

## **COMPOSANTS SEMI-CONDUCTEURS**

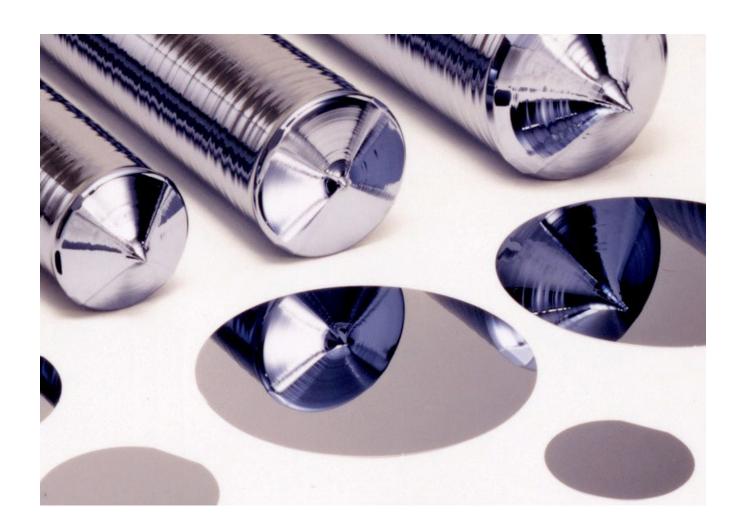
I) Formation de bandes

P.A. Besse

**EPFL** 



## Plaquettes de silicium

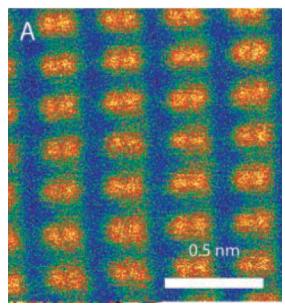


### Composition et propriétés des plaquettes de silicium ?



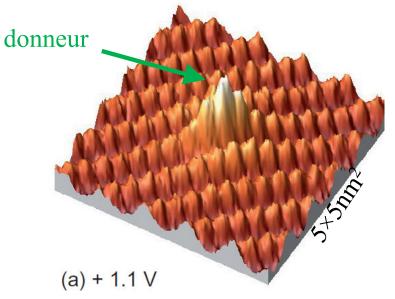
# Réseau cristallin: images STM (Scanning Tunnel Microscope)

Silicium [112]-orientation



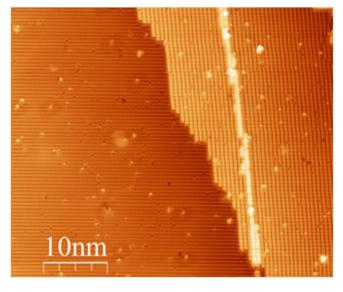
P.D.Nellist et al. « Direct Sub-Angstrom Imaging of a Crystal Lattice», Science, Vol. 305, 2004, p. 1741

N-doped Si (111)-2×1 surface



C.Sürgers et al., «Electronic disorder of P- and B-doped Si at the metal—insulator transition investigated by scanning tunnelling microscopy and electronic transport», New Journal of Physics 15 (2013)

Silicium (100)-surface



http://www.nist.gov/pml/div683/grp02/abdm.cfm



Le silicium et un réseau cristallin, on peut le décrire par des «modes globaux» et interpréter les porteurs libres comme des «paquets d'ondes» dans ce réseau.



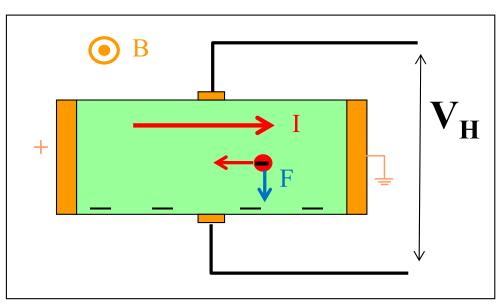
#### Motivation: Effet Hall →

#### charges libres positives ou négatives

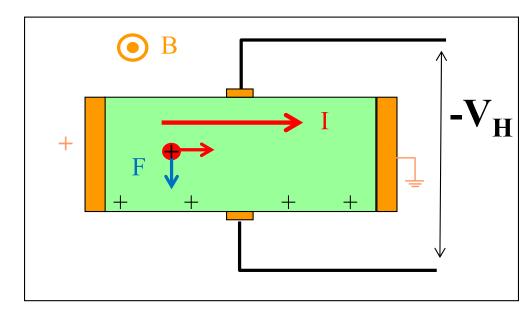
Dopé au phosphore ou à l'arsenic

#### Dopé au bore

Courant porté par des charges négatives



Courant porté par des charges positives

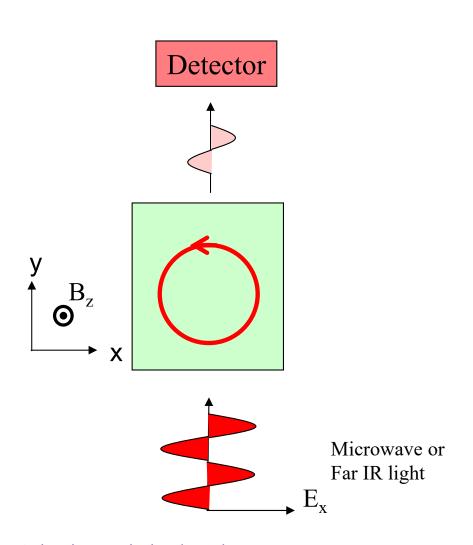


$$\vec{F} = q\vec{v} \times \vec{B} \cong \vec{I} \times \vec{B}$$

Le signe de la tension de Hall  $V_H$  dépend des charges porteuses du courant Les deux signes de la tension de Hall sont possibles et dépendent du choix de dopant !!!



# Masses des porteurs dans le cristal résonance cyclotronique



Dans une cavité résonante:

- Champ B statique
- Champ E haute fréquence  $\omega_0$

Le champ B est varié.

$$\omega_{\rm c} = \omega_0$$
  $\rightarrow$  Résonance

→ Absorption d'énergie à la fréquence de résonance.

La masse effective perpendiculaire à B est déterminée.

Fréquence cyclotron:

$$\omega_c = \frac{qB}{m}$$



## Motivation: masses anisotropiques Résonance cyclotronique dans le silicium

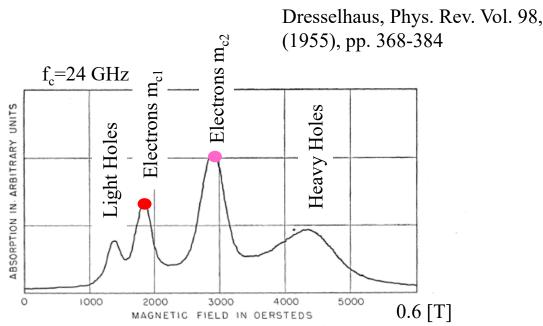


Fig. 3. Typical cyclotron resonance results in silicon near 24 000 Mc/sec and 4°K: static magnetic field orientation in a (110) plane at 30° from a [100] axis.

- Plusieurs résonances
- Masses proches de celle de l'électron
- Masses variables selon l'orientation du wafer dans le champ magnétique

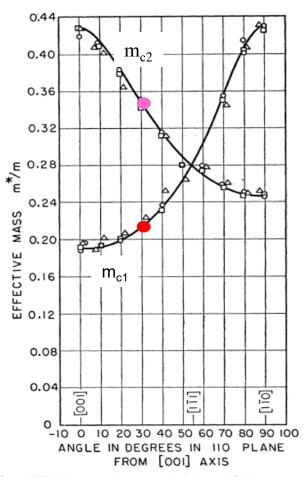


Fig. 6. Effective mass of electrons in silicon at 4°K for magnetic field directions in a (110) plane; the theoretical curves are calculated from Eq. (38), with  $m_i = 0.98m$ ;  $m_i = 0.19m$ .



#### Nature de l'électron

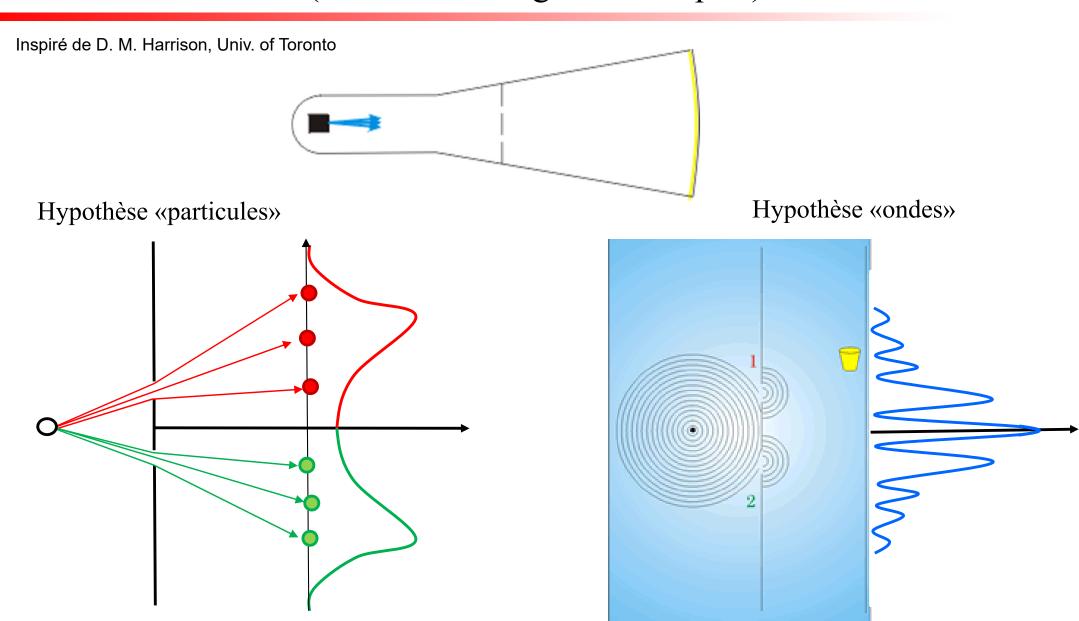
## **Particule**

ou/et

Onde??



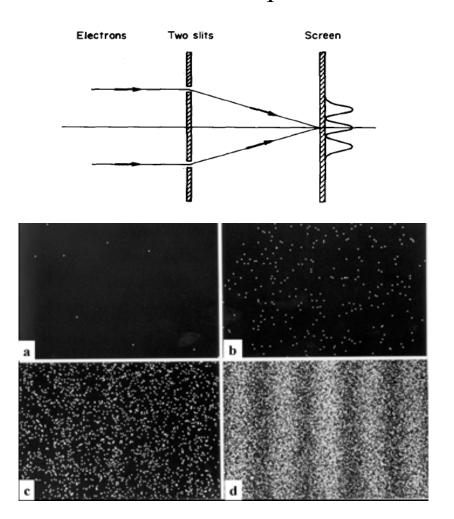
## Interférences d'électrons: (fentes de Young électroniques)

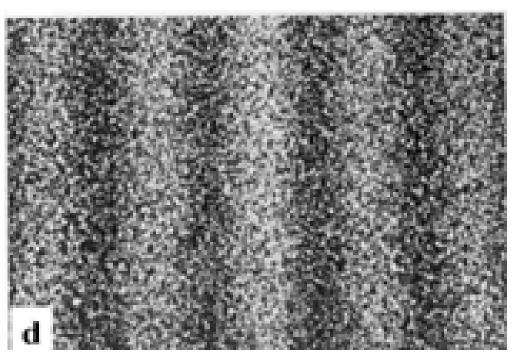




## Particule / Onde Motivation: interférences d'électrons

#### Double-slit experiment with single electron





 $\underline{http://www.hqrd.hitachi.co.jp/em/movie/doubleslite-n.wmv}$ 

A. Tonomura, Am. J. Phys. 57 (2), 1989, pp. 117-120



## Physique quantique: principe

Interactions → Particules

Propagation  $\rightarrow$ 

Fonction d'onde

$$\psi(\vec{x},t) = A \cdot e^{i\vec{K}x} \cdot e^{-i\omega t}$$

#### Particules:

- Energie E
- Impulsion  $\vec{P}$

« Planck »

$$E = \hbar \cdot \omega$$

$$\vec{P} = \hbar \cdot \vec{K}$$

« De Broglie »

#### Ondes:

- Fréquence  $\omega$ = $2\pi\nu$
- Vecteur d'onde  $\vec{K}$   $|\vec{K}| = 2\pi / \lambda$

Relation de l'énergie

$$E = \frac{P^2}{2m} + V_{pot}$$

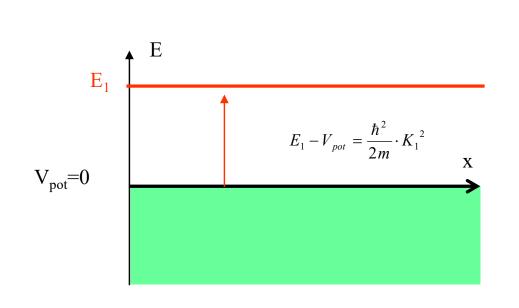
$$\iff$$

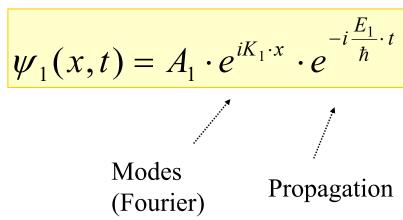
$$\hbar\omega = \frac{\left(\hbar K\right)^2}{2m} + V_{pot}$$

Relation de dispersion



#### Modes oscillatoires dans le vide





- 1)  $E_1 > V_{pot}$
- K<sub>1</sub> est réel

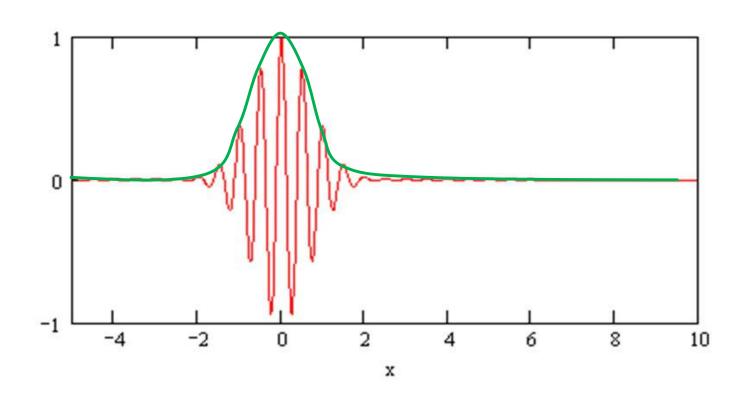
Il existe un continuum d'ondes planes de la forme sinus et cosinus.

 $E_1 < V_{pot}$ 

K<sub>1</sub> est imaginaire Les ondes sont évanescentes et ne peuvent donc pas se propager.



Electron libre = «bit» = porteuse et son enveloppe



Propagation comme un «paquet d'ondes» autour de la porteuse

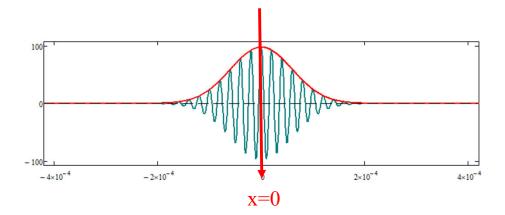


## Bit électronique

Amplitude en t=0

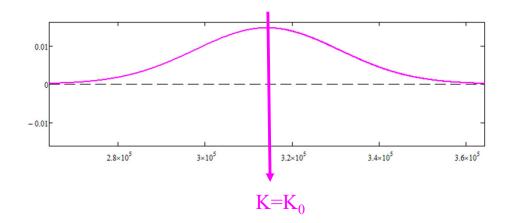
enveloppe

$$\left|\psi_{0}(x)\right\rangle = \left(\frac{1}{\pi \cdot \sigma_{0}^{2}}\right)^{1/4} \cdot e^{-\frac{x^{2}}{2\sigma_{0}^{2}}} \cdot e^{iK_{0}x}$$



Transformée de Fourier en t=0

$$\left|\tilde{\psi}_0(K)\right\rangle = \left(4\pi\sigma_0^2\right)^{1/4} \cdot e^{-\frac{\sigma_0^2(K-K_0)^2}{2}}$$



Variance en x:  $\sigma_r^2 = \sigma_0^2$ 

Variance en K:  $\sigma_K^2 = 1/\sigma_0^2$ 

$$\sigma_K^2 = 1/\sigma_0^2$$



## Propagation du bit électronique

#### Propagation dans l'espace de Fourier

$$\left|\tilde{\psi}(K,t)\right\rangle = \left(4\pi\sigma_0^2\right)^{1/4} \cdot e^{-\frac{\sigma_0^2(K-K_0)^2}{2}} \cdot e^{-i\omega t}$$

$$\hbar\omega = \frac{(\hbar K)^2}{2m}$$

#### Retour dans l'espace x par transformée de Fourier inverse:

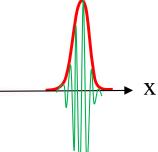
$$|\psi(x,t)\rangle \approx \left(\frac{1}{\pi \cdot \sigma^2}\right)^{1/4} \cdot e^{-\frac{(x-v_G t)^2}{2\sigma^2}}$$

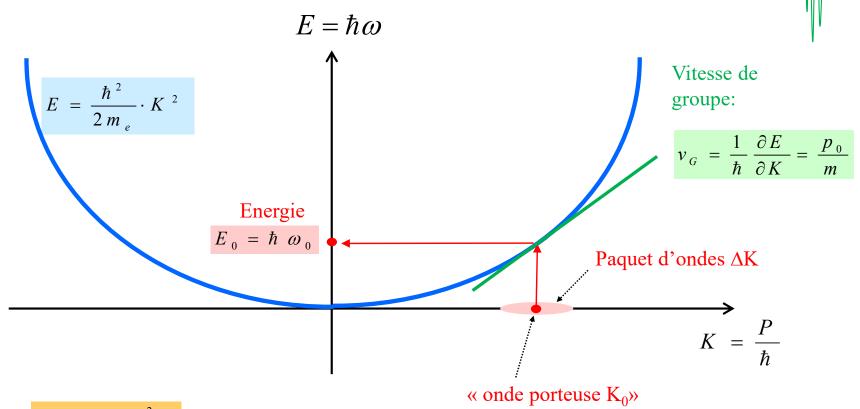
Vitesse de groupe: 
$$v_G = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial K} \Big|_{K=K_0} = \frac{\hbar K_0}{m} = \frac{p_0}{m}$$

Dispersion: 
$$\sigma = \sigma_0 \cdot \sqrt{1 + (\hbar t / m \sigma_0^2)^2}$$



## Relation de dispersion dans le vide





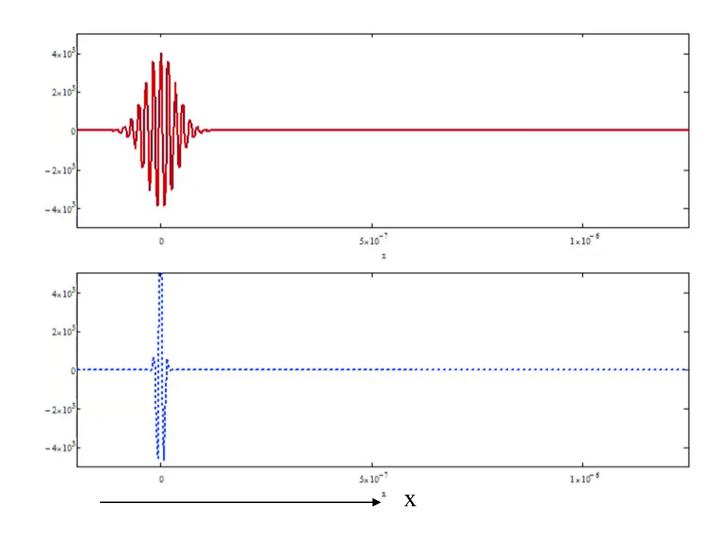
Masse:

$$\frac{1}{m_e} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial K^2}$$

Impulsion: 
$$P_0 = \hbar K_0$$



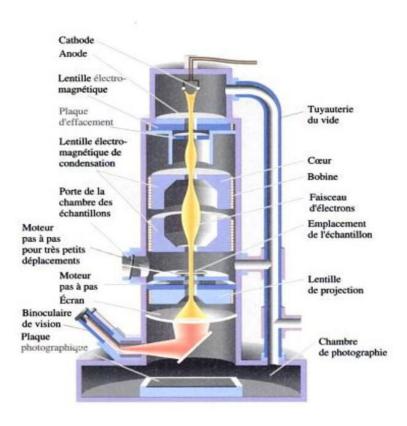
## Vitesse de phase et vitesse de groupe





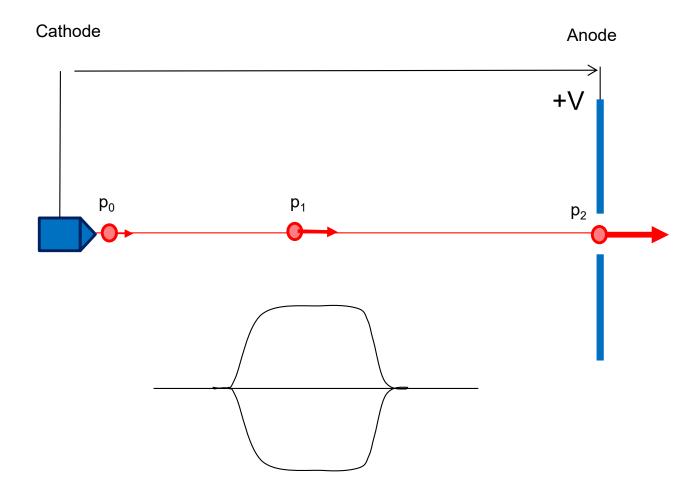
#### Exercice

#### TEM principle

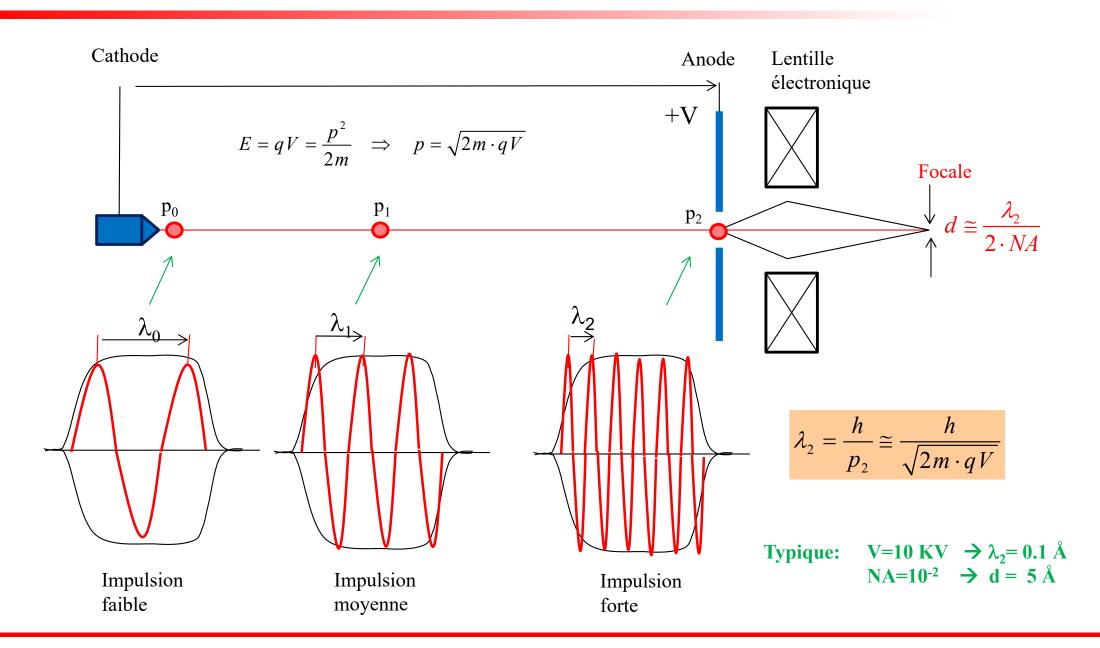


Eugene Hecht, « Physique », p. 1171

#### Canon à électrons simplifié

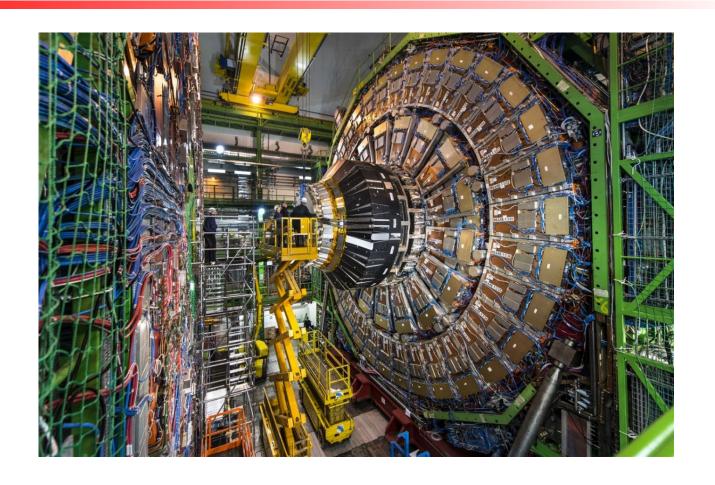


## EPFL Microscope électronique: canon à électrons





# Quel est le «microscope» le plus puissant au monde ?



... le LHC (Large Hardron Collider)

$$\lambda_2 = \frac{h}{p_2} \cong \frac{h}{\sqrt{2m \cdot qV}}$$

#### Atomes

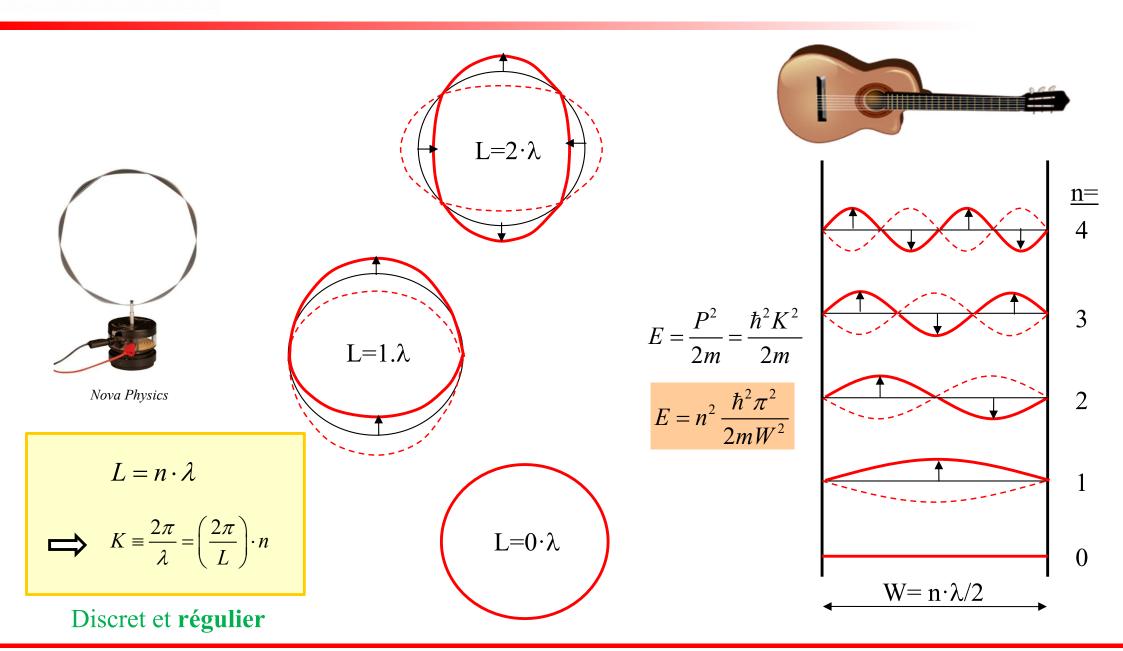
## **Orbitales**

et

## Niveaux discrets d'énergie



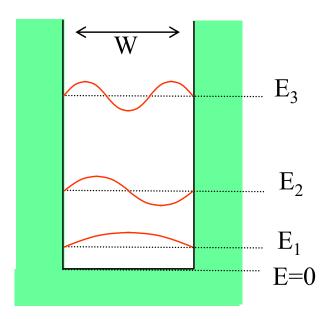
#### Ondes stationnaires





## Atome isolé = puits de potentiel

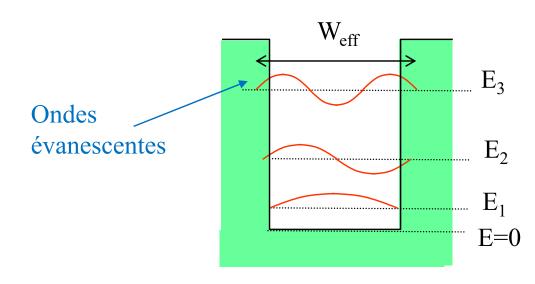
Puits infini



$$n\,\frac{\lambda}{2}=W$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} = n^2 \cdot \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m W^2}$$

#### Puits fini



Pénétration latérale surtout pour états supérieurs

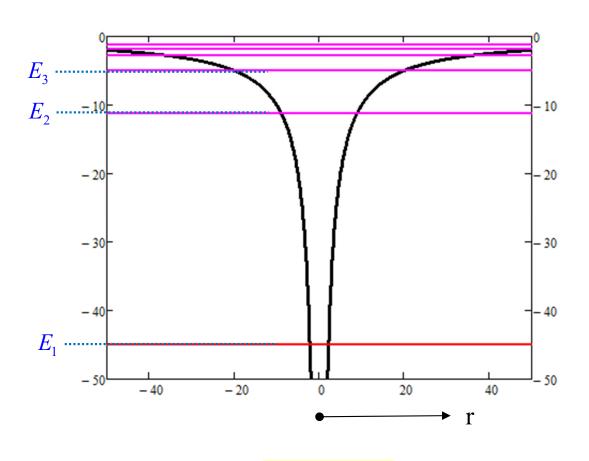
« Etats discrets »

$$E_n \cong n^2 \cdot \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m W_{eff}^2}$$



## Potentiel de Coulomb en 1/r

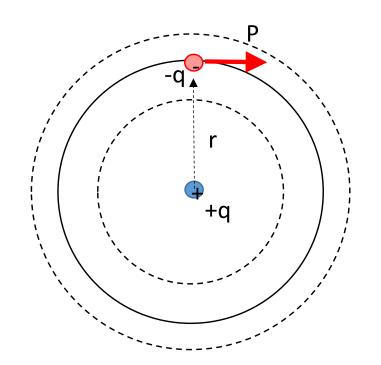
#### Potentiel en 1/r



$$E_n \approx -\frac{1}{n^2}$$

Centrifuge = Coulomb 
$$\frac{v^2}{r} \approx \frac{1}{r^2}$$

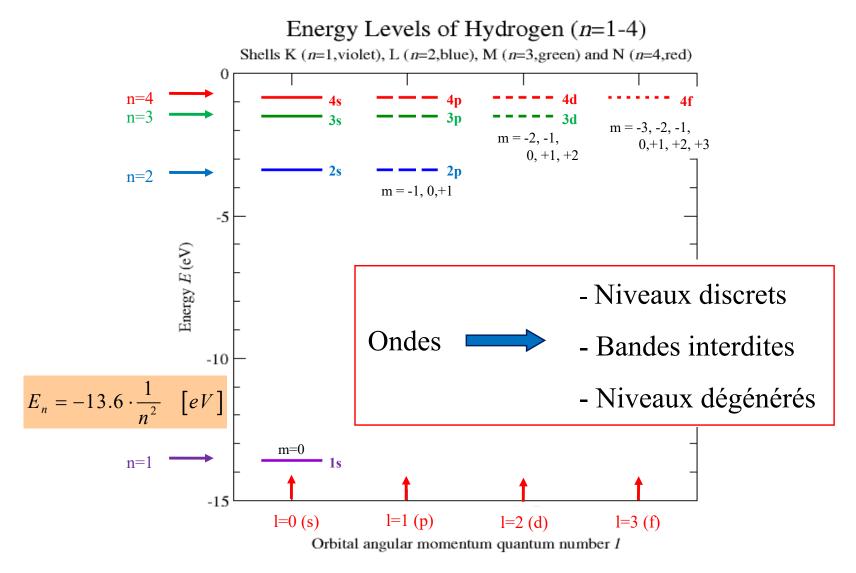
Onde stable 
$$K = \frac{2\pi}{\lambda} = \left(\frac{2\pi}{L}\right) \cdot n$$



Orbitales discrètes dans l'atome d'hydrogène



## Niveaux d'énergie de l'hydrogène



http://en.wikipedia.org/wiki/Laplace-Runge-Lenz vector





## Liaisons covalentes

et

## Formation de bandes



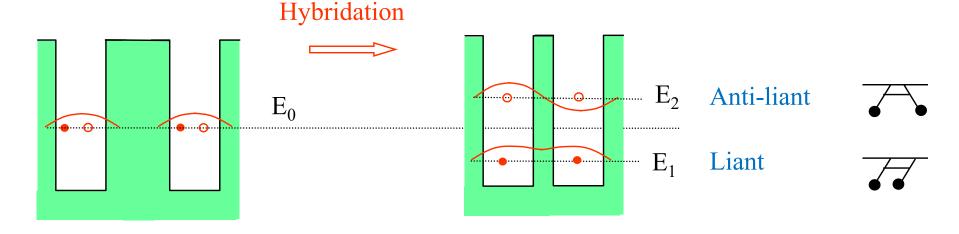
#### Deux atomes: états liants et anti-liants

#### **Atomes H**

Deux atomes séparés avec 1 électron chacun

#### Molécule H<sub>2</sub>

Deux atomes proches avec 1 électron chacun



Deux états identiques:

- localisés
- deux spins possibles par état
- un électron dans chaque puits

Etat « liant »:

- énergie profonde, occupé par un électron de chaque atome.

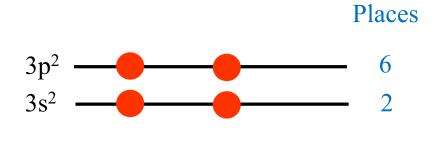
Etat « anti-liant »:

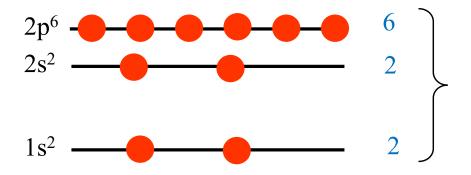
- énergie supérieure, libre à basse température



#### Atome de silicium

#### Structure électronique d'un atome isolé.





Chaque atome apporte:

- 8 places et
- 4 électrons

dans les couches élevées.

10 places toujours occupées ne participent pas à la conduction.

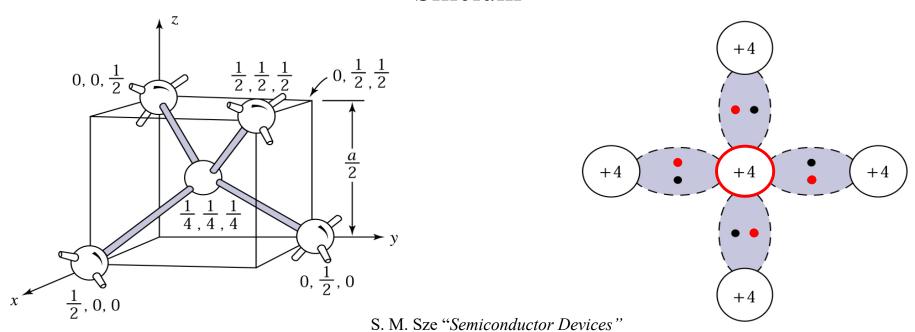


## Hybridation: Liaisons covalentes

2 atomes = 8 électrons 16 places

→ 4 états liants sp³ (8 places occupées par 8 électrons) 4 états anti-liants sp³ (8 places libres à basse température)

#### Silicium





#### Semi-conducteurs IV et III-V



J. Singh: "Semiconductor Devices"

#### IV Semiconductors

C 
$$1s^2 2s^2 2p^2$$

Si 
$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$$

Ge 
$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^2$$

#### III-V Semiconductors

Ga 
$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^1$$

As 
$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^3$$

Ga

$$4s^2$$

$$3s^2$$

$$1s^2$$

As

$$4p^3$$

$$3s^2$$

$$2s^2$$

$$1s^2$$

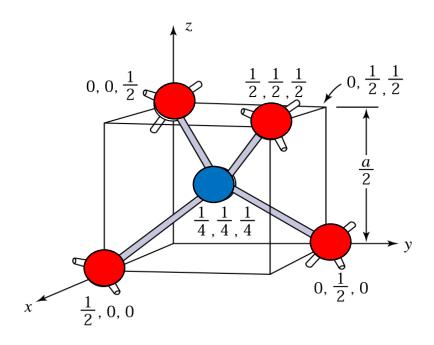
Si = 2 atomes = 8 électrons à placer sur les 4 liaisons tétraédriques

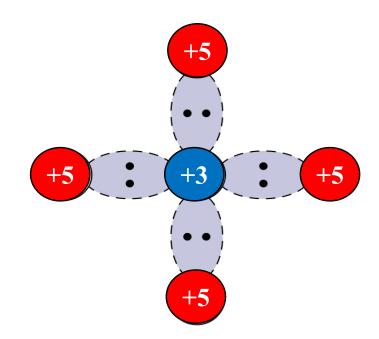
GaAs = 2 atomes = 8 électrons à placer sur les 4 liaisons tétraédriques



#### Semi-conducteurs III-V

GaAs , InP , InGaAs , InGaAsP , ...

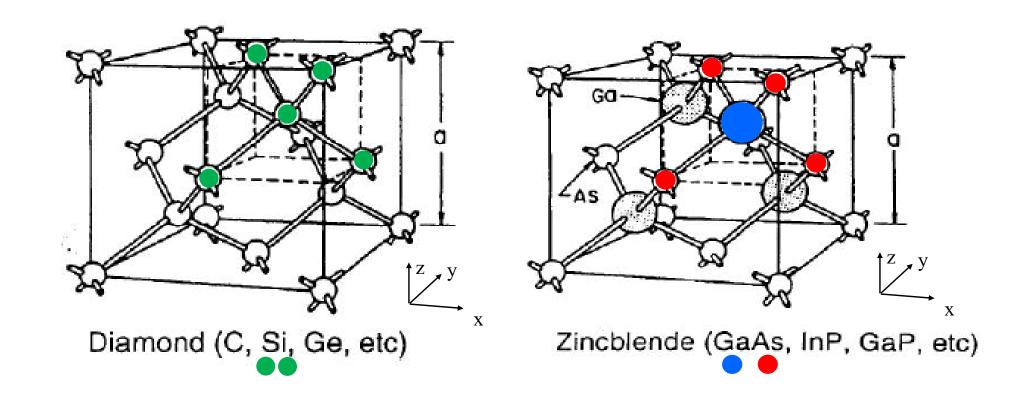




S. M. Sze "Semiconductor Devices"



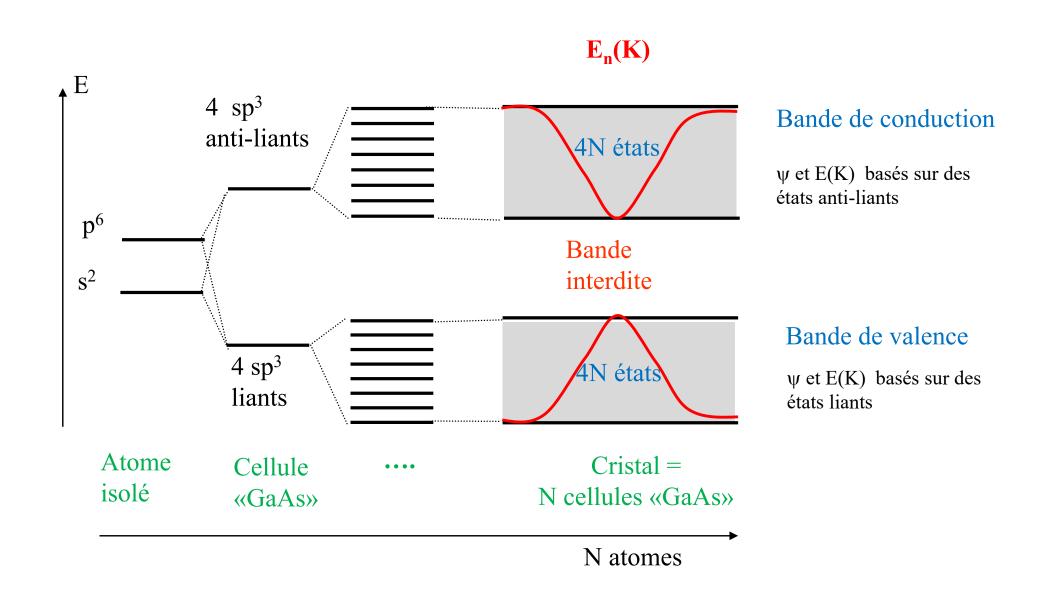
#### Structure cristalline



S. M. Sze "Physics of semiconductor devices"

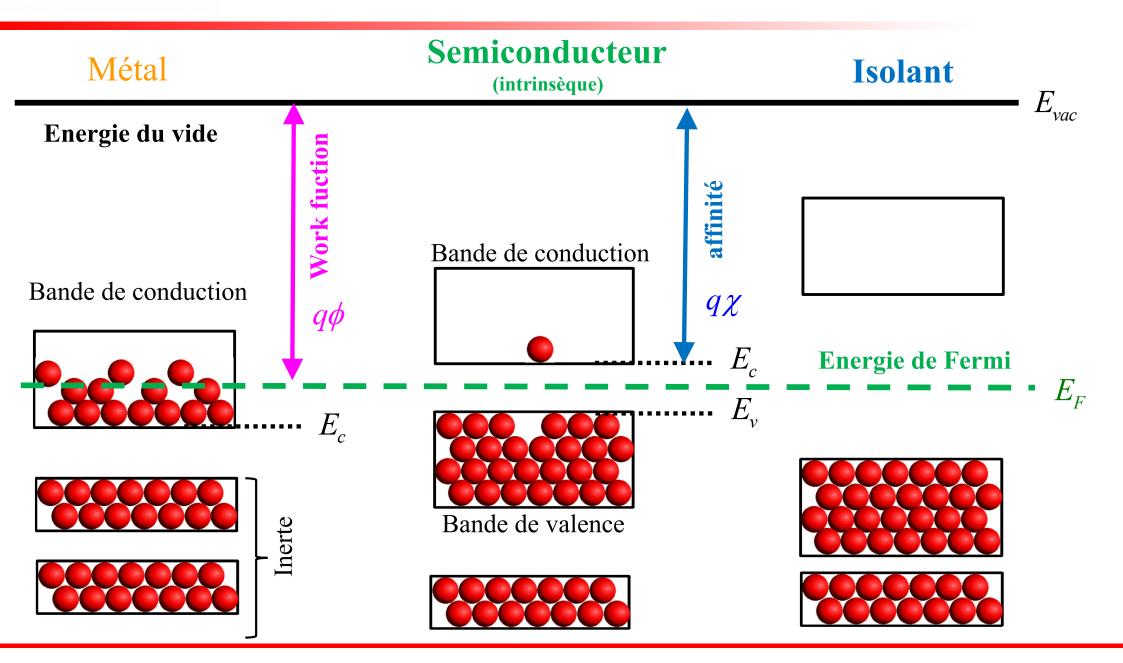


#### Formation de bandes





## Métal, semi-conducteur, isolant





# Cas spécifique: silicium à température ambiante

$$E_{g,Si} \equiv E_C - E_V \cong 1.1 [eV]$$

$$U_{th} \equiv \frac{kT}{q} \cong 25 \left[ meV \right]$$
 à température ambiante

$$E_{g,Si} \gg U_{th}$$

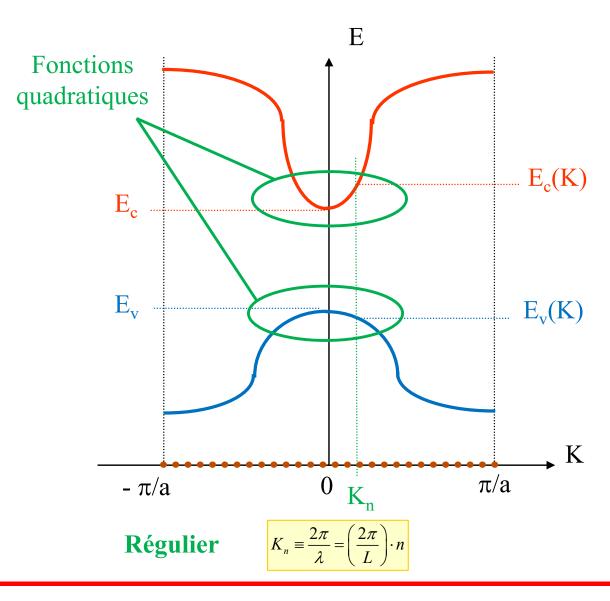
Le silicium non-dopé à T=300K est un isolant Il doit être dopé pour devenir semi-conducteur

Rem:

$$n_i \cong 10^{10} \left[ cm^{-3} \right] \ll N_{dopage} \cong 10^{18} \left[ cm^{-3} \right] \ll N_{atomes} \cong \left( 10^8 \right)^3 = 10^{24} \left[ cm^{-3} \right]$$

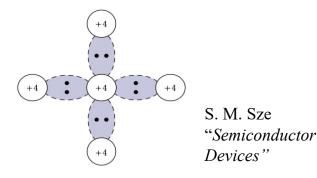


# Semicondeteurs: relation de dispersion E(K)



Bande de conduction basée sur des états libres (anti-liants)

Bande de valence basée sur des liaisons tétraédriques





## Approximation des relations de dispersion: Masses effectives et vitesse de groupe

Développement de Taylor

$$E \cong E_c + \frac{\hbar^2}{2} \overrightarrow{K} \cdot \frac{1}{m_n^*} \cdot \overrightarrow{K}$$

Masse effective de la bande de conduction

$$E \cong E_v - \frac{\hbar^2}{2} \vec{K} \cdot \frac{1}{m_p^*} \cdot \vec{K}$$

Masse effective de la bande de valence

$$\overrightarrow{v_G} = \frac{1}{\hbar} \cdot \overrightarrow{grad_K}(E)$$

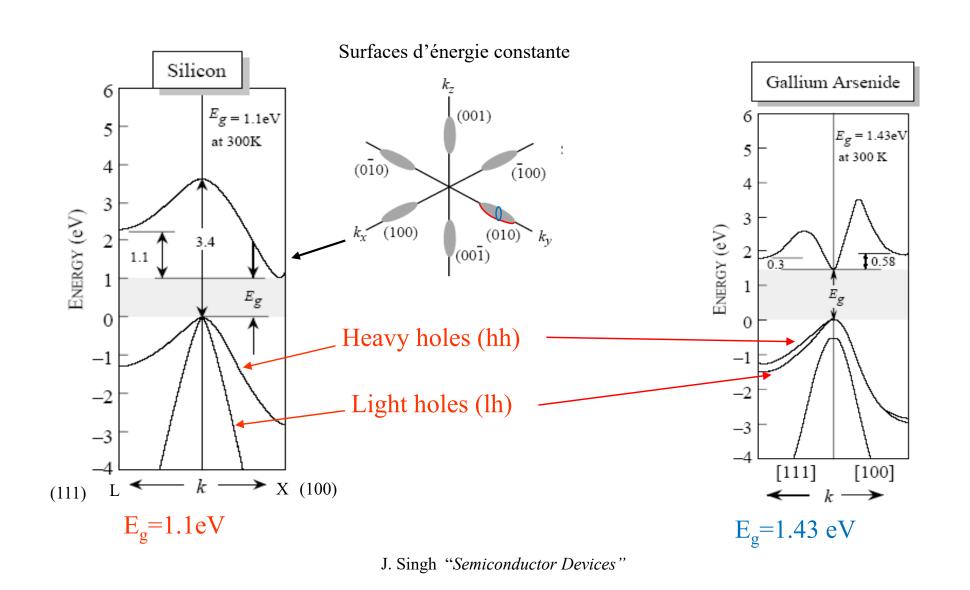
Accélération due à une force F:

$$\vec{a} = \frac{d\vec{v_G}}{dt} = \left(\frac{1}{m^*}\right) \cdot \vec{F} \quad avec \quad \left(\frac{1}{m^*}\right) \equiv \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2}{\partial K^2} E$$

$$\left(\frac{1}{m^*}\right) \equiv \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2}{\partial K^2} E$$



## Exemples: Si et GaAs





## Masses effectives et bandgaps (1)

Material	Bandgap (eV)	Relative Dielectric Constant
С	5.5, I	5.57
Si	1.124, I	11.9
Ge	0.664, I	16.2
SiC	2.416, I	9.72
GaAs	1.424, D	13.18
AlAs	2.153, I	10.06
InAs	0.354, D	15.15
GaP	2.272, I	11.11
InP	1.344, D	12.56
InSb	0.230, D	16.8
CdTe	1.475, D	10.2
A1N	6.2, D	9.14
GaN	3.44, D	10.0
ZnSe	2.822, D	9.1
ZnTe	2.394, D	8.7

Masses effectives en unité:  $m_0=0.911.10^{-30}$  Kg

PROPERTY	SI	GAAs
Electron	$m^*_l = 0.98$	m* = 0.067
effective mass	$m_{t}^{*} = 0.19$	
$(m_0)$	$m^*_{dos} = 1.08$	
	$m^*_{\sigma} = 0.26$	
	_	
Hole	$m^*_{hh} = 0.49$	$m^*_{hh} = 0.45$
effective mass	$m^*_{lh} = 0.16$	$m^*_{lh} = 0.08$
$(m_0)$	$m^*_{dos} = 0.55$	$m^*_{dos} = 0.47$
	$m_{\sigma}^* = 0.37$	$m_{\sigma}^* = 0.34$
Bandgap	1.17 - 4.37 x 10 <sup>-4</sup> T <sup>2</sup>	1.519 - <u>5.4 x 10<sup>-4</sup> T<sup>2</sup></u>
(eV)	T + 636	T + 204
Electron affinity	4.01	4.07
(eV)		

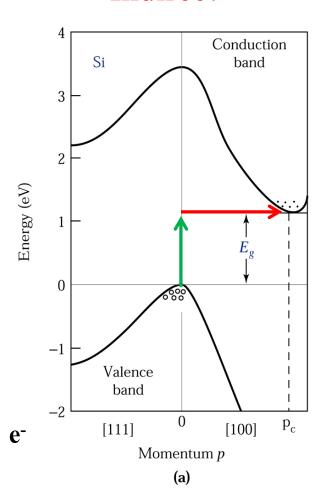
For Si:  $m^*_{dos}$ : To be used in calculating density of states, position of Fermi level  $m^*_{\sigma}$ : To be used in calculating response to electric field, e.g., in mobility

J. Singh "Semiconductor Devices"

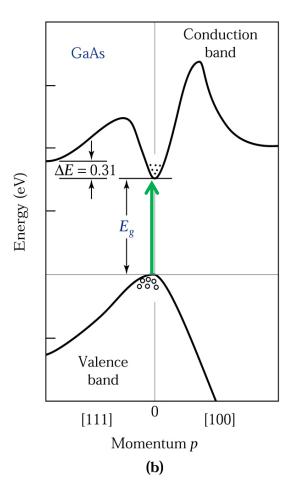


#### Semi-conducteurs directs et indirects

#### **Indirect**

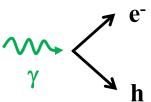


#### Direct



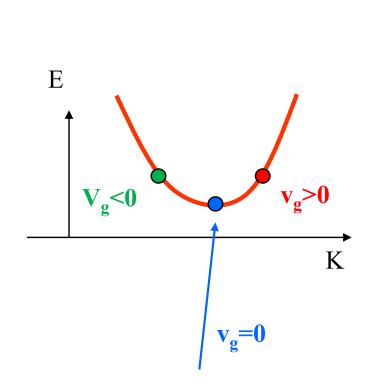
S. M. Sze "Semiconductor Devices"

Un semi-conducteur indirect doit utiliser des phonons (vibrations du cristal) pour conserver l'impulsion.

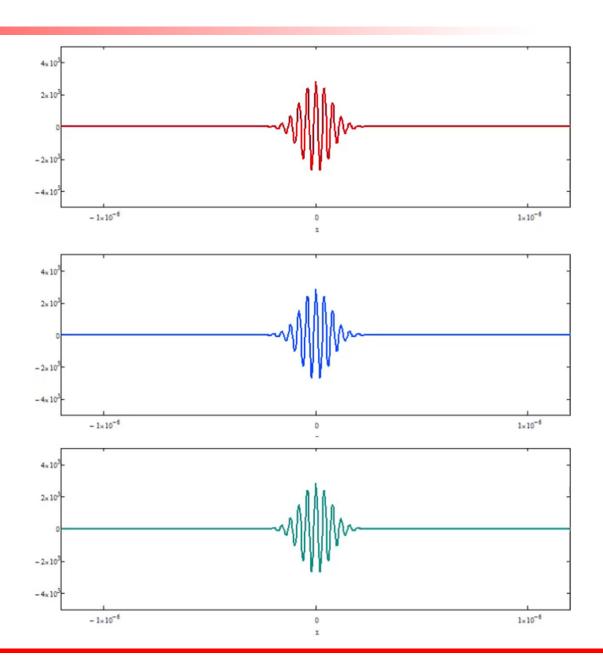




#### Minima de la bande de conduction



Impulsion non-nulle mais vitesse de groupe nulle !!





## Défauts ponctuels

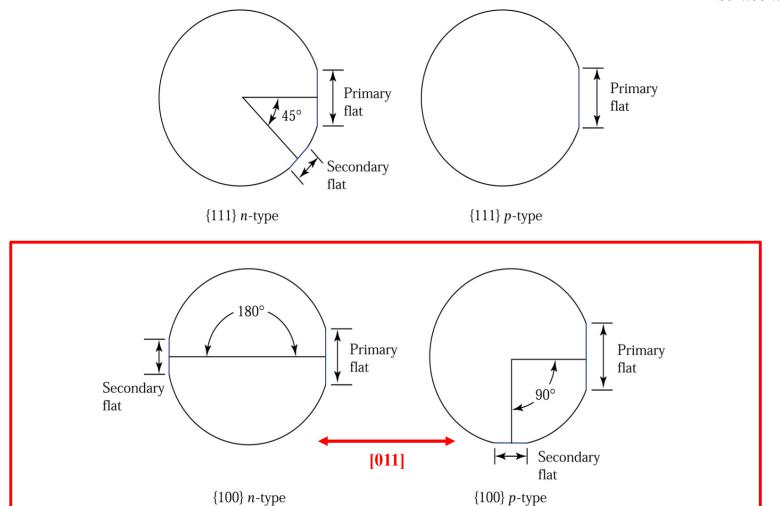
Substitution	Impureté interstitielle	
Vacance	Défaut de Frenkel	
	S. M. Sze "Semiconductor Devices"	



## Identification de wafer









## Exercice E1.1: donnée



Des questions de réflexion sont en fin de chaque script. Elles couvrent les notions fondamentales de chaque chapitre et vous aident à préparer l'examen oral final.

#### Répondez aux questions 1.1, 1.2 et 1.5

1.1	Qu'appelle-t-on la relation de dispersion d'une particule ? Exprimez-la pour une particule dans le vide. Comment peut-on déterminer graphiquement la vitesse de groupe et la masse effective de la particule à partir de cette relation ?
1.2	Considérez un atome « A » avec trois électrons sur deux niveaux d'énergie. Dessinez le schéma d'énergie de la cellule « AA » contenant deux atomes « A ». Expliquez la formation de bandes dans un monocristal basé sur cette cellule « AA ».
1.5	À l'aide du schéma d'énergie, expliquez l'absorption optique dans un gaz et dans un semi- conducteur monocristallin.