}$, les impuretés s'ionisent (se dégèlent).

(c) $50\text{ K} < T_2 < 500\text{ K}$, $n_0 \approx N_D \gg n_i(T_2) \gg p_0$. (d) $T_3 > 500\text{ K}$, $n_0 \approx p_0 \approx n_i(T_3)$.

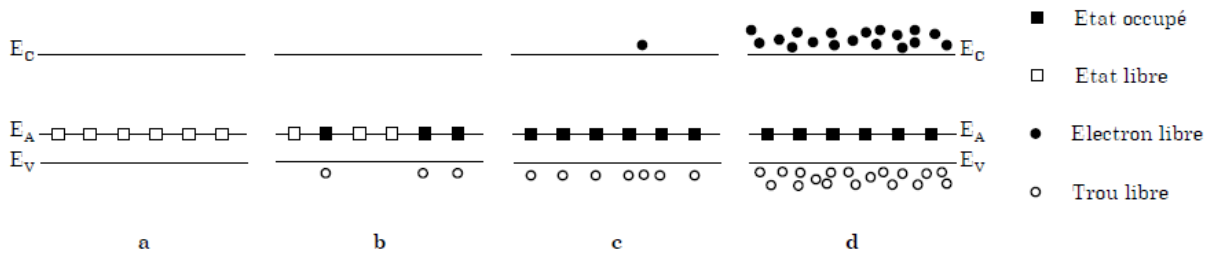
I.4.2.2. Semi-conducteur de type p

Cette fois les impuretés sont de type accepteur d'électrons ce qui correspond aux atomes de la colonne III pour un cristal constitué d'atomes de la colonne IV. le bore se retrouve ionisé négativement (charge fixe) et on assiste au déplacement d'un trou (libre) d'atome en atome. Ce phénomène correspond à l'apparition d'un niveau d'énergie E_a dans la bande interdite. . Dans le cas d'un SC de type p : $p \gg n$

Exemple : Silicium dopé au Bore. a. $T = 0\text{ K}$. b. $T > 0\text{ K}$.



Diagrammes de bandes faisant apparaître le niveau d'énergie des états de type accepteur et leur occupation



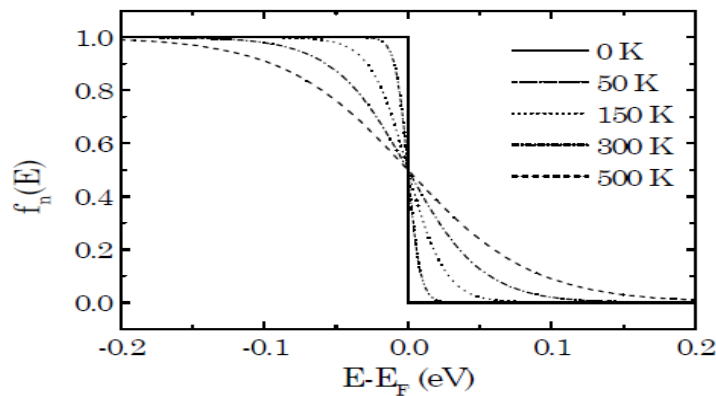
(a) $T_0 = 0K$, $n_0 = p_0 = 0$. (b) $0 < T_1 < 50 K$, les impuretés s'ionisent.
(c) $50 K < T_2 < 500 K$, $p_0 \approx N_A \gg n_i(T_2) \gg n_0$. (d) $T_3 > 500 K$, $n_0 \approx p_0 \approx n_i(T_3)$.

I.5- Statistique des porteurs de charge à l'équilibre thermodynamique

La fonction $f_n(E)$ est la probabilité d'occupation (à l'équilibre) d'un niveau d'énergie E par un électron et elle est donnée par (statistique de Fermi-Dirac) :

$$f_n(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)}$$

E_F étant le niveau de Fermi, qui correspond à une probabilité d'occupation égale à 1/2, quelle que soit la température T . La figure suivante donne l'évolution de $f_n(E)$ en fonction de la différence $E - E_F$ et de la température.



Elle permet de constater que sa valeur varie plus ou moins rapidement de 1 à 0 en passant toujours par 0,5 pour $E - E_F = 0$.

La probabilité $f_p(E)$ qu'un niveau E soit occupé par un trou est complémentaire de la probabilité $f_n(E)$:

$$f_p(E) = 1 - f_n(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_F - E}{kT}\right)}$$

Dans le cas du comportement non dégénéré, la fonction de FERMI devient :

$$F(E) \cong \exp -(E - E_F)/k_B T$$

La concentration en électrons libres à l'équilibre n_0 est donc obtenue en sommant, pour tous les niveaux d'énergie de la bande de conduction, le produit de la densité d'états $n_C(E)$ (nombre de places disponibles dans la BC) par la probabilité d'occupation de ces places $f_n(E)$:

$$n_0 = \int_{BC} n(E) dE = \int_{E_C}^{E_{max}} n_C(E) f_n(E) dE \cong \int_{E_C}^{\infty} n_C(E) f_n(E) dE$$

où $n(E)$ représente la distribution en énergie (ou densité énergétique) des électrons dans la bande de conduction. Pour pouvoir effectuer l'intégration, on considère que le semi-conducteur n'est

pas dégénéré, c'est-à-dire que le niveau de Fermi reste dans la bande interdite en respectant les inégalités $E_C - E_F > qqs \text{ kT}$ et $E_F - E_V > qqs \text{ kT}$. En utilisant alors l'expression correspondante

Exercice : montrer que

$$n_c(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_c^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E - E_c} \quad \text{et} \quad n_v(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_v^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E_v - E}$$

$$n = N_c \exp - \frac{E_C - E_F}{k_B T}$$

avec : N_c : **densité équivalente d'états dans la Bande de Conduction**

$$N_c(T) = \frac{2}{h^3} (2\pi m_e k_B T)^{3/2} = 2.5 \cdot 10^{19} \left[\frac{m_e}{m_0} \right]^{3/2} \left[\frac{T}{T_0} \right]^{3/2}$$

Avec $T_0=300 \text{ K}$, de même pour la concentration des trous

$$p_0 = \int_{BV} p(E) dE = \int_{E_{\min}}^{E_V} n_v(E) f_p(E) dE \cong \int_{-\infty}^{E_V} n_v(E) f_p(E) dE$$

$$p = N_v \exp - \frac{E_F - E_v}{k_B T}$$

avec : N_v : **densité équivalente d'états dans la Bande de Valence :**

$$N_v(T) = \frac{2}{h^3} (2\pi m_h k_B T)^{3/2} = 2.5 \cdot 10^{19} \left[\frac{m_h}{m_0} \right]^{3/2} \left[\frac{T}{T_0} \right]^{3/2} \quad (\text{cm}^{-3})$$

En multipliant la densité d'électrons par la densité de trous, on obtient un résultat indépendant de la position du niveau de Fermi (et donc du dopage). Cette loi est appelée « loi d'action de masse ».

$$n_i^2 = N_c N_v \exp - \left(\frac{E_g}{k_B T} \right)$$

n_i est appelé le **nombre intrinsèque** ou **densité intrinsèque de porteurs**.

Le produit de la densité des porteurs négatifs par la densité des porteurs positifs, à l'**équilibre thermodynamique** (en l'absence de perturbations), est indépendant de la position du niveau de FERMİ. Il est fonction des densités équivalentes d'états de la BdC et de la BdV (N_c et N_v), de la hauteur de la bande interdite (E_g) et de la température absolue (T). C'est une loi d'**action de masse** au sens de la thermodynamique. en tenant compte des expressions de N_c et N_v :

$$n_i^2(T) = A T^3 \exp - \left(\frac{E_g}{k_B T} \right) \quad (\text{cm}^{-6})$$

A : constante spécifique du matériau, indépendante de la température.

Exercice : calculer le niveau de fermi E_{F_i} pour un semi-conducteur intrinsèque et démontrer les relations suivantes :

$$n = n_i \exp - \frac{E_F - E_{Fi}}{k_B T} \quad p = n_i \exp - \frac{E_{Fi} - E_F}{k_B T}$$

Exercice :

Les masses effectives dans le cas du GaAs sont respectivement $m_c^*/m_e = 0.068$ et $m_v^*/m_e = 0.47$. La largeur de la bande interdite est $E_g = 1.43 \text{ eV}$.

1. Calculer le niveau de Fermi à 0 K.
2. Déterminer la position du niveau de Fermi à 100 K, 300 K et 600 K.
3. Représenter par un schéma les différents niveaux de Fermi puis commenter.
4. A 300 K, calculer les densités de charges n , p et n_i ?

I.4.3. Equation de neutralité:

Considérons un semi-conducteur contenant une densité de donneurs N_d et une densité d'accepteurs N_a , alors :

- N_d^+ est le nombre de donneurs ionisés
- N_a^- est le nombre d'accepteurs ionisés

La charge totale du matériau est nulle (principe de conservation de charges).

$$n + N_a^- = p + N_d^+$$

n et p sont respectivement les densités d'électron et de trous.

A température ambiante, l'énergie $k_B T$ est de même ordre de grandeur que les énergies de liaison de l'électron du donneur et de trous de l'accepteur. Ceci veut dire que tous les donneurs et accepteurs sont ionisés. L'équation de neutralité précédente s'écrit donc :

$$n + N_a = p + N_d$$

N_a et N_d sont les densités d'accepteurs et de donneurs

Semi conducteur de type n

Les densités des donneurs et accepteurs ionisés sont donnés par :

$$N_D^+ = \frac{N_D}{1 + 2 \exp\left(\frac{E_F - E_D}{k_B T}\right)}$$

Densité des porteurs libres.

● A l'équilibre thermodynamique, la densité des porteurs libres d'un semiconducteur dopé par N_D atomes donneurs (supposés tous ionisés) est déterminée par 2 lois fondamentales :

- la loi d'action de masse : $n p = n_i^2$
- la neutralité électrique de l'échantillon (la somme algébriques des charges est nulle) :
 $-q n + q p + q N_D = 0$

● En associant ces 2 relations et en ne tenant compte que de la solution physique (n est toujours positif) on trouve :

$$n = \frac{N_D + \sqrt{N_D^2 + 4n_i^2}}{2} \quad (\text{cm}^{-3})$$

● Le terme N_D est indépendant de la température, alors que n_i^2 évolue très rapidement, on obtient 2 cas limites :

1°) $N_D^2 \gg n_i^2$

L'expression de n se simplifie et :

$$n_n = N_D \quad \text{Porteurs majoritaires} \quad (\text{cm}^{-3})$$

$$p_n = n_i^2/N_D \quad \text{Porteurs minoritaires} \quad (\text{cm}^{-3})$$

- Les porteurs négatifs sont beaucoup plus nombreux que les porteurs positifs, le **semiconducteur est de type "N"** (repéré par indice n)

Plus un semiconducteur est dopé N, plus la différence entre la densité des porteurs majoritaires négatifs et la densité des porteurs minoritaires positifs (trous) est importante.

- La densité des porteurs négatifs est constante et égale à la densité des atomes d'impuretés.
- Ce mode de fonctionnement est appelé "**régime d'épuisement des donneurs**".

2°) $N_D^2 \ll n_i^2$

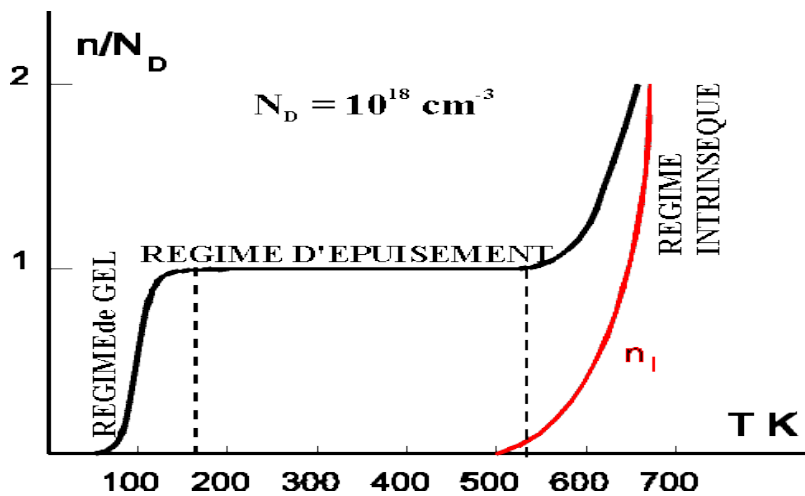
On retrouve : $n = p = n_i \quad (\text{cm}^{-3})$

Ce régime est appelé "**régime intrinsèque**".

- Influence de température.

L'évolution de la densité des porteurs négatifs (n) par rapport à la densité des impuretés (N_D) en fonction de la température montre les caractéristiques suivantes :

1. Pour les très basses températures (**régime de gel**), les impuretés ne sont pas toutes ionisées et la densité des porteurs négatifs augmente très rapidement.
2. Dans une large gamme de températures (**régime d'épuisement : régime de saturation**), la densité des porteurs négatifs est égale à la densité des impuretés. C'est le domaine de fonctionnement "normal" des dispositifs.
3. Pour les températures supérieures, l'agitation thermique engendre plus de paires électron-trou qu'il y a d'impuretés donneuses, c'est le **régime intrinsèque**.



1°) Position du niveau de FERMI. : régime de saturation

● En tenant compte que $n_n = N_D$ dans l'expression de la position du niveau de FERMI on trouve :

$$\partial E_n = E_C - E_{FN} = k_B T \text{Log} \left(\frac{N_C}{N_D} \right)$$

E_{FN} : position du niveau de FERMI dans un semiconducteur "N"

Plus un semiconducteur est de type "N", plus son niveau de FERMI se rapproche du minimum de la Bdc.

Semiconducteur de type "P"

la densité des donneurs ionisés est donnée par la relation :

$$N_A^- = \frac{N_A}{1 + 4 \exp\left(\frac{E_A - E_F}{k_B T}\right)}$$

un facteur 2 devant l'exponentielle tient compte du fait que l'on peut placer 2 électrons de spins opposés sur chaque niveau et un autre facteur 2 tient compte de la dégénérescence de la bande de valence pour Ge, Si et GaAs.

Densité des porteurs libres.

● A l'équilibre thermodynamique, la densité des porteurs libres d'un semiconducteur dopé par N_A atomes accepteurs (supposés tous ionisés) est déterminée par 2 lois fondamentales :

- la loi d'action de masse : $n p = n_i^2$
- la neutralité électrique de l'échantillon (la somme algébriques des charges est nulle) : $-q n + q p - q N_A = 0$

● En associant ces 2 relations et en ne tenant compte que de la solution physique (p est toujours positif) on trouve :

$$p = \frac{N_A + \sqrt{N_A^2 + 4n_i^2}}{2} \quad (\text{cm}^{-3})$$

● Le terme N_A est indépendant de la température, alors que n_i^2 évolue très rapidement, on obtient 2 cas limites :

1°) $N_A^2 \gg n_i^2$

L'expression de p se simplifie et :

$$\begin{aligned} p_p &= N_A && \text{Porteurs majoritaires} && (\text{cm}^{-3}) \\ n_p &= n_i^2/N_A && \text{Porteurs minoritaires} && (\text{cm}^{-3}) \end{aligned}$$

2°) $N_A^2 \ll n_i^2$

On retrouve :

$$n = p = n_i \quad (\text{cm}^{-3})$$

Ce régime est appelé "régime intrinsèque".

1°) **Position du niveau de FERMI (régime de saturation : épuisement)**

● En tenant compte que $p_p = N_A$ dans l'expression de la position du niveau de FERMI on trouve :

$$\partial E_p = E_{FP} - E_V = k_B T \text{Log} \left(\frac{N_V}{N_A} \right)$$

E_{FP} : position du niveau de FERMI dans un semiconducteur "P"

Plus un semiconducteur est de type "P", plus son niveau de FERMI se rapproche du maximum de la BdV.

II- semi-conducteur hors équilibre

II.1. Fonction de distribution-- Equation de Boltzmann :

L'état du système que forme la population d'électrons d'un semi-conducteur est entièrement décrit par la fonction de distribution $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$, qui représente à l'instant t la probabilité de présence d'un électron aux points \vec{k} du réseau réciproque et \vec{r} de l'espace réel. La connaissance de cette fonction permet de déterminer toutes les grandeurs locales liées aux porteurs telles que la concentration $n(\vec{r}, t)$ ou la valeur $A(\vec{r}, t)$ de toute grandeur transportée (vitesse, énergie,...) via les expressions suivantes :

$$n(\vec{r}, t) = \int n(\vec{k}) f(\vec{r}, \vec{k}, t) d\vec{k} \quad \text{et} \quad A(\vec{r}, t) = \int A(\vec{k}) n(\vec{k}) f(\vec{r}, \vec{k}, t) d\vec{k}$$

et l'expression générale du flux transporté devient :

$$\phi = \int Q(\vec{k}) v(\vec{k}) n(\vec{k}) f(\vec{r}, \vec{k}, t)$$

En présence d'une perturbation, f s'écarte de la fonction à l'équilibre thermique f_0 d'une quantité f_1 :

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

La fonction $f_0(\vec{r}, \vec{k}, t)$ correspond à la statistique de Fermi-Dirac

$$f_0(\vec{r}, \vec{k}, t) = f_0(\vec{r}, \vec{k}) = \frac{1}{1 + \exp(\varepsilon(\vec{k}) + E_c(\vec{r}) - E_f)}$$

où $E_c(\vec{r})$ est l'énergie potentielle (bas de bande de conduction) et $\varepsilon(\vec{k})$ l'énergie cinétique des électrons, E_f est l'énergie de fermi. Le but est donc de déterminer l'évolution dans le temps de f dans un espace à 6 dimensions (l'espace des phases :

$$f(\vec{r}, \vec{k}, t) \rightarrow df = \vec{\nabla}_{\vec{r}} f d\vec{r} + \vec{\nabla}_{\vec{k}} f d\vec{k} + \frac{\partial f}{\partial t} dt$$

$$\frac{df}{dt} = \vec{\nabla}_{\vec{r}} f \frac{d\vec{r}}{dt} + \vec{\nabla}_{\vec{k}} f \frac{d\vec{k}}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t}$$

On sait que $\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}$ et $\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{\vec{F}}{\hbar}$

Pour un système conservatif $\frac{df}{dt} = 0$ (théorème de Liouville)

Pour un système non conservatif $\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c$

où $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c$ représente la contribution des collisions.

pour calculer leur contribution à l'évolution temporelle de f , nous nous plaçons dans l'hypothèse de faibles perturbations, c'est-à-dire que la vitesse de retour à l'équilibre est proportionnelle à l'écart $f - f_0$, avec pour facteur de proportionnalité $1/\tau$, où τ est un temps de relaxation dépendant *a priori* de l'énergie. C'est l'*hypothèse de Boltzmann*. Ainsi,

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_c = -\frac{f - f_0}{\tau} = -\frac{f_1}{\tau}$$

Si on se place en régime permanent, $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$, On aboutit alors, à l'équation de Boltzmann simplifiée :

$$\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f + \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f + \frac{f_1}{\tau} = 0$$

La contribution de f_0 dans l'expression générale du flux résultant est nulle car il n'y a pas de flux à l'équilibre thermique. L'expression du flux devient donc :

$$\vec{\phi} = \int Q(\vec{k}) \vec{v}(\vec{k}) n(\vec{k}) f_1(\vec{r}, \vec{k}, t)$$

Nous allons maintenant appliquer l'équation de Boltzmann au calcul de la conductivité électrique et du coefficient de diffusion des porteurs.

II.2. Conduction électrique en champ faible ($E < 1 \text{ kV.cm}^{-1}$)

La perturbation est une force électrostatique $\vec{F} = -q\vec{E}$ la quantité transportée est la charge électrique $-q$, le flux résultant est la densité de courant est:

$$\vec{J} = -q \int \vec{v}(\vec{k}) n(\vec{k}) f_1(\vec{r}, \vec{k}, t)$$

Nous allons faire le calcul de \vec{j} , dans le cadre de l'approximation de Boltzmann et des hypothèses suivantes : (i) semiconducteur non dégénéré, (ii) de dopage et de température uniformes, et (iii) dans lequel règne un champ électrique faible, constant et uniforme. Nous supposons de plus que (iv) les électrons se trouvent sur une bande d'énergie parabolique et isotrope, l'équation de Boltzmann se réduit à :

$$\frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f + \frac{f_1}{\tau} = 0$$

pour le calcul de $\vec{\nabla}_{\vec{k}} f$, de considérer que : $f = f_0 + f_1 \approx f_0$. Nous avons alors pour un semiconducteur non dégénéré :

$$\vec{\nabla}_{\vec{k}} f = \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \vec{\nabla}_{\vec{k}} \varepsilon = -\frac{\hbar}{kT} f_0 \vec{v}$$

ce qui conduit à l'expression de f_1 ,

$$f_1(\vec{k}) = -\frac{q}{k_B T} \tau(\varepsilon) f_0(\vec{k}) \vec{E} \cdot \vec{v}$$

En prenant pour axe Ox la direction du champ, la densité de courant devient :

$$J_x = \frac{q^2}{k_B T} E_x \int \tau(\varepsilon) f_0(\vec{k}) v_x^2 n(\vec{k}) d\vec{k}$$

La bande d'énergie considérée étant parabolique et isotrope, il est commode de remplacer l'intégration sur k par une intégration sur l'énergie ε . De plus, l'hypothèse de faible champ implique que l'énergie cinétique moyenne des porteurs reste égale à sa valeur d'équilibre thermodynamique, et équitablement répartie suivant toutes les directions. Ainsi, calculée sur toute fonction de distribution, la valeur moyenne de v_x^2 peut s'écrire :

$$\langle v_{x2} \rangle = \langle v^2 \rangle / 3 = 2 \langle \varepsilon \rangle / (3m^*)$$

Nous pouvons donc remplacer dans v_x^2 par $2\varepsilon/(3m^*)$ où m^* est la masse effective du porteur. Compte tenu de la densité d'états en énergie, la densité de courant devient alors :

$$J_x = \frac{q^2}{k_B T} E_x \frac{2}{3m^*} \int \tau(\varepsilon) f_0(\varepsilon) \varepsilon n(\varepsilon) d\varepsilon$$

ce qui peut également s'écrire :

$$J_x = \frac{q^2}{k_B T} E_x \frac{2}{3m^*} n \frac{\int \tau(\varepsilon) \varepsilon f_0(\varepsilon) n(\varepsilon) d\varepsilon}{\int \varepsilon f_0(\varepsilon) n(\varepsilon) d\varepsilon} \frac{\int \varepsilon f_0(\varepsilon) n(\varepsilon) d\varepsilon}{\int f_0(\varepsilon) n(\varepsilon) d\varepsilon}$$

c'est-à-dire :

$$J_x = n \frac{q^2}{k_B T} E_x \frac{2}{3m^*} \frac{\langle \tau \varepsilon \rangle}{\langle \varepsilon \rangle}$$

Or, $\langle \varepsilon \rangle = 1,5 k_B T$. On utilise de plus l'abus d'écriture suivant qui simplifie les notations : $\langle \tau \rangle = \langle \tau \varepsilon \rangle / \langle \varepsilon \rangle$. Cette quantité $\langle \tau \rangle$ est homogène à un temps mais n'est pas rigoureusement le temps de relaxation moyen. La densité de courant s'écrit alors :

$$J_x = n \frac{q^2}{m^*} \langle \tau \rangle E_x$$

On retrouve ainsi la loi d'Ohm qui relie la densité de courant au champ électrique par la conductivité σ . On définit de plus la mobilité par le rapport $\mu = |v/E|$. On a alors :

$$\begin{cases} \bar{J}_n = \sigma_n \bar{E} \text{ où } \sigma_n = qn\mu_n \text{ avec } \mu_n = \frac{q \langle \tau_n \rangle}{m_n^*} & \text{(cas des électrons)} \\ \bar{J}_p = \sigma_p \bar{E} \text{ où } \sigma_p = qp\mu_p \text{ avec } \mu_p = \frac{q \langle \tau_p \rangle}{m_p^*} & \text{(cas des trous)} \end{cases}$$

II.3. Mobilité des porteurs:

Plusieurs mécanismes influencent la mobilité :

-Les collisions coulombiennes : les impuretés ionisées et d'une manière générale tous les centres chargés qui gênent le parcours des porteurs.

-Les collisions avec le réseau : les atomes du réseau cristallin qui vibrent autour de leur position moyenne (phonons) sont des obstacles pour les porteurs : Collisions avec les phonons, d'autant plus nombreuses que les vibrations sont importantes, i.e. que la température est élevée. La mobilité diminue à haute température.

Dans les cristaux purement covalents (Si, Ge), les porteurs libres interagissent principalement avec les modes de vibration longitudinaux acoustiques. les porteurs sont diffusés par les phonons. Ce processus est d'autant plus important que la température est élevée.

Les collisions sur la rugosité de surface : les dimensions d'un composant à semi-conducteur n'étant pas infinies, les porteurs 'heurtent' parfois la surface et sont d'autant plus gênés dans leur mouvement que cette surface est de mauvaise qualité.

Dans un semi-conducteur, la mobilité des électrons est supérieure à la mobilité des trous, on observe expérimentalement dans le silicium que la mobilité des trous est trois fois plus

petite que celle des électrons. Cela peut s'interpréter par le fait que les électrons participant à la conduction sont quasi libres dans le cristal (bande de conduction) alors que les trous correspondent au vide laissé par un électron passé sur la bande de conduction. Pour que le trou se déplace, il faut qu'un électron de valence d'un atome voisin vienne prendre sa place ce qui est moins facile d'un point de vue quantique.

la loi de Matthiessen dit que la mobilité peut être écrite comme la somme de l'influence du réseau (des phonons) et de celle des impuretés :

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_{res}} + \frac{1}{\mu_{imp}}$$

	Si	Ge	GaAs	InAs	InSb
μ_n	1350	3600	8000	30000	80000
μ_p	480	1800	300	450	450

Valeurs typiques à température ambiante pour un semiconducteur non dopé.

II.4. Dépendance de la mobilité avec la température :

$$\mu \propto m^{*-5/2} T^{-\alpha}$$

$\alpha = 3/2$ pour les modes longitudinaux acoustiques dans les matériaux covalents comme le Si, Ge

$$\mu \propto T^{-\alpha}$$

$\alpha = 2$ pour les modes longitudinaux optiques dans les matériaux ioniques comme les III-V (GaAs, InP, GaN).

II.5. Diffusion:

On suppose qu'il y'a un gradient spatial de concentration de porteurs, la quantité transportée est un nombre de particules. D'une manière générale dans un processus de diffusion, le flux résultant s'écrit donc :

$$\bar{\Phi} = \int v(\bar{k}) n(\bar{k}) f_1(\bar{r}, \bar{k}, t) d\bar{k}$$

Les porteurs étant chargés électriquement, ce flux se traduit bien sûr par une densité de courant. Nous allons faire le calcul de Φ dans le cadre des hypothèses suivantes : (i) semiconducteur non dégénéré, (ii) absence de force exercée sur les porteurs (iii) faible perturbation de la fonction de distribution, et (iv) bande parabolique isotrope. l'équation de Boltzmann en régime permanent devient:

$$\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f + \frac{f_1}{\tau} = 0$$

faisant l'approximation suivante:

$$f(\vec{r}, \vec{k}) \approx f_0(\vec{k}) \approx \exp\left(\frac{E_F - \varepsilon}{k_B T}\right) = \exp\left(\frac{E_F - E_C}{k_B T}\right) \exp\left(\frac{E_C - \varepsilon}{k_B T}\right)$$

l'expression de la concentration n est:

$$n = N_C \exp\left(\frac{E_F - E_C}{k_B T}\right)$$

Alors:

$$\vec{\nabla}_{\vec{r}} f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial (E_F - E_C)} \vec{\nabla}_{\vec{r}} (E_F - E_C) = \frac{f_0}{k_B T} k_B T \frac{\vec{\nabla}_{\vec{r}} n}{n}$$

Par conséquent, d'après l'expression de n, f_1 est donnée, pour un gradient unidimensionnel par :

$$f_1 = -\tau f_0 \frac{1}{n} \frac{dn}{dx} v_x$$

On calcule alors le flux du courant de diffusion de façon analogue au calcul de la densité de courant dans l'étude de la conductivité :

$$\Phi_x = -\frac{dn}{dx} \frac{2}{3m} \frac{1}{n} \int \tau(\varepsilon) \varepsilon f_0(\varepsilon) n(\varepsilon) d\varepsilon = -\frac{k_B T}{m} \langle \tau \rangle \frac{dn}{dx} = -D_n \frac{dn}{dx}$$

et le flux s'écrit finalement comme une loi de Fick où l'on a introduit le coefficient de diffusion D_n reliant le flux à sa cause. Ainsi, le coefficient de transport lié à la diffusion est relié à la mobilité, qui caractérise le phénomène de conduction, par la relation d'Einstein :

$$D_n = \frac{k_B T}{q} \mu_n \text{ (électrons) et } D_p = \frac{k_B T}{q} \mu_p \text{ (trous)}$$

On obtient l'expression générale du courant de diffusion pour les deux types de porteurs :

$$\begin{cases} \vec{J}_n = q D_n \vec{\nabla} n \\ \vec{J}_p = -q D_p \vec{\nabla} p \end{cases}$$

Les valeurs des coefficients de transport dans Si non dopé à 300 K sont :

$$\mu_n = 1500 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}, \mu_p = 500 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}, D_n = 37,5 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}, \text{ et } D_p = 12,5 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}.$$

II.6. Equations de dérive-diffusion :

En présence à la fois d'un champ électrique et d'un gradient de concentration, on a donc

$$\begin{cases} \vec{J}_n = qn\mu_n \vec{E} + qD_n \vec{\nabla} n \\ \vec{J}_p = qp\mu_p \vec{E} - qD_p \vec{\nabla} p \end{cases}$$

Ce sont les équations de dérive-diffusion, largement employées pour l'étude du transport dans les dispositifs semi-conducteurs.

Pour conserver les expressions qui donnent les concentrations de porteurs n et p, en présence de phénomènes de conduction et de diffusion, il faut définir des niveaux de Fermi différents pour les électrons et les trous, respectivement E_{Fn} et E_{Fp} , appelés quasi niveaux de Fermi. Les courants d'électrons et de trous s'écrivent alors :

$$\begin{cases} \vec{J}_n = qn\mu_n \vec{E} + qD_n \frac{n}{k_B T} [\vec{\nabla} E_{Fn} - \vec{\nabla} E_C] \\ \vec{J}_p = qp\mu_p \vec{E} - qD_p \frac{p}{k_B T} [\vec{\nabla} E_V - \vec{\nabla} E_{Fp}] \end{cases}$$

Or, $\vec{\nabla} E_C = \vec{\nabla} E_V = q\vec{E}$, ce qui nous donne, compte tenu de la relation d'Einstein:

$$\begin{cases} \vec{J}_n = \frac{\sigma_n}{q} \vec{\nabla} E_{Fn} \\ \vec{J}_p = \frac{\sigma_p}{q} \vec{\nabla} E_{Fp} \end{cases}$$

Constantes universelles

$$k_B = 1,38064852 \times 10^{-23} \text{ J/K}$$

$$8,61733034 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$$

$$\text{Constante de planck } 6,62607004 \times 10^{-34} \text{ J s}$$

$$\hbar = h / 2\pi \approx 1,054 571 800 \times 10^{-34} \text{ J s}$$

$$\hbar \approx 6,582 119 514(40) \times 10^{-16} \text{ eV s}$$

$$K^{\circ} = ^{\circ}C + 273,15$$

$$M_e = 9,109 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

Exercice :

Le silicium intrinsèque comprend 5×10^{28} atomes. m^{-3} . À la température ambiante, 2×10^{16} paires électron-trou par mètre cube participent à la conduction électrique, n est la densité des électrons et p la densité des trous : $n = p = ni$.

Nous connaissons la mobilité des électrons μ_n et des trous μ_p :

$$\mu_n = 0,14 \text{ m}^2 \cdot \text{V}^{-1} \text{s}^{-1} \text{ et } \mu_p = 0,05 \text{ m}^2 \cdot \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$$

1. Calculer la résistivité du silicium intrinsèque à la température ambiante.

2. Calculer, à température ambiante, la résistivité du silicium dopé avec des donneurs N_d avec un taux de dopage de 2×10^{-7} . Nous admettons le produit : $N_d \cdot p = ni^2$.

3. Calculer dans les deux cas la résistance d'un tronçon de semi-conducteur de 2 mm^2 de Section et de 1 cm de longueur.

Exercice : écrire l'équation de transport de Boltzmann dans le cas d'un champ électrique constant, calculer le courant de conduction.

Exercice ; écrire l'équation de transport de Boltzmann dans le cas d'un gradient de concentration (dans la direction x), calculer le courant de diffusion.

III. Phénomène de Génération-Recombinaison

On dit qu'il y a génération lorsqu'un électron occupant un état dans la bande de valence fait une transition vers un état inoccupé de la bande de conduction. C'est un processus qui se produit spontanément à température non-nulle. L'énergie est fournie par :

- Des photons (lumière)
- Des particules énergétiques (rayonnements ou porteurs).
- De la chaleur

En équilibre thermodynamique, la génération thermique est exactement compensée par un processus antagoniste, appelé recombinaison, afin de maintenir une distribution de taux d'occupation obéissant à la statistique de Fermi-Dirac. Un électron de la bande de valence peut aussi atteindre la bande de conduction, suite à l'absorption d'un photon ayant une énergie supérieure à la bande interdite. Par analogie avec la création d'antimatière, il convient de parler de création ou d'annihilation de paires électron-trou puisqu'un électron qui monte dans la bande de conduction laisse derrière lui un trou de charge positive dans la bande de valence. Il y a plusieurs processus de recombinaisons dans les semiconducteurs, On distingue habituellement les recombinaisons radiatives et non-radiatives selon que la paire électron-trou s'annihile directement par l'émission d'un photon ou non.

Les recombinaisons non-radiatives sont de deux types : le premier implique une interaction avec un défaut assisté par des phonons. La théorie la plus simple et la plus utilisée pour les décrire est celle de Shockley, Read et Hall (SRH) développée en 1952. Le second type implique une annihilation de la paire électron-trou impliquant un troisième porteur : les recombinaisons Auger.

Soient g' et r' respectivement le nombre de porteurs de charges créés par unité de volume et unité de temps ($\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$) et le nombre de porteurs de charges qui disparaissent par unité de volume et de temps ($\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$).

Le nombre de porteurs de charges créés par unité de volume et unité de temps g' résulte d'une part de la génération spontanée due à l'agitation thermique g_{th} appelé taux de génération thermique et d'autre part de l'excitation par une source extérieure (g) telles que ; l'excitation optique, irradiation par particules, champ électrique ...etc

Le nombre de porteurs de charges créés par unité de volume et unité de temps g' s'écrit :

$$g' = g + g_{th}$$

Le nombre de porteurs de charges r' est fonction des processus régissant la recombinaison des porteurs de charges excédentaires, c'est un paramètre propre au matériau.

La variation de la densité de porteurs de charges par unité de volume et unité de temps est due aux processus de génération – recombinaison produits sous l'effet de l'excitation extérieure et de

l'agitation thermique, alors :

$$\left(\frac{dn}{dt}\right)_{gr} = g' - r' = g + g_{th} - r'$$

Avec :

- g : c'est le taux de génération spécifique à l'excitation extérieure

- g_{th} et r' : paramètres spécifiques au matériau à une température donnée

$$r = r' - g_{th}$$

Cette relation représente le bilan entre la recombinaison et la génération thermique. R est un paramètre spécifique au matériau, il représente le taux de recombinaison.

La variation de la densité de porteurs de charges par unité de volume et unité de temps devient

:

$$\left(\frac{dn}{dt}\right)_{gr} = g - r$$

Dans le processus de la recombinaison directe, le nombre d'électrons qui se recombinent est égal à celui de trous, soit ;

$$r'_n = r'_p = r' = k n p$$

Le taux de recombinaison r s'écrit donc :

$$r_n = r_p = r = r' - g_{th} = k n p - g_{th}$$

En absence de toute excitation extérieure ($g=0$), le taux de recombinaison r est nul (équilibre thermodynamique) et les densités (n) d'électrons et (p) de trous sont :

$$n = n_0, p = p_0 \text{ avec } r=0$$

La relation précédente devient :

$$r = k n_0 p_0 - g_{th} = 0 \Rightarrow g_{th} = k n_0 p_0$$

D'où :

$$g_{th} = k n_i^2$$

Le taux de recombinaison s'écrit donc :

$$r = k (n p - n_i^2)$$

En régime hors équilibre les densités (n) d'électrons et (p) de trous peuvent être écrites sous forme :

$$n = (n_o + \Delta n) \quad \text{et} \quad p = (p_o + \Delta p)$$

Avec : $\Delta n = \Delta p$ (condition de neutralité électrique)

Le taux de recombinaison r s'écrit alors :

$$r = k [(n_o + \Delta n) (p_o + \Delta p) - n_i^2]$$

$$r = k [n_o \Delta p + p_o \Delta n + \Delta n \Delta p + n_o p_o - n_i^2]$$

Avec : $n_o \cdot p_o = n_i^2$

$$r = k [n_o \Delta p + p_o \Delta n + \Delta n \Delta p]$$

Avec : $\Delta n = \Delta p$

$$r = k [n_o + p_o + \Delta n] \Delta n = k [n_o + p_o + \Delta p] \Delta p$$

Le taux de recombinaison r s'écrit aussi sous la forme suivante :

$$r = \frac{\Delta n}{\tau(\Delta n)} = \frac{\Delta p}{\tau(\Delta p)}$$

Avec : $\tau(\Delta n) = \frac{1}{k [n_o + p_o + \Delta n]}$

$\tau(\Delta n)$ est la durée de vie des porteurs dans un semiconducteur excité.

- Dans le cas d'un semi-conducteur de type (P) de faible injection, la densité intrinsèque n_o est très faible devant p_o .

$$p_o \gg n_o \quad \text{et} \quad \Delta n = \Delta p \ll p_o$$

$$p = p_o + \Delta p \approx p_o \quad \text{et} \quad n = n_o + \Delta n$$

Il en résulte que :

$$\tau \approx \frac{1}{k p_o} \quad \text{et} \quad r \approx \frac{\Delta n}{\tau}$$

Dans le cas d'un semiconducteur de type (N) de faible injection, la densité intrinsèque p_o est très faible devant n_o .

$$n_o \gg p_o \quad \text{et} \quad \Delta n = \Delta p \ll n_o$$

$$p = p_o + \Delta p \quad \text{et} \quad n = n_o + \Delta n \approx n_o$$

Il en résulte que :

$$\tau \approx \frac{1}{k n_o} \quad \text{et} \quad r \approx \frac{\Delta p}{\tau}$$

Dans un matériau dopé en régime de faible injection, la densité de porteurs majoritaires est supposée constante. Le taux de recombinaison des porteurs minoritaires s'écrit :

- Pour un semi-conducteur de type p : $r_n = \frac{\Delta n}{\tau_n}$

- Pour un semi-conducteur de type n : $r_p = \frac{\Delta p}{\tau_p}$

Avec : $\tau_n = \frac{1}{kp_0}$ et $\tau_p = \frac{1}{kn_0}$ les durées de vie des porteurs minoritaires.

Recombinaison indirecte (centre de recombinaison)

Dans les semi-conducteurs, la durée de vie des porteurs dépend de leur densité. En effet, la probabilité pour qu'un électron et un trou se recombinent est très faible si les densités sont faibles. La présence d'impuretés a un effet très important sur la durée de vie des porteurs de charges, ils forment des centres de recombinaison. Il y a deux types de centres :

- Centre de recombinaison : capture d'un électron et d'un trou (recombinaison).
- Piège à électron : capture d'un électron puis le réémettre vers la bande de conduction.

Le taux de recombinaison s'écrit :

$$r = \frac{1}{\tau_m} \left(\frac{pn - n_i^2}{2n_i + p + n} \right)$$

$$\text{Avec : } \tau_m = \frac{1}{C N_R}$$

C : est le coefficient de capture, C_n (électrons) = C_p (trous) = C

N_R : Densité de centres de recombinaison

a) Semi-conducteur de type (N)

Dans ce cas d'une faible excitation :

$$n_o \gg n_i \gg p_o \text{ et } n = n_o + \Delta n \approx n_o \text{ et aussi : } p = p_o + \Delta p \ll n_o$$

Le taux de recombinaison donné par la relation précédente s'écrit :

$$r = \frac{1}{\tau_m} \left(\frac{pn - n_i^2}{n} \right) = \frac{p - n_i^2/n}{\tau_m} = \frac{p - p_o}{\tau_m}$$

$$r = \frac{\Delta p}{\tau_m}$$

b) Semi-conducteur de type (P)

Dans ce cas d'une faible excitation :

$$p_o \gg n_i \gg n_o \text{ et } p = p_o + \Delta p \approx p_o \text{ et aussi : } n = n_o + \Delta n \ll p_o$$

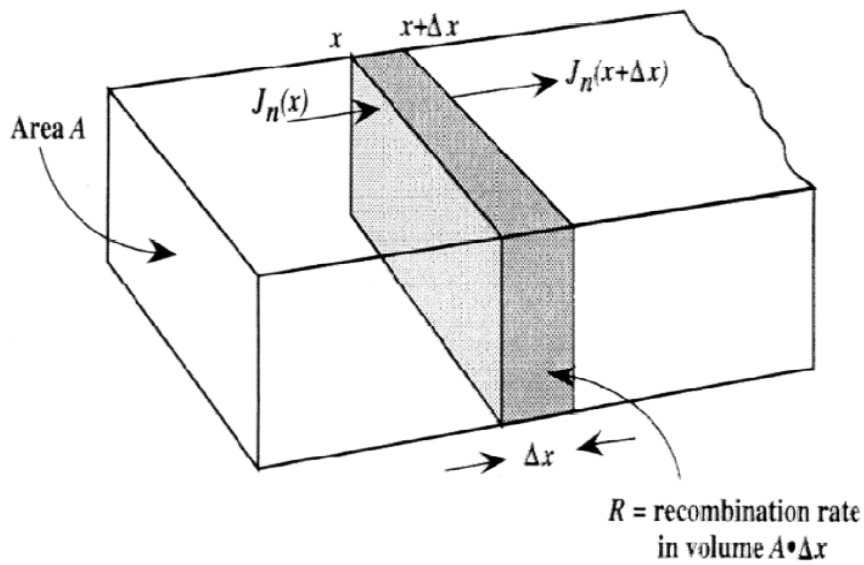
Le taux de recombinaison donné par la relation précédente s'écrit :

$$r = \frac{1}{\tau_m} \left(\frac{pn - n_i^2}{p} \right) = \frac{n - n_i^2/p}{\tau_m} = \frac{n - n_o}{\tau_m}$$

$$r = \frac{\Delta n}{\tau_m}$$

IV. Equations de continuité (équations de conservation de chaque type de porteurs):

Bilan : Variation de la densité d'électrons dans le volume par unité de temps



$$A\Delta x \frac{dn(x,t)}{dt} = A \left[\frac{J_n(x+\Delta x)}{e} - \frac{J_n(x)}{e} \right] - R + G$$

$$A\Delta x \frac{dn(x,t)}{dt} \cong A \frac{dJ_n(x)}{dx} \frac{\Delta x}{e} - R + G$$

On obtient alors les *équations de continuité* pour les électrons et les trous:

$$\frac{dn(x,t)}{dt} = \frac{1}{e} \frac{dJ_n}{dx} - r_n + g_n$$

$$\frac{dp(x,t)}{dt} = -\frac{1}{e} \frac{dJ_p}{dx} - r_p + g_p$$

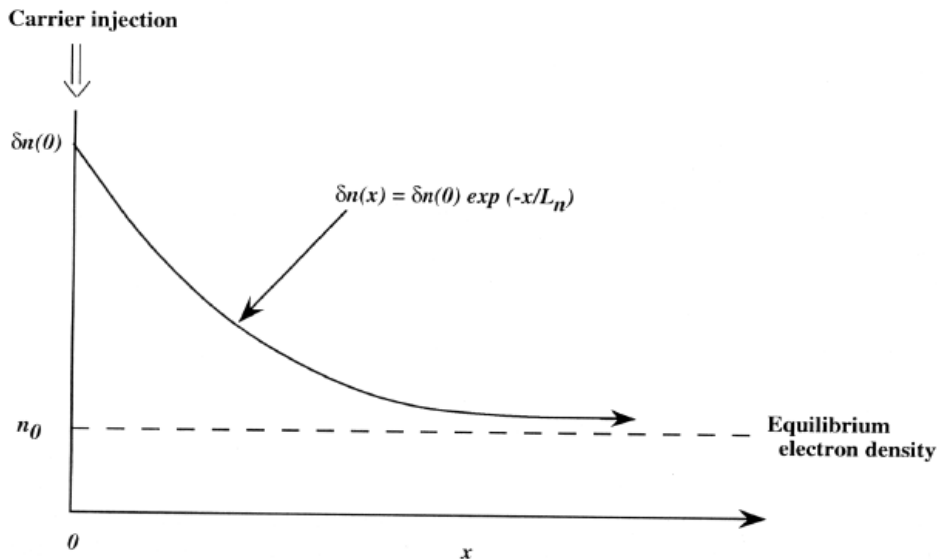
Exemple: cas où le courant est *exclusivement* du à de la diffusion:

$$\begin{cases} J_n(\text{diff}) = eD_n \frac{dn}{dx} \\ J_p(\text{diff}) = -eD_p \frac{dp}{dx} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{dn}{dt} = D_n \frac{d^2 n}{dx^2} - \frac{n - n_0}{\tau_n} \\ \frac{dp}{dt} = D_p \frac{d^2 p}{dx^2} - \frac{p - p_0}{\tau_p} \end{cases}$$

Équations de continuité – longueur de diffusion

$$\frac{d^2(n - n_0)}{dx^2} = \frac{n - n_0}{D_n \tau_n} = \frac{n - n_0}{L_n^2} \quad \text{avec } L_n = \sqrt{D_n \tau_n}$$

$$\frac{d^2(p - p_0)}{dx^2} = \frac{p - p_0}{D_p \tau_p} = \frac{p - p_0}{L_p^2} \quad \text{avec } L_p = \sqrt{D_p \tau_p}$$



Exercice ; montrer que la solution est :

Longueur de diffusion: représente la distance moyenne parcourue avant que l'électron ne se recombine avec un trou

5. Equation de Poisson:

Elle est dérivée de la première équation de Maxwell. Elle relie le potentiel électrique et la densité de charge:

$$\frac{d^2V}{dx^2} = -\frac{dE}{dx} = -\frac{\rho(x)}{\epsilon_{sc}}$$

Dans les SC, deux types de charges (fixes et mobiles):

$$\frac{d^2V}{dx^2} = -\frac{e}{\epsilon_{sc}} [p(x) - n(x) + N_D^+(x) - N_A^-(x)]$$

Exemple

En considérant un champ électrique selon une seule direction et en rappelant que le champ électrique dérive d'un potentiel ($-\xi_x = \partial V / \partial x = V/L$ si l'échantillon considéré est homogène), l'équation (VI.16) devient, en valeur absolue :

$$j_{\text{tot}} = \sigma_{\text{tot}} \cdot V/L$$

$$R = \frac{1}{\sigma_{\text{tot}}} \frac{L}{S} = \frac{1}{(qn|\mu_n| + qp\mu_p)} \frac{L}{S}$$

