



P.A. Besse

Physique des
composants
semi-conducteurs:

Partie A:

Propriétés électroniques

<http://moodle.epfl.ch/>

Lausanne, Juillet 2023

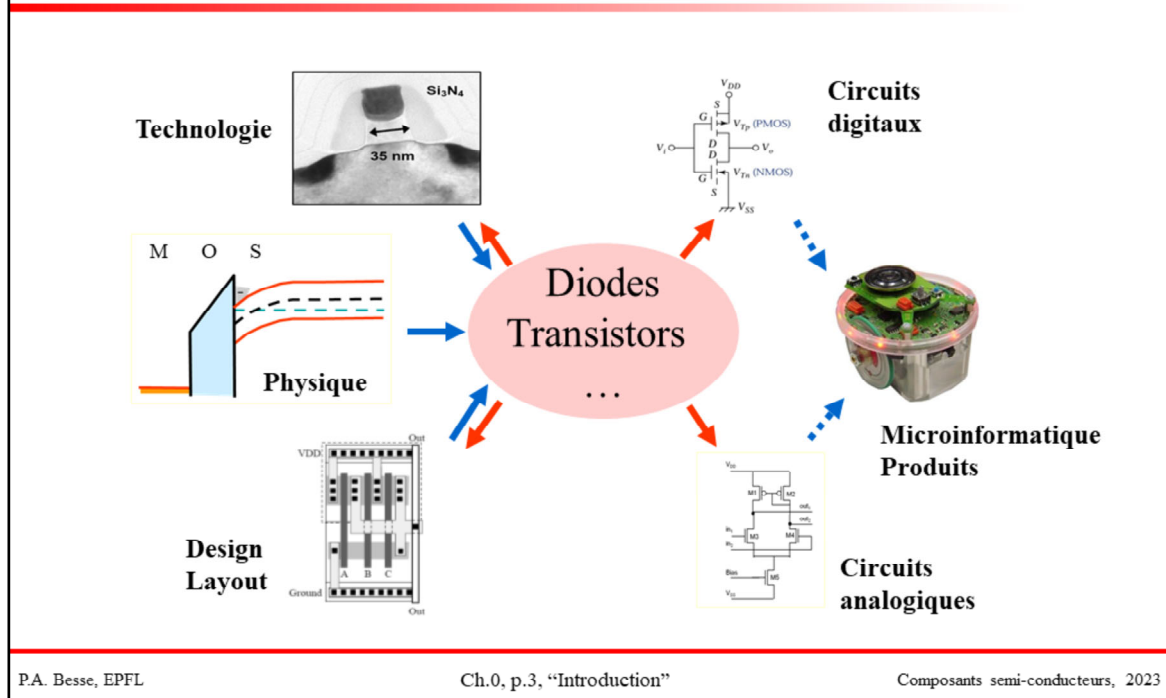
COMPOSANTS SEMI-CONDUCTEURS



Dr. P.-A. Besse

Cours EPFL

3^{ème} année
Bachelor microtechnique



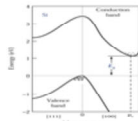
Ce cours cherche à expliquer le fonctionnement des composants de base de l'électronique. Il se base sur les lois de la physique du solide et plus particulièrement sur la description des propriétés électroniques des cristaux semi-conducteurs.

Chaque composant nécessite une technologie spécifique. La conception de composants doit donc tenir compte de ces possibilités technologiques et des règles de design qui en découlent. D'un autre côté, une meilleure compréhension des phénomènes internes permet d'adapter et d'optimiser la technologie et le design.

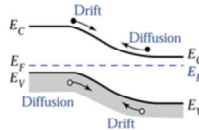
Les composants de base servent de point de départ pour l'élaboration de circuits analogiques ou digitaux, qui eux-mêmes sont à la base des microcontrôleurs et des microprocesseurs.

- | | |
|--|---------------------|
| <ul style="list-style-type: none">• Comprendre les semiconducteurs• Elaborer les modèles physiques• Dériver les équations mathématiques | Fondements |
| <ul style="list-style-type: none">• Appliquer sur :<ul style="list-style-type: none">- diodes et transistors- cellules solaires- capacités MOS et mémoires• Optimiser | Applications |
| <ul style="list-style-type: none">• Circuits digitaux et analogiques<ul style="list-style-type: none">- inverseur CMOS- ampli de tension | Circuits |

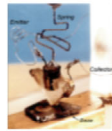
- Concepts de base
(schéma de bandes, ...)



- Diodes MS et p/n
(barrière variable, ...)



- Transistors bipolaires
(barrière contrôlable, ...)



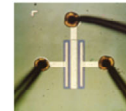
- Cellules solaires



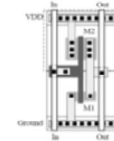
- Capacités MOS
(CCD, mémoires, ...)



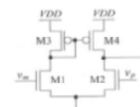
- Transistors FET
(canal, ...)



- Circuits CMOS
digitaux
(inverseur, ...)



- Circuits CMOS
analogiques
(ampli différentiel, ...)



1. Dispersion, masse effective, vitesse de groupe, bandes de conduction et de valence.
2. Densité d'états, niveau de Fermi, concentrations n et p , donneurs, accepteurs, loi d'action de masse.
3. Zones de charge, courants de conduction et de diffusion, mobilité.
4. Loi de continuité, génération, recombinaison, temps de vie, longueur de diffusion, quasi-niveaux de Fermi, variations des potentiels d'énergie.
5. Jonction métal / semi-conducteur, barrière de potentiel, contacts ohmiques.
6. Diode p-n à l'équilibre et hors équilibre, schéma de bande, zone de déplétion, courants dans une diode, capacités et schéma équivalent petits signaux.
7. Transistors bipolaires, schéma de bande, gain, modèle de Ebers-Moll.
8. Cellules solaires.
9. Jonction MOS, potentiel de surface, accumulation, déplétion, inversion faible et forte, capacité MOS, MOS en déplétion profonde, Charge Coupled Device (CCD)
10. FET, NMOS, PMOS, subthreshold, inversion forte,
11. CMOS, JFET, HEMT, mémoires floating gate.
12. Circuits CMOS pour les fonctions logiques, inverseur CMOS.
13. Exemples de circuits analogiques CMOS: ampli à source commune, ampli différentiel.
14. Comparaison et choix de diodes et de transistors.



[1] **S.M. Sze, Kwok K. Ng « Physics of semiconductor devices »**
Wiley-interscience, 3^{ème} édition, 2007
Disponible par e-book

[2] S.M. Sze, « Semiconductor devices, physics and technology »
Wiley, ISBN 0 – 471 – 33372 - 7

[3] Jasprit Singh, « Semiconductor Devices: Basic Principles »
Wiley, ISBN 0 – 471 – 36245 – X

[4] **R.J. Baker, « CMOS, circuit design, layout and simulation »,**
IEEE Press, 1998 and second edition 2005
Disponible par e-book

Ce cours est avant tout basé sur la référence [1] qui décrit les composants de base ainsi que des composants avancés (non abordés dans ce cours) de la microélectronique.

Il est disponible en livre électronique pour les étudiants EPFL. Il suffit de le rechercher sur le site de la bibliothèque.

La référence [2] contient les explications détaillées sur les différents concepts abordés dans le cours. Il inclut dans les derniers chapitres aussi les aspects de fabrication microélectronique et de salle blanche.

La référence [3] détaille également les concepts de ce cours. Les aspects « électronique des corps solides » (chapitre 1 de ce cours) y sont plus particulièrement analysés, mais la description technologique n'y est pas incluse.

La référence [4] se concentre sur les circuits CMOS digitaux et analogiques décrits aux chapitres 12 et 13.

**Electrodynamique (physique III EPFL)**

- [5] D.J. Griffiths, "Introduction to Electrodynamics"
- [6] A. Zangwill, "Modern Electrodynamics"
- [7] Jackson "Classical Electrodynamics" (la 3eme édition est en unité SI)

Physique du solide

- [8] Neil W. Ashcroft; N. David Mermin; Physique des solides, 2002
- [9] Charles Kittel; Introduction to solid state physics, 1996



Script en 3 parties à la vente des cours



Livres électroniques gratuits à l'EPFL



Site Web sur Moodle



Vidéos comme support de cours



3 crédits: 2h de cours, 1h exercices
 2-3h de travail personnel



2 tests à blanc
+ questions de réflexion par chapitre



Examen oral: 15' prépa., 15' de discussion

CS-2023 : contenu du cours

Chapitre	contenu	Vidéos
LIVRE A		
0-intro 1-bandes	Expériences motivantes Electrons dans le vide Atomes et molécules Bandes silicium Masses effectives	CS-1-1 CS-1-2 CS-1-3 CS-1-4 CS-1-5
2-équilibre	Trous Densité intrinsèque Dopage Densité avec dopage	CS-2-1 CS-2-2 CS-2-3 CS-2-4
3-transport	Courant de drift Equation de Poisson Courant de diffusion	CS-3-1 CS-3-2 CS-3-3
4-hors équilibre	Génération Recombinaison Equation de continuité Schéma de bandes Faible injection	CS-4-1 CS-4-2 CS-4-3 CS-4-4
LIVRE B		
5-Metal-semicond	Equilibre MS Courant MS Contacts ohmiques	CS-5-1 CS-5-2 CS-5-3
6-jonction pn	Equilibre PN Hors équilibre PN Diode idéale PN Diode réelle PN	CS-6-1 CS-6-2 CS-6-3 CS-6-4

7-bipolaire npn	Principe BJT	CS-7-1
	Ebers-Moll	CS-7-2
	Early	CS-7-3
	Petit signal BJT	CS-7-4
8-solar cells	Solar cells IV curve	CS-8-1
	Solar pannels	CS-8-2
	Solar cell efficiencies	CS-8-3
	Hétéro solar cells	CS-8-4
	Solar cells and batteries	CS-8-5
9-jontion MOS	Jonction MOS	CS-9-1
	Première équation MOS	CS-9-2
	CCD	CS-9-3
	Capa-MOS	CS-9-4
LIVRE C		
10-MOSFET	Structure MOSFET	CS-10-1
	Fonctionnement MOSFET	CS-10-2
	Modèle basic d'un MOSFET	CS-10-3
	MOSFET petits signaux	CS-10-4
11-CMOS techno+memories	Technologie CMOS	CS-11-1
	Principe JFET	CS-11-2
	Mémoires	CS-11-3
	Floating gate	CS-11-4
12-circuits-numériques	Inverseur CMOS	CS-12-1
	NAND-NOR	CS-12-2
	Logique et oscillateur CMOS	CS-12-3
13-circuits-analogiques	Source de courant	CS-13-1
	Ampli de tension	CS-13-2
	Ampli différentiel	CS-13-3

14-comparaison	Comparaison des diodes	CS-14-1
	Comparaison des transistors	CS-14-2
	Avantages des CMOS	CS-14-3

CS-2023 : contenu des exercices

Chap.	contenu	Vidéos
PARTIE A		
1	1.1 relation de dispersion 1.2 formation de bandes 1.3 absorption optique	S1-1 S1-2 S1-3
2	2.1 profile de dopage 2.2 niveau de Fermi et température	S2-1 S2-2
3	3.1 jonction N+/N 3.2 hot plate 3.3 thermocouple	S3-1 S3-2 S3-3
4	4.1 schéma de bande 4.2 cellule et tension de membrane	S4-1 S4-2
PARTIE B		
5	5.1 diode Schottky	S5-1
6	6.1 courants dans une diode P+/N- 6.2 courants et diode PN courte 6.3 sonde de Kelvin	S6-1 S6-2 S6-3
7	7.1 schéma de bande d'un pnp 7.2 ampli de tension avec npn	S7-1 S7-2
8	8.1 efficience maximale estimée 8.2 efficience et gap 8.3 laser power converter 8.4 CMOS camera	S8-1-2019 S8-2-2019 S8-3-2019 S8-4-2019
9	9.1 MOS jonction substrat n : bandes 9.2 MOS jonction substrat n : charges	S9-1 S9-2
PARTIE C		
10	10.1 NMOS subthreshold 10.2 VLSI et dispersion d'énergie 10.3 tension sur l'oxyde	S10-1 S10-2 S10-3

	10.4 MOSFET gate et drain court-circuité	S10-4
11	11.1 contrôle de VT 11.2 transmission gate 11.3 ampli de tension avec JFET 11.4 mémoires avec traps dans oxyde 11.5 ISFET	S11-1 S11-2 S11-3 S11-4 S11-5
12	12.1 multiplexer CMOS 12.2 full adder 12.3 dimensionnement NAND 12.4 tri-state inverter	S12-1 S12-2 S12-3 S12-4
13	13.1 ampli diff et comparateur 13.2 ampli de tension avec NMOS	S13-1 S13-2
14	14.1 charge et décharge d'une capa 14.2 pertes dynamiques dans inverseur	S14-2 S14-2

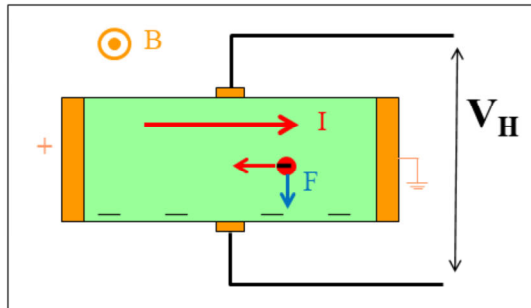
COMPOSANTS SEMI-CONDUCTEURS

I) Formation de bandes

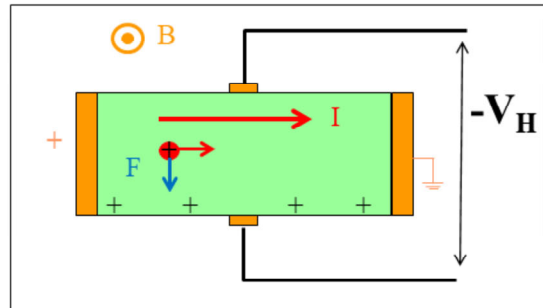
P.A. Besse

EPFL

Courant porté par des charges négatives



Courant porté par des charges positives



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

Le signe de la tension de Hall V_H dépend des charges porteuses du courant
Dans la nature les deux cas sont mesurés !!!

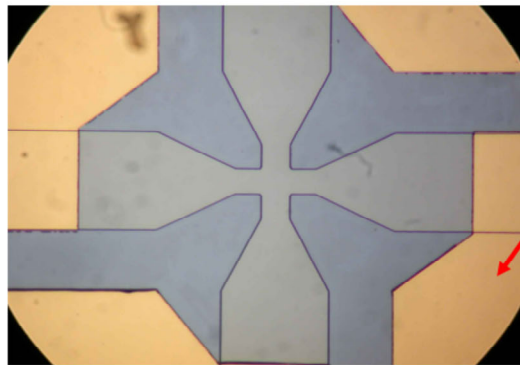
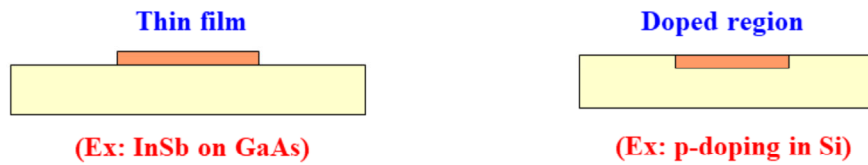
Une représentation naïve d'un semi-conducteur est celle d'un cristal fait d'un alignement régulier de noyaux atomiques fixes avec des électrons libres se baladant entre eux. Dans ce cas:

- Seules les charges négatives sont libres et portent le courant (figure de gauche),
- La masse (l'inertie) de ces charges est celle des électrons dans le vide.

Considérons l'effet Hall. Un courant I circule dans une plaque semi-conductrice. Le champ magnétique B produit une force de Lorentz sur les charges mobiles. Les charges mobiles (quelque soit leur signe) sont attirées dans la même direction par cette force de Lorentz. Sur les deux figures ci-dessus il y a accumulation de charges mobiles sur le bas de la plaque semi-conductrice. Pour des charges mobiles positives la tension de Hall V_H a un signe contraire à celle produite par des charges mobiles négatives.

Expérimentalement, la tension de Hall peut avoir les deux signes! Il y a donc parfois des charges libres négatives et parfois des charges libres positives dans le cristal. Nous devons comprendre quelles sont ces particules !

1^{ère} question: Quelles sont les masses de ces particules ?



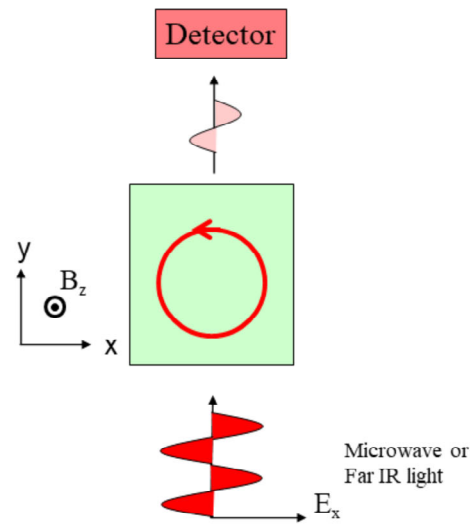
Bonding pad

G. Boero, IMT - EPFL

Voici des exemples de capteurs Hall.

- Sur des semi-conducteurs à haute mobilité (comme le InSb ou le GaAs) la couche conductrice est en général obtenue par croissance épitaxiale puis sa forme est définie par attaque chimique.
- Dans le silicium, la couche conductrice est une région implantée dans le substrat lui-même.

La croix centrale forme le capteur Hall proprement dit. Ses bras ont une épaisseur pouvant descendre jusqu'au dessous du micron.



[Animation et principe du cyclotron](#)

Dans une cavité résonante:

- Champ B statique
- Champ E haute fréquence ω_0

Le champ B est varié.

$\omega_c = \omega_0 \rightarrow$ Résonance
 \rightarrow Absorption d'énergie à la fréquence de résonance.

La masse effective perpendiculaire à B est déterminée.

Fréquence cyclotron:

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

Considérons une galette (wafer) de semi-conducteur dans un champ magnétique B_z perpendiculaire. Appliquons un champ électrique haute fréquence E_x sur ce setup (ce champ est en fait une micro-onde ou une source dans le lointain infrarouge).

Sur un porteur libre, la force de Lorentz équilibre la force centrifuge:

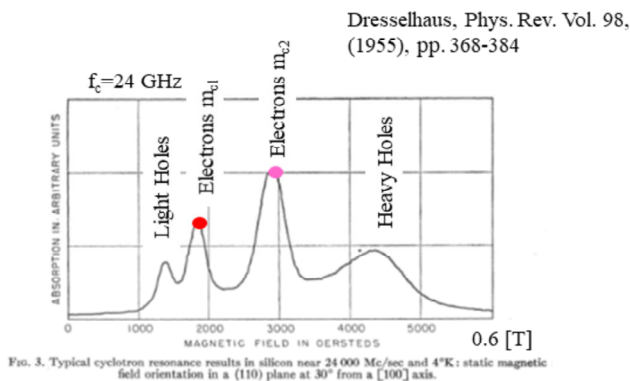
$$qvB = m \frac{v^2}{R} \Rightarrow R = \frac{mv}{qB}$$

Le rayon du cercle dans l'espace dépend linéairement de la vitesse.

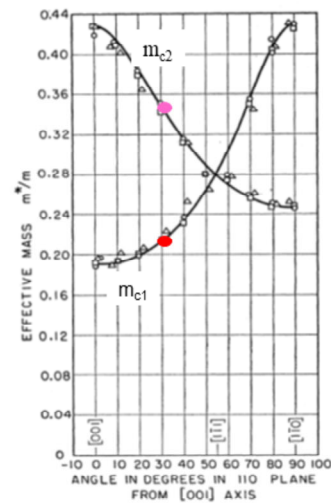
Le temps T pour accomplir une rotation est relié à la fréquence de cyclotron ω_c par:

$$T = \frac{2\pi}{\omega_c} = \frac{2\pi R}{v} \Rightarrow \omega_c = \frac{v}{R} = \frac{qB}{m}$$

La fréquence de cyclotron est indépendante de la vitesse et du rayon ! Le champ B est connu, nous pouvons déterminer la masse de la particule libre dans la galette de semi-conducteur.



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

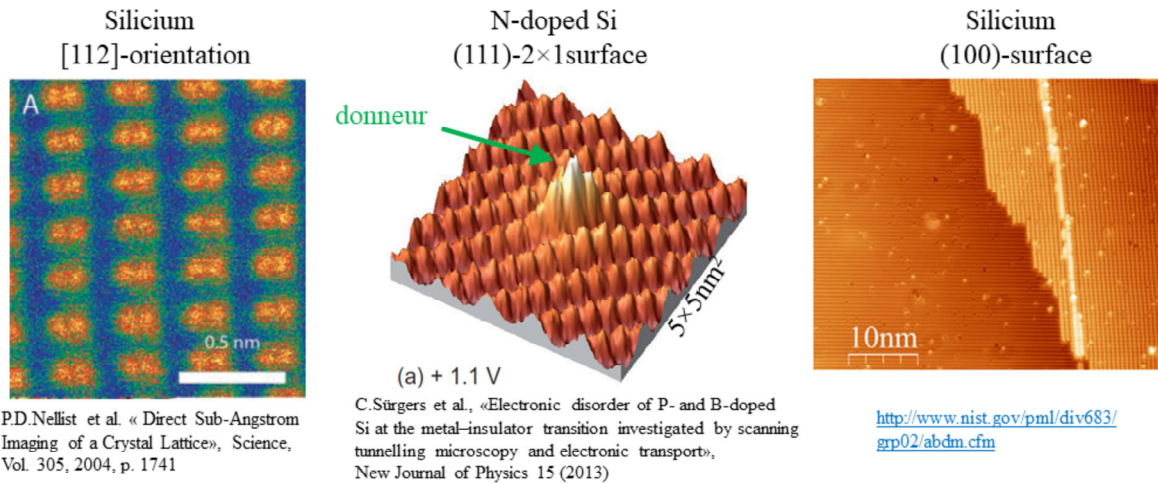


L'expérience de résonance cyclotronique peut être faite dans le silicium. Les résultats montrent des effets surprenants:

- 1) Il y a plusieurs résonances, donc plusieurs sortes de particules libres peuplent le semi-conducteur. Nous verrons plus tard dans ce chapitre qu'il s'agit d'électrons ou « d'électrons manquants » appelés « trous ».
- 2) Les masses de ces particules sont d'un ordre de grandeur comparable à la masse de l'électron dans le vide. Mais elles en diffèrent légèrement (les pics d'absorption sur le graphique de gauche correspondent à 0.16, 0.22, 0.34 et 0.49 de la masse de l'électron dans le vide).
- 3) Plus surprenant encore: les positions des pics, donc les masses des particules dépendent de l'orientation de la galette de silicium dans le champ magnétique ! (voir figure de droite). En fait seuls les deux pics centraux varient, nous verrons plus tard qu'ils correspondent aux électrons libres dans la bande de conduction.

→ Une nouvelle représentation (semi-quantique) des semi-conducteurs et de la matière est nécessaire.

Comme point de départ de cette nouvelle représentation nous pouvons nous inspirer de la nature de la lumière: à la fois « onde » et « particule ».



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

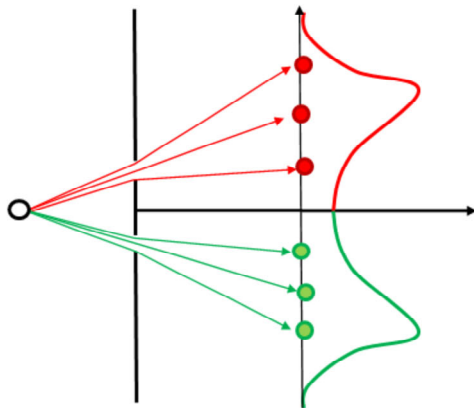
Le STM (Scanning Tunnel Microscope) permet de voir les atomes avec des résolutions inférieures à l'Angstrom. Le silicium a été étudié dans plusieurs orientations cristallines.

- (112)-orientation: deux atomes sont très proches, néanmoins la résolution est suffisante pour les voir séparément.
- (111)-surface: le réseau régulier est clairement visible. Un atome de Phosphore (P) sert de donneur (dopant de type N), il provoque une perturbation du réseau clairement visible au centre de l'image.
- (100)-surface: deux terrasses sont visibles. Elles sont séparées par une hauteur d'un seul plan atomique (1.36 Angstrom). Une «ligne atomique» a été déposée sur la droite.

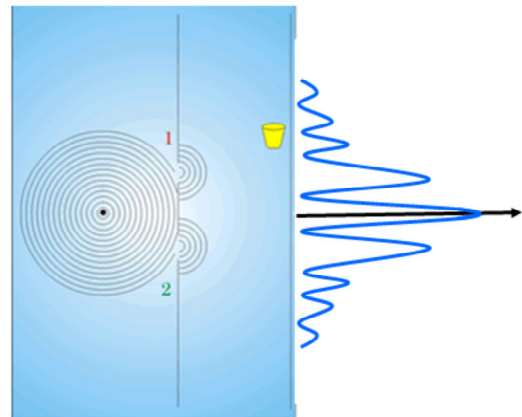
Ces images montrent que le silicium est un réseau régulier. Si nous pensons dans le modèle quantique, la nature est décrite par des ondes. Dans une structure régulière, les ondes se décrivent par des modes globaux et les «particules» par des paquets d'ondes se déplaçant dans le réseau. Nous allons suivre cette pensée pour comprendre mieux la nature des porteurs de charges dans le silicium.

Inspiré de D. M. Harrison, Univ. of Toronto

Hypothèse «particules»



Hypothèse «ondes»



Les ondes, par exemple dans l'eau, peuvent interférer. Deux ondes radiales dans un lac, si elles sont en phase, produisent des zones d'interférence constructive et d'autres zones d'interférence destructive (voir: <http://video.mit.edu/watch/ripple-tank-interference-of-two-point-sources-4273/>).

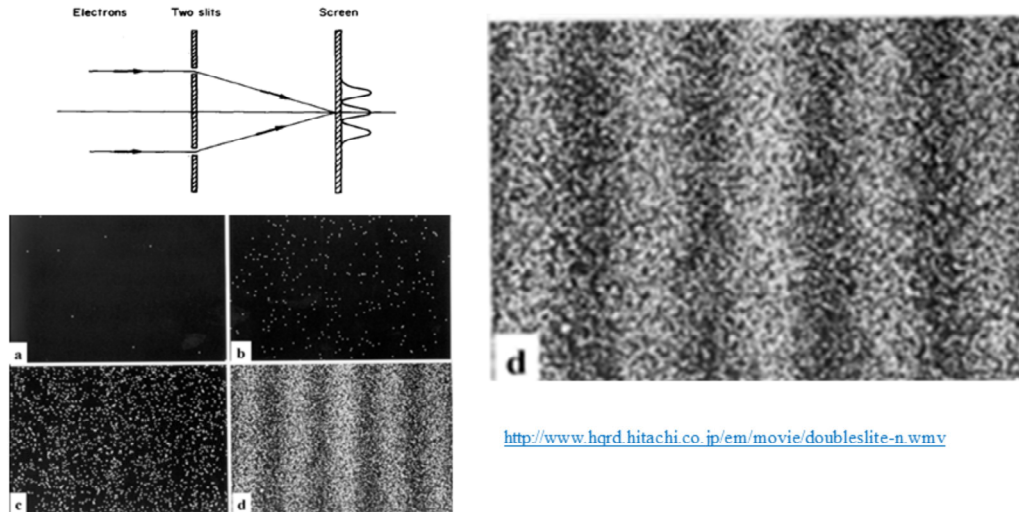
L'expérience des « fentes de Young » est connue en optique. Un photon passe à travers deux fentes, une interférence se produit sur l'écran derrière les fentes. Cela prouve la nature « ondulatoire » de la lumière.

(voir: <http://www.youtube.com/watch?v=dNx70orCPnA>)

Si le modèle quantique s'applique à l'électron, nous devrions pouvoir produire des interférences, comme avec l'eau ou la lumière.

Nous proposons ici la même expérience mais avec des électrons dans un tube à vide. Chaque électron passe par les deux fentes. Si l'électron est une onde, des lignes d'interférences devraient apparaître sur l'écran de détection !

Double-slit experiment with single electron



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

Cette expérience pose la question suivante: l'électron dans le vide est-il une particule ou une onde ?

Un jet d'électrons est envoyé sur deux fentes puis ce jet est détecté par une « caméra à électrons » capable de détecter le point d'arrivée d'un seul électron.

- Si le jet est composé de particules élémentaires indivisibles (électrons), chaque particule ne peut passer qu'à travers une seule fente et il ne devrait pas se produire d'interférence. De plus, un seul détecteur doit réagir lorsque l'intensité du jet est très fortement diminuée.
- Si le jet est en fait une onde, il doit y avoir interférence et de plus l'onde arrive sur tous les détecteurs même à très faible intensité.

L'expérience nous force à admettre:

- 1) L'électron est une particule lorsqu'il interagit avec le détecteur,
- 2) L'électron est une onde lorsqu'il se propage.

→ Physique quantique:

À toute particule est associée une fonction d'onde. La probabilité de trouver la particule en un point est donnée par « l'intensité de la fonction d'onde » (sa norme au carré).

Un exemple (plus connu) de particule/onde est le photon: l'intensité lumineuse correspond au nombre de photons dans un lieu donné. La lumière produit des interférences, mais il existe des détecteurs localisés de photons. (voir: <http://www.youtube.com/watch?v=MbLzh1Y9POQ>).

Electricité**Particule: « électron »**

- Condensateur
- Arc électrique
- Tube cathodique

Onde:

- Microscope électronique
- Raies d'absorption
- Effet tunnel

Lumière**Onde:**

- Diffraction
- Interférences

Particule: « photon »

- Effet photoélectrique
- Compteurs de photons

La nature est-elle faite d'ondes ou de particules?

- Un condensateur (ou un générateur de van der Graaf) accumule des charges électriques comme des grains de sable dans un réservoir. Un arc électrique (un éclair) et un tube cathodique sont des canons à électrons. L'électricité est donc un flux de particules.
- La diffraction sur un obstacle ainsi que les franges d'interférence sont des signatures typiques des ondes. La lumière est donc un phénomène ondulatoire.

MAIS:

- Les électrons sont utilisés dans les microscopes électroniques comme des ondes (voir exercice).
- Les états atomiques sont discrets et conduisent à des raies d'absorption dans les gaz.
- Par effet tunnel, un électron peut traverser une barrière, un peu comme une onde évanescence en optique classique.
- Dans l'effet photoélectrique, une plaque métallique émet un électron si elle est atteinte par une onde UV. Cette émission est locale.
- Certains détecteurs (photomultiplicateurs, diodes à avalanche) produisent des impulsions discrètes s'ils sont illuminés.

DONC:

!!! La matière et la lumière sont à la fois onde et particule !!!

Interactions →

Particules

Propagation →

Fonction d'onde

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

Particules:

- Energie E
- Impulsion P

« Planck »

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

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

« De Broglie »

Ondes:

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

Relation de l'énergie

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



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

Relation de dispersion

La nature est composée de particules qui interagissent entre elles. Ces particules sont caractérisées par une énergie E et une impulsion P.

À chaque particule est associée une onde décrite par une fonction d'onde $\psi(x, t)$. Elle est caractérisée par une fréquence ω et un vecteur d'onde K.

Les relations de Planck et de De Broglie permettent de passer du modèle « particule » au modèle « onde » en reliant leurs caractéristiques entre elles.

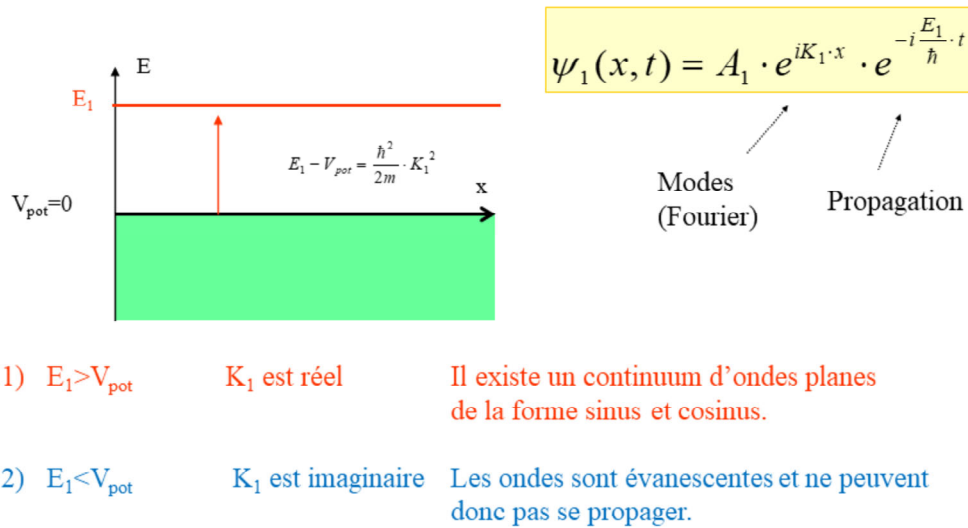
Interprétation:

La fonction d'onde $\psi(x, t)$ permet de calculer la probabilité de trouver la particule associée, à un temps t donné, dans un volume dV autour du lieu x.

Cette probabilité (comme en optique) correspond à l'intensité de la fonction d'onde:

$$p(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2 \cdot dV$$

Comme nous le verrons plus tard, la relation de dispersion (reliant l'énergie à l'impulsion) permet de calculer l'évolution spatio-temporelle de cette onde de probabilité dans le vide. Cette relation est en lien direct avec l'équation quantique de Schrödinger (voir complément en fin de chapitre), qui elle décrit l'évolution spatio-temporelle de la fonction d'onde dans le cas général.

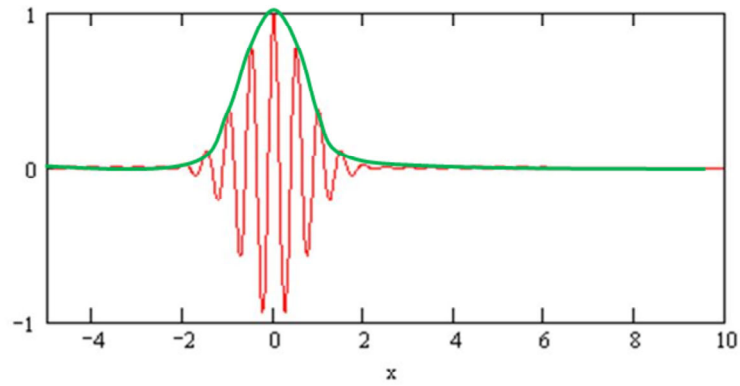


Pour commencer, étudions un cas simple: **l'électron libre dans le vide.**

Appliquons lui le formalisme quantique. Il s'agit en premier de déterminer les modes oscillatoires permis dans le vide. L'énergie potentielle V_{pot} est constante et peut être définie arbitrairement. Choisissons $V_{\text{pot}}=0$.

L'équation de Schrödinger se réduit à la relation de dispersion: $E=p^2/2m$. Elle peut facilement être résolue:

- Si l'énergie d'un électron est supérieure à l'énergie potentielle, alors le vecteur d'onde K est réel et la fonction d'onde ψ peut se propager comme une onde plane. Si $(E-V_{\text{pot}})$ est grand, l'onde a une oscillation rapide et un vecteur K élevé. Au-dessus de V_{pot} , il existe un continuum de solutions pour les fonctions d'ondes.
- Pour les énergies inférieures à V_{pot} , l'onde plane se transforme en onde évanescente qui se propage que sur une très courte distance. Il n'existe donc pas de solution « propageante » dans cette zone. Si $(V_{\text{pot}}-E)$ est grand, l'onde s'évanouit plus rapidement.



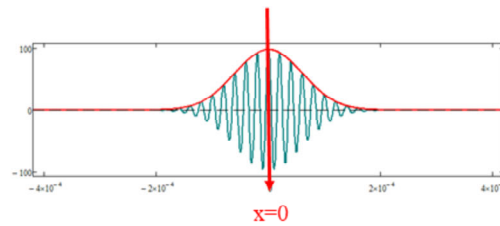
Propagation comme un «paquet d'ondes» autour de la porteuse

Amplitude en $t=0$

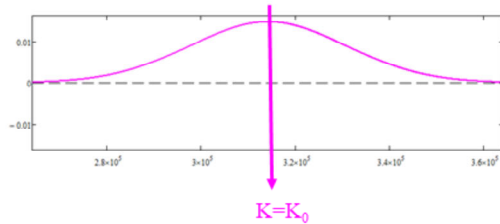
$$|\psi_0(x)\rangle = \left(\frac{1}{\pi \cdot \sigma_0^2} \right)^{1/4} \cdot e^{-\frac{x^2}{2\sigma_0^2}} \cdot e^{iK_0 x}$$

enveloppe

Porteuse

Transformée de Fourier en $t=0$

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

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

Un électron peut être décrite comme une superposition d'ondes planes. Un «bit» électronique (l'électron) est décrit sous la forme d'un paquet d'ondes.

Regardons l'électron au temps $t=0$. par simplicité nous le décrivons comme une «porteuse» (de vecteur d'onde K_0) limité spatialement par une «enveloppe» de forme Gaussienne (avec une extension donnée par σ). Le paquet d'onde est normé à l'unité.

Les composantes spectrales de ce paquet d'onde peuvent être obtenues en utilisant la transformée de Fourier exprimée par:

$$\tilde{f}(K) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \cdot e^{-iKx} dx$$

Dans l'espace de Fourier, nous trouvons une fonction Gaussienne centrée sur la porteuse K_0 et d'extension $1/\sigma$.

Propagation dans l'espace de Fourier

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

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

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: $v_g \equiv \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial K} \Big|_{K=K_0} = \frac{\hbar K_0}{m}$

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

Nous avons décrit l'électron comme un paquet d'onde en $t=0$. Laissons-le se propager.

Pour cela nous travaillons dans l'espace de Fourier. Chaque terme de Fourier se propage avec un terme $e^{-i\omega t}$.

Nous exprimons ensuite la fréquence ω comme une fonction **quadratique** en K :

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

C'est la différence principale avec l'optique !

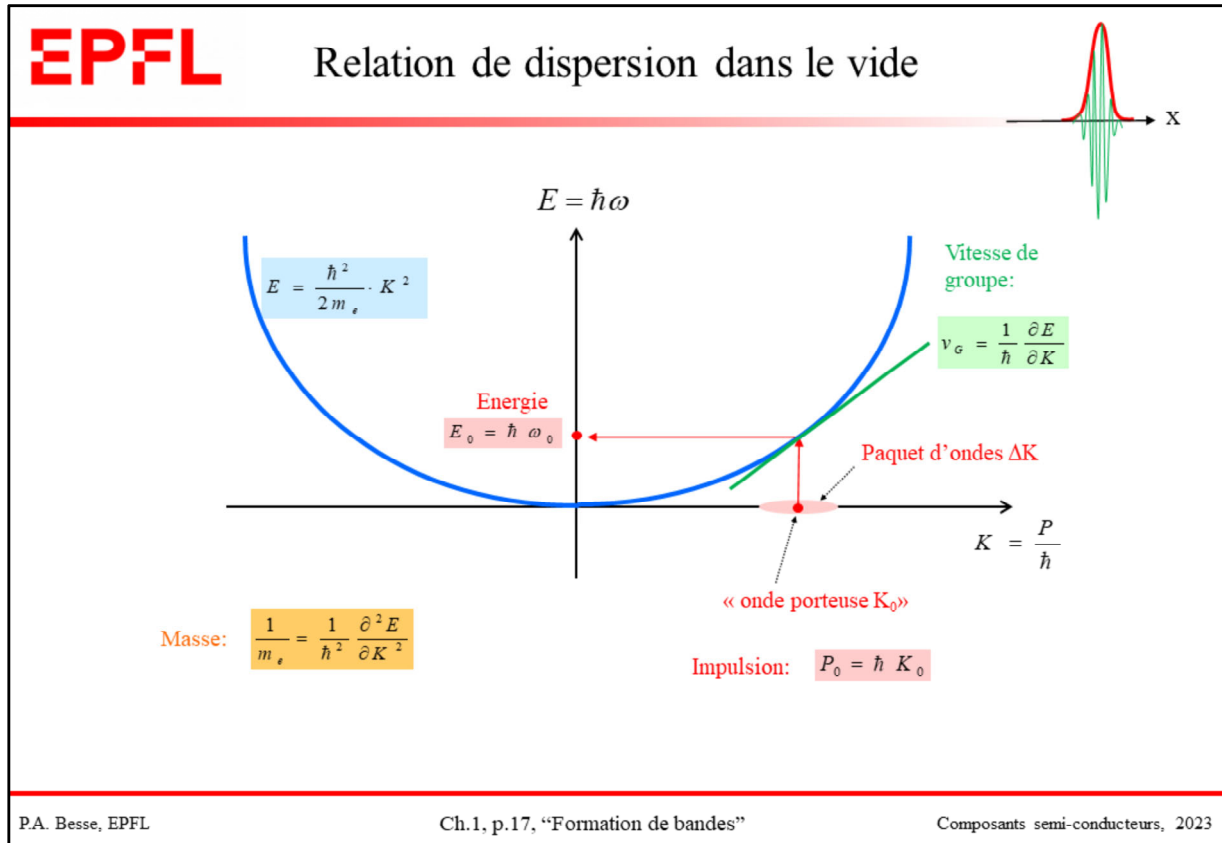
La transformée de Fourier inverse, exprimée par:

$$f(x) \equiv \frac{1}{2\pi} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{f}(K) \cdot e^{iKx} dK$$

permet de revenir dans l'espace X mais maintenant au temps $t > 0$.

L'électron est toujours une fonction Gaussienne mais centrée sur $x=v_g \cdot t$ avec v_g la vitesse de groupe. Cette vitesse est donnée par la pente de la fonction $E(K)$.

La fonction d'onde s'est dispersée, donc elle est devenue plus large avec le temps. La variance de la courbe de Gauss s'est agrandie. Cela s'explique par des vitesses de propagation différente pour chaque composante de Fourier.



Pour un électron dans le vide, la relation de dispersion s'écrit: $E = \frac{P^2}{2m_e} = \frac{(\hbar K)^2}{2m_e}$

L'électron est une particule, un « paquet d'onde » centré sur l'onde porteuse K_0 .

a) Son impulsion est: $P_0 = \hbar \cdot K_0$

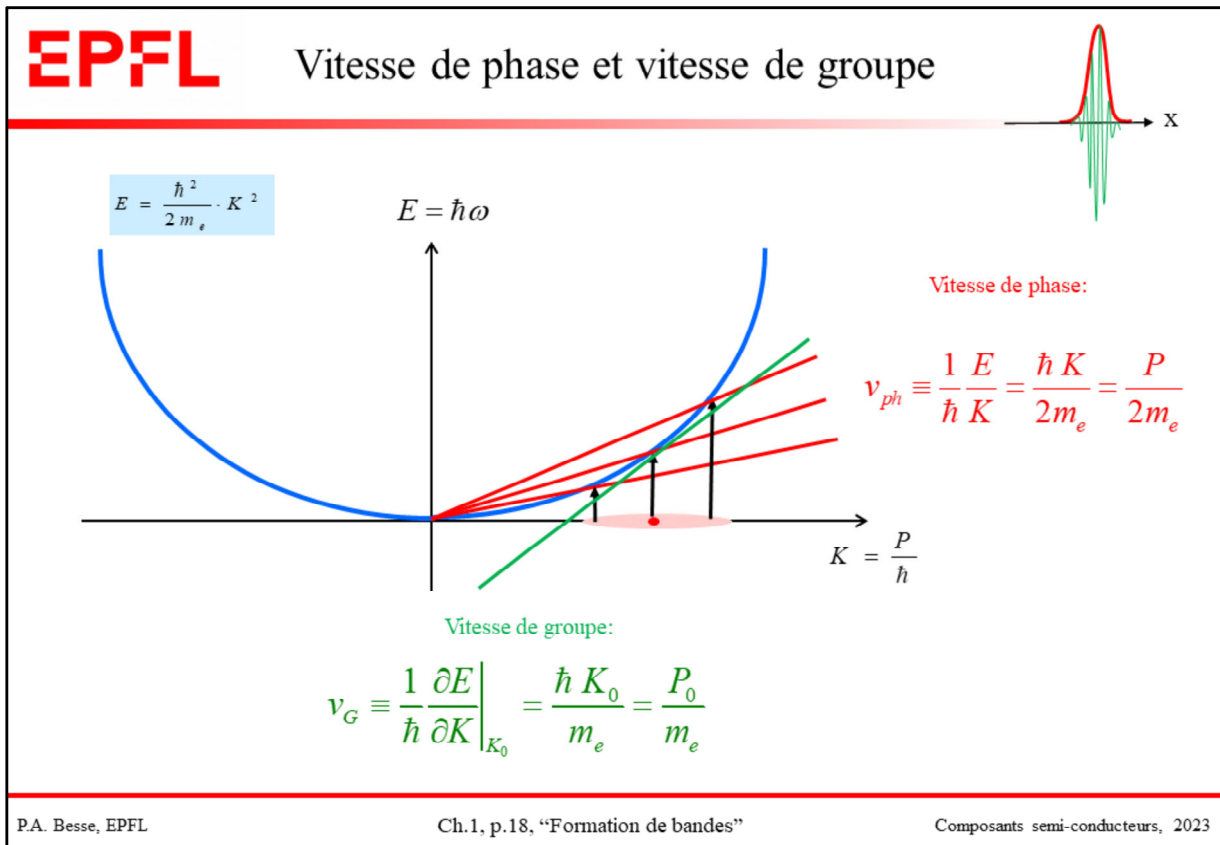
b) Sa propagation est donnée par la vitesse de groupe: $v_G = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial K} = \frac{P_0}{m_e}$

Cette formulation correspond à la propagation

d'une particule puisque $v=P/m$ est l'expression de la physique classique.

c) Sa masse est reliée à la courbure de la relation de dispersion par:

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



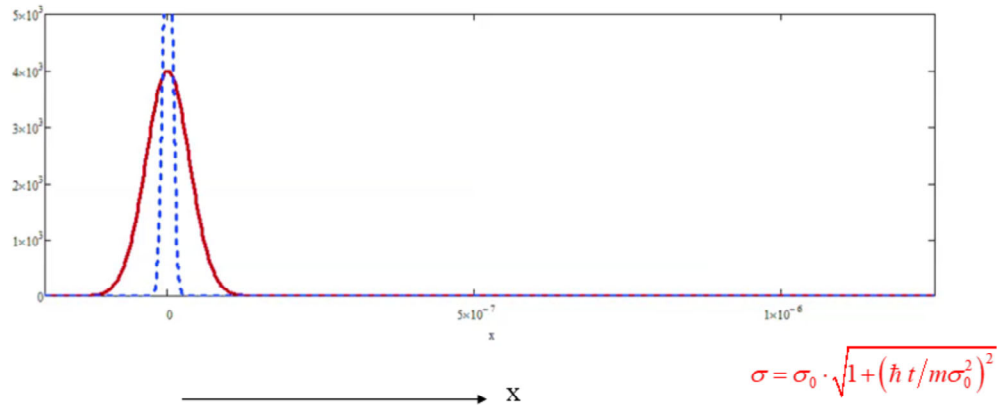
La vitesse de phase est donnée par
$$v_{ph} = \frac{1}{\hbar} \frac{E}{K} = \frac{P}{2m_e}$$

Elle est différente pour chaque valeur de K . Le paquet d'ondes contient donc des vitesses de propagation différentes pour chaque composante du paquet.

La vitesse de groupe correspond à la pente de la courbe $E(K)$ pour la porteuse K_0 .

$$v_G = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial K} = \frac{P_0}{m_e}$$

Propagation deux particules de localisation σ_0 différentes:



Considérons deux particules de même masse m :

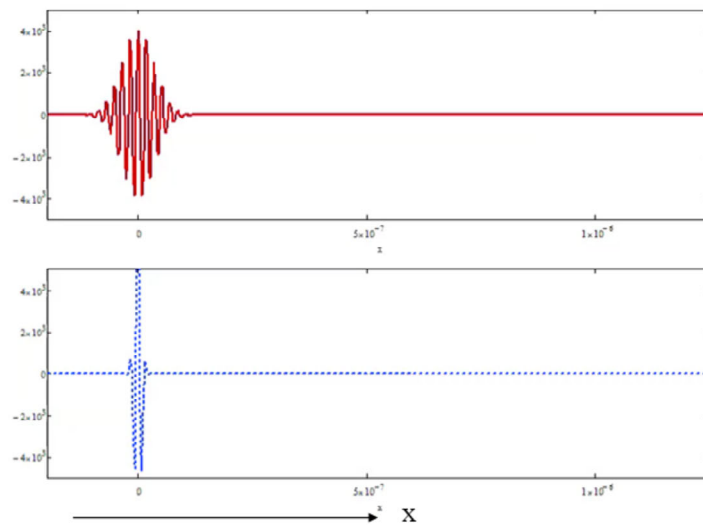
- La première particule est fortement localisée (Nous l'avons mesurée très précisément au temps $t=0$). Son impulsion est mal déterminée, elle va donc se disperser rapidement.
- La seconde particule est mal localisée au temps $t=0$. Son impulsion peut être connue plus précisément, et donc elle se disperse moins.

Remarques:

Le temps de dispersion caractéristique τ est approximativement: $1/\tau \cong \hbar / \sigma_0^2 m$

Dans le monde macroscopique, aussi bien σ_0 que m sont trop grands pour que la dispersion apparaisse après un temps mesurable.

Par exemple, pour une goutte d'eau de $1\mu\text{m}$ de diamètre: $\tau \cong 1'400 h$



La simulation ci-dessus représente la partie réelle de la fonction d'onde d'une particule dans le vide. La vitesse de groupe est donnée par le déplacement du maximum de l'enveloppe. La vitesse de phase correspond au déplacement des fronts d'ondes de la porteuse (à haute fréquence spatiale). Les petites fréquences spatiales se propagent lentement, les hautes fréquences spatiales sont elles plus rapides. Cela explique la dispersion du paquet d'ondes. Cela est particulièrement visible lorsque la particule est très localisée au départ car elle contient plus de fréquences spatiales différentes.

Remarquez l'analogie avec l'optique et plus particulièrement avec la propagation d'un bit laser dans une fibre optique. Les bits d'information se propagent aussi avec une vitesse de groupe et plus ils sont courts plus ils ont tendance à se disperser rapidement

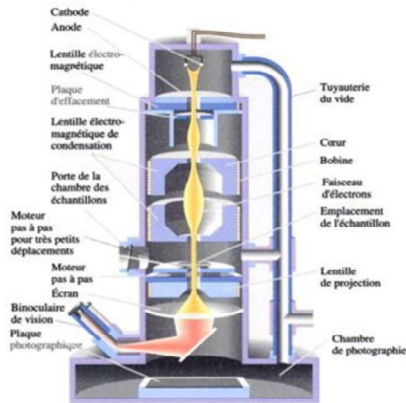
Conclusions:

- Le formalisme quantique peut s'appliquer à l'électron dans le vide.
- L'équation de Schrödinger se réduit à la relation de dispersion exprimant l'énergie cinétique comme en physique classique.
- La vitesse de groupe correspond à l'expression classique de la vitesse d'une particule.
- Le seul phénomène nouveau est la dispersion des particules dans le monde microscopique.

Question:

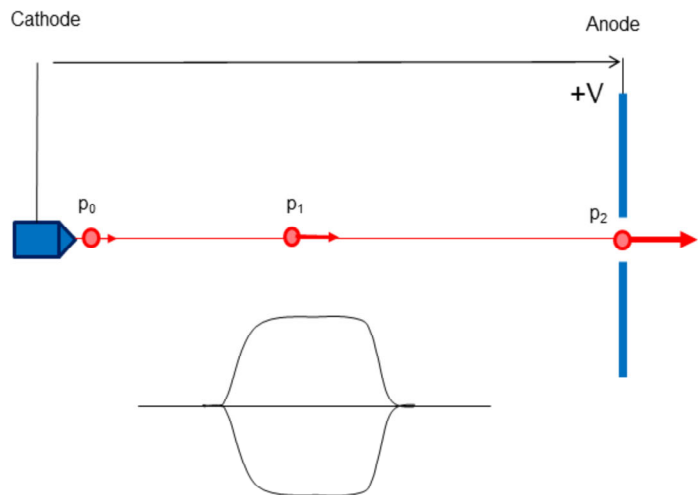
Pourquoi décrire l'électron se propageant dans le vide comme un paquet d'ondes ? Le formalisme est ardu, les calculs complexes et un modèle « simple » de particule avec énergie E et impulsion P donne apparemment le même résultat !!

TEM principe



Eugene Hecht, « Physique », p. 1171

Canon à électrons simplifié

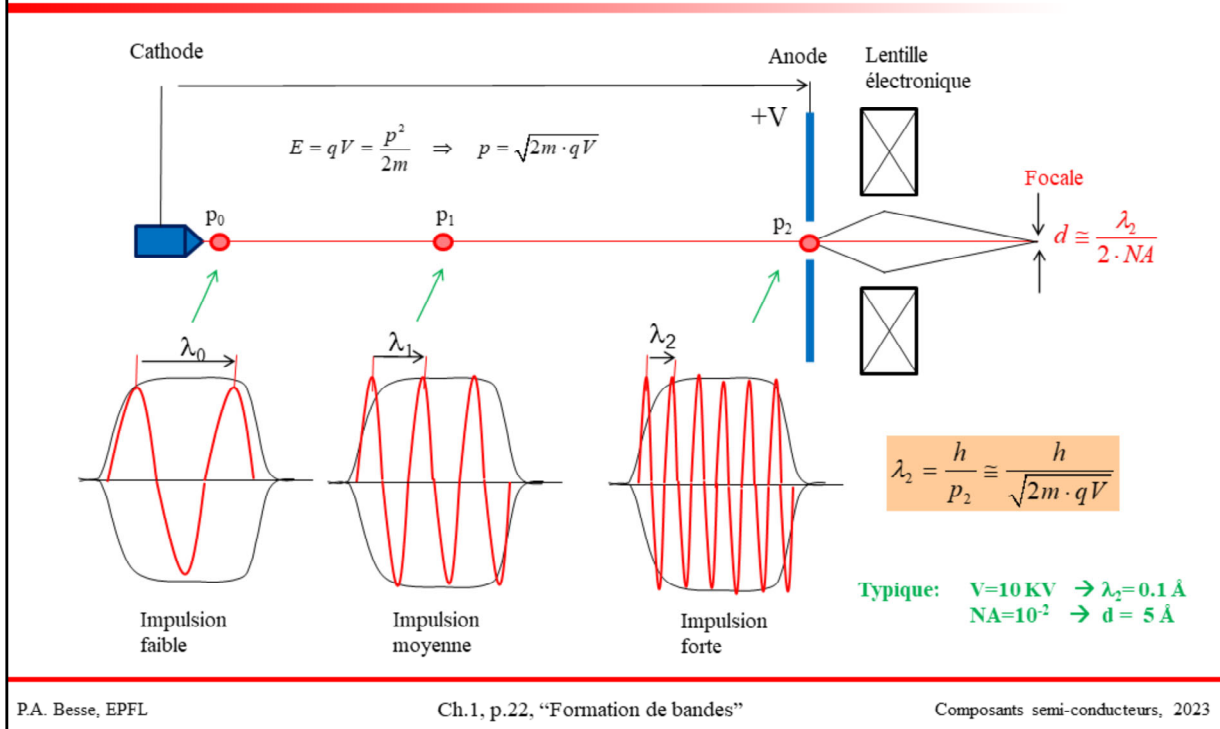


Un microscope électronique est composé d'un « canon à électrons », d'un système de « lentilles électroniques » servant à focaliser le jet d'électrons sur la pièce à observer. Nous allons nous intéresser au canon à électrons.

L'électron est accéléré dans le vide. Il forme un « paquet d'onde », dont l'enveloppe est dessinée ci-dessus.

- A) Esquissez l'onde elle-même (avec la porteuse) à l'entrée, au centre et à la sortie du canon à électrons. Comment se transforme la longueur d'onde de l'électron lorsqu'il traverse la zone d'accélération ?
- B) Pourquoi utilise-t-on des électrons fortement énergétiques dans les microscopes électroniques modernes ?

!! Pensez à la relation quantique entre l'impulsion et la longueur d'onde !!



Un électron est arraché de la cathode, sa vitesse est faible. Il est accéléré par un très fort champ électrique entre la cathode et l'anode (mise à la tension V). Son impulsion augmente fortement.

Dans le modèle « particule », il gagne une énergie $E=p^2/2m=qV$. Si nous passons maintenant dans une « onde », l'impulsion correspond au vecteur K , donc à l'inverse de la longueur d'onde: $p=\hbar K=h/\lambda$.

Plus la tension V est grande, plus la longueur d'onde est petite. Cela correspond à une porteuse de plus en plus rapide dans le paquet d'onde. Cette propriété se voit dans la résolution du microscope. Comme en optique, la plus petite tache visible est de l'ordre de λ . En augmentant la tension, on augmente la résolution (on diminue la dimension la plus petite encore observable).

Remarque:

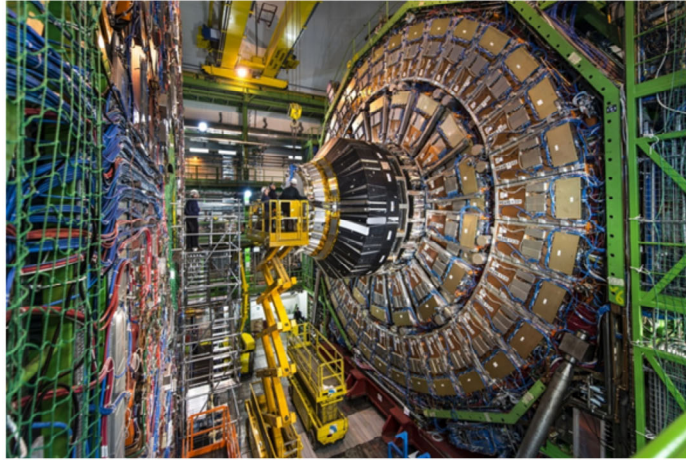
Dans les microscopes électroniques modernes, la vitesse des électrons approche celle de la lumière. Il faut donc utiliser la théorie relativiste:

À la cathode: $p=0$ et $\varphi=0 \Rightarrow E_0=mc^2$

À l'anode: $E_2 = \sqrt{(mc^2)^2 + (p_2c)^2} + (-q)V$

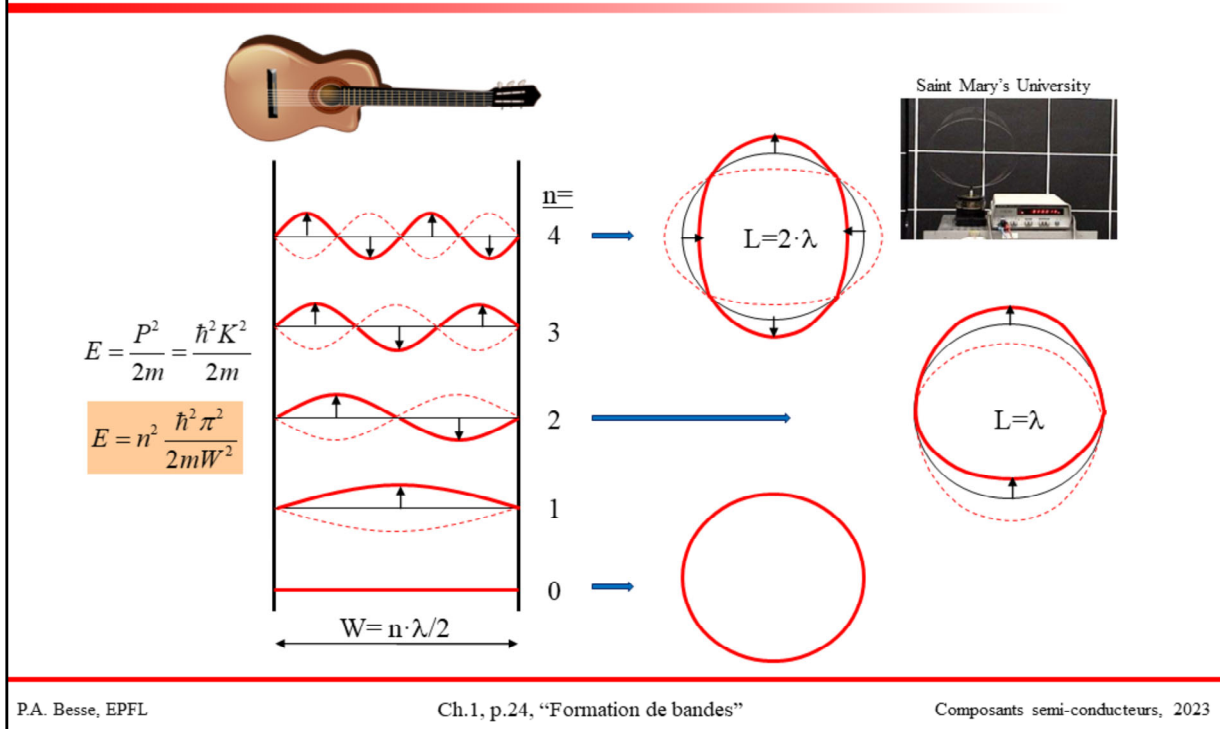
Impulsion: $E_2 = E_0 \Rightarrow p_2 = \sqrt{2mqV \left(1 + \frac{qV}{2mc^2}\right)}$ et $\lambda_2 = \frac{h}{p_2} = \frac{h}{\sqrt{2mqV \left(1 + \frac{qV}{2mc^2}\right)}}$

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



... le LHC (Large Hardron Collider)

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



P.A. Besse, EPFL

Ch.1, p.24, "Formation de bandes"

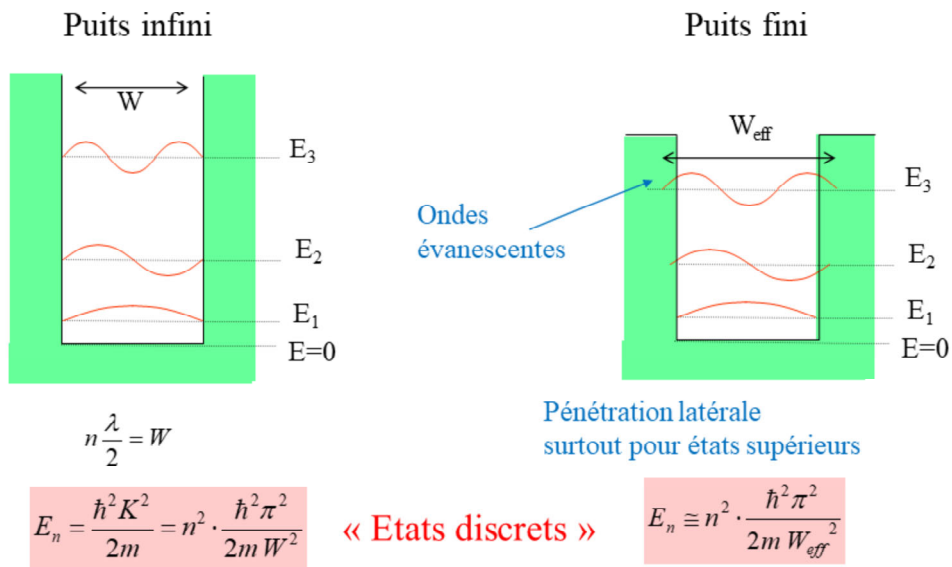
Composants semi-conducteurs, 2023

Voici quelques exemples d'ondes stationnaires:

- 1) Les cordes d'une guitare: la condition stationnaire est que la longueur W de la corde contient un nombre entier de demi-longueur d'onde. Les états vibratoires sont discrets. Leur énergie est reliée au carré de l'impulsion, donc par les lois de la physique quantique au carré du vecteur K . Le spectre de l'énergie dépend de n^2 .
- 2) Les vibrations d'un anneau métallique. La condition stationnaire est donnée par la longueur du périmètre qui doit correspondre à un nombre entier de longueur d'onde. Les états sont aussi discrets.

Remarque:

Les vibrations des ondes d'électrons autour d'un noyau sont similaires, mais dans ce cas nous devons travailler en 3D avec un potentiel de Coulomb. Les résultats numériques sont forts différents, en particulier les niveaux d'énergie dépendent de $1/n^2$. Une similarité demeure: les états sont discrets et cette discrétisation s'explique par le caractère ondulatoire des électrons.

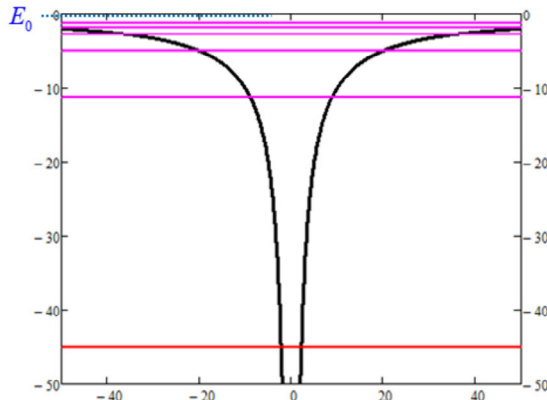


Le noyau d'un atome forme un potentiel de coulomb radial autour de l'atome. L'équation de Schrödinger peut être résolue en coordonnées sphériques (problème de l'atome d'hydrogène). Nous allons utiliser une grande simplification et considérer un potentiel unidimensionnel (1D) rectangulaire. Cela suffit pour expliquer la discrétisation des niveaux atomiques.

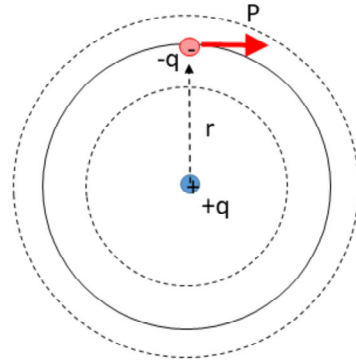
Comme pour une corde de guitare, dans un puits de profondeur infinie, les résonances possibles sont données par la condition: « L'amplitude d'oscillation aux bords est nulle ». Donc la largeur W du puits doit être un multiple de la demi-longueur d'onde. Cela nous définit des états K ($K=2\pi/\lambda$), et des niveaux d'énergie E_n discrets.

Si la profondeur du puits est finie, des ondes évanescentes apparaissent aux bords. La distance de pénétration de ces ondes est plus importante pour les niveaux énergétiques supérieurs. Tout ce passe comme si le puits de potentiel devenait plus large. On définit parfois une largeur effective du puits W_{eff} .

Les atomes réels ont un potentiel tridimensionnel assez complexe. Néanmoins leurs niveaux d'énergie sont discrets.

Potentiel en $1/r$ 

$$E_n - E_0 \approx -\frac{1}{n^2}$$

Orbitales discrètes dans l'atome d'hydrogène

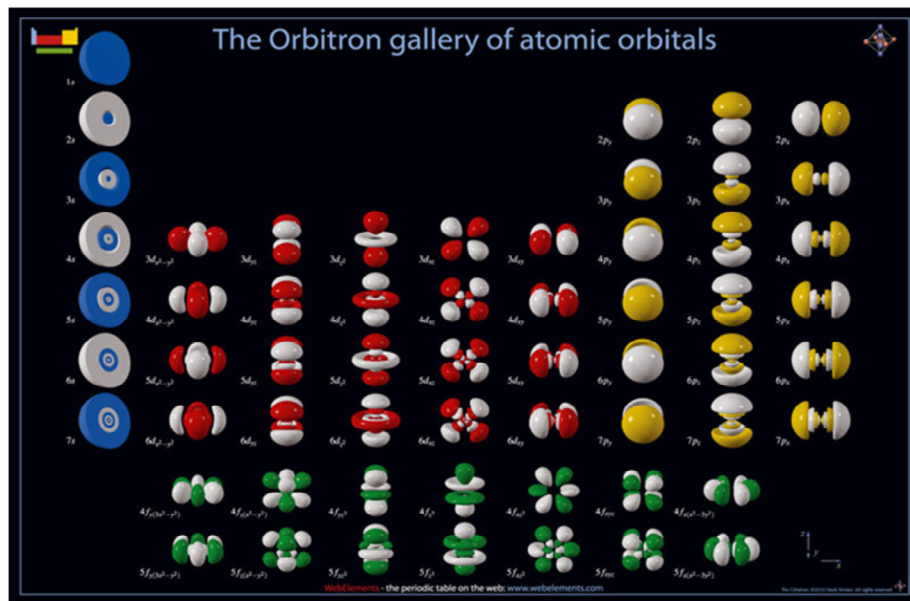
Nous avons décrit un potentiel 1D fini et rectangulaire. Les énergies sont discrètes et ont une dépendance en n^2 . Elles sont donc serrées au fond du puits et plus espacées au sommet.

Considérons un puits de forme différente: avec une dépendance en $1/r$. Il serait plus étroit au fond et nettement plus large au sommet. Intuitivement nous attendons un écartement des énergies au fond du puits et un resserrement au sommet.

Le potentiel de Coulomb qui décrit les électrons autour d'un noyau atomique est en $1/r$ mais en 3D. Les solutions peuvent être calculées mais nécessitent un long et fastidieux développement mathématique qui dépasse largement ce cours.

Au final, les énergies restent discrètes mais la dépendance devient en $1/n^2$. Comme attendu, les énergies sont maintenant écartées au fond du puits et très serrées au sommet.

Seules des orbites discrètes sont possibles dans l'atome d'hydrogène. Elles correspondent aux orbitales atomiques.

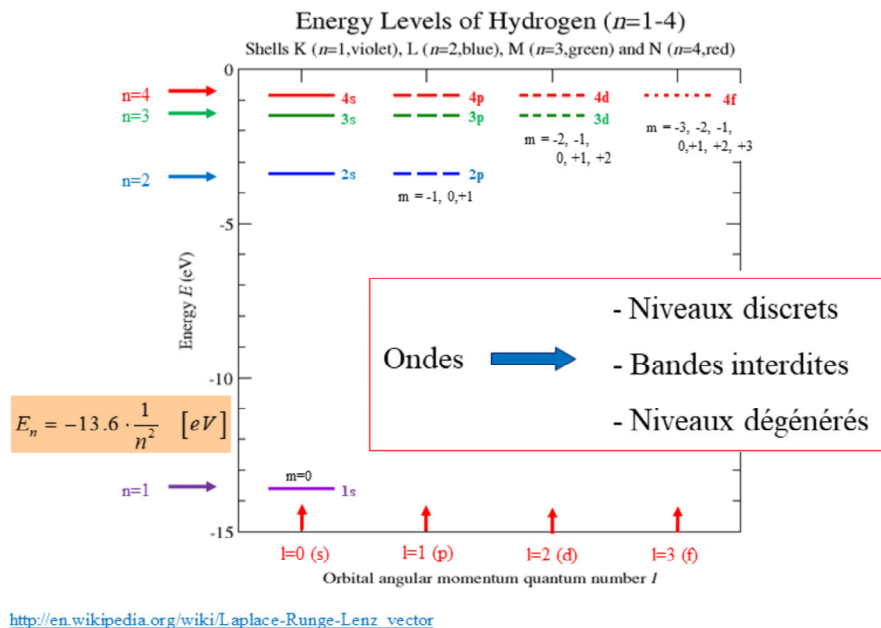


www.webelements.com/shop/

Voici les orbitales calculées en résolvant mathématiquement l'équation de Schrödinger en 3D.

Les orbites « s » ont une symétrie « sphériques ».

m correspond au nombre de longueur d'ondes pour une rotation autour de l'axe vertical (Z).



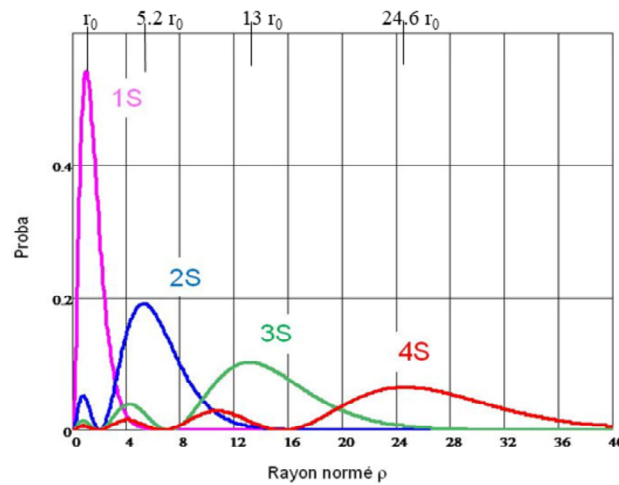
Les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène peuvent être calculés en résolvant l'équation de Schrödinger en coordonnées sphériques avec le potentiel de Coulomb. Les calculs sont complexes (voir Feynman lectures vol. III). Il en résulte 4 nombres quantiques:

- | | |
|------------------------------------|--|
| $n: 1, 2, \dots$ | Il correspond aux ondes radiales et il détermine les niveaux d'énergie. |
| $l: 0, 1, \dots n-1$
du | Il correspond à la discrétisation (quantisation) de la norme moment cinétique L . |
| $m: -1, \dots -1, 0, +1, \dots +1$ | Il correspond à la discrétisation de L_z , la projection du moment cinétique sur l'axe Z . |
| $s: -1/2, +1/2$ | Il correspond au spin de l'électron. |

En conclusion:

- 1) Le caractère ondulatoire des électrons explique les états atomiques discrets.
- 2) Entre les états permis, il y a des « zones interdites », vides d'état. (Cette constatation prendra tout son sens dans les semi-conducteurs).
- 3) Des orbites différentes peuvent avoir la même énergie. Par exemple les nombres quantiques l et m n'influencent pas l'énergie des niveaux. Les états sont « dégénérés ».

Orbitales s (symétriques): probabilités pour un rayon r donné



$$\rho \equiv r / r_0 \quad \text{avec} \quad r_0 = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{mq^2} = 0.53 \text{ \AA}$$

Les orbitales « s » sont sphériques. On montre ici les probabilités de trouver l'électron à une distance r/r_0 pour ces orbitales. r_0 est appelé le rayon de Bohr.

On voit clairement le caractère ondulatoire de la probabilité électronique.

Remarques:

La probabilité correspond au carré de la norme de la fonction d'onde, intégrée sur la surface de la sphère (pour sommer toutes les probabilités indépendamment de la position angulaire).

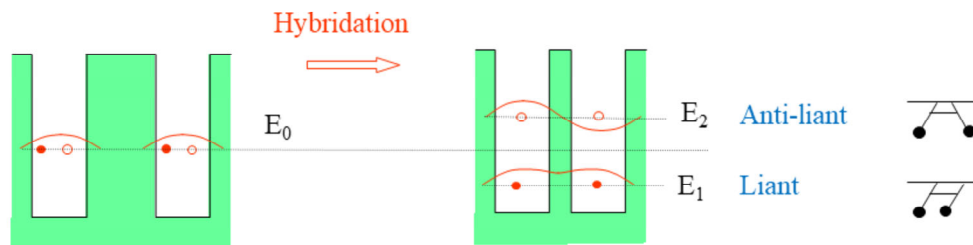
La probabilité présentée ici est donnée par $4\pi\rho^2 |\psi|^2$

En conclusion:

- Plus le nombre quantique n est élevé, plus les électrons ont de probabilité de se trouver loin du centre. Les valeurs n élevées correspondent aux orbitales externes.
- Nous devons maintenant décrire ce qui se passe lorsque deux orbitales externes se touchent et forment une « liaison ».

Deux atomes séparés
avec 1 électron chacun

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

Si deux atomes sont séparés, leurs états sont identiques et localisés. Il y a un électron dans chaque puits, la deuxième place dans le puits reste libre.

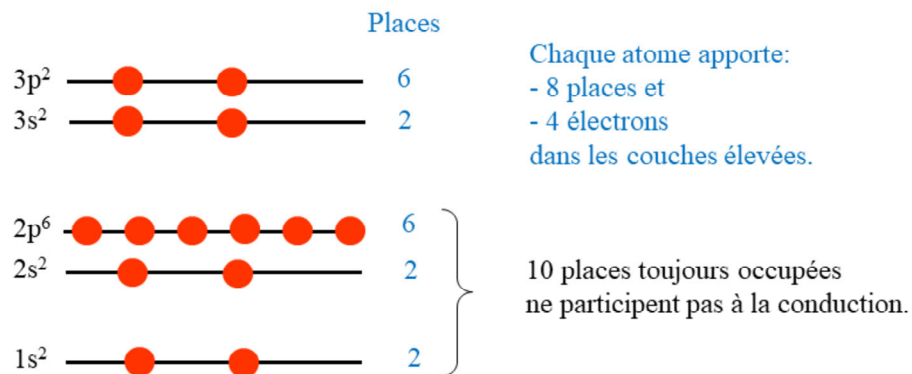
Lorsque les atomes sont plus proches, leurs fonctions d'onde se chevauchent et s'hybrident. Deux états « globaux » apparaissent. En première approximation, ils sont la superposition symétrique (état liant) et antisymétrique (état anti-liant) des fonctions d'ondes primaires.

Dans l'état liant l'électron a de fortes chances d'être entre les deux atomes. Le niveau « liant » est plus profond que le niveau « anti-liant ». À basse température, les deux électrons seront dans la liaison, l'état anti-liant restant libre.

Une analogie mécanique peut être tirée: deux pendules mécaniques couplés ont deux oscillations de base, une symétrique et l'autre antisymétrique. L'oscillation symétrique a une fréquence (énergie) plus basse.

Dans un atome réel, à plusieurs niveaux d'énergie, le chevauchement des ondes évanescentes définit si les états sont séparés ou proches. Les états profonds resteront séparés; seuls les états élevés vont s'hybrider et former des états liants et anti-liants.

Structure électronique d'un atome isolé.



Nous venons de voir un modèle simplifié d'un atome (puits de potentiel 1D) et d'une molécule (double puits de potentiel 1D). Il nous permet de comprendre l'apparition de niveaux d'énergie discrets et d'états de liaison et d'anti-liaison. Regardons maintenant la structure atomique réelle de quelques atomes importants en microélectronique.

Le silicium a 4 électrons sur sa couche extérieure « 3 ». Cette couche contient en tout 8 places, elle n'est donc pas pleine. C'est elle qui est responsable des propriétés de conduction électrique du silicium.

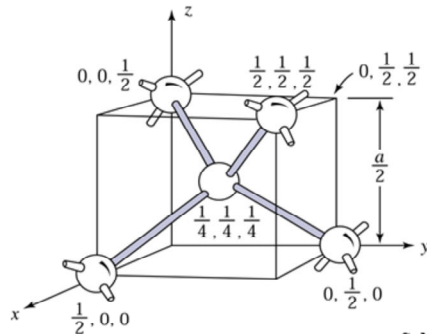
Les couches « 1 » et « 2 » sont pleines et ne participent pas à la conduction électrique.

Dans un atome de silicium isolé à basse température, l'état 3s est occupé par deux électrons de spins opposés. L'état 3p a deux électrons et 4 places vides.

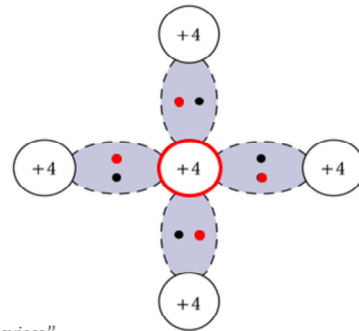
2 atomes =
8 électrons
16 places

→ 4 états liants sp^3 (8 places occupées par 8 électrons)
4 états anti-liants sp^3 (8 places libres à basse température)

Silicium



S. M. Sze "Semiconductor Devices"



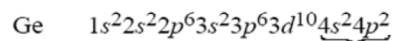
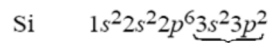
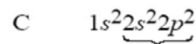
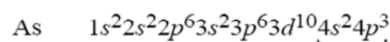
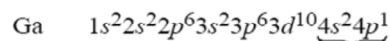
Pour former un cristal, les niveaux 3s et 3p du silicium s'hybrident et forment des liaisons covalentes, mais aussi des états anti-liants. Chaque atome participe à 4 liaisons tétraédriques (états liants) avec ses voisins, il participe aussi à 4 états anti-liants, restés libres à basse température.

Dans un cristal parfait (sans défaut) à basse température, toutes les liaisons sont occupées par 2 électrons et il n'y a pas d'électron libre (c.-à-d. dans un état anti-liant) dans le cristal. Les états anti-liants existent mais sont vides. À température plus élevée, certaines liaisons vont se rompre et ces électrons vont alors partiellement occuper les états anti-liants (électrons libres).

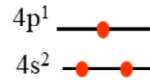
Telle que représentée sur la figure, la cellule représente l'environnement proche d'un atome de silicium dans le cristal. Par contre, elle ne peut pas former la totalité du cristal par simple translation périodique. Elle n'est donc pas une cellule de base du cristal.



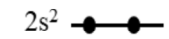
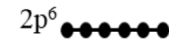
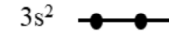
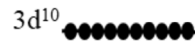
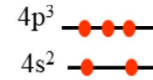
J. Singh: "Semiconductor Devices"

IV Semiconductors**III-V Semiconductors**

Ga



As



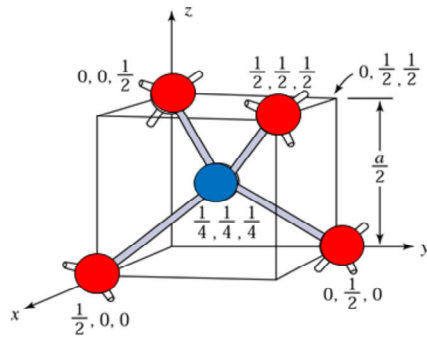
Si = 2 atomes = 8 électrons à placer sur les 4 liaisons tétraédriques

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

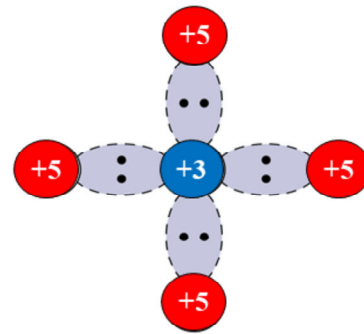
Les semi-conducteurs IV et III-V sont basés sur une configuration électronique semblable.

Les atomes vont s'associer par des liaisons. Chaque atome participe à 4 liaisons et chaque liaison contient 2 électrons. Par exemple, deux atomes de Si ont 8 électrons placés sur 4 liaisons. De même, un groupe GaAs a aussi 8 électrons placés sur 4 liaisons.

GaAs , InP , InGaAs , InGaAsP , ...



S. M. Sze "Semiconductor Devices"

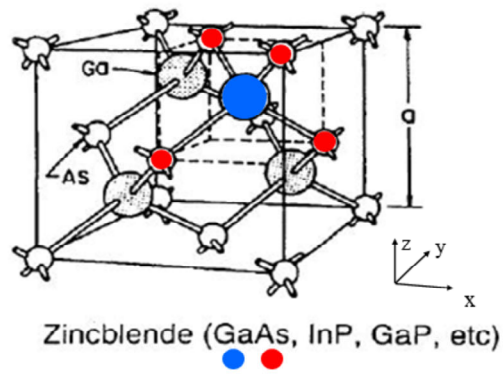
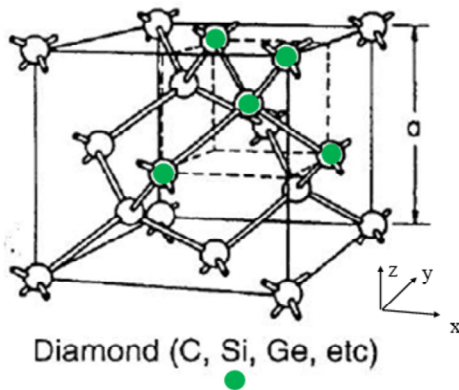


Le GaAs a une structure cristalline très similaire à celle du Si.

Telle que représentée sur la figure, la cellule représente l'environnement proche d'un atome de Ga dans le cristal. Par contre, elle ne peut pas former la totalité du cristal par simple translation périodique. Elle n'est donc pas une cellule de base du cristal.

8 atomes par cellule de base:

32 électrons sur 16 liaisons



S. M. Sze "Physics of semiconductor devices"

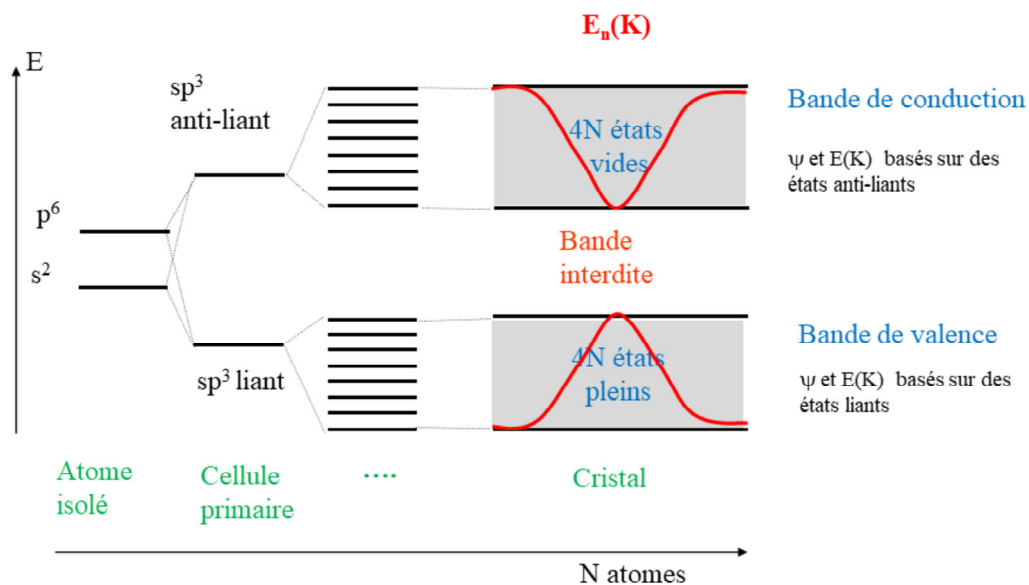
La cellule de base des semi-conducteurs IV est le « diamant ». Elle permet de former le cristal par simple translation périodique.

Elle contient 8 atomes. Pour le Si, la distance interatomique est de 2.35\AA , et la constante du réseau $a=5.43\text{\AA}$.

Les composants III-V ont une structure similaire, avec 8 atomes (4 de chaque sorte). Pour le GaAs la distance interatomique est de 2.45\AA , et la constante du réseau $a=5.65\text{\AA}$.

La cellule de base définit les axes x,y,z du cristal, la constante a du réseau ainsi que les plans cristallins (« indices de Miller »).

Remarque: Cette cellule de base n'est pas la plus petite cellule qui puisse former le cristal par simple translation périodique ! (voir plus loin « cellule primaire »).



En partant des états s et p de l'atome isolé, nous pouvons augmenter le nombre d'atomes. Des états hybrides sp^3 liants et anti-liants se forment.

Chaque nouvel atome apporte des nouveaux états globaux, basés sur sp^3 liants et sur sp^3 anti-liants. Ces états globaux ont tous des énergies légèrement différentes.

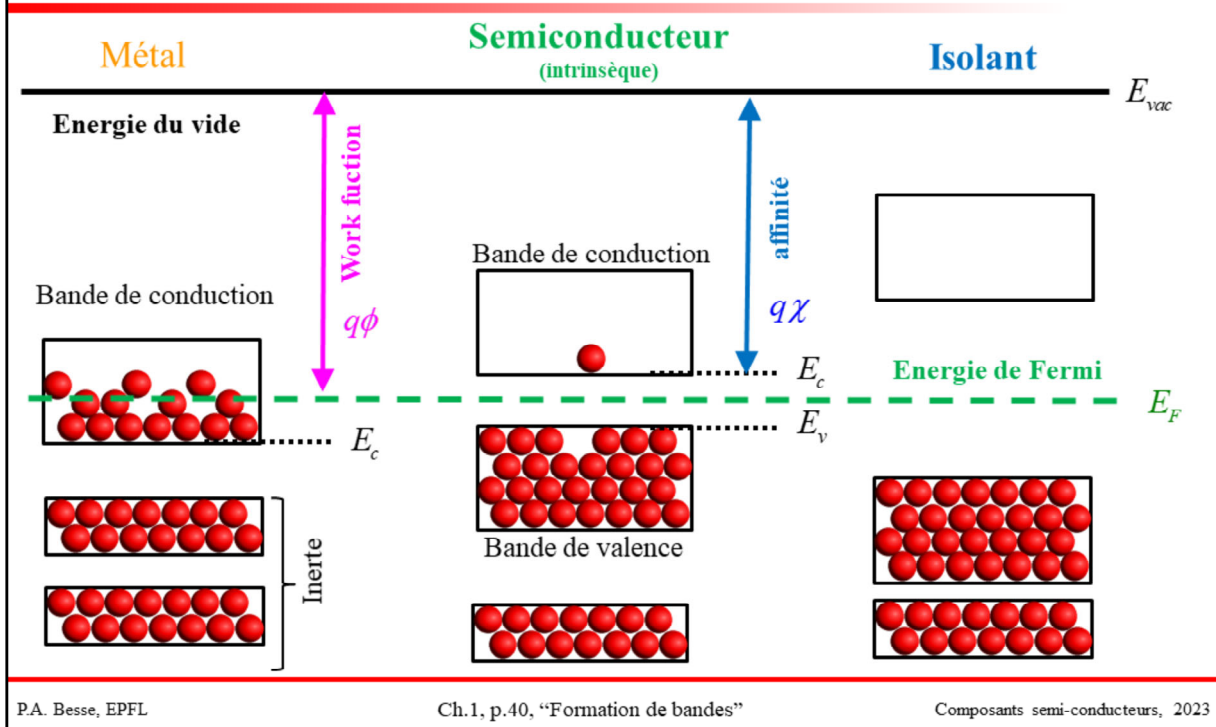
Avec N atomes, il se forme ainsi une bande quasi-continue d'états de valence. Les électrons dans cette bande sont placés sur les liaisons entre les atomes.

De même, il se forme une bande de conduction. Ces états sont fortement délocalisés et lorsqu'un électron s'y trouve il est dit « libre ».

La zone interdite (le « gap » du semi-conducteur) correspond dans cette représentation au saut d'énergie entre les états sp^3 liant et anti-liant. Dans cette zone, aucun état n'existe et il est donc impossible qu'un électron s'y trouve.

Conclusions:

- Les bandes sont le reflet des états électroniques discrets dans l'atome.
- Les fonctions d'ondes dans chaque bande sont les fonctions basées sur la fonction locale de l'état électronique correspondant dans la cellule primaire.
- Dans chaque bande nous avons une relation de dispersion liant l'énergie E et le vecteur d'onde K (courbes en rouge sur la figure).



P.A. Besse, EPFL

Ch.1, p.40, "Formation de bandes"

Composants semi-conducteurs, 2023

Chaque matériel a une structure de bande différente.

Les niveaux profonds correspondent à des états atomiques fortement localisés autour de l'atome. Ils ne participent pas aux liaisons cristallines et sont toujours occupés par des électrons liés à l'atome. D'un point de vue électronique ils sont inertes.

Seules les couches atomiques externes ont dégénéré en bandes. Leur propriétés électroniques dépendent de leur niveau de remplissage.

- Dans les métaux: Une bande est à moitié pleine. Le niveau de remplissage (défini plus loin comme l'énergie de Fermi E_F) passe au milieu d'une bande. Cela permet aux électrons de bouger, d'être mobiles. Ils peuvent occuper des places libres environnantes. Cette bande est dite active. **La distance entre l'énergie du vide et l'énergie de Fermi est définie comme la « work function », caractéristique essentielle d'un métal.**
- Dans les isolants: L'énergie de Fermi passe dans le gap. Il y a ainsi une bande de valence pleine et une bande de conduction vide. **La caractéristique essentielle est l'affinité électronique, distance entre l'énergie du vide et le fond de la bande de conduction.** Les électrons ne peuvent pas bouger, car il n'y a aucune place vide à disposition dans leur environnement.
- Dans les semi-conducteurs: La situation est identique à celle dans les isolants, sauf que le gap est faible et que des électrons peuvent sauter (thermiquement) de la bande de valence dans la bande de conduction. Ils peuvent alors bouger librement dans cette bande.

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

Energie thermique: $U_{th} \equiv \frac{kT}{q} \cong 25 [meV]$ à température ambiante

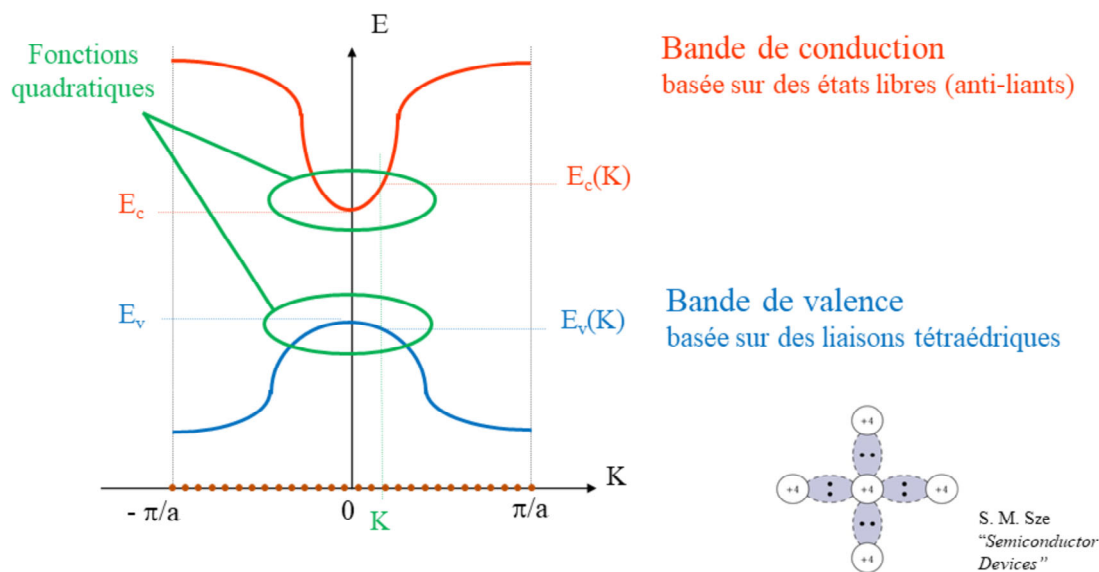
$$E_{g, Si} \gg U_{th}$$



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

Rem:

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



Dans chaque bande, les différents états sont caractérisés par un vecteur K de la zone de Brillouin. À ce vecteur K correspond une énergie. Nous avons donc dans chaque bande une fonction $E(K)$ connue sous le nom de « relation de dispersion ».

Dans les semi-conducteurs, la bande de valence est presque pleine et la bande de conduction presque vide. Les propriétés électriques des semi-conducteurs sont donc avant tout données par la forme des bandes autour des maxima de la bande de valence et des minima de la bande de conduction.

L'énergie minimale de la bande de conduction est appelée: E_c

L'énergie maximale de la bande de valence est appelée: E_v

Autour de ces points extrêmes, les fonctions $E_c(K)$ et $E_v(K)$ peuvent être approximées par des courbes quadratiques en K (paraboles), correspondant à la bande de conduction et de valence respectivement. Ces courbes quadratiques ont les mêmes caractéristiques que celle des électrons dans le vide. Elles permettent donc de définir la vitesse de groupe (dérivée de la courbe) et la masse (inverse de la courbure) dans le semiconducteur. Ces minima et maxima sont anisotropes, la vitesse de groupe et la masse deviennent donc aussi anisotropes et dépendent des directions de propagation des électrons dans le matériel.

Développement de Taylor

Conduction: $E \cong E_c + \frac{\hbar^2}{2} \vec{K} \cdot \frac{1}{m_n^*} \cdot \vec{K}$ Masse effective de la bande de conduction

Valence: $E \cong E_v - \frac{\hbar^2}{2} \vec{K} \cdot \frac{1}{m_p^*} \cdot \vec{K}$ Masse effective de la bande de valence

Vitesse de groupe: $\vec{v}_G = \frac{1}{\hbar} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}_K(E)$

Accélération due à une force F:

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

Autour de leurs extrêmes, les relations de dispersion (les bandes) peuvent être développées par Taylor et approximées par des courbes quadratiques en K.

Dans un modèle isotrope 1D nous avons à partir de la physique de base:

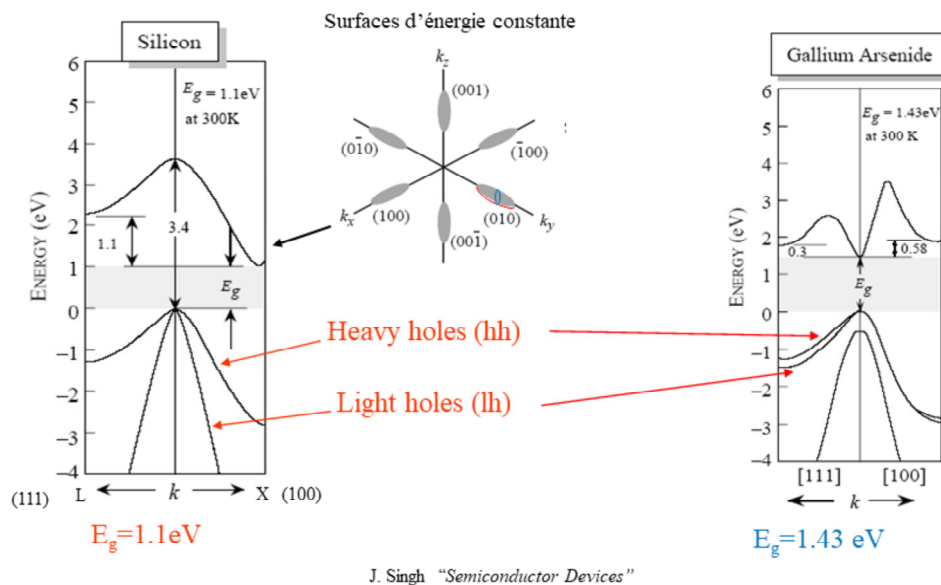
$$E = E_0 + \frac{P^2}{2m}$$

Nous remplaçons l'impulsion P par sa valeur $\hbar K$. Le facteur $1/m$ est donné par la courbure de la courbe $E(K)$ considérée.

Pour une bande isotrope un scalaire m^* , définit comme la « masse effective », suffit.

Comme pour un paquet d'ondes dans le vide, la vitesse de groupe d'une particule est le gradient de la bande d'énergie dans laquelle elle se trouve. Une particule est donc au repos aux extrêmes d'une bande d'énergie.

La valeur $(1/m^*)$ tel que défini ci-dessus (courbures de la bande d'énergie) permet de relier l'accélération d'une charge dans le cristal avec la force externe F qui l'a produite (voir exercice).



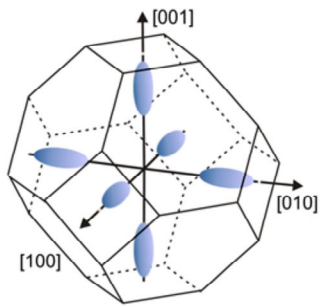
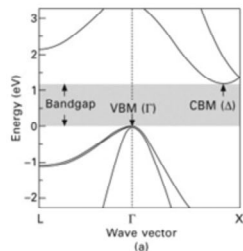
La situation dans un semi-conducteur réel est similaire mais nettement plus complexe.

La zone de Brillouin est tridimensionnelle. Il faut donc représenter les courbes de dispersion dans plusieurs directions cristallines. Dans une direction, les courbes sont symétriques, on ne représente donc que les valeurs positives de K . Les courbes ci-dessus représentent les courbes de dispersion (« les bandes ») dans les directions (100) et (111) pour le Si et le GaAs.

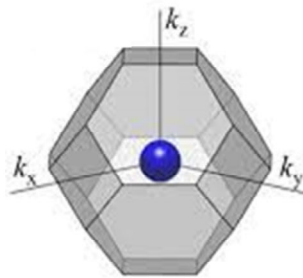
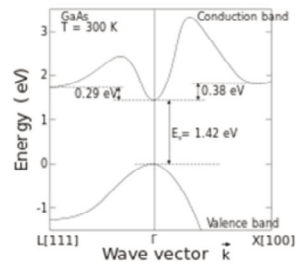
Dans les deux cas les bandes de valences sont multiples. Nous distinguons une bande « light holes (lh) » et une bande « heavy holes (hh) ». Elles ont le même maximum. Le GaAs a aussi une bande « split-off » généralement négligeable car son maximum est plus bas. Les maxima des bandes de valences sont situées autour du point $K=0$ et sont isotropes.

Le minima de la bande de conduction du GaAs est située aussi autour du point $K=0$ et elle est également isotrope. Pour le silicium la bande de conduction est formée de 6 vallées anisotropes situées proche des points X dans les directions (100). Il y a donc 6 minima équivalents.

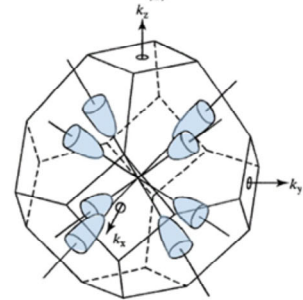
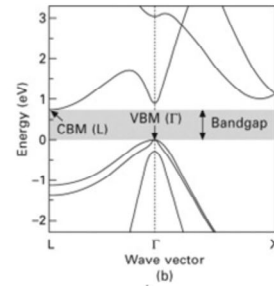
Silicium



GaAs



Germanium



Material	Bandgap (eV)	Relative Dielectric Constant
C	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
AlN	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 effective mass (m_0)	$m_{\text{e}}^* = 0.98$	$m^* = 0.067$
	$m_{\text{t}}^* = 0.19$	
	$m_{\text{dos}}^* = 1.08$	
	$m_{\text{c}}^* = 0.26$	
Hole effective mass (m_0)	$m_{\text{hh}}^* = 0.49$	$m_{\text{hh}}^* = 0.45$
	$m_{\text{lh}}^* = 0.16$	$m_{\text{lh}}^* = 0.08$
	$m_{\text{dos}}^* = 0.55$	$m_{\text{dos}}^* = 0.47$
	$m_{\text{v}}^* = 0.37$	$m_{\text{v}}^* = 0.34$
Bandgap (eV)	$1.17 - \frac{4.37 \times 10^{-4} T^2}{T + 636}$	$1.519 - \frac{5.4 \times 10^{-4} T^2}{T + 204}$
Electron affinity (eV)	4.01	4.07

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

J. Singh "Semiconductor Devices"

Tableau du « gap » pour différents semi-conducteurs.

Masses effectives pour le Si et le GaAs.

Les masses pour la bande de conduction correspondent aux masses effectives des électrons. Pour les bandes de valence, on se réfère aux masses effectives des trous (voir plus loin).

Pour le Si, la bande de conduction a 6 vallées avec la masse longitudinale $m_{\text{l}}^* = m_1$ et les masses transversales $m_{\text{t}}^* = m_2 = m_3$.

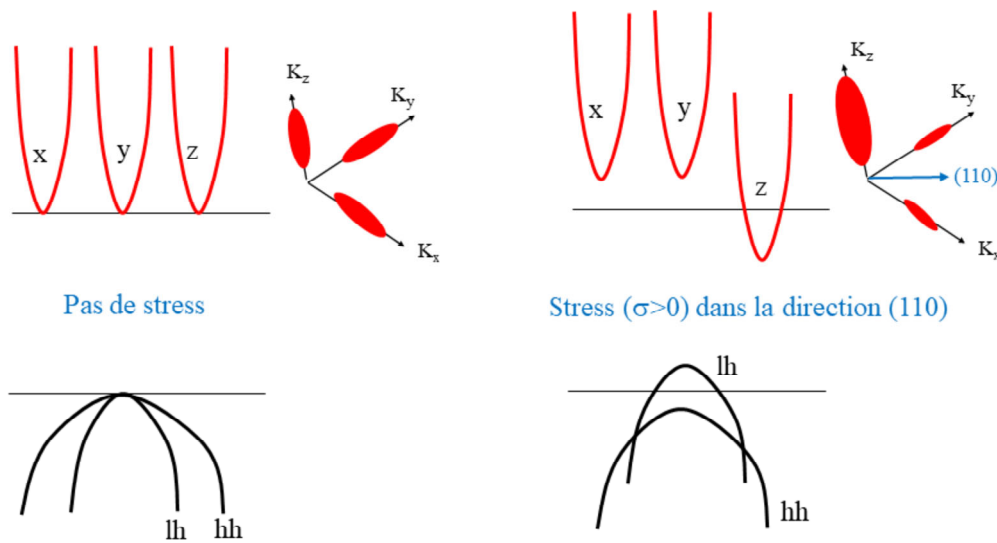
Pour les bandes de valence on distingue les bandes heavy hole et light hole et on définit la masse heavy hole m_{hh}^* et la masse light hole m_{lh}^* .

On définira plus loin deux masses effectives moyennes:

m_{dos}^* = masse effective moyenne utilisée dans le calcul de la densité d'états (« density of states »).

m_{c}^* = masse effective moyenne utilisée pour les propriétés de conduction.

Remarque: Toutes les masses effectives sont données en unité relative comparée à la masse d'un électron dans le vide.



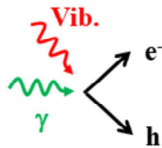
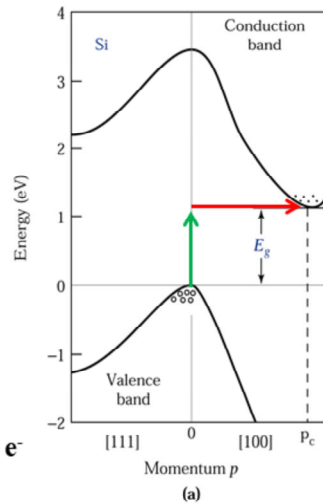
Dans un morceau de silicium, un stress mécanique induit des transformations des bandes.

Par exemple pour un stress dans la direction (110):

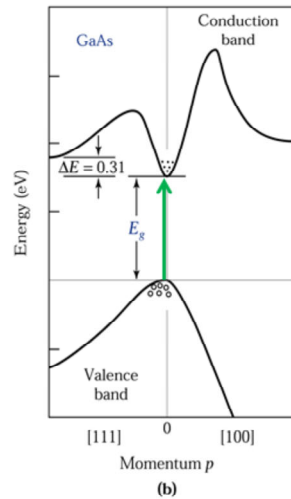
- Les niveaux des bandes de conduction sont changés. Les 4 bandes dans les directions x et y montent, alors que les 2 bandes en z descendent. (Seules les directions positives sont montrées ici par simplicité). Les masses restent inchangées.
- Les niveaux et les masses des bandes de valence varient également.

De telles variations des bandes résultent en des variations importantes des caractéristiques conductrices du matériau. Un effet de piezorésistance apparaît, la résistance du matériau dépend fortement du stress mécanique qu'il subit. Les jauges de contraintes sont basées sur ce principe.

Indirect

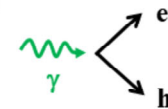


Direct



S. M. Sze "Semiconductor Devices"

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

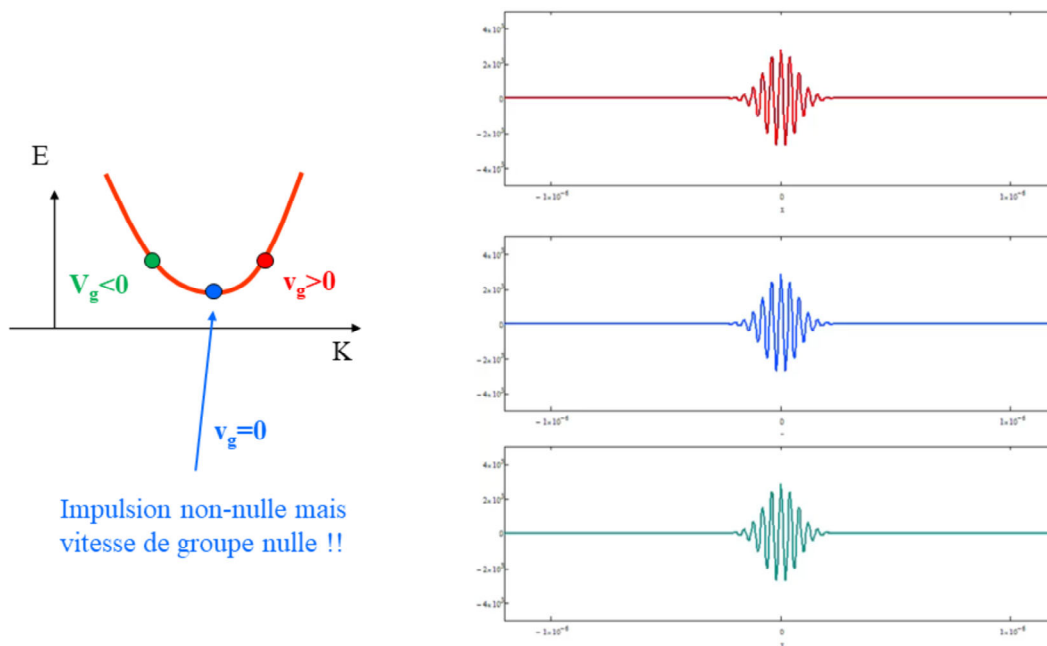


Le Si est un exemple de semi-conducteur indirect.

Pour passer d'une bande de valence à une vallée de conduction, un électron doit recevoir de l'énergie DE mais aussi une impulsion DK . Il doit donc interagir avec les vibrations cristallines (phonons).

Le GaAs est un exemple de semi-conducteur direct.

Seule une variation d'énergie est nécessaire pour passer de la bande de valence à celle de conduction. Ce procédé est donc plus probable.

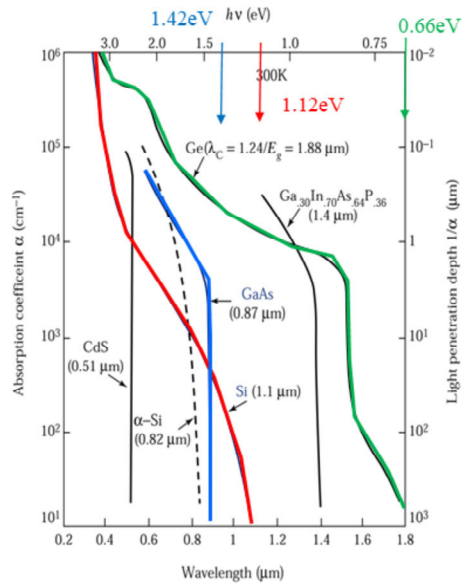


Dans le cas du silicium: les bandes de conduction ont leur minima déplacés vers des valeurs de K non nulles. Nous avons donc:

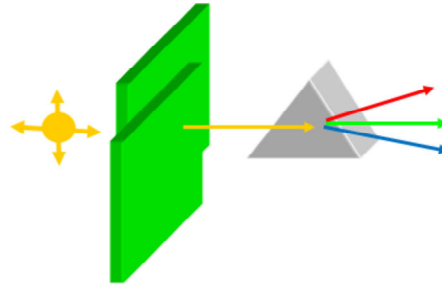
Un électron peut ne pas bouger (vitesse de groupe nulle) mais avoir une impulsion non nulle !

Explication:

L'impulsion est reliée à la fréquence spatiale de l'onde porteuse. Le déplacement de l'électron est donné par la vitesse de groupe reliée à l'enveloppe du paquet d'ondes.



S. M. Sze "Semiconductor Devices"



$$E_{[eV]} = \frac{h\nu}{q} = \frac{hc}{q} \cdot \frac{10^6}{\lambda_{[\mu m]}} \cong \frac{1.24}{\lambda_{[\mu m]}}$$

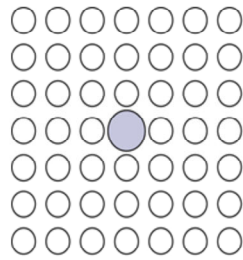
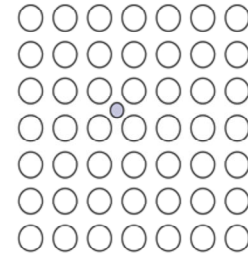
L'énergie du gap E_g peut être mesurée optiquement.

Un photon d'énergie $h\nu=hc/\lambda$ ne peut pas être absorbé par le cristal si cette énergie est inférieure à E_g . Aux longueurs d'onde élevées (IR), le cristal est transparent. Le gap résulte donc en une montée rapide de l'absorption en-dessous d'une longueur d'onde caractéristique λ_g :

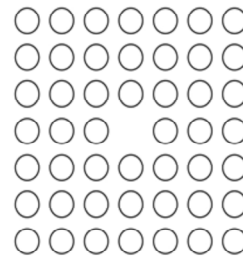
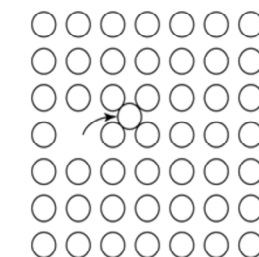
$$E_{g[eV]} = \frac{1.24}{\lambda_{g[\mu m]}}$$

Remarque: Pour s'affranchir des problèmes de réflexion en surface, on mesure des plaques d'épaisseur différente.

Substitution

Impureté
interstitielle

Vacance

Défaut de
Frenkel

S. M. Sze
"Semiconductor Devices"

Nous avons jusqu'ici étudié le cristal semi-conducteur pur, c.-à-d. sans défauts. En pratique ces défauts de structure ou d'atomes sont inévitables.

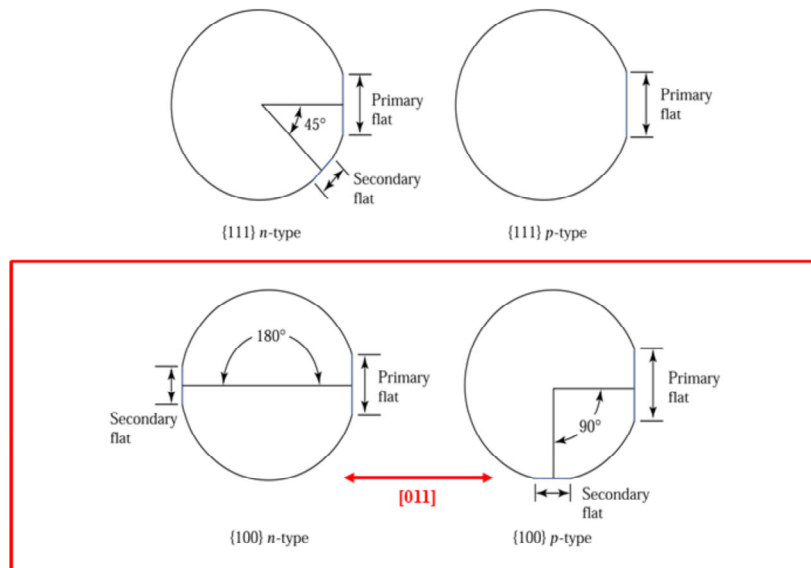
Certains défauts sont ponctuels et bien localisés au niveau atomique:

- Un atome étranger peut se substituer et prendre la place de l'atome correct dans le cristal.
- Une place dans la structure cristalline peut être vacante.
- Un atome peut occuper une place entre les mailles du cristal, dans un interstice.
- Un atome correct peut être mal placé et occuper un interstice proche de sa place dans la structure cristalline.

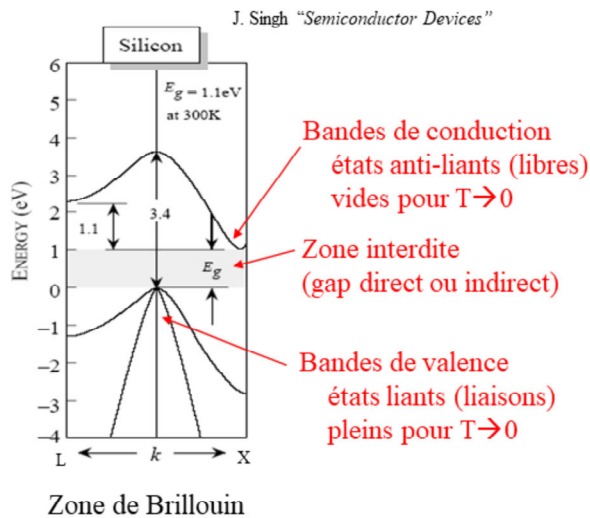
Tous ces défauts rompent la périodicité du cristal et influent légèrement sur le déplacement des électrons dans le cristal (voir « mobilité » et « impurity scattering » au chapitre 3).



S. M. Sze "Semiconductor Devices"



Selon la position du « flat primaire » et du « flat secondaire », il est aisé de reconnaître les directions cristallines et le dopage d'un wafer.



Relations de dispersion:

Relations quantiques

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

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

Particules = paquet d'ondes

$$\vec{v}_G = \frac{1}{\hbar} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}_K(E)$$

$$\vec{a} = \frac{d\vec{v}_G}{dt} = \left(\frac{1}{m^*} \right) \cdot \vec{F}$$

Masses effectives

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{i,j} \equiv \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2}{\partial K_i \partial K_j} E$$

$$E(K) = E_{c,v} \pm \frac{\hbar^2}{2} (\vec{K} - \vec{K}_0) \cdot \left(\frac{1}{m^*} \right) \cdot (\vec{K} - \vec{K}_0)$$

Lorsqu'il interagit, l'électron est une particule d'énergie E et d'impulsion P . Lorsqu'il se propage, l'électron est un paquet d'ondes de fréquence ω et de vecteur d'onde K .

L'ordre atomique d'un cristal conduit à la formation de:

- Bandes de valence: Formées à partir d'états liants (liaisons).
- Bandes de conduction: Formées avec des états anti-liants (libres).
- Zone interdite: « Gap » direct ou indirect.

À basse température, la bande de valence est pleine, celle de conduction vide.

La zone de Brillouin contient tous les vecteurs d'ondes décrivant le cristal. Ces vecteurs d'onde K correspondent à l'impulsion P de la particule. À chaque interaction avec la matière (chocs) l'impulsion et l'énergie sont conservés.

Pour chaque bande, une relation de dispersion relie E et le vecteur d'onde K . Aux extrema elle peut être approximée par une fonction quadratique. Les courbures aux extrema des fonctions de dispersion sont les inverses des masses effectives. Ce tenseur relie l'accélération avec la force externe qui la produit. La vitesse de groupe est déterminée par le gradient de la relation de dispersion $E(K)$.



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.

COMPOSANTS SEMI-CONDUCTEURS

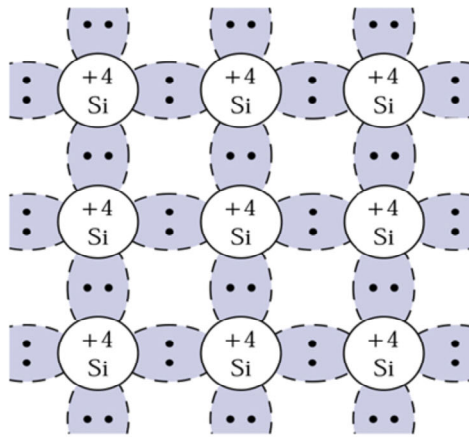
II) Semi-conducteurs à l'équilibre

P.A. Besse

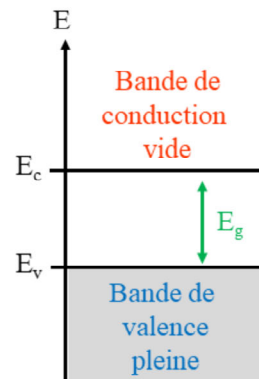
EPFL

Concepts d'électrons libres et de trous

À basse température: * toutes les liaisons sont occupées
($T=0$) * la bande de valence est pleine, celle de conduction vide



S. M. Sze "Semiconductor Devices"

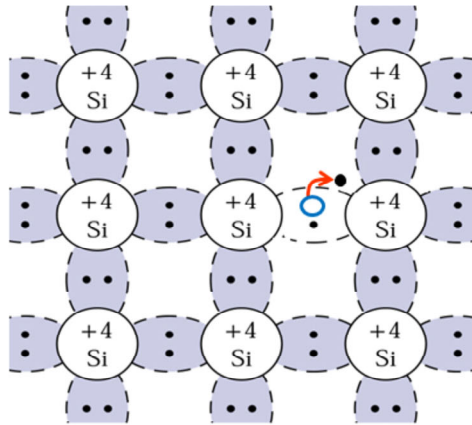


Pas de déplacement possible → isolant

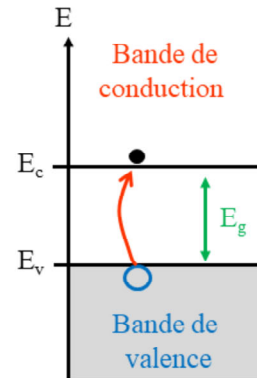
Dans un semi-conducteur « intrinsèque », l'influence du dopage est négligeable. Il peut donc être modélisé par un semi-conducteur « pur », idéalement composé d'atomes corrects (silicium par exemple). Comme nous l'avons vu au chapitre 1, à basse température toutes les liaisons de valence sont occupées. La bande de valence est pleine et la bande de conduction totalement vide.

→ Il n'y a pas de déplacement possible de charges électriques. En effet, dans la bande de valence un électron ne peut pas sauter dans une liaison vide, et dans la bande de conduction aucun porteur n'est présent. Le semi-conducteur se comporte comme un isolant.

Par excitation thermique :
un électron devient libre
et un trou apparaît



S. M. Sze "Semiconductor Devices"



Dans ce même semi-conducteur intrinsèque, une élévation de la température permet de rompre une liaison, un électron passant de la bande de valence à la bande de conduction. Une place libre (un « trou ») est généré dans la bande de valence et un électron apparaît dans la bande de conduction.

La probabilité d'une telle rupture de liaison par effet thermique dépend de la largeur du gap E_g . Si le gap est très grand par rapport à l'énergie thermique kT , ces ruptures sont négligeables et nous aurons un matériel isolant. Plus le gap diminue et plus la génération thermique d'électron/trou est fréquente. Le matériel devient plus conducteur.

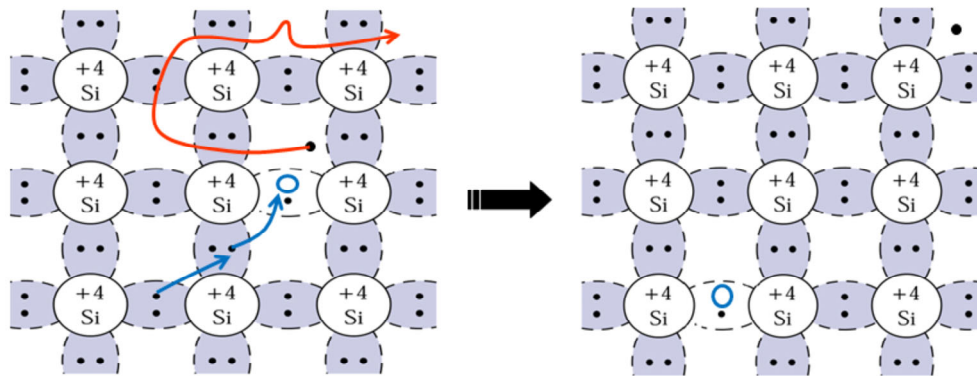
Remarque: Si le gap est vraiment très faible, les bandes de valence et de conduction se touchent presque et la conduction est très bonne. On parle parfois dans ce cas de semi-métal.

L'électron libre ainsi que le trou se déplacent indépendamment

La zone avec l'électron libre est chargée négativement

La zone avec le trou est chargée positivement

S. M. Sze "Semiconductor Devices"

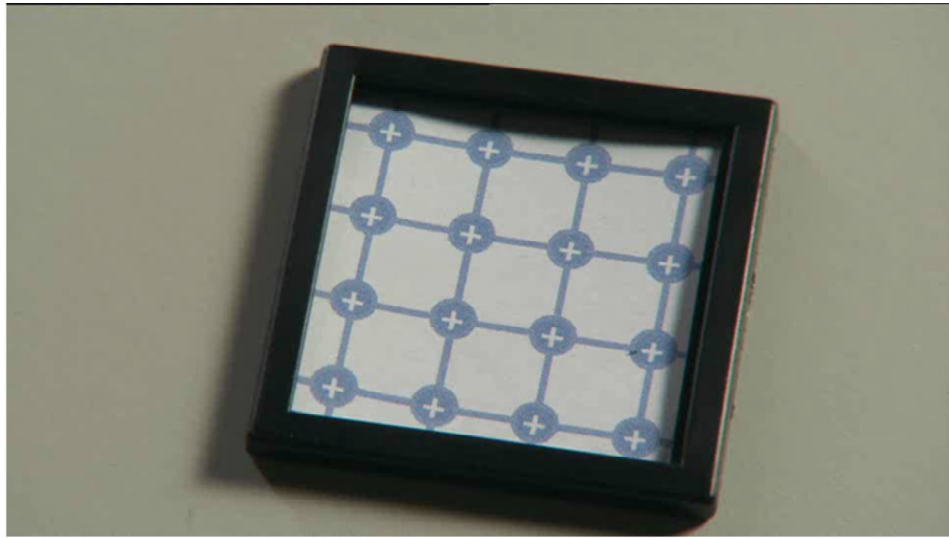


Deux sortes de charges contribuent à la conduction: les électrons libres et les trous

Sous l'effet thermique (mouvement brownien) ou sous l'effet d'une force extérieure (champ électrique par exemple), l'électron libre et le trou se séparent et bougent indépendamment l'un de l'autre.

Le trou est une charge négative manquante. Dans la zone proche du trou, il y a plus de charges positives dans les noyaux des atomes que d'électrons dans les liaisons interatomiques. Le trou correspond donc à une zone chargée positivement.

Après leur génération, l'électron dans la bande de conduction et le trou dans la bande de valence sont des charges menant une existence indépendante. Il y a donc deux sortes de porteurs libres dans un semi-conducteur: les électrons de la bande de conduction et les trous de la bande de valence. Tous deux participent aux propriétés conductrices du semi-conducteur.





Electron libre = électron occupant un état de la bande de conduction (état anti-liant)
porte une charge négative
réagit à une force extérieure avec sa masse effective dans le cristal
cherche à minimiser son énergie,
comme une « bille » dans un pot.

Trou = liaison inoccupée qui se déplace par « substitution »
porte une charge positive
réagit à une force extérieure avec sa masse effective dans le cristal
cherche à maximiser son énergie,
comme une « bulle » dans un liquide.

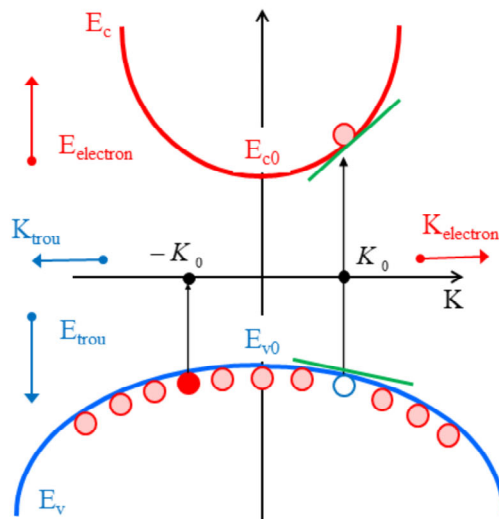
Passage d'un électron d'une bande à l'autre = évaporation et condensation
→ On peut générer ou faire disparaître une paire électron-trou
donc la charge totale reste neutre.

L'électron cherche à minimiser son énergie. Il va donc occuper les niveaux d'énergie les plus bas dans le diagramme de bande.

→ Dans la bande de conduction l'électron libre est comme une bille dans un pot, il cherche à atteindre le fond du pot. L'énergie thermique agit comme une vibration aléatoire autour de cet équilibre.

→ Dans la bande de valence, les électrons occupent les niveaux profonds, donc les trous (places libres) sont comme des bulles d'air qui occupent les niveaux énergétiques les plus élevés dans cette bande. De nouveau la température agit comme une vibration aléatoire autour de cet équilibre.

Il arrive qu'un électron de la bande de conduction réintègre une liaison de valence inoccupée. Il y a alors recombinaison de la paire électron/trou. C'est l'effet contraire à la génération de paires électron/trou. Dans les deux cas la charge totale est conservée et le matériel reste neutre.



Electrons

Charge:	négative
Impulsion:	$P_e = \hbar K_0$
Vitesse groupe:	$v_e = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_c}{\partial K}$
Masse effective:	$\frac{1}{m_e} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_c}{\partial K^2} > 0$

Trous

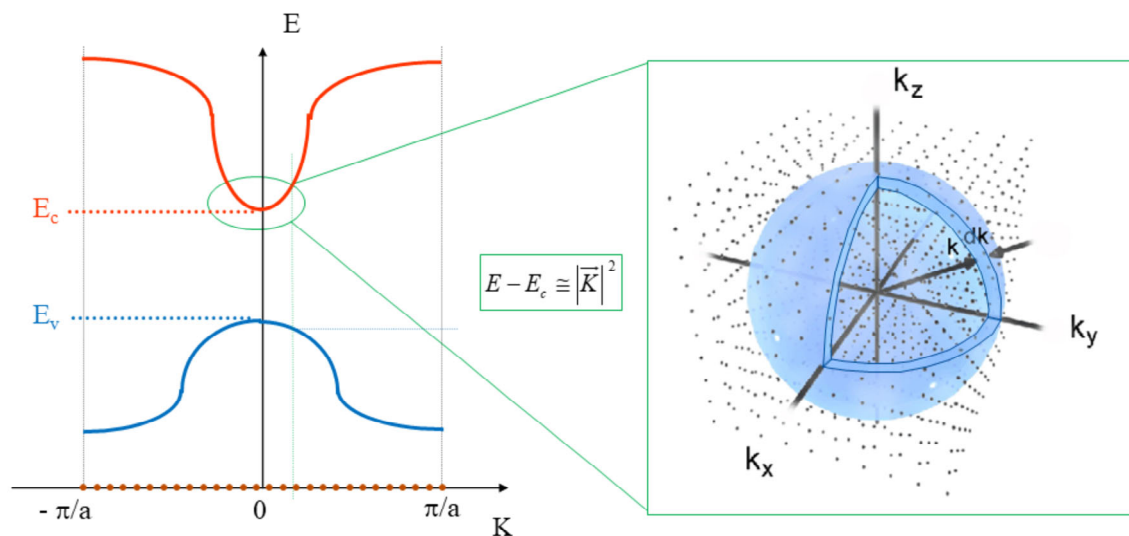
Charge:	positive
Impulsion:	$P_h = -\hbar K_0$
Vitesse groupe:	$v_h = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_v}{\partial K}$
Masse effective:	$\frac{1}{m_h} = -\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_v}{\partial K^2} > 0$

La notion de « trou » doit remplacer une bande de valence pleine d'électrons. Il faut pour cela définir les propriétés du « trou » de façon à égaler celles de l'ensemble des électrons dans la bande de valence.

- **Le trou a une charge positive**, elle correspond à la charge du noyau atomique non-compensée par l'électron de liaison manquant.
- Lors de la génération d'un électron-trou l'impulsion totale du système est conservée. **L'impulsion du trou est égale mais de signe opposé à celle de l'électron**. Dans la bande de valence, tout électron a un électron d'impulsion opposée, sauf l'électron en $-K_0$. La résultante des impulsions est donc $P_h = -\hbar K_0$
- De même dans la bande de valence, les vitesses des électrons se compensent deux à deux, sauf pour l'électron d'impulsion $-K_0$. Cet électron est une charge négative ayant une vitesse de signe opposé à celle de l'électron manquant. Le trou de charge positive doit donc avoir la même vitesse que l'électron manquant. **La vitesse de groupe du trou est donnée au signe près par la pente de la bande de valence**.
- Dans l'exemple ci-dessus, le trou a une impulsion négative ($-K_0$), et également une vitesse négative. Le tenseur $1/m_h$ doit être positif. **La masse du trou est positive et de signe opposé à la courbure de la bande de valence**.
- **L'énergie des trous doit être lue à l'envers**: son énergie potentielle est minimale au sommet de la bande de valence. L'énergie cinétique des électrons est positive et donnée par $(E_c - E_{c0})$. L'énergie cinétique des trous est elle donnée par $-(E_v - E_{v0})$, elle est également positive

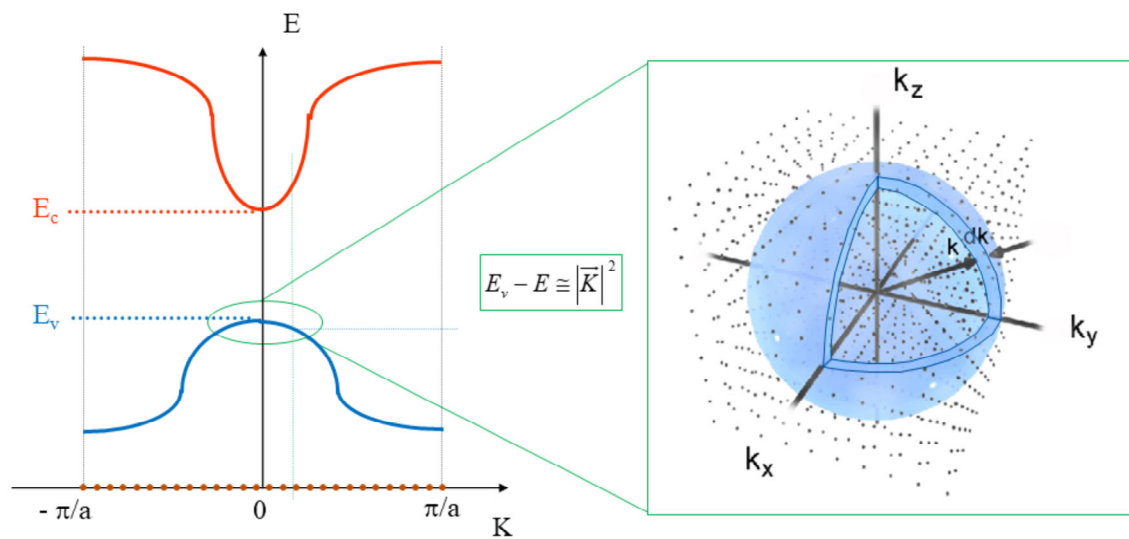
Voir: Ch. Kittel, « Introduction to Solid State Physics », Wiley, p. 206 ...

Calcul
de la densité d'états,
du taux d'occupation
et des concentrations de porteurs

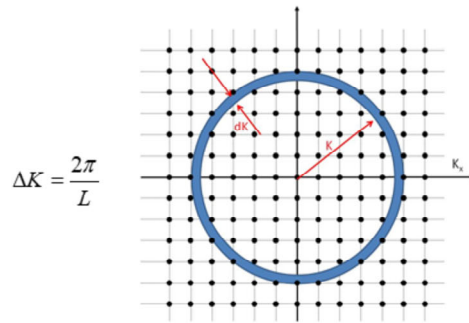
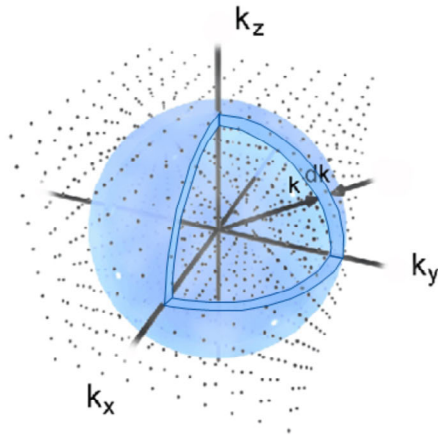


Le calcul de la densité d'états électroniques dans l'espace K est trivial. Comme pour les transformées de Fourier, les vecteurs d'onde K sont équidistants. Pour un cristal cubique de dimension $(L \cdot L \cdot L)$, les vecteurs K permis occupent les mailles d'un réseau régulier de période $2\pi/L$.

Le taux d'occupation des états électroniques est déterminé en fonction de l'énergie, nous devons donc exprimer la densité d'état $\rho(E)$ en fonction de l'énergie E (Voir les calculs page suivante).



Il en va de même pour les trous dans la bande de valence.



$$\Delta K = \frac{2\pi}{L}$$

$$n_K = (4\pi \cdot K^2 \cdot dK) / \Delta K^3$$

La densité d'états avec la même norme de K:

$$\rho_K \cdot dK \equiv \frac{n_K}{L^3} = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \cdot 4\pi \cdot K^2 \cdot dK$$

Les vecteurs K sont équidistants (comme pour les transformées de Fourier). Il forment un réseau régulier de maille $2\pi/L$.

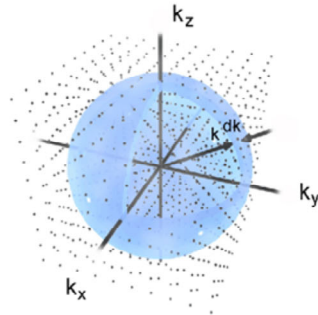
Le nombre d'états n_K dans une surface sphérique de rayon K et d'épaisseur dK est donné par le volume de cette région ($4\pi \cdot K^2 \cdot dK$) divisé par le volume ΔK^3 d'une maille du réseau.

La densité $\rho_K \cdot dK$ d'états ayant la même norme du vecteur K est obtenue en divisant n_K par le volume du cristal (L^3).

La densité d'états avec la même norme de K:

$$\rho_K \cdot dK \equiv \frac{n_K}{L^3} = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \cdot 4\pi \cdot K^2 \cdot dK$$

Dispersion:



$$E_e = \frac{p^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \cdot K^2$$



$$\sqrt{E} \approx K \quad dE \approx K \, dK$$

$$K^2 \cdot dK = K \cdot K \, dK \approx \sqrt{E} \cdot dE$$

Densité d'état en énergie (Electrons):

$$\rho_E \cdot dE = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{m^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \cdot \sqrt{E - E_0} \cdot dE$$

On peut alors utiliser la relation de dispersion correspondant à la bande d'énergie considérée pour remplacer mathématiquement la norme K par l'énergie E.

Le cas d'une bande de conduction isotrope est considéré dans l'équation ci-dessus.

La densité d'état est proportionnelle à la racine de l'énergie exprimée à partir du minimum de la bande.

Cas anisotrope avec plusieurs vallées:

Bande de conduction:

$$\rho_c = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{(m_{dos,n}^*)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \cdot \sqrt{E - E_c}$$

Silicium:

$$m_{dos,n}^* = 6^{2/3} \cdot (m_l^* \cdot m_t^* \cdot m_t^*)^{1/3}$$

Bande de valence:

$$\rho_v = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{(m_{dos,p}^*)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \cdot \sqrt{E_v - E}$$

$$m_{dos,p}^* = (m_{hh}^{3/2} + m_{lh}^{3/2})^{2/3}$$

! Chaque état peut être occupé par 2 électrons de spin opposé !

Dans les cas généraux tridimensionnels, avec des bandes anisotropes à plusieurs minima, une expression similaire est obtenue.

- Pour la bande de conduction: La densité d'état reste proportionnelle à la racine de l'énergie exprimée à partir du minimum de la bande.
- Pour la bande de valence: La densité d'état est proportionnelle à la racine de l'énergie exprimée à partir du maximum de la bande.

Un nouveau paramètre: la masse effective « density of state » m_{dos}^* doit être définie à partir des masses effectives. Ce paramètre est inclus dans la table de résumé en fin du script A.

Remarque: Des couches très fines (quelques nanomètres) permettent de créer des structures bidimensionnelles (quantum wells), unidimensionnelles (quantum wires) voir même des boîtes à électrons (quantum dots). Dans ces cas, la densité d'état ne suit plus la loi en racine de l'énergie.

Masses effective «Density of States» (dos)

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

J. Singh "Semiconductor Devices"

Masses effectives en unité:
 $m_0 = 0.911 \cdot 10^{-30}$ Kg

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

Electrons

$F(E)$ doit remplir les limites:

- $F(E) = 1$ si E très bas
- $F(E) = \text{Boltzmann}$ si E élevé

$$F_c(E) = \frac{1}{1 + e^{(E - E_F)/kT}}$$

→ Fermi-Dirac avec un paramètre le niveau de Fermi

Trous

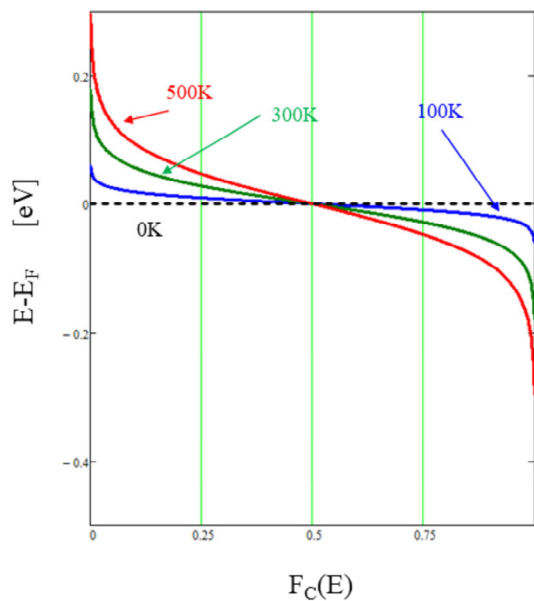
Proba d'occupation d'un trou = 1-proba d'occupation d'un électron

$$F_v(E) = 1 - F_c(E) = \frac{1}{1 + e^{(E_F - E)/kT}}$$

Nous commençons par calculer le taux (la probabilité) d'occupation des états électroniques. À basse énergie, les états sont tous occupés ($F(E)=1$). À haute énergie le taux d'occupation diminue suivant la loi exponentielle de Boltzmann.

Le taux d'occupation pour les électrons est donné par la probabilité de Fermi-Dirac $F_c(E)$. Elle contient un seul paramètre, l'énergie de Fermi E_F , qu'il faudra déterminer.

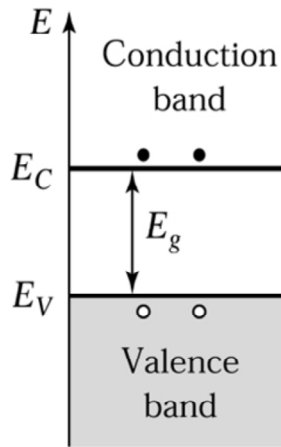
Pour les trous: un trou est une place électronique inoccupée. La probabilité $F_v(E)$ qu'un trou occupe un niveau électronique est donc égale à la probabilité $1-F_c(E)$ qu'un électron ne s'y trouve pas. Ce taux d'occupation des trous est aussi uniquement déterminé par l'énergie de Fermi E_F .



$$F_C(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_F}{kT}}}$$

La probabilité de Fermi-Dirac pour les électrons est représentée ci-dessus. À température nulle tous les niveaux possibles au-dessous de l'énergie de Fermi sont occupés et tous les niveaux au-dessus de E_F sont vides. En élevant la température, une zone de transition apparaît dans laquelle le taux d'occupation baisse graduellement de 1 à 0. Cette zone de transition s'élargit en augmentant la température.

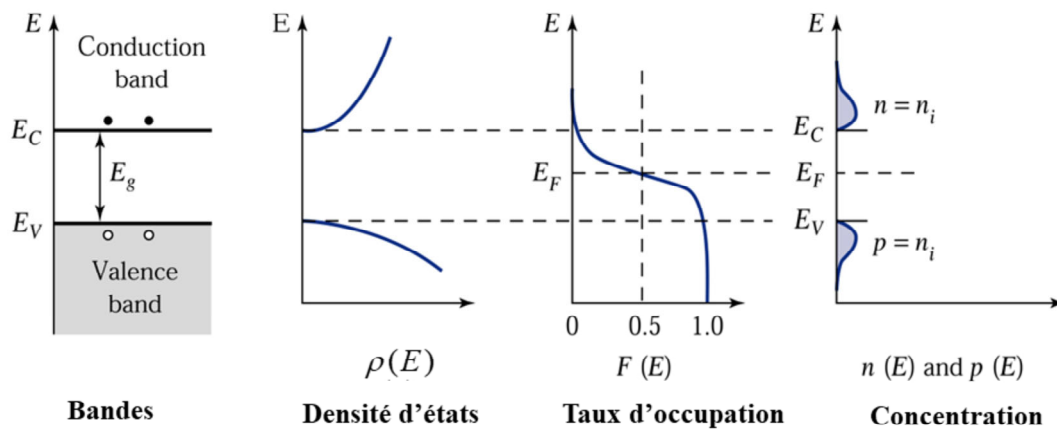
L'énergie de Fermi E_F correspond à un taux d'occupation de $\frac{1}{2}$. Au-dessous de l'énergie de Fermi, les états sont majoritairement occupés ($F(E) > \frac{1}{2}$), au-dessus de E_F les états sont majoritairement vides ($F(E) < \frac{1}{2}$).



n = concentration d'électrons libres

p = concentration de trous

S. M. Sze "Semiconductor Devices"



$$\text{Concentration} = 2 \cdot \int \rho(E) \cdot F(E) dE$$

↑
Spin

S. M. Sze "Semiconductor Devices"

L'équation ci-dessus représente le principe général pour le calcul des concentrations de porteurs libres.

La densité d'états $\rho(E)$ correspond au nombre d'états électroniques (de fonction d'onde) possibles par volume de cristal et par intervalle d'énergie dE . En multipliant cette densité par le taux d'occupation $F(E)$ et par le nombre de spins possibles (2 pour l'électron), on obtient la concentration de porteurs dans l'intervalle d'énergie dE .

La concentration n d'électrons libres est obtenue en intégrant le tout sur la bande de conduction. La concentration p de trous est obtenue de façon similaire mais en intégrant sur la bande de valence.

Nous allons maintenant calculer les valeurs de $\rho(E)$ et de $F(E)$ pour être à même de déterminer les concentrations n et p d'électrons libres et de trous respectivement.

Concentration d'électrons libre dans les bandes de conduction:

$$n = 2 \cdot \int_{E_c}^{E_{c,\max}} \rho_c(E) \cdot F_c(E) \cdot dE = \sqrt{2} \frac{(m_{dos,n}^*)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_{E_c}^{\infty} \sqrt{E - E_c} \cdot \frac{1}{1 + e^{(E - E_F)/kT}} \cdot dE$$

Concentration de trous dans les bandes de valence:

$$p = 2 \cdot \int_{E_{v,\min}}^{E_v} \rho_v(E) \cdot F_v(E) \cdot dE = \sqrt{2} \frac{(m_{dos,p}^*)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_{-\infty}^{E_v} \sqrt{E_v - E} \cdot \frac{1}{1 + e^{(E_F - E)/kT}} \cdot dE$$

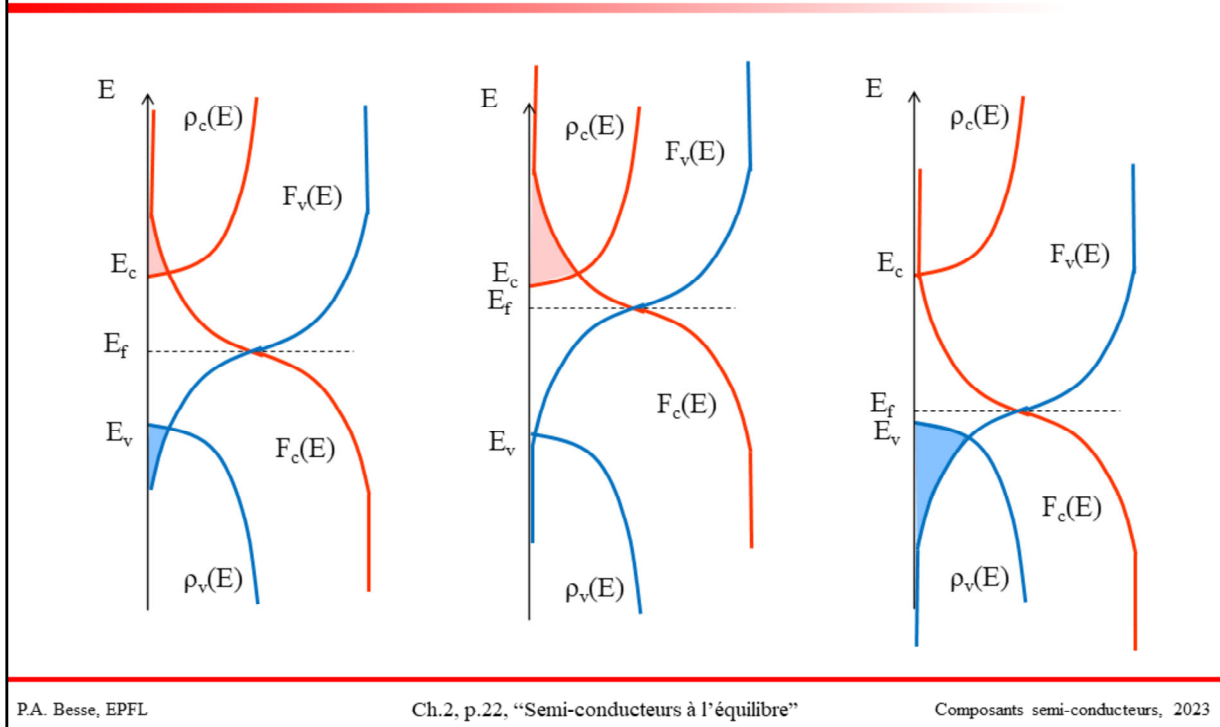
Remarques: - Ces équations sont aussi valides pour un semi-conducteur dopé

- Un paramètre est pour l'instance libre: l'énergie de Fermi E_F .

Nous avons maintenant tous les éléments pour exprimer les concentrations n et p de porteurs libres. En appliquant le principe général du calcul des concentrations et en introduisant les expressions de la distribution de Fermi et de la densité d'états, les 2 équations ci-dessus sont obtenues. Elles contiennent une intégrale à résoudre numériquement.

Nous n'avons que deux équations, mais 3 inconnues: n , p et E_F . L'énergie de Fermi E_F doit encore être déterminée. Pour cela nous devons considérer la neutralité du semi-conducteur.

Avant de résoudre ces équations, nous allons simplifier les intégrales ci-dessus. Pour cela, la position de l'énergie de Fermi dans la bande interdite doit être estimée.



P.A. Besse, EPFL

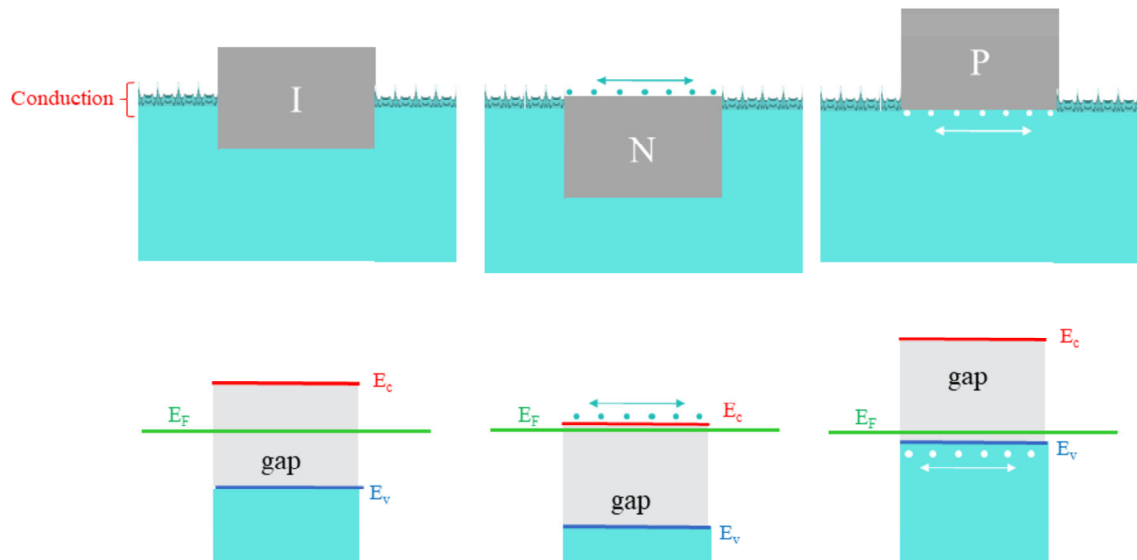
Ch.2, p.22, "Semi-conducteurs à l'équilibre"

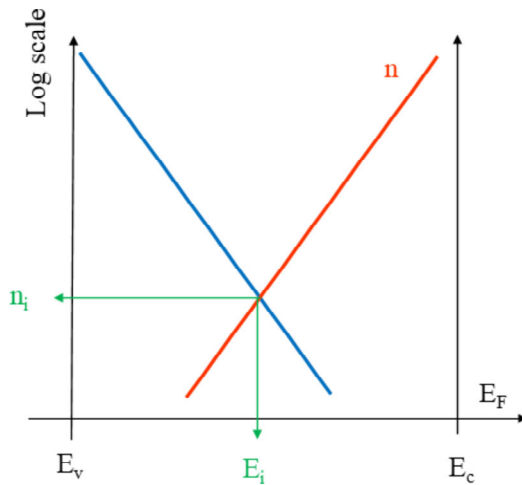
Composants semi-conducteurs, 2023

Afin de mieux comprendre l'influence de l'énergie de Fermi E_F , il est intéressant de résoudre graphiquement les deux intégrales de la page précédente. Considérons des masses effectives identiques pour les électrons et les trous. Nous devons multiplier la densité d'état $\rho(E)$ par le taux d'occupation $F(E)$ et intégrer le tout. Le résultat correspond aux surfaces hachurées sur les graphiques ci-dessus.

- Si l'énergie de Fermi est au milieu du gap: la solution est symétrique et la densité n est égale à la densité p .
- Si l'énergie de Fermi s'approche de la bande de conduction: la concentration n augmente fortement alors que la concentration p des trous tend vers zéro.
- Si l'énergie de Fermi s'approche de la bande de valence: la concentration p augmente fortement alors que la concentration n tend vers zéro.

Les constatations ci-dessus vont nous permettre de déterminer l'énergie de Fermi (seul paramètre encore inconnu dans notre calcul).





Le semi-conducteur intrinsèque est neutre:

$$\rightarrow n = p = n_i$$

Cette condition de neutralité nous donne la valeur de: l'énergie de Fermi intrinsèque E_i et de la concentration n_i

L'énergie de Fermi intrinsèque E_i est proche du milieu du gap
 \rightarrow Approximation de Boltzmann

Dans un semi-conducteur intrinsèque, les porteurs sont générés thermiquement. Lorsqu'un électron est créé dans la bande de conduction, un trou apparaît dans la bande de valence. Le semi-conducteur reste donc toujours neutre.

Cette condition de neutralité implique que $n=p=n_i$. (n_i correspond à la concentration intrinsèque de porteurs libres). Pour des électrons et des trous de même masse effective, l'énergie de Fermi doit donc être située au milieu du gap !

En considérant des électrons et des trous de masses différentes, nous devons résoudre la condition de neutralité en exprimant n et p par leurs expressions intégrales. E_F peut ainsi être déterminé.

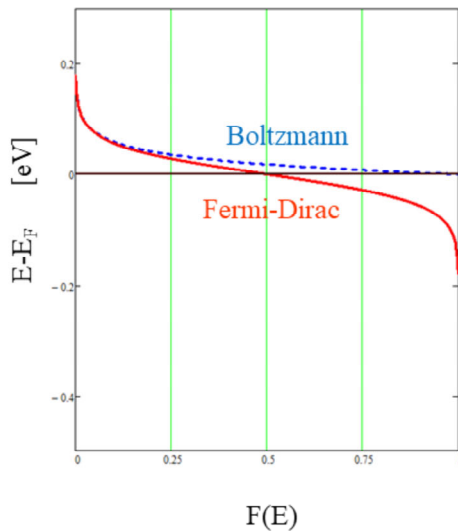
Dans tous les cas réels, E_F reste situé très proche du milieu du gap pour un semi-conducteur intrinsèque.

Remarques:

- Il est possible de résoudre la condition de neutralité graphiquement (graphique de Shockley) en dessinant les fonctions $n(E_F)$ et $p(E_F)$ sur le même graphique.
- Il est judicieux d'approximer la fonction de Fermi-Dirac par l'approximation de Boltzmann. Ainsi les intégrales deviennent analytiquement solvables et de très bonnes expressions analytiques peuvent être trouvées pour les semi-conducteurs intrinsèques.

\rightarrow Nous allons suivre maintenant ce chemin !

$T=300\text{K} \rightarrow kT=25\text{meV}$



Pour la bande de conduction:

Si: $E_c - E_F > 3kT$

$$F_c(E) \cong e^{-(E-E_F)/kT}$$

Pour la bande de valence:

Si: $E_F - E_v > 3kT$

$$F_v(E) \cong e^{-(E_F-E)/kT}$$

Lorsque l'énergie de Fermi est dans la zone interdite, le calcul des concentrations ne demande que de considérer la queue de la fonction de Fermi-Dirac. C'est en particulier le cas lorsque l'énergie de Fermi est proche du milieu du gap (semi-conducteur intrinsèque).

Cette queue peut s'approximer par la fonction de Boltzmann. Nous allons l'introduire dans les intégrales. Nous pourrions alors les résoudre analytiquement.

$$n \equiv \sqrt{2} \frac{(m_{dos,n}^*)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_{E_c}^{\infty} \sqrt{E - E_c} \cdot e^{-(E - E_F)/kT} \cdot dE$$



$$n \cong N_c \cdot e^{-(E_c - E_F)/kT}$$

$$p \equiv \sqrt{2} \frac{(m_{dos,p}^*)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_{-\infty}^{E_v} \sqrt{E_v - E} \cdot e^{-(E_F - E)/kT} \cdot dE$$



$$p \cong N_v \cdot e^{-(E_F - E_v)/kT}$$

Densités effectives d'états:

$$N_c = \frac{1}{\sqrt{2} \hbar^3} \cdot \left(\frac{kT}{\pi} m_{dos,n}^* \right)^{3/2}$$

$$N_v = \frac{1}{\sqrt{2} \hbar^3} \cdot \left(\frac{kT}{\pi} m_{dos,p}^* \right)^{3/2}$$

Loi d'action de masse:
(valable pour tout semi-conducteur
à l'équilibre)

$$n \cdot p = N_c N_v e^{-E_g/kT} \equiv n_i^2$$

L'approximation de Boltzmann est introduite dans les équations des concentrations n et p . L'intégrale est résolue analytiquement et deux expressions très simples sont trouvées pour les concentrations n et p .

Les densités effectives d'états N_c et N_v ne dépendent que de la température et du matériel semi-conducteur lui-même. La loi d'action de masse permet de déterminer la concentration intrinsèque de porteurs n_i . Cette concentration ne dépend aussi que de la température et du matériel semi-conducteur lui-même. Pour un semi-conducteur intrinsèque $n=p=n_i$. Pour un tel matériel, les concentrations de porteurs peuvent donc être approximées analytiquement par des expressions simples.

$$n = 2 \cdot \int_{E_c}^{E_{c,\max}} \rho_c(E) \cdot F_c(E) \cdot dE$$

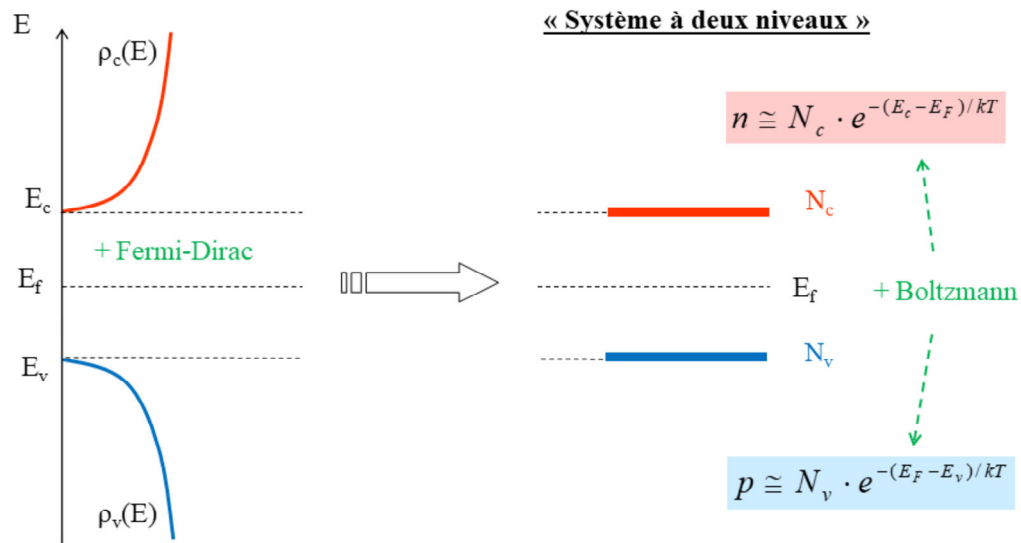
$$p = 2 \cdot \int_{E_{v,\min}}^{E_v} \rho_v(E) \cdot F_v(E) \cdot dE$$

$$n \cong N_c \cdot e^{-(E_c - E_F) / kT}$$

$$p \cong N_v \cdot e^{-(E_F - E_v) / kT}$$

$$n \cdot p = N_c N_v e^{-E_g / kT} \equiv n_i^2$$

Loi d'action de masse

**Interprétation:**

Les densités effectives d'états peuvent être interprétées comme suit:

- Les bandes continues d'états de valence et de conduction sont remplacées par un système à deux niveaux d'énergie, avec des densités d'états données par N_v et N_c respectivement.
- De plus, la distribution de Fermi-Dirac est elle aussi remplacée par la distribution de Boltzmann.

Boltzmann

$$n_i = n = p$$

$$n_i = N_c \cdot e^{-(E_c - E_i)/kT} = N_v \cdot e^{-(E_i - E_v)/kT}$$

$$E_i = \frac{(E_c + E_v)}{2} + kT \cdot \ln \sqrt{\frac{N_v}{N_c}}$$

$$n_i = \sqrt{n \cdot p} = \sqrt{N_c N_v} \cdot e^{-E_g/2kT}$$

Pour le silicium à température ambiante:

$$E_i = \frac{(E_c + E_v)}{2} + 11 \text{ meV} \cong \frac{(E_c + E_v)}{2}$$

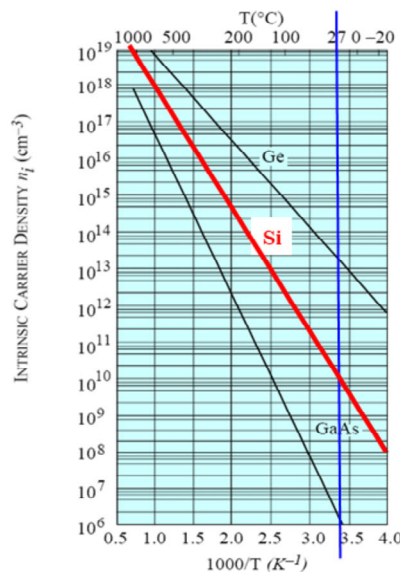
$$n_i = \sqrt{n \cdot p} \cong 10^{10} \text{ cm}^{-3}$$

Ce transparent résume la situation pour les semi-conducteurs intrinsèques. Nous pouvons supposer l'énergie de Fermi E_F proche du milieu du gap et remplacer la distribution de Fermi-Dirac par celle de Boltzmann. Les intégrales peuvent ainsi être résolues.

La condition de neutralité peut maintenant être résolue et l'énergie de Fermi déterminée. Pour cela nous entrons les approximations pour n et p dans l'expression $n=p=n_i$.

L'énergie de Fermi contient un premier terme qui correspond au milieu du gap. Le second terme est une petite correction due aux masses différentes des trous et des électrons libres. Il est souvent négligeable. Par exemple, pour le silicium à température ambiante ce terme vaut 11 meV seulement.

La valeur de n_i s'exprime facilement à partir de la loi d'action de masse $n_i^2 = n \cdot p$.



J. Singh "Semiconductor Devices"

$$N_c = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{h^3} \cdot \left(\frac{kT}{\pi} m_{dos,n}^* \right)^{3/2} \quad N_v = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{h^3} \cdot \left(\frac{kT}{\pi} m_{dos,p}^* \right)^{3/2}$$



$$n_i = \sqrt{N_c N_v} \cdot e^{-E_g / 2kT}$$

$$E_i = \frac{(E_c + E_v)}{2} + kT \cdot \ln \sqrt{\frac{N_v}{N_c}} \cong \frac{(E_c + E_v)}{2}$$

MATERIAL	CONDUCTION BAND EFFECTIVE DENSITY (N_c)	VALENCE BAND EFFECTIVE DENSITY (N_v)	INTRINSIC CARRIER CONCENTRATION ($n_i = p_i$)	E_g [eV]
Si (300 K)	$2.78 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$	$9.84 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	$1.5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$	1.12
Ge (300 K)	$1.04 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$	$6.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	$2.33 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$	0.66
GaAs (300 K)	$4.45 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$	$7.72 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	$1.84 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$	1.42

Le graphique donne les valeurs de la concentration intrinsèque n_i pour différents matériaux.

Il est facile de retenir pour le silicium à température ambiante: $n_i = 10^{10} \text{ cm}^{-3}$.

Nous constatons:

- Ce graphique reflète la loi de Boltzmann (que nous avons introduite pour approximation). Si la température s'élève, il y a exponentiellement plus d'électrons/trous générés thermiquement. Donc la concentration de porteurs n_i augmente exponentiellement (linéairement dans un graphique logarithmique!).
- Le germanium a un gap plus petit, sa valeur de n_i est plus élevée. Là aussi cela se comprend en terme d'une augmentation de la génération thermique d'électrons/trous.

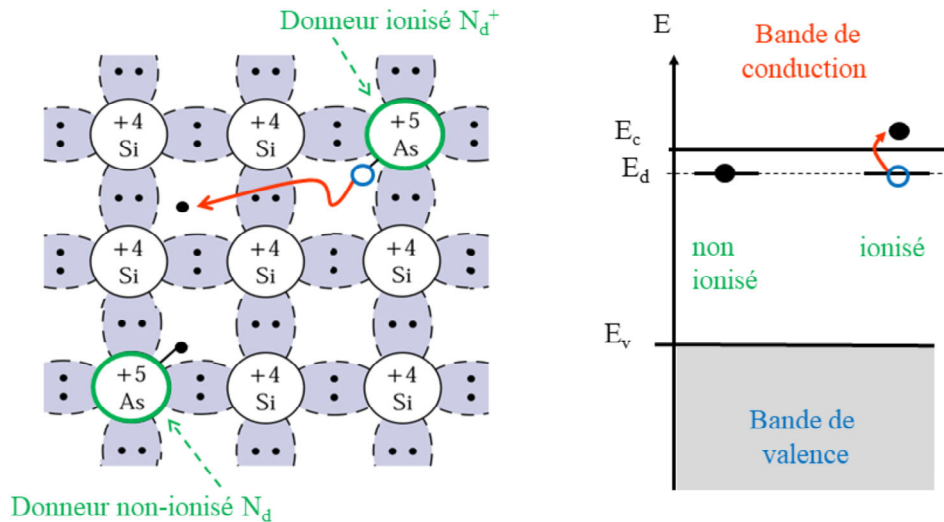
Ces deux constatations peuvent directement être déduites de la loi physique:

$$n_i = \sqrt{N_c N_v} \cdot e^{-E_g / 2kT}$$

Nous avons jusqu'ici travaillé avec des semi-conducteurs intrinsèques, c.-à-d. où le dopage ne jouait aucun rôle pour la concentration de porteurs. Cette concentration dépendait alors uniquement de la génération thermique de la bande de valence à la bande de conduction.

Dopage:
Donneurs
Accepteurs

S. M. Sze "Semiconductor Devices"



P.A. Besse, EPFL

Ch.2, p.32, "Semi-conducteurs à l'équilibre"

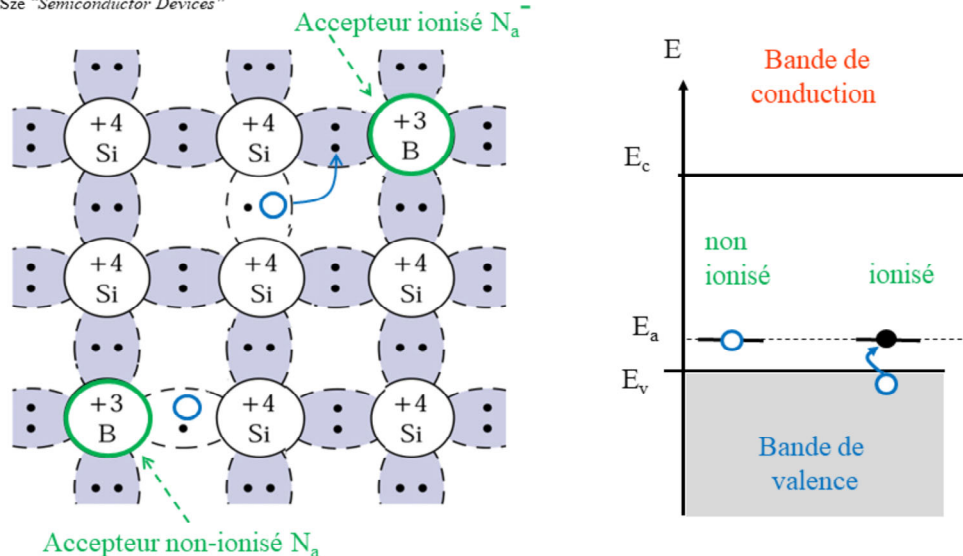
Composants semi-conducteurs, 2023

Nous allons maintenant introduire dans le cristal une petite quantité (par rapport au nombre d'atomes du cristal) d'atomes dopants. Ces dopants sont des éléments bien spécifiques, choisis pour libérer un électron (donneur) ou pour capturer un électron (accepteur).

Dans le cas des donneurs dans le silicium: un atome « étranger », contenant un électron et une charge dans le noyau de plus que le silicium, est introduit à la place d'un atome de silicium. Il s'agit donc de remplacer le silicium (groupe IV) par un atome du groupe V (As par exemple).

L'électron supplémentaire a un état atomique d'énergie E_d juste inférieure à la bande de conduction E_c . Maintenant une excitation thermique permet facilement d'ioniser cet atome et de générer un électron libre dans la bande de conduction. Le saut énergétique à effectuer est bien inférieur au gap, donc ce processus d'ionisation est très efficace. Il n'y a pas de génération de trous libres dans la bande de valence. Par contre une charge positive fixe, correspondant à la charge du noyau de l'atome donneur, apparaît. Le matériel reste neutre. Il faudra par la suite toujours considérer les atomes ionisés dans le calcul des charges dans un semi-conducteur.

S. M. Sze "Semiconductor Devices"



P.A. Besse, EPFL

Ch.2, p.33, "Semi-conducteurs à l'équilibre"

Composants semi-conducteurs, 2023

Dans le cas des accepteurs dans le silicium: un atome « étranger », contenant un électron et une charge dans le noyau de moins que le silicium, est introduit à la place d'un atome de silicium. Il s'agit donc de remplacer le silicium (groupe IV) par un atome du groupe III (B par exemple).

L'électron manquant a un état atomique d'énergie E_a juste supérieure à la bande de valence E_v . Maintenant une excitation thermique permet facilement d'ioniser cet atome et de générer un trou dans la bande de valence. Le saut énergétique à effectuer est bien inférieur au gap, donc ce processus d'ionisation est très efficace. Il n'y a pas de génération d'électron libre dans la bande de conduction. Par contre une charge négative fixe, correspondant à la charge de l'électron capturé, apparaît. Le matériel reste neutre. Il faudra par la suite toujours considérer les atomes ionisés dans le calcul des charges dans un semi-conducteur.

Tableau périodique des éléments

The periodic table is color-coded by groups:

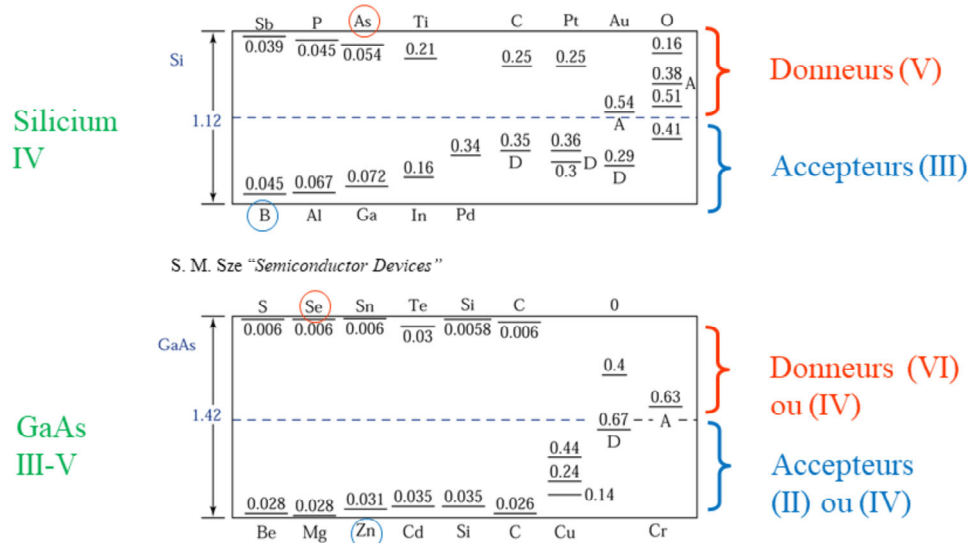
- alkali metals (light orange)
- alkaline earth metals (orange)
- transition metals (purple)
- other metals (light purple)
- other nonmetals (red)
- halogens (green)
- noble gases (light blue)
- lanthanides (yellow)
- actinides (light blue)

The periodic table shows elements from Hydrogen (H) to Oganesson (Og). The groups are numbered 1 through 18, and the periods are numbered 1 through 7. Lanthanides and actinides are shown as separate rows at the bottom.

Encyclopaedia Britannica, Inc.

Le tableau périodique des éléments permet de déterminer quels atomes peuvent servir de dopants (donneurs ou accepteurs) pour un semi-conducteur.

Il ne donne par contre pas l'énergie d'ionisation de ces dopants.



Les graphiques ci-dessus permettent de choisir les dopants et de connaître leur énergie d'ionisation, par rapport à la bande de valence ou de conduction. Ils sont à mettre en relation avec le tableau périodique des éléments de la page précédente.

Pour le silicium (groupe IV), les accepteurs traditionnels sont du groupe III. Les donneurs sont du groupe V.

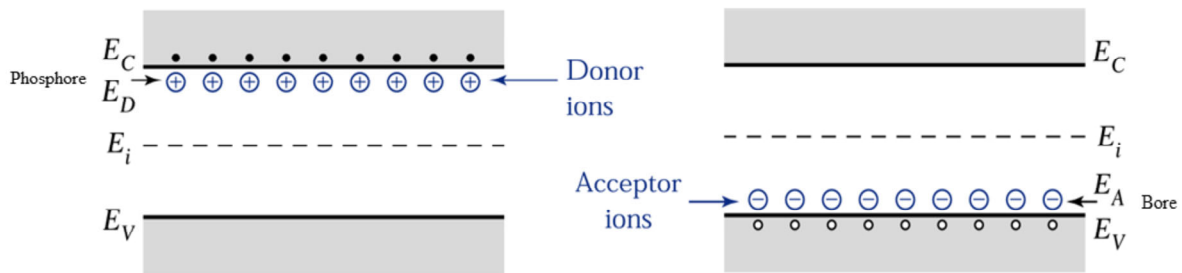
Dans le GaAs, semi-conducteur composé du groupe III et V, les accepteurs peuvent soit avoir un électron en moins que le Ga ou que le As, suivant quels atomes ils remplacent dans le cristal. Les accepteurs remplaçant le Ga sont du groupe II, ceux remplaçant le As sont du groupe IV. Idem pour les donneurs, ceux remplaçant le Ga sont du groupe IV, ceux remplaçant le As du groupe VI.

Remarque: Le silicium ou le carbone sont soit accepteurs (à la place du As) soit donneurs (à la place du Ga).

A température ambiante:
Ionisation complète

Type n

Type p



S. M. Sze "Semiconductor Devices"

Le schéma de bande, développé pour les semi-conducteurs intrinsèques, doit maintenant être complété pour tenir compte des dopants.

Les donneurs sont des niveaux juste sous la bande de conduction. Non-ionisés, ils contiennent un électron mais leur charge totale est nulle car le noyau a une charge positive en trop. Après ionisation, ils libèrent un électron dans la bande de conduction. On parle de semi-conducteur dopé n. Le donneur lui-même est une charge positive fixe après ionisation.

Les accepteurs sont des niveaux juste dessus la bande de valence. Non-ionisés, ils contiennent un trou mais leur charge totale est nulle car le noyau a une charge positive manquante. Après ionisation, ils capturent un électron et libèrent ainsi un trou dans la bande de valence. On parle de semi-conducteur dopé p. L'accepteur lui-même est une charge négative fixe après ionisation.



Probabilité pour un donneur d'avoir un électron:

$$F_D = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} e^{(E_D - E_F)/kT}}$$

Nombre de donneurs ionisés:
(N_D = densité d'atome donneurs)

$$N_D^+ = N_D (1 - F_D)$$

Probabilité pour un accepteur d'avoir un trou:

$$F_A = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} e^{(E_F - E_A)/kT}}$$

Nombre d'accepteurs ionisés:
(N_A = densité d'atome accepteurs)

$$N_A^- = N_A (1 - F_A)$$

Comme dans les semi-conducteurs intrinsèques, nous devons déterminer la densité d'états et le taux d'occupation pour les états donneurs et accepteurs afin de déterminer la densité d'atomes dopants ionisés.

La densité d'état est simple à calculer. Elle correspond au nombre d'atomes dopants N_A ou N_D implantés dans le cristal.

Le taux d'occupation est donné par les équation ci-dessus pour F_D et F_A . Elles sont une adaptation de la distribution de Fermi-Dirac. Elles permettent d'exprimer la densité de dopants ionisés en multipliant la densité d'atomes dopants implantés par $(1-F_D)$ respectivement $(1-F_A)$.

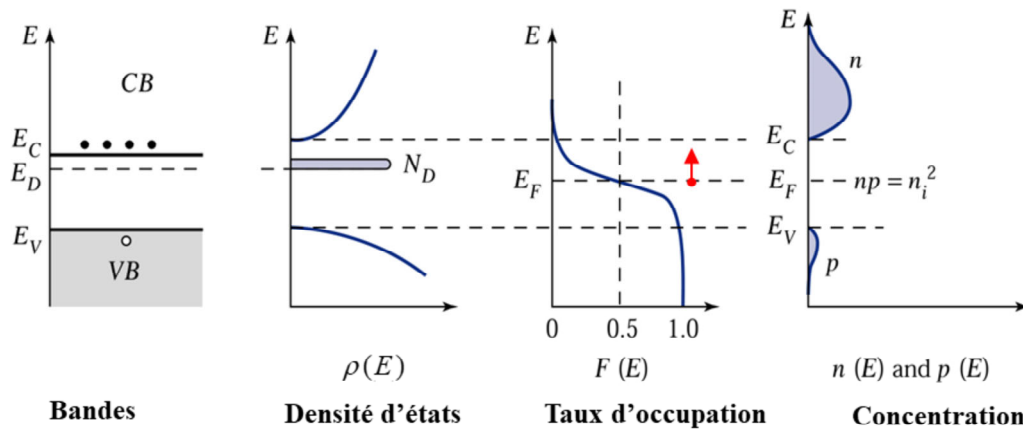
Remarques:

- 1) Ces équations ne servent que dans le phénomène de « freeze-out » dans les semi-conducteurs à basse température (voir ci-après). À température ambiante et à haute température la ionisation est complète et nous pouvons approximer:

$$N_D^+ \cong N_D$$

$$N_A^- \cong N_A$$

- 2) La probabilité de Fermi-Dirac pour les dopants tient compte de la dégénérescence. Chaque donneur peut libérer un seul électron mais de deux spins différents (dégénérescence de 2, ce qui explique le facteur $\frac{1}{2}$). Chaque accepteur peut prendre un seul électron mais de deux spins différents et sur deux bandes différentes (heavy hole et light hole). La dégénérescence est de 4, ce qui explique le facteur $\frac{1}{4}$.



$$\text{Concentration} = 2 \cdot \int \rho(E) \cdot F(E) dE$$

↑
Spin

S. M. Sze "Semiconductor Devices"

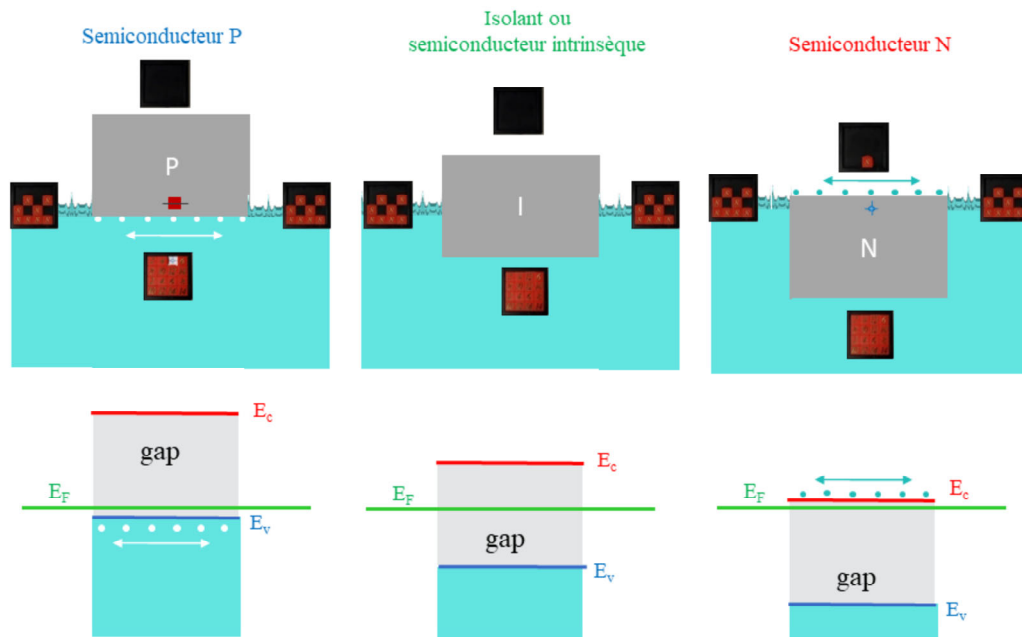
Nous allons décrire le calcul des concentrations de porteurs libres n et p dans un semi-conducteur extrinsèque (dans lequel le dopage est un facteur dominant).

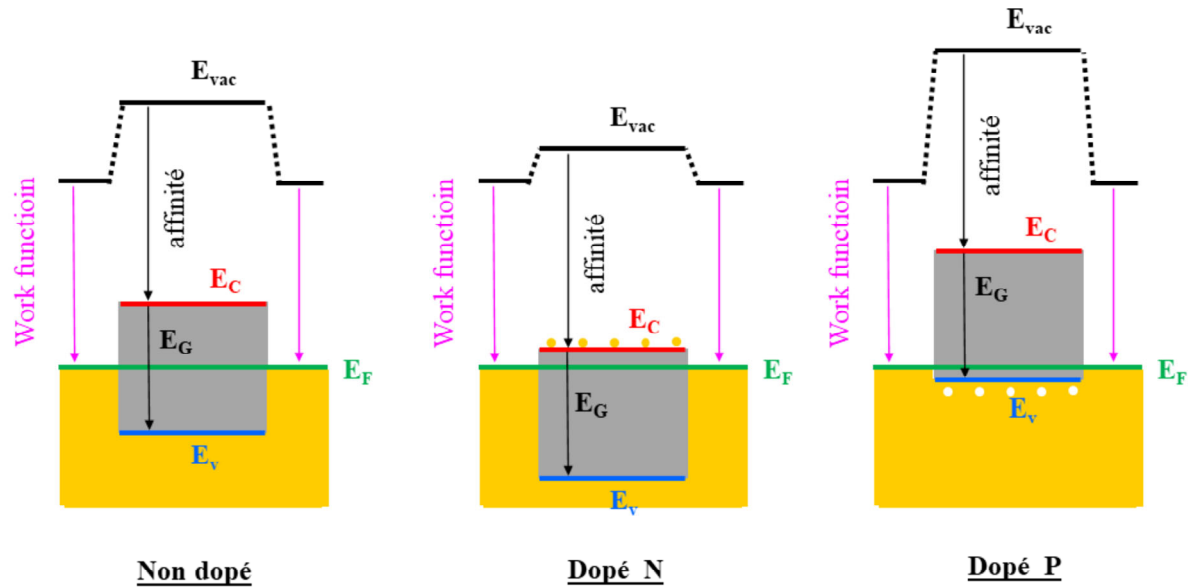
Le principe de calcul est exactement le même que celui dans un semi-conducteur intrinsèque.

La densité d'états $\rho(E)$ correspond au nombre d'états électroniques (de fonction d'onde) possibles par volume de cristal et par intervalle d'énergie dE . Dans les bandes de valence et de conduction, elle est inchangée par rapport au calcul pour les semi-conducteurs intrinsèques. Seul des niveaux d'énergie sont introduits dans le gap (aux énergies E_D et E_A) pour décrire les dopants. En multipliant cette densité $\rho(E)$ par le taux d'occupation $F(E)$ et par le nombre de spins possibles (2 pour l'électron), on obtient la concentration de porteurs dans l'intervalle d'énergie dE .

La concentration n d'électrons libres est obtenue en intégrant le tout sur la bande de conduction. La concentration p de trous est obtenue de façon similaire mais en intégrant sur la bande de valence.

Si comme sur les figures ci-dessus, la structure est dopée n , nous verrons que l'énergie de Fermi se rapproche de la bande de conduction. Si elle est dopée p , l'énergie de Fermi se rapprocherait de la bande de valence.





$$n = 2 \cdot \int_{E_c}^{E_{c,max}} \rho_c(E) \cdot F_c(E) \cdot dE$$

$$p = 2 \cdot \int_{E_{v,min}}^{E_v} \rho_v(E) \cdot F_v(E) \cdot dE$$

!!! Il n'y a formellement pas de différence
entre le cas extrinsèque et le cas intrinsèque !!!

Le dopage n'influence que la position de l'énergie de Fermi E_F .

Ce niveau est déterminé en considérant la condition de neutralité

Le dopage influence uniquement la position du niveau de Fermi E_F . Si le matériel est dopé n, le niveau E_F s'approche de la bande de conduction. Si le matériel est dopé p, le niveau E_F s'approche de la bande de valence.

Les intégrales à résoudre ou à approximer pour calculer les concentrations de porteurs libres n et p dans le cas extrinsèque (dopé) sont rigoureusement identiques au cas intrinsèque (non dopé).

$$n = 2 \cdot \int_{E_c}^{E_{c,\max}} \rho_c(E) \cdot F_c(E) \cdot dE$$

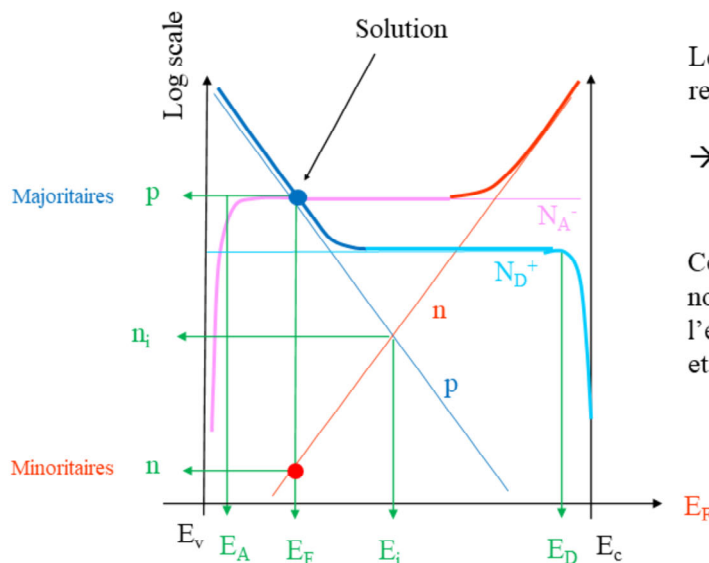
$$p = 2 \cdot \int_{E_{v,\min}}^{E_v} \rho_v(E) \cdot F_v(E) \cdot dE$$

$$n \cong N_c \cdot e^{-(E_c - E_F)/kT}$$

$$p \cong N_v \cdot e^{-(E_F - E_v)/kT}$$

$$n \cdot p = N_c N_v e^{-E_g/kT} \equiv n_i^2$$

Loi d'action de masse



Le semi-conducteur dopé
reste neutre:

$$\rightarrow n + N_A^- = p + N_D^+$$

Cette condition de neutralité
nous donne la valeur de:
l'énergie de Fermi E_F
et des concentrations n et p

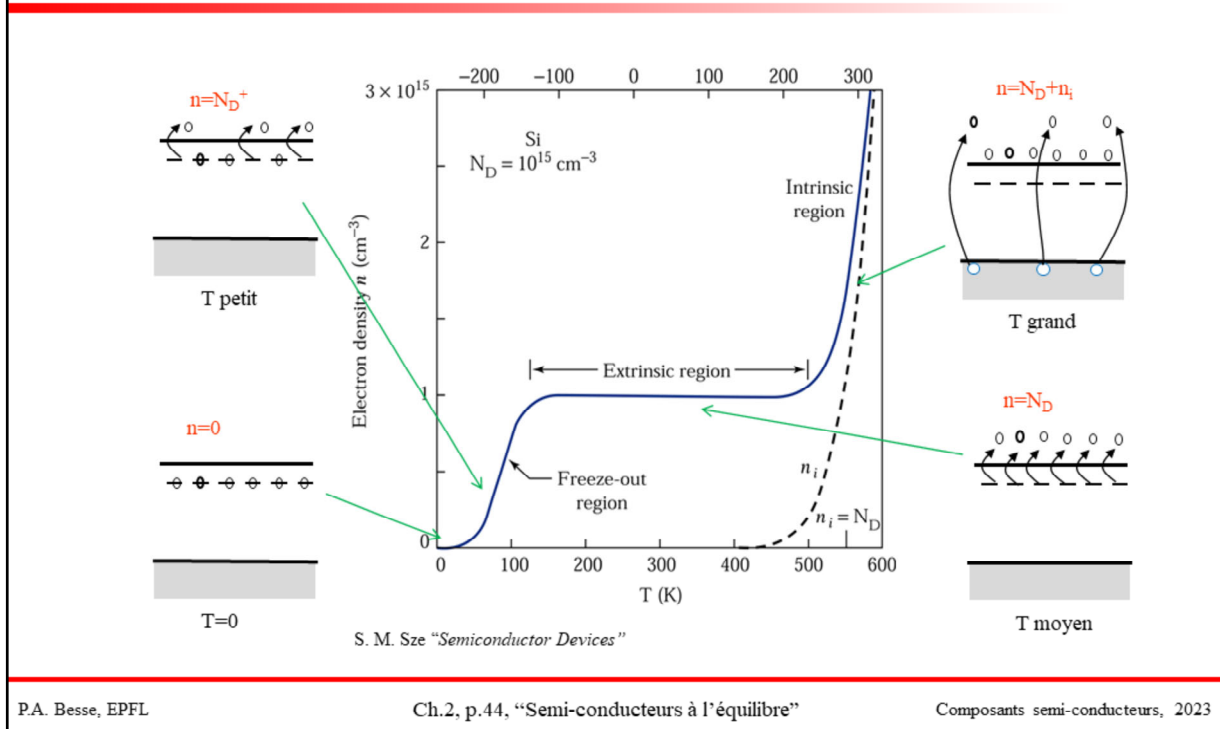
Nous avons vu que le dopage n'influence que la position du niveau de Fermi. Nous devons donc maintenant calculer cette valeur en tenant compte du dopage. Pour cela le raisonnement est le même que dans le cas intrinsèque. Nous considérons que le matériel reste neutre. Les noyaux des atomes dopants ionisés représentent des charges fixes que nous devons introduire dans la condition de neutralité. La somme des électrons libres n et des accepteurs ionisés forme la charge négative. Elle doit être égale à la charge positive formée par les trous p et les donneurs ionisés.

Le « graphique de Shockley » permet de résoudre cette condition. Il représente les différentes concentrations dans une échelle logarithmique en fonction de l'énergie de Fermi. Les charges négatives sont en rouge/rose, les charges positives en bleu. L'intersection des deux courbes donne la solution pour l'énergie de Fermi et pour les concentrations n et p. Dans le cas du graphique ci-dessus, un dopage p est représenté ($N_A > N_D$). Le niveau de Fermi est plus proche de la bande de valence.

Si $E_c - E_F > 3kT$ l'approximation de Boltzmann peut remplacer la distribution de Fermi-Dirac et la courbe n est une droite. De même si $E_F - E_v > 3kT$ la courbe p est une droite.

Si $E_D - E_F > 3kT$ les donneurs sont tous ionisés. N_D^+ est constant.

Si $E_F - E_A > 3kT$ les accepteurs sont tous ionisés. N_A^- est constant.



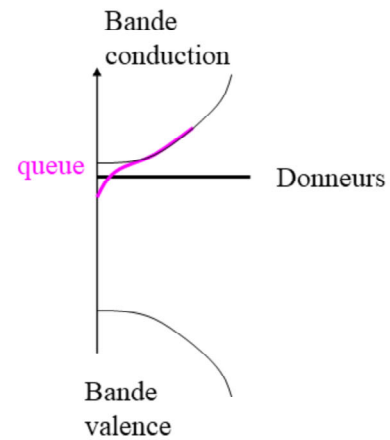
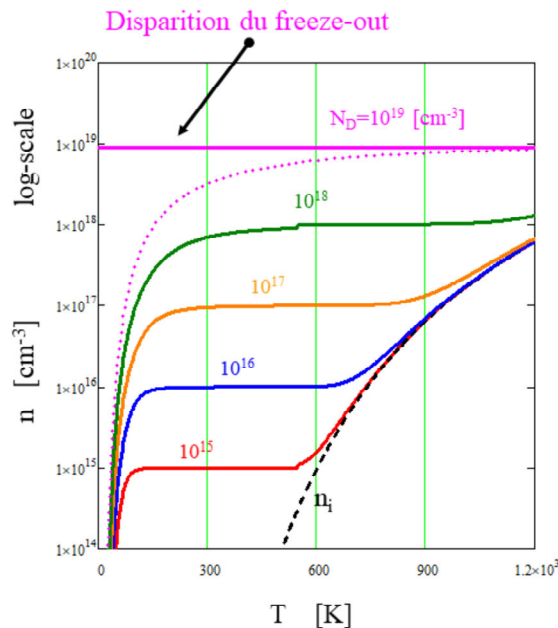
P.A. Besse, EPFL

Ch.2, p.44, "Semi-conducteurs à l'équilibre"

Composants semi-conducteurs, 2023

La variation des concentrations de porteurs libres n et p en fonction de la température peut être comprise par l'analyse des effets physiques dominants. Par exemple, analysons le cas d'un silicium dopé n .

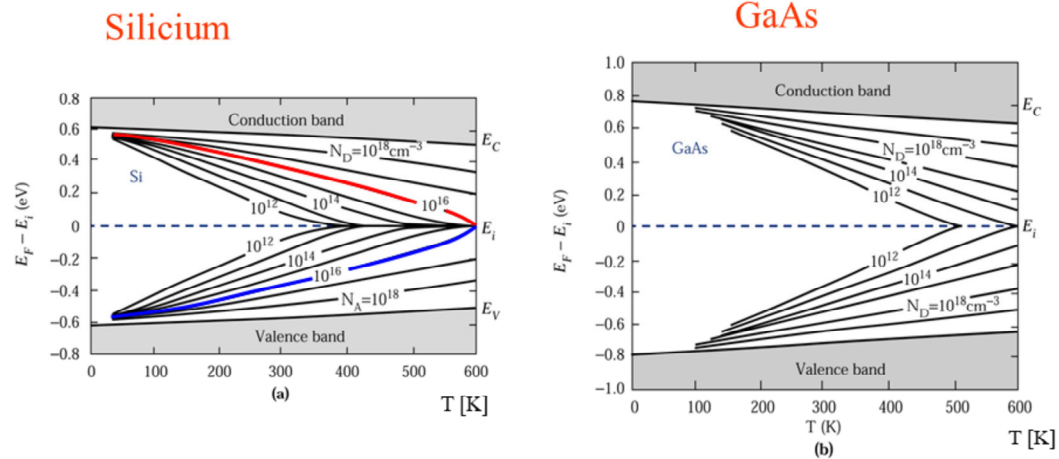
- À température nulle: Aucun donneur n'est ionisé. La bande de conduction est vide. La concentration n tend vers zéro.
- À basse température: Certains donneurs commencent à être ionisés. La concentration n s'élève. Au dessus d'une certaine température (< 150 °K) tous les donneurs sont ionisés. Cette zone s'appelle la région de « freeze-out », en refroidissant fortement sous la température ambiante les électrons libres gèlent et sont capturés par les donneurs.
- Dans une vaste zone de températures autour de la température ambiante: Tous les donneurs sont ionisés. La concentration n ne varie plus ! C'est dans cette « région extrinsèque » que la plupart des composants électroniques travaillent. Les concentrations de porteurs majoritaires sont constantes, cela permet le développement d'une électronique peu dépendante de la température.
- À températures élevées: Les donneurs sont tous ionisés, mais en plus la génération de bande de valence à bande de conduction devient possible et même dominante. La concentration n augmente à nouveau. Le comportement du semi-conducteur devient intrinsèque.



A très fort dopage ($>10^{19} \text{ cm}^{-3}$),
les donneurs se touchent et
forment une queue de bande

Lorsque le dopage est très élevé, la structure de bande se déforme. Comme esquissé sur la figure de droite, la bande de conduction se prolonge par « une queue de bande » formée par les états dopants en grand nombre. L'énergie nécessaire pour ioniser les dopants devient donc nulle, car ils sont maintenant dans la bande elle-même. La zone de freeze-out disparaît et la concentration de porteurs reste constante même à très basse température.

Les composants fortement dopés peuvent donc fonctionner même proche du zéro absolu. Les applications sont par exemple dans le domaine spatial. Les transistors MOS peuvent contenir exclusivement des zones à très fort dopage et sont donc tout à fait compatibles avec ces applications.



S. M. Sze "Semiconductor Devices"

Les graphiques ci-dessus donnent l'énergie de Fermi en fonction de la température et du dopage. Ces courbes sont les solutions de la condition de neutralité (et du graphique de Shockley).

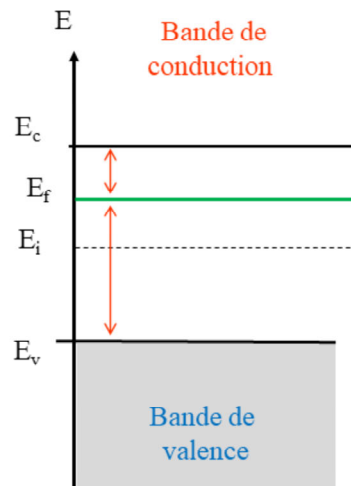
À basse température, les dopants ne sont plus ionisés (« freeze-out effect »). L'énergie de Fermi est située entre l'énergie des dopants et la bande. Plus la température augmente et plus l'énergie de Fermi s'approche du milieu du gap. Le semi-conducteur tend vers un comportement intrinsèque où la génération thermique d'électron/trou de la bande de valence à la bande de conduction est dominante. À même température, plus le dopage est élevé et plus l'énergie de Fermi est proche de la bande correspondante.

Remarque: En augmentant la température le gap diminue légèrement. Les figures en tiennent compte.

Par référence aux
densités effectives d'états

$$n \cong N_c \cdot e^{-(E_c - E_F)/kT}$$

$$p \cong N_v \cdot e^{-(E_F - E_v)/kT}$$



L'approximation de Boltzmann, introduite dans les intégrales, permet de résoudre analytiquement les concentrations n et p. Nous obtenons les expressions de gauche ci-dessus. Elles relient n et p aux densités effectives d'états N_c et N_v et à la différence entre l'énergie de Fermi et le bord des bandes.

Comme pour le cas intrinsèque, le problème se résume à un système à deux états. Les N_c états à disposition dans la bande de conduction sont peuplés par les électrons libres selon la distribution de Boltzmann (fonction exponentielle décroissante dépendante de la différence entre E_c et E_F). De même, les N_v états à disposition dans la bande de valence sont peuplés par les trous selon la distribution de Boltzmann (fonction exponentielle décroissante dépendante de la différence entre E_F et E_v).

Cette formulation indique que la concentration n d'électrons libres augmente et tend vers sa valeur maximale N_c lorsque E_F s'approche de E_c . De même, la concentration p de trous augmente et tend vers sa valeur maximale N_v lorsque E_F s'approche de E_v .

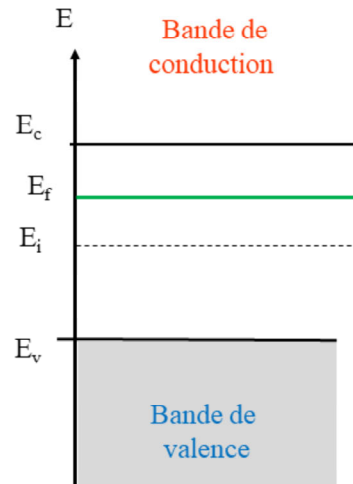
Par référence aux
densités effectives d'états

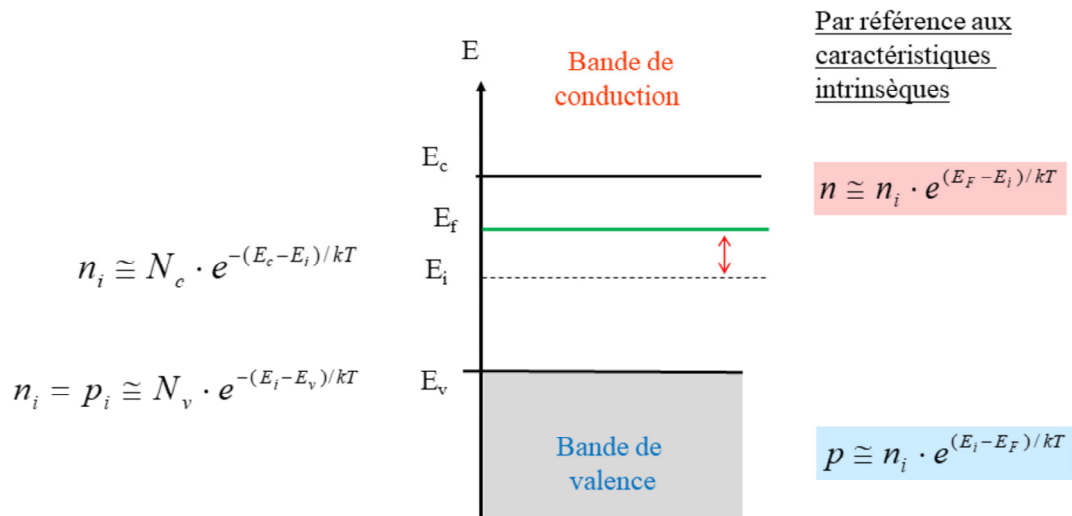
$$n \cong N_c \cdot e^{-(E_c - E_F)/kT}$$

$$n_i \cong N_c \cdot e^{-(E_c - E_i)/kT}$$

$$n_i = p_i \cong N_v \cdot e^{-(E_i - E_v)/kT}$$

$$p \cong N_v \cdot e^{-(E_F - E_v)/kT}$$





Il est souvent préférable d'exprimer les concentrations n et p en fonction des paramètres intrinsèques du matériel n_i et E_i . (Par exemple pour le silicium à température ambiante $n_i=10^{10}\text{cm}^{-3}$ et E_i est au milieu du gap). Les équations de droite sont équivalentes à celles de la page précédente. Pour s'en convaincre il suffit d'introduire les expressions pour n_i (à gauche) dans les équations de droite !

Cette deuxième formulation se réfère aux valeurs n_i et E_i sans dopage (intrinsèque). Lorsque E_F est supérieur à E_i , la concentration n d'électrons libres augmente exponentiellement à partir de n_i . La concentration p de trous diminue pour maintenir le produit n·p constant (loi d'action de masse $n \cdot p = n_i^2$).

De même, lorsque E_F est inférieur à E_i , la concentration p augmente exponentiellement à partir de n_i . La concentration n diminue pour maintenir le produit n·p constant.

Les expressions de droite peuvent être réécrites pour exprimer l'énergie de Fermi en fonction des paramètres intrinsèques et des concentrations n et p. Elles deviennent:

$$E_F = E_i + kT \ln\left(\frac{n}{n_i}\right) \quad E_F = E_i - kT \ln\left(\frac{p}{n_i}\right)$$

$$n = 2 \cdot \int_{E_c}^{E_{c,\max}} \rho_c(E) \cdot F_c(E) \cdot dE$$

$$p = 2 \cdot \int_{E_{v,\min}}^{E_v} \rho_v(E) \cdot F_v(E) \cdot dE$$

$$n \cong N_c \cdot e^{-(E_c - E_F)/kT}$$

$$p \cong N_v \cdot e^{-(E_F - E_v)/kT}$$

$$n \cong n_i \cdot e^{(E_F - E_i)/kT}$$

$$p \cong n_i \cdot e^{(E_i - E_F)/kT}$$

$$n \cdot p = N_c N_v e^{-E_g/kT} \equiv n_i^2$$

Loi d'action de masse

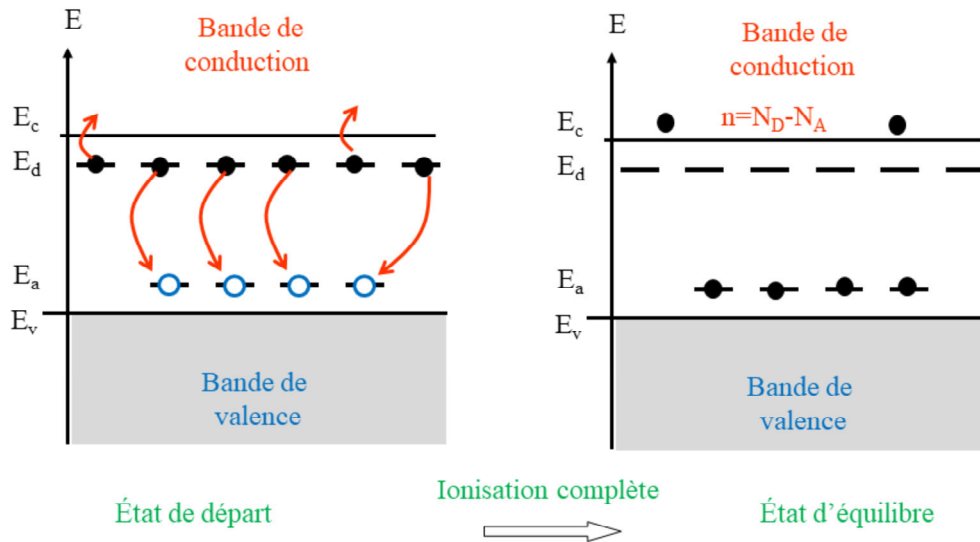
De façon générale, le calcul des concentrations utilisent les intégrales de base. Elles ne sont pas solvables analytiquement.

Dans une large majorité de cas pratiques deux approximations peuvent être introduites:

- 1) Le dopage est suffisamment faible pour que le semi-conducteur reste non-dégénéré. L'énergie de Fermi n'est pas trop proche des bandes de conduction ou de valence. Dans ce cas (comme pour les semi-conducteurs intrinsèques) l'approximation de Boltzmann peut s'appliquer. Elle permet de résoudre les intégrales de façon analytique. Les solutions sont identiques au cas intrinsèque. La loi d'action de masse s'applique toujours. De plus, il est parfois pratique d'exprimer n et p en fonction des valeurs intrinsèques n_i et E_i et non plus en fonction de N_c et N_v .

Remarque: Par rapport au cas intrinsèque, l'énergie de Fermi doit être modifiée !

- 2) Dans une large zone de températures autour de la température ambiante, la ionisation des dopants est complète.



Il arrive parfois que deux zones d'implantation se chevauchent. Deux sortes de dopants sont donc présents dans le semi-conducteur (graphique de gauche). Il y a alors compensation de dopage. Par exemple, les accepteurs minoritaires capturent les électrons libérés par les donneurs. Seuls les donneurs en surnombre fournissent des électrons à la bande de conduction. Il en résulte n dopage effectif donné par $N_D - N_A$.



En supposant « Boltzmann » et « ionisation complète »:

Type intrinsèque:

$$n = p = n_i = \sqrt{N_c N_v} e^{-E_g / 2kT}$$

$$E_i = (E_c + E_v) / 2 + kT \ln \sqrt{N_v / N_c}$$

Silicium, $T = 300K$

$$\rightarrow n_i \cong 10^{10} \text{ cm}^{-3}$$

$$\rightarrow E_i \cong \frac{E_c + E_v}{2}$$

Type n:

$$N_D \gg N_A$$

$$n = N_D = n_i \cdot e^{(E_F - E_i) / kT}$$

$$p = n_i^2 / N_D$$

Loi d'action de masse
pour les minoritaires

Type p:

$$N_A \gg N_D$$

$$p = N_A = n_i \cdot e^{(E_i - E_F) / kT}$$

$$n = n_i^2 / N_A$$

Ce tableau résume le calcul des concentrations de porteurs libres dans les semi-conducteurs non-dégénérés (approximation de Boltzmann valable) à température ambiante (les dopants sont tous ionisés).

Les valeurs n_i et E_i sont des paramètres intrinsèques au matériel considéré. Ils correspondent respectivement à la concentration de porteurs libres n et p et à l'énergie de Fermi dans le matériel non-dopé.

Les majoritaires sont donnés par la concentration de dopants N_D ou N_A respectivement.

Les minoritaires sont donnés par la loi d'action de masse.

L'énergie de Fermi, exprimée à partir de E_i , est donnée par:
 $kT \cdot \ln(N_{D,A} / n_i)$



En supposant « Boltzmann » et « ionisation complète »:

<p>Type intrinsèque:</p> $n = p = n_i = \sqrt{N_c N_v} e^{-E_g / 2kT}$ $E_i = (E_c + E_v) / 2 + kT \ln \sqrt{N_v / N_c}$	<p>Silicium, $T = 300K$ $\rightarrow n_i \cong 10^{10} cm^{-3}$ $\rightarrow E_i \cong \frac{E_c + E_v}{2}$</p>
<p>Type n:</p> $n = N_D = n_i \cdot e^{(E_F - E_i) / kT}$ $E_F = E_i + kT \ln \left(\frac{N_D}{n_i} \right)$ <p>$N_D \gg N_A$</p>	<p>$p = n_i^2 / N_D$</p> <p>Loi d'action de masse pour les minoritaires</p>
<p>Type p:</p> $p = N_A = n_i \cdot e^{(E_i - E_F) / kT}$ $E_F = E_i - kT \ln \left(\frac{N_A}{n_i} \right)$ <p>$N_A \gg N_D$</p>	<p>$n = n_i^2 / N_A$</p>

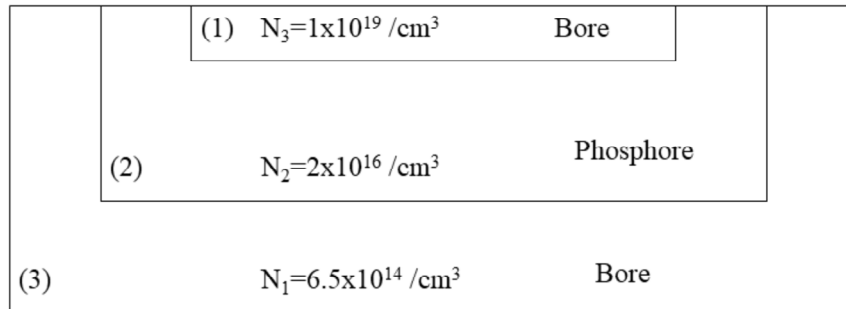
Ce tableau résume le calcul des concentrations de porteurs libres dans les semi-conducteurs non-dégénérés (approximation de Boltzmann valable) à température ambiante (les dopants sont tous ionisés).

Les valeurs n_i et E_i sont des paramètres intrinsèques au matériel considéré. Ils correspondent respectivement à la concentration de porteurs libres n et p et à l'énergie de Fermi dans le matériel non-dopé.

Les majoritaires sont donnés par la concentration de dopants N_D ou N_A respectivement.

Les minoritaires sont donnés par la loi d'action de masse.

L'énergie de Fermi, exprimée à partir de E_i , est donnée par:
 $kT \cdot \ln(N_{D,A} / n_i)$



La figure ci-dessus montre le profil schématisé de dopage au centre d'une photodiode. Ce profil est modélisé par trois zones à dopage constant, dopées respectivement avec du bore pour le substrat (3), du phosphore pour (2) et du bore pour (1). À température ambiante (300 K) et en supposant la ionisation complète des impuretés, trouvez en utilisant l'approximation de Boltzmann la concentration d'électrons et de trous dans les trois zones.



- 1) *Trouvez le niveau de Fermi d'un silicium dopé avec 10^{16} cm^{-3} atomes de phosphore à 300 K.*
- 2) *Le même matériau est chauffé à 600 K.
Calculez la concentration de porteurs intrinsèques à cette température.
Quel est maintenant le niveau de Fermi ?
Supposez le bangap et les masses effectives constants en température .*
- 3) *Si l'échantillon est refroidi à la température de l'azote liquide (77 K),
quelle hypothèse faut-il reconsidérer ?
(Pour information, l'énergie d'ionisation du phosphore est $E_D = E_C - 0.045 \text{ eV}$).*

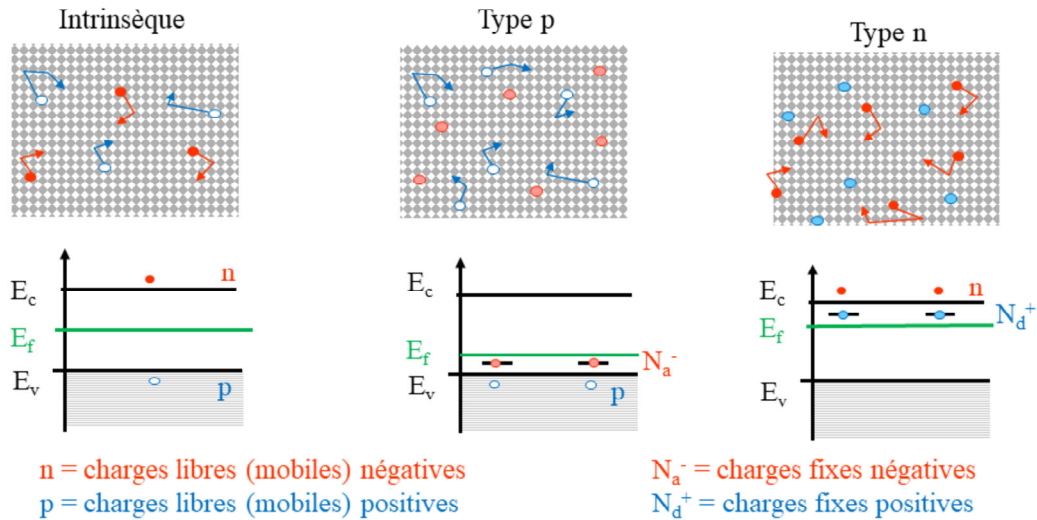
COMPOSANTS SEMI-CONDUCTEURS

III) Propriétés de transport

P.A. Besse

EPFL

À l'équilibre, dans un milieu homogène,
la condition de neutralité ($n + N_a^- = p + N_d^+$) détermine l'énergie de Fermi E_f



Ceci est un résumé ciblé du chapitre 2. Le niveau de Fermi est déterminé par la condition de neutralité dans un milieu homogène à l'équilibre.

Dans un semi-conducteur intrinsèque (non-dopé), les électrons libres et les trous sont en même concentration. Les deux sortes de charges n et p sont mobiles. L'énergie de Fermi est au milieu du gap.

Dans un semi-conducteur de type p, les trous sont les charges libres majoritaires. Les atomes accepteurs ionisés sont des charges fixes négatives, réparties de façon homogène dans tout le composant. La structure est neutre électriquement. L'énergie de Fermi s'est rapprochée de la bande de valence.

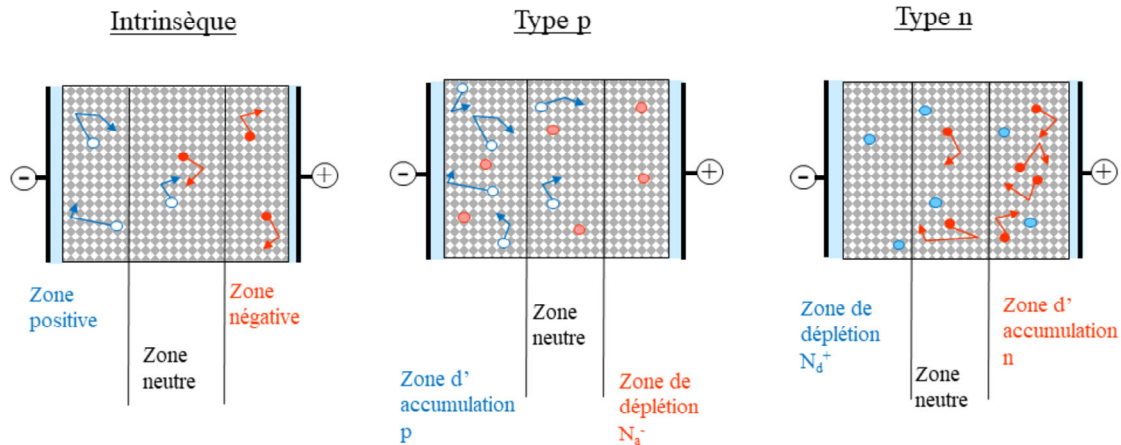
Dans un semi-conducteur de type n, les électrons sont les charges libres majoritaires. Les atomes donneurs ionisés sont des charges fixes positives, réparties de façon homogène dans tout le composant. La structure est neutre électriquement. L'énergie de Fermi s'est rapprochée de la bande de conduction.

Influences extérieures



Zones de charges

Ex: semiconducteur entre deux plaques chargées (champ électrique externe):



Une expérience simple permet d'illustrer les phénomènes décrits dans ce chapitre. Plaçons les trois semi-conducteurs homogènes de la page précédente dans le champ électrique produit entre les plaques d'un condensateur chargé. Sous l'effet du champ électrique les porteurs libres seront concentrés dans certaines régions, ils seront attirés ou repoussés suivant leur charge. Par contre les charges fixes, composées par les atomes dopants ionisés ne bougeront pas. Il en résulte l'apparition de zones de charges. On parle de zones d'accumulation là où les porteurs libres sont accumulés, leur charge totale est alors dominante. Dans les zones de déplétion, les porteurs libres sont partis, la charge des atomes dopants ionisés est alors dominante.

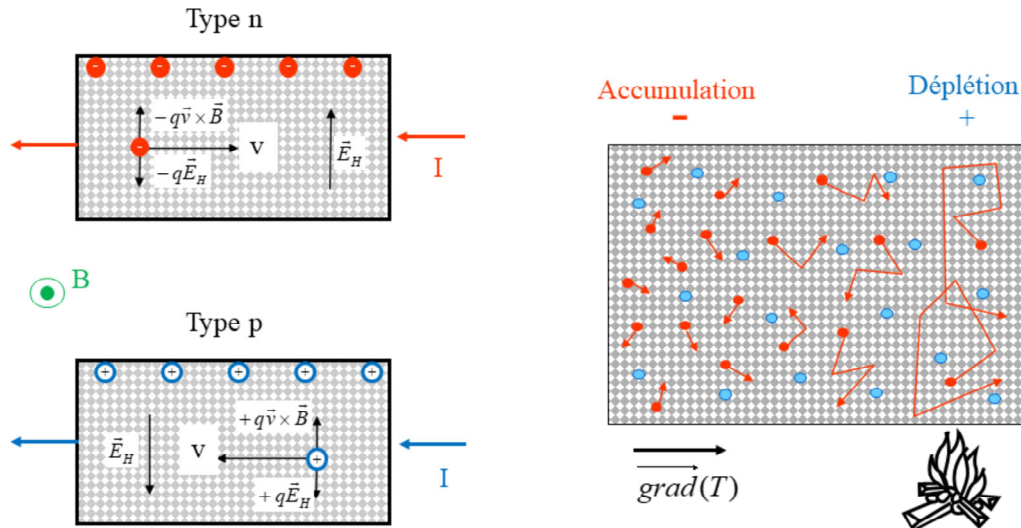
L'accumulation des charges mobiles est compensée par deux autres effets: premièrement les zones de charges génèrent un champ électrique opposé au champ du condensateur, dans la zone centrale neutre le champ total est nul. Deuxièmement, la diffusion tend à homogénéiser les concentrations de porteurs libres. Un équilibre se met en place.

Le but de ce chapitre est de décrire physiquement et mathématiquement les processus impliqués dans l'expérience ci-dessus.



Ex: champ magnétique (capteur Hall)

Ex: température (semicond. type n)

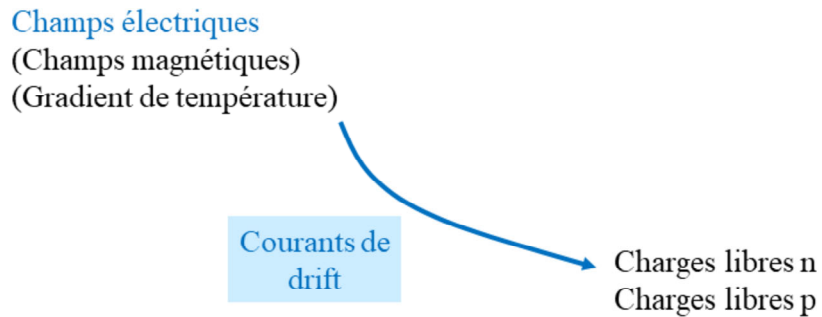


Dans ce cours nous analysons les concentrations de charges, les courants et les champs électriques dans les semi-conducteurs. Deux sortes de courants vont être utilisés: les courants de drift produits par les champs électriques et les courants de diffusion provoqués par les gradients de concentration de porteurs libres.

Comme esquissé ci-dessus, il existe d'autres sources de courants dans les semi-conducteurs:

- 1) Un champ magnétique B appliqué sur une plaque conductrice (ou semi-conductrice) provoque une concentration de porteurs sur les bords. Ils sont responsables de l'apparition d'une tension de Hall.
- 2) Un gradient de température accumule les porteurs libres dans les régions froides. En effet, les charges libres à température plus élevée bougent plus par mouvement brownien. Ils occupent donc une plus grande place et leur densité est plus faible. Dans certains cas, une variation de la mobilité en température peut compenser cet effet, voire même provoquer une accumulation de porteurs libres vers les zones chaudes. Ces effets sont utilisés dans les thermopiles pour détecter la chaleur.

Nous n'utiliserons pas ces courants pour ce cours. Ils peuvent cependant être intéressants pour certains composants: capteurs Hall, magnéto-transistors, ...



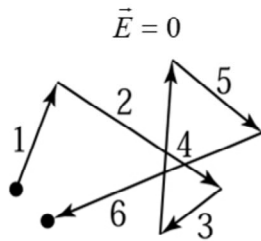
Le premier courant que nous allons décrire est provoqué par les champs électriques sur les porteurs libres n et p.

Le champ électrique provoque, sur une particule de charge q , une force:

$$\vec{F} = q \cdot \vec{E}$$

Les électrons libres et les trous dans le semi-conducteur subissent cette force et ils sont accélérés. Ils subissent aussi des collisions qui ont tendance à les freiner. Nous nous intéressons à déterminer la vitesse moyenne de déplacement des charges libres sous l'influence du champ électrique.

Mouvement brownien



$$\vec{E} = 0$$

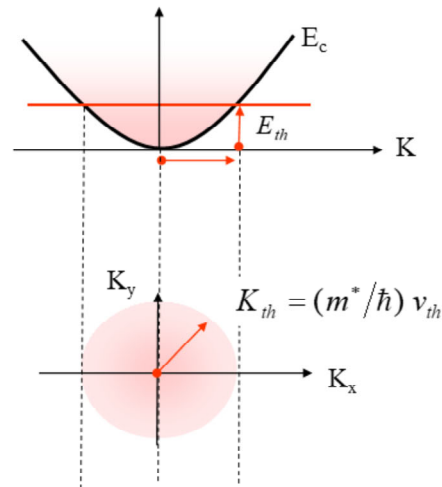
S. M. Sze
"Semiconductor
Devices"

$$E_{th} = \frac{1}{2} m^* v_{th}^2 = \frac{3}{2} k T$$

Ex.: T=300K, électrons dans Si:
→ $v_{th} = 2.10^7$ cm/s = 200 km/s

Temps moyen de parcours libre = temps entre collisions = τ_c

Parcours libre moyen = distance entre collisions = $l_c = v_{th} \cdot \tau_c$



$\approx [0.1 - 1] ps$

$\approx [20 - 200] nm$

Voyons d'abord comment se comporte une charge libre sans champ électrique.

L'excitation thermique provoque des mouvements aléatoires des charges libres (mouvement brownien). À la suite de collisions, la particule change de direction et de vitesse. À l'équilibre thermique, l'énergie cinétique de la particule doit être égale à l'énergie thermique d'un système à 3 dimensions ($3 \cdot kT/2$). Entre deux collisions une vitesse thermique moyenne v_{th} assez élevée est atteinte. Dans la structure de bande, les porteurs forment un nuage isotrope et centré sur le minimum. Son rayon est directement relié à la vitesse v_{th} .

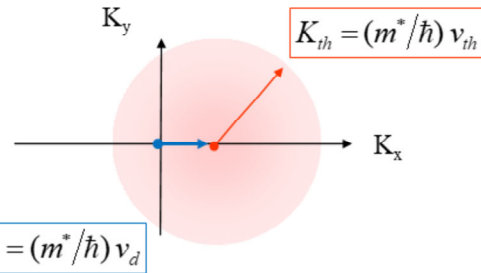
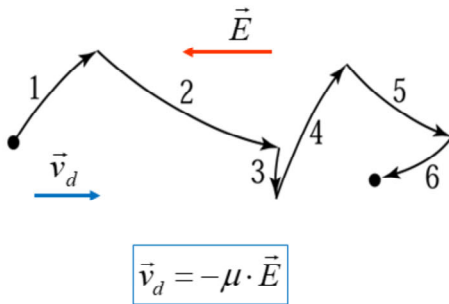
Le temps séparant deux collisions est typiquement de 1ps. L'ordre de grandeur de la distance parcourue entre deux collisions est de 20-200 nm. Lors de la traversée d'un dispositif électronique standard les porteurs subissent donc un grand nombre de collisions. Il est donc justifié pour un tel composant de considérer les déplacements moyens.

Sans champ électrique le déplacement moyen est nul, il n'y a donc pas de courant.

Remarque: Les composants extrêmement miniaturisés peuvent éviter les collisions, on parle alors de « porteurs balistiques ».

Champ électrique \rightarrow vitesse de drift v_d (vitesse moyenne du nuage de porteurs)

S. M. Sze "Semiconductor Devices"

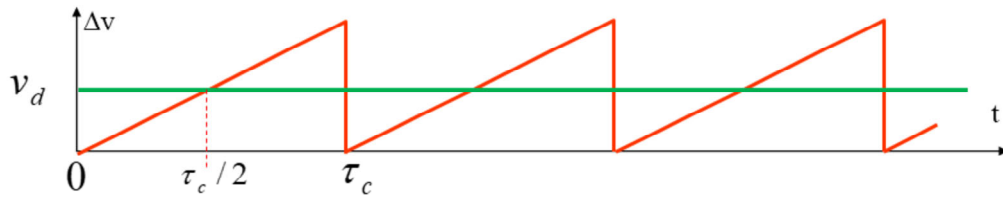


Ex.: $E=10^4 \text{ V/cm}$, électron dans Si:
 $\rightarrow v_d = 6.10^6 \text{ cm/s} < v_{th}$

En appliquant un champ électrique sur le semi-conducteur, le mouvement thermique aléatoire des porteurs reçoit une composante systématique, qui en moyenne ne s'annule pas. Cette composante s'appelle la vitesse de drift.

La mobilité μ est définie comme la constante linéaire reliant, à faible champ électrique, la vitesse de drift v_d au champ électrique E . Elle reflète la facilité avec laquelle un porteur libre répond à la force électrique et bouge dans le cristal semi-conducteur. Plus le temps entre deux collisions est long, plus le porteur peut accélérer et augmenter sa vitesse. Il est donc intuitif de relier physiquement la mobilité et le temps moyen de parcours libre défini à la page précédente.

Dans le schéma de bande, le nuage de porteurs s'est déplacé sous l'effet du champ électrique. Il n'est plus centré sur le minimum de la bande. Il est instructif de comparer la vitesse de drift et la vitesse thermique. Dans la plupart des cas la vitesse de drift est nettement plus faible que la vitesse thermique. Le déplacement du nuage est faible par rapport à son rayon. En bonne approximation la distribution de Fermi-Dirac peut toujours s'appliquer.

Temps moyen de parcours libre = temps entre collisions = τ_c **Modèle:**

Sous l'effet d'une force F les porteurs augmentent de vitesse jusqu'au prochain choc.

La vitesse moyenne (vitesse de drift) v_d est:

Le déplacement de drift moyen l_{drift} est:

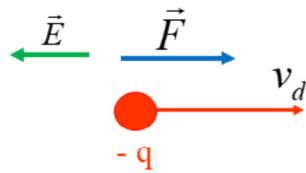
$$v_d = \left(\frac{F}{m^*} \right) \cdot \left(\frac{\tau_c}{2} \right)$$

$$l_{\text{drift}} = \frac{1}{2} \left(\frac{F}{m^*} \right) \tau_c^2 = v_d \cdot \tau_c$$

L'idée intuitive que la mobilité et le temps moyen de parcours libre sont reliés peut être calculée par un modèle simple.

Considérons qu'un porteur a une vitesse nulle après chaque collision et qu'il accélère ensuite de façon continue sous l'effet d'une force F pendant le temps τ_c . Sa vitesse suit la courbe en dents de scie représentée sur le graphique ci-dessus. La pente de chaque dent est l'accélération $a = F/m^*$.

La vitesse moyenne (vitesse de drift) est obtenue au temps $\tau_c/2$. La distance parcourue est $l_{\text{drift}} = \frac{1}{2} a \cdot \tau_c^2$.



$$\vec{F} = -q \cdot \vec{E}$$

$$\vec{v}_d = -\mu \cdot \vec{E} \quad \text{avec} \quad \mu \equiv \frac{q}{m^*} \frac{\tau_c}{2}$$

Pour électrons:

$$\vec{v}_{d,n} \equiv \vec{v}_n = -\mu_n \cdot \vec{E}$$

Pour trous:

$$\vec{v}_{d,p} \equiv \vec{v}_p = \mu_p \cdot \vec{E}$$

Mobilité

Le modèle de la page précédente avait permis d'exprimer la vitesse de drift par:

$$v_d = \left(\frac{F}{m^*} \right) \cdot \left(\frac{\tau_c}{2} \right)$$

La force électrique est $F = -q \cdot E$. Elle permet d'exprimer la mobilité en fonction du temps moyen de parcours libre.

En fonction de la sorte de porteurs (électrons libres ou trous) les expressions ci-dessus s'appliquent.

$$\vec{j}_n = -q n \cdot \vec{v}_n$$

$$\vec{j}_p = q p \cdot \vec{v}_p$$

Pour électrons:

$$\vec{j}_n = \sigma_n \cdot \vec{E}$$

Pour trous:

$$\vec{j}_p = \sigma_p \cdot \vec{E}$$

Conductivité

Conductivité: $\sigma_n = q n \mu_n = \frac{q^2 \tau_c}{2} n \frac{1}{m_e^*}$ $\sigma_p = q p \mu_p = \frac{q^2 \tau_c}{2} p \frac{1}{m_h^*}$

En considérant un seul porteur nous avons exprimé sa vitesse de drift (vitesse moyenne de déplacement) en fonction du champ électrique appliqué. Les semi-conducteurs contiennent des densités n et p de porteurs libres. La densité de courant est obtenue en multipliant la vitesse de drift par la densité de porteurs et par leur charge.

La conductivité des électrons libres et des trous relie directement les courants de drift J_n et J_p au champ électrique E appliqué. Cette grandeur est liée à la mobilité et donc au temps moyen de parcours libre.

Remarque: Dans tous les semi-conducteurs les deux courants de drift existent (celui des électrons libres et celui des trous). Souvent un des deux courants est dominant.

Conductivité:

anisotrope

isotrope

$$\sigma_n = \frac{q^2 \tau_c n}{2} \cdot 2 \begin{pmatrix} \frac{1}{m_l^*} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_t^*} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_t^*} \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} \frac{1}{m_t^*} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_l^*} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_t^*} \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} \frac{1}{m_t^*} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_t^*} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_l^*} \end{pmatrix} = \frac{q^2 \tau_c n}{2} \cdot 2 \left[\frac{1}{m_l^*} + \frac{1}{m_t^*} + \frac{1}{m_t^*} \right] \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Masse effective pour le conductivité:

$$\sigma_n = qn\mu \equiv \frac{q^2 \tau_c n}{2} \frac{1}{m_\sigma^*} \Rightarrow \frac{1}{m_\sigma^*} = \frac{1}{3} \left[\frac{1}{m_l^*} + \frac{2}{m_t^*} \right] \quad \text{Masse effective de conduction}$$

Pour le silicium dopé n, chacune des 6 vallées est anisotrope. Mais chacune contient la même densité d'électrons libres $n/6$. La conductivité totale est la somme des conductivités de chaque vallée. Nous pouvons définir une masse effective pour la conductivité. Elle est isotrope tant que les vallées sont toutes également peuplées. (Remarque: Ce n'est plus le cas lorsqu'une force mécanique est appliquée sur le silicium. L'effet piezorésistif est anisotrope). Pour le silicium dopé n nous obtenons:

$$\frac{1}{m_{\sigma n}^*} \equiv \frac{1}{3} \left[\frac{1}{m_l^*} + \frac{2}{m_t^*} \right] \Rightarrow m_{\sigma n}^* = 0.26 \cdot m_e$$

Pour le silicium dopé p, il y a deux vallées isotropes, mais différemment peuplées. Il faut pondérer les masses par la concentration de porteurs dans chaque bande hh (heavy hole) et lh (light hole):

$$\frac{1}{m_{\sigma p}^*} \equiv \frac{p_{hh}}{p} \frac{1}{m_{hh}^*} + \frac{p_{lh}}{p} \frac{1}{m_{lh}^*} = \frac{m_{hh}^{*1/2} + m_{lh}^{*1/2}}{m_{hh}^{*3/2} + m_{lh}^{*3/2}} \Rightarrow m_{\sigma p}^* = 0.37 \cdot m_e$$

En reprenant les résultats du chapitre 2:

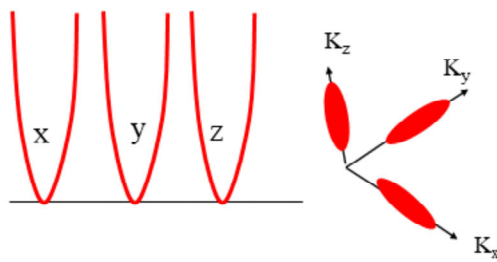
$$p_{hh} \cong m_{hh}^{*3/2} \quad p_{lh} \cong m_{lh}^{*3/2} \quad p \cong m_{hh}^{*3/2} + m_{lh}^{*3/2}$$

Masses effectives en unité: $m_0=0.911 \cdot 10^{-30}$ Kg

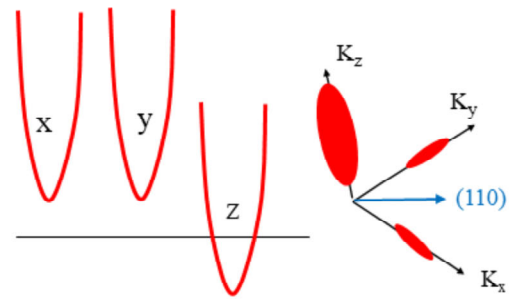
PROPERTY	Si	GAAs
Electron effective mass (m_0)	$m_{\text{c}}^* = 0.98$	$m^* = 0.067$
	$m_{\text{v}}^* = 0.19$	
	$m_{\text{dos}}^* = 1.08$	
	$m_{\text{g}}^* = 0.26$	
Hole effective mass (m_0)	$m_{\text{hh}}^* = 0.49$	$m_{\text{hh}}^* = 0.45$
	$m_{\text{lh}}^* = 0.16$	$m_{\text{lh}}^* = 0.08$
	$m_{\text{dos}}^* = 0.55$	$m_{\text{dos}}^* = 0.47$
	$m_{\text{c}}^* = 0.37$	$m_{\text{c}}^* = 0.34$
Bandgap (eV)	$1.17 - 4.37 \times 10^{-4} \frac{\text{T}^2}{\text{T} + 636}$	$1.519 - 5.4 \times 10^{-4} \frac{\text{T}^2}{\text{T} + 204}$
Electron affinity (eV)	4.01	4.07

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

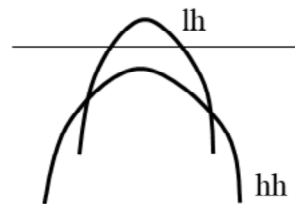
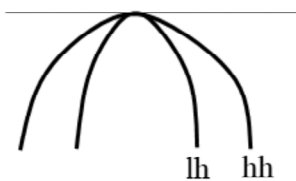
J. Singh "Semiconductor Devices"



Pas de stress



Stress ($\sigma > 0$) dans la direction (110)



Dans un morceau de silicium, un stress mécanique induit des transformations des bandes.

Par exemple pour un stress dans la direction (110):

- Les niveaux des bandes de conduction sont changés. Les 4 bandes dans les directions x et y montent, alors que les 2 bandes en z descendent. (Seules les direction positives sont montrées ici par simplicité). Les masses restent inchangées.
- Les niveaux et les masses des bandes de valence varient également.

De telles variations des bandes résultent en des variations importantes des caractéristiques conductrices du matériau. Un effet de piezorésistance apparaît, la résistance du matériau dépend fortement du stress mécanique qu'il subit. Les jauges de contraintes sont basées sur ce principe.

Le champ électrique produit **plusieurs** courant

Courant de drift:

$$\vec{j}_{drift} \equiv \vec{j}_n + \vec{j}_p = (\sigma_n + \sigma_p) \cdot \vec{E}$$

Sommer les courants



$$\vec{E} = \rho \cdot \vec{j}_{drift}$$

Résistivité:

$$\rho \equiv \frac{1}{\sigma_n + \sigma_p}$$

Sommer les conductivités
et prendre l'inverse

Le champ électrique E est appliqué aux deux sortes de porteurs, les électrons libres et les trous. Nous pouvons donc définir un courant de drift total et une conductivité totale en sommant:

$$\sigma = \sigma_n + \sigma_p$$

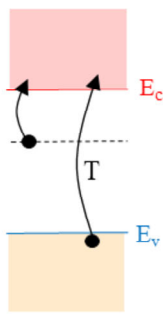
La plus grande des deux conductivités domine.

Il est parfois nécessaire d'exprimer le champ électrique en fonction du courant de drift total. On utilise alors la notion de résistivité ρ , qui peut s'exprimer en fonction des conductivités des électrons libres et des trous.

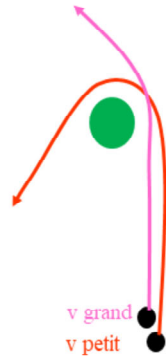
Remarque: La résistivité du matériel le plus conducteur domine.

Reduction de resistance:

a) Generation de porteurs

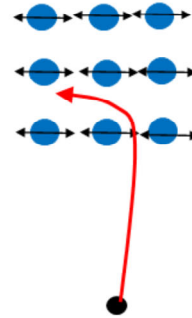


b) Impurity scattering:

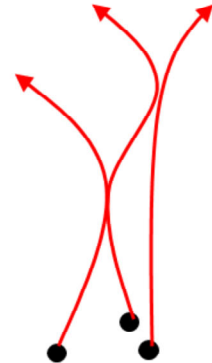


Augmentation de resistance:

c) Phonon scattering:



d) Electron scattering:



2 phénomènes physiques réduisent la résistance du conducteur en fonction de la température:

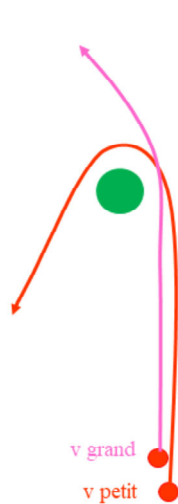
a) La génération de porteurs libres, soit depuis les dopants, soit depuis la bande de valence. En silicium cela se produit soit à très basses températures ($<100\text{K}$) soit à hautes températures ($>600\text{K}$).

b) Les impuretés sont vues comme des perturbations par les porteurs. À haute température, la vitesse du porteur est grande et l'influence de l'impureté diminue (comme une bille lancée à haute vitesse sur une surface rugueuse). La mobilité des porteurs augmente.

2 phénomènes physiques (diminuant la mobilité des porteurs) augmentent la résistance d'un conducteur en fonction de la température

c) Les porteurs entrent en collision avec les vibrations du cristal. Cet effet domine pour les semi-conducteurs comme le silicium dopé à température ambiante.

d) Les porteurs s'entrechoquent entre eux. Cet effet domine dans les métaux.



a) Impurity scattering:

- Le nombre d'impuretés augmente avec le dopage
est constant en température
- L'effet d'une collision est plus faible à haute vitesse (T)
→ Le temps τ_i entre deux collisions augmente avec la température et diminue avec le dopage

b) Phonon scattering (vibrations cristallines):

- Le nombre de phonons augmente avec la température
est constant en dopage
- Le temps τ_{ph} entre deux collisions diminue avec la température mais ne dépend pas du dopage

Scattering totale:

$$\frac{1}{\tau_c} = \frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_{ph}}$$

La mobilité, la conductivité et la résistivité sont des grandeurs « ingénieur » qui résument globalement les propriétés des matériaux mais qui ne décrivent pas les processus physiques sous-jacents. Nous avons relié ces grandeurs au temps moyen de parcours libre τ_c .

Nous allons maintenant décrire les causes physiques qui limitent le temps entre les collisions.

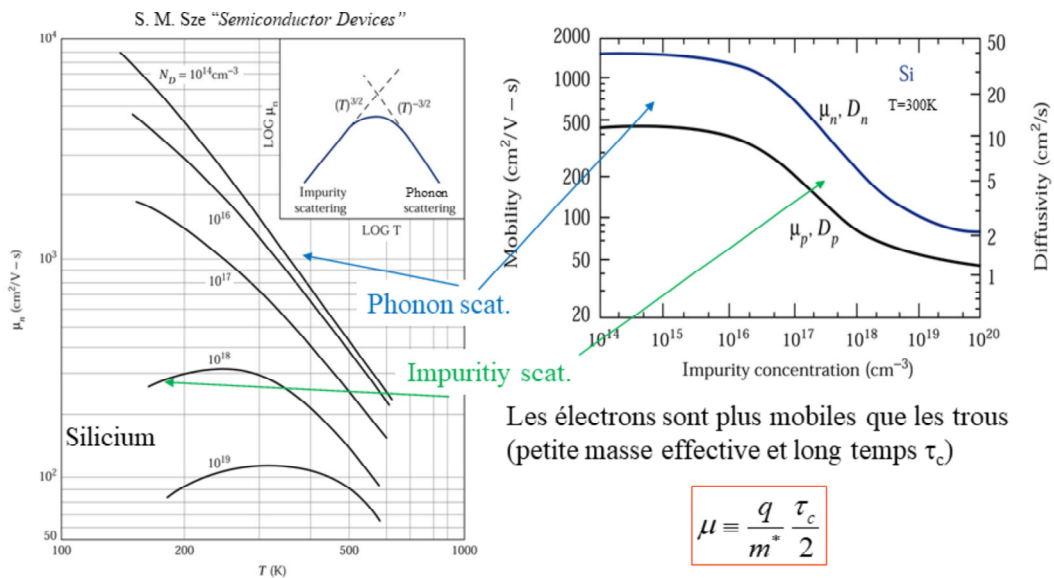
Dans un cristal parfait, les états électroniques représentent des modes vibratoires parfaits → les porteurs qui occupent ces états ne subissent donc aucune collision. Les causes d'un temps de parcours libre limité sont à chercher dans les imperfections du cristal. Deux effets dominent dans des cristaux réels:

a) Les collisions avec les impuretés (« **impurity scattering** »):

Les impuretés rompent la symétrie et la périodicité du cristal, cela perturbe les états électroniques et diminue le parcours libre. Les impuretés sont inévitables dans un cristal (voir fin du chapitre 1). De plus, les atomes dopants sont aussi des impuretés pour la scattering.

b) Les collisions avec les vibrations du cristal (« **phonon scattering** »):

Thermiquement les atomes vibrent autour de leur position idéale dans la structure cristalline. Ces déplacements aléatoires sont aussi des imperfections du cristal. Ils réduisent le parcours libre pour les porteurs. Plus la température est élevée, plus les vibrations sont importantes.



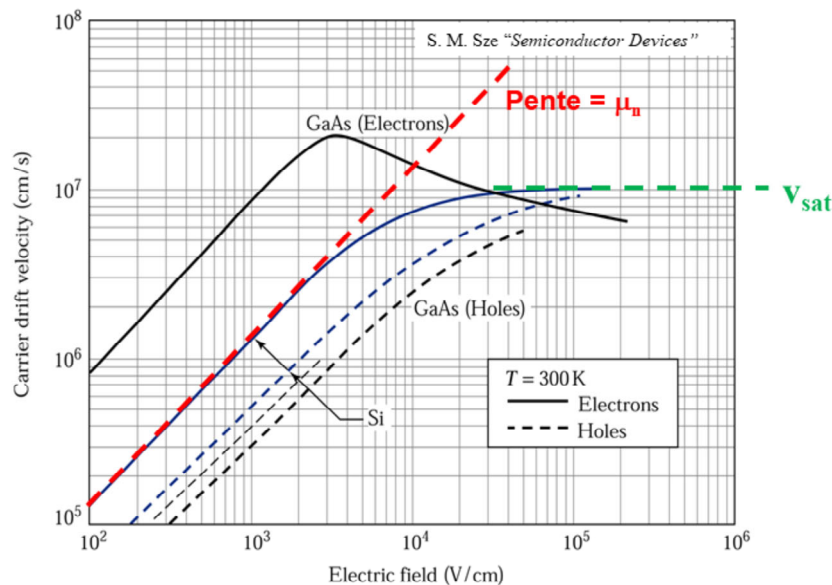
Les deux figures ci-dessus donnent le comportement de la mobilité dans le silicium en fonction de la température et de la concentration des impuretés (du dopage). La mobilité est linéairement proportionnelle au temps moyen de parcours libre τ_c .

Nous constatons:

- 1) Les électrons ont une masse effective plus petite. Ils ont également un temps entre collisions plus long \rightarrow leur mobilité est plus grande.
- 2) À faible dopage la phonon scattering domine, elle ne dépend pas du dopage.
- 3) L'impurity scattering réduit fortement la mobilité à fort dopage.
- 4) À basse température l'impurity scattering domine, elle diminue avec la température et la mobilité (à dopage élevé) a tendance à augmenter avec la température.

Remarque:

Comme nous le verrons ci-après, la constante de diffusion D est directement liée à la mobilité par des constantes physiques. Elle est donc également représentée sur la figure de droite avec son échelle sur le coté droit.

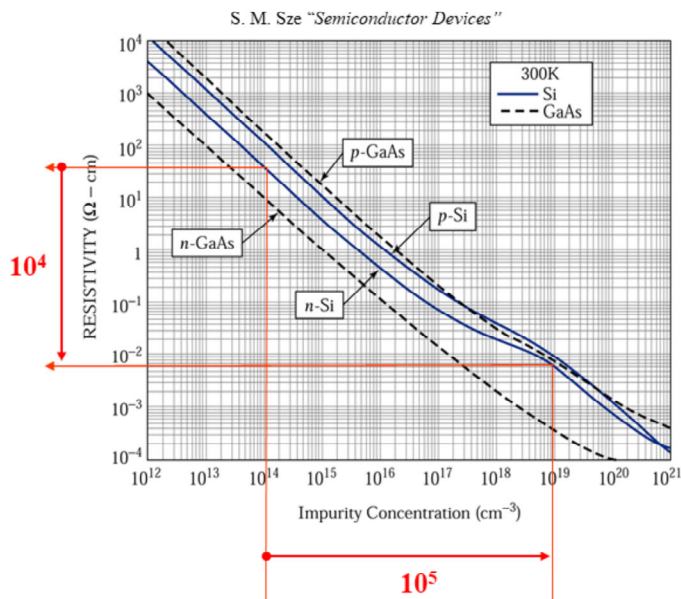


Remarque:

Nous avons exprimé la vitesse de drift en fonction du champ électrique par la mobilité. Cette définition s'applique pour des champs électriques pas trop élevés.

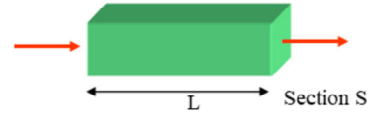
Pour des champs très forts, un phénomène de saturation de la vitesse de drift apparaît. Cela s'explique par l'apparition à haute vitesse de nouveaux phénomènes de scattering qui limitent fortement le parcours libre des porteurs.

Pour la plupart des semi-conducteurs, la vitesse de saturation des électrons et des trous est de l'ordre de 10^7 cm/s.



Résistivité

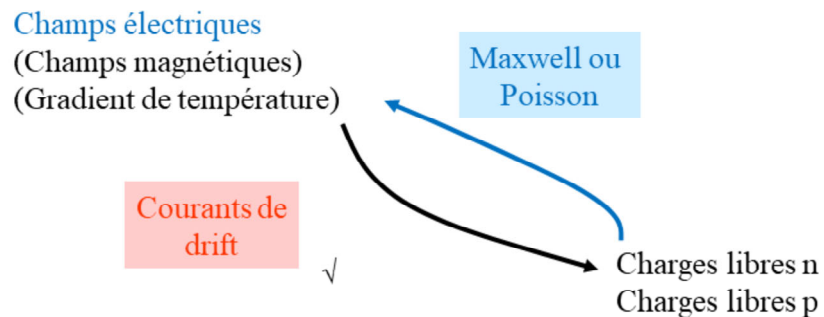
$$\rho \approx \frac{1}{\sigma} \approx \frac{1}{q n \mu}$$



Résistance

$$R = \rho \cdot \frac{L}{S}$$

En utilisant un barreau de dimension connue, on peut mesurer la résistance entre les deux contacts. La résistivité peut être déterminée en tenant compte des paramètres géométriques.



Nous avons vu comment un champ électrique peut provoquer des courants de drift sur les électrons libres et sur les trous. Ces courants $J_{\text{drift},n}$ et $J_{\text{drift},p}$ font appel à la notion de mobilité μ_n et μ_p .

Comme dans l'expérience décrite en début de chapitre (silicium entre deux plaques métalliques), ces courants de drift peuvent créer des zones de charges dans le semi-conducteur. Nous allons maintenant décrire et exprimer mathématiquement comment les charges produisent un champ et une tension électrique dans le semi-conducteur.

La tension électrique provoque un potentiel énergétique qui influence sur le niveau d'énergie dans le schéma de bande du semi-conducteur.

Maxwell:

$$\operatorname{div}(\vec{D}) = \rho$$

$$\rho = q (p + N_d^+ - n - N_a^-)$$

$$\operatorname{rot}(\vec{E}) = -\dot{\vec{B}} = 0 \quad \Rightarrow \quad \vec{E} = -\overrightarrow{\operatorname{grad}}(\varphi)$$

Champ électrique E:

$$\operatorname{div}(\vec{E}) = \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon} q (p + N_d^+ - n - N_a^-)$$

Potentiel électrique φ : (équation de Poisson)

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{1}{\epsilon_0 \epsilon} q (p + N_d^+ - n - N_a^-)$$

Pour simplifier, nous allons considérer le cas d'une constante diélectrique ϵ homogène dans toute la structure.

Une charge ponctuelle produit un champ électrique radial autour d'elle (voir cours de physique de base). D'une manière générale il est donc évident qu'une zone de charge produise un champ électrique dans son environnement. Formellement, les équations de Maxwell permettent de calculer ce champ et le potentiel électrique qui en découle.

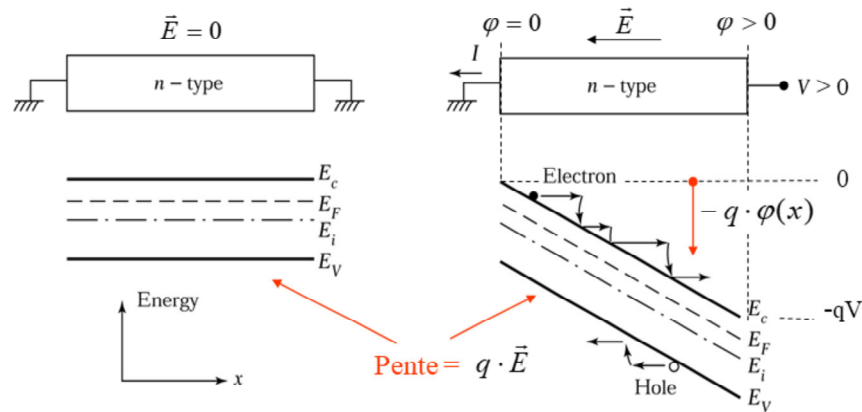
Ce slide résume les équations nécessaires pour ce calcul. Un point est spécifique aux semi-conducteurs dopés. Le calcul de la densité de charge ρ doit tenir compte de toutes les charges présentes, mobiles et fixes. Cette densité ρ contient donc les charges positives (les trous et les atomes donneurs ionisés) et avec un signe moins les charges négatives (électrons libres et atomes accepteurs ionisés). Nous obtenons:

$$\rho = q (p + N_d^+ - n - N_a^-)$$

Le champ électrique E est relié à la densité de charge par une équation de Maxwell. C'est une équation différentielle du premier ordre. Le potentiel électrique φ est exprimé par l'équation de Poisson. C'est une équation différentielle du second ordre. Il suffit de résoudre une de ces deux équations.

Remarque: Dans une structure microélectronique typique, le champ E peut varier de plusieurs ordres de grandeur, le potentiel électrique φ lui ne varie que de quelques volts. Numériquement, l'équation de Poisson converge souvent mieux.

Au potentiel ϕ est associé une énergie potentielle: $E_{pot} = -q \cdot \phi$
 → variation des bandes d'énergie



S. M. Sze "Semiconductor Devices"

Le potentiel électrique ϕ , calculé par l'équation de Poisson, est associé à une énergie potentielle du porteur libre (voir cours de physique de base).

Analysons le cas d'une résistance faite en matériau semi-conducteur homogène:

- Sans champ électrique: il n'y a pas de variation de potentiel. Les porteurs voient tout le long de la résistance le même schéma de bande.
- Avec un champ électrique produit par une source de tension $V > 0$. Pour tenir compte de l'énergie potentielle induite par le potentiel électrique ϕ , la structure de bande devient pentue avec une pente donnée par $q \cdot E$.

Analysons le mouvement des porteurs dans cette structure de bande: les électrons libres de la bande de conduction se comportent comme des billes qui visent à minimiser leur énergie, ils se dirigent vers la droite, donc vers le pôle + de la résistance. Les trous, comme des bulles d'air, remontent vers la gauche et se dirigent vers le pôle - de la résistance. Pour être plus précis, les électrons accélèrent dans le champ électrique, ils quittent le fond de la bande et gagnent en énergie cinétique. Ils perdent cette énergie cinétique par collision et rejoignent le fond de la bande. Le mouvement moyen suit le fond de la bande. (Les trous ont un comportement similaire dans la bande de valence).

- La différence de hauteur des bandes entre deux points correspond (en négatif) à la tension électrique entre ces deux points.
- Le gradient des bandes correspond au champ électrique local.
- La courbure des bandes correspond à la densité de charge.

$$\vec{E} = -\overrightarrow{\text{grad}}(\varphi)$$

$$E_{pot} = -q \cdot \varphi$$

$$\vec{E} = +\overrightarrow{\text{grad}}\left(\frac{E_{pot}}{q}\right) = +\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{E_{bande}}{q}\right)$$

La pente de la bande indique un champ électrique

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{1}{\epsilon_0 \epsilon} \rho$$

$$E_{pot} = -q \cdot \varphi$$

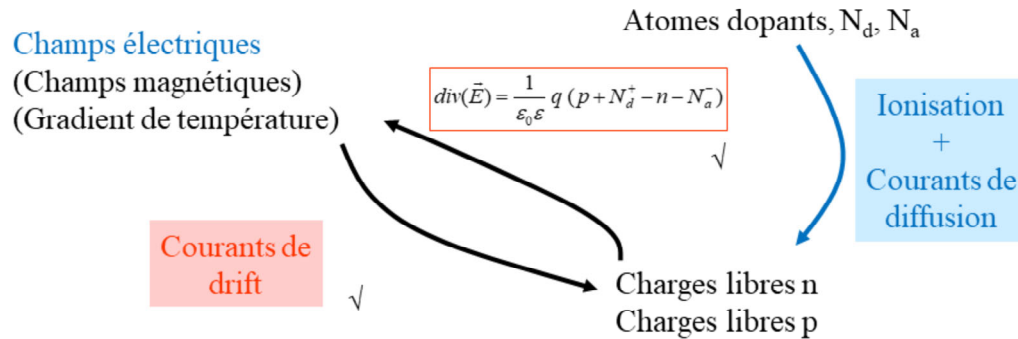
$$\nabla^2 \left(\frac{E_{pot}}{q}\right) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{E_{bande}}{q}\right) = +\frac{1}{\epsilon_0 \epsilon} \cdot |q| (p + N_D^+ - n - N_A^-)$$

La courbure de la bande indique une charge totale

$$\text{div}(\vec{D}) = \rho$$

$$\vec{E} = +\frac{q}{\epsilon_0 \epsilon} \int (p + N_d^+ - n - N_a^-) \cdot dx$$

Le champ électrique est l'intégrale des charges



Dans une structure semi-conductrice au dopage inhomogène (une jonction p/n par exemple), de forts gradients de concentration sont attendus. Comme une goutte de colorant dans de l'eau, l'effet de diffusion aura tendance à égaliser les concentrations. Des courants de diffusion s'installent, ils cherchent à répartir les porteurs uniformément dans toute la structure.

Donneurs

$$N_D^+ = N_D (1 - F_D)$$

$$F_D = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} e^{(E_D - E_F)/kT}}$$

Accepteurs

$$N_A^- = N_A (1 - F_A)$$

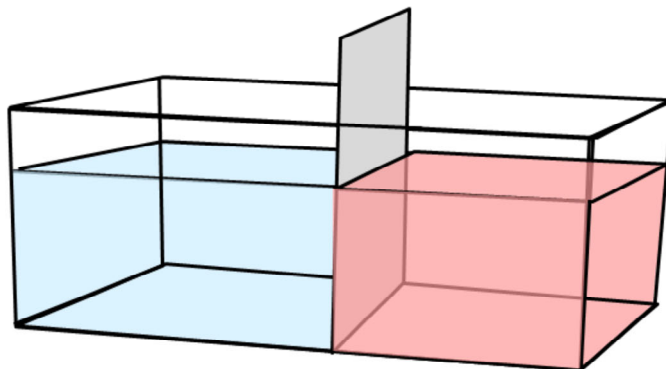
$$F_A = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} e^{(E_F - E_A)/kT}}$$

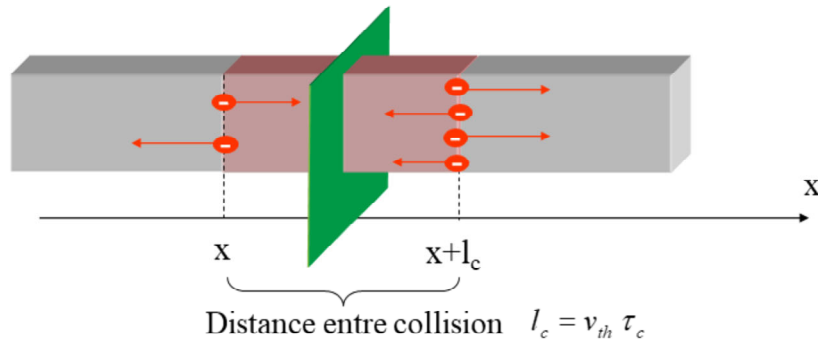
Ionisation complète:

$$N_D^+ = N_D \quad \text{et} \quad N_A^- = N_A$$

Dans une structure au dopage inhomogène, les valeurs N_A et N_D des concentrations d'atomes dopants implantés varient sur toute la structure. Nous sommes intéressés par connaître, non pas les atomes implantés, mais les atomes dopants ionisés N_A^- et N_D^+ . Pour cela les équations ci-dessus peuvent être appliquées.

Dans la plupart des cas (silicium à température ambiante), nous pouvons admettre une ionisation complète. Le problème est alors trivial, les atomes dopants implantés sont tous ionisés !

Courants de diffusion



$$\begin{aligned}
 \vec{j}_{\rightarrow} &= -q \frac{n(x)}{2} \vec{v}_{th} \\
 \vec{j}_{\leftarrow} &= -q \frac{n(x+l_c)}{2} \vec{v}_{th}
 \end{aligned}
 \left. \vphantom{\begin{aligned} \vec{j}_{\rightarrow} \\ \vec{j}_{\leftarrow} \end{aligned}} \right\}
 \begin{aligned}
 \vec{j}_{dif} &= \vec{j}_{\rightarrow} - \vec{j}_{\leftarrow} = q v_{th} \frac{l_c}{2} \cdot \left(\frac{n(x+l_c) - n(x)}{l_c} \right) \\
 \vec{j}_{dif,n} &= q v_{th}^2 \frac{\tau_c}{2} \cdot \frac{\partial n}{\partial x} = q D_n \cdot \frac{\partial n}{\partial x}
 \end{aligned}$$

Nous pouvons maintenant nous attaquer à dériver une équation décrivant le phénomène de diffusion. Nous cherchons l'expression d'un courant qui devrait dépendre du gradient de la concentration des porteurs.

Considérons des électrons libres avec une concentration inhomogène. Ils peuvent parcourir sans collision une distance l_c à leur vitesse thermique v_{th} . Exprimons les courants qui traversent une plaque située au milieu de cette distance de gauche à droite j_{\rightarrow} et de droite à gauche j_{\leftarrow} . La différence de concentration provoque un courant résultant j_{dif} , appelé courant de diffusion. Le même principe est appliqué pour les trous. Nous obtenons finalement deux courants de diffusion, celui des électrons libres et celui des trous.

Le modèle ci-dessus permet de relier linéairement le courant de diffusion au gradient de la concentration.

Energie thermique d'un système à un degré de liberté:

$$\frac{1}{2} m v_{th}^2 = \frac{1}{2} kT$$

Mobilité et temps entre collisions:

$$\mu = \frac{q}{m} \frac{\tau_c}{2}$$

Relations d'Einstein:

$$D_n = v_{th}^2 \cdot \frac{\tau_c}{2} = \frac{kT}{q} \mu_n$$

$$D_p = v_{th}^2 \cdot \frac{\tau_c}{2} = \frac{kT}{q} \mu_p$$

Courants de diffusion des électrons libres et des trous:

$$\vec{j}_{dif,n} = kT \mu_n \cdot \overrightarrow{grad}(n)$$

$$\vec{j}_{dif,p} = -kT \mu_p \cdot \overrightarrow{grad}(p)$$

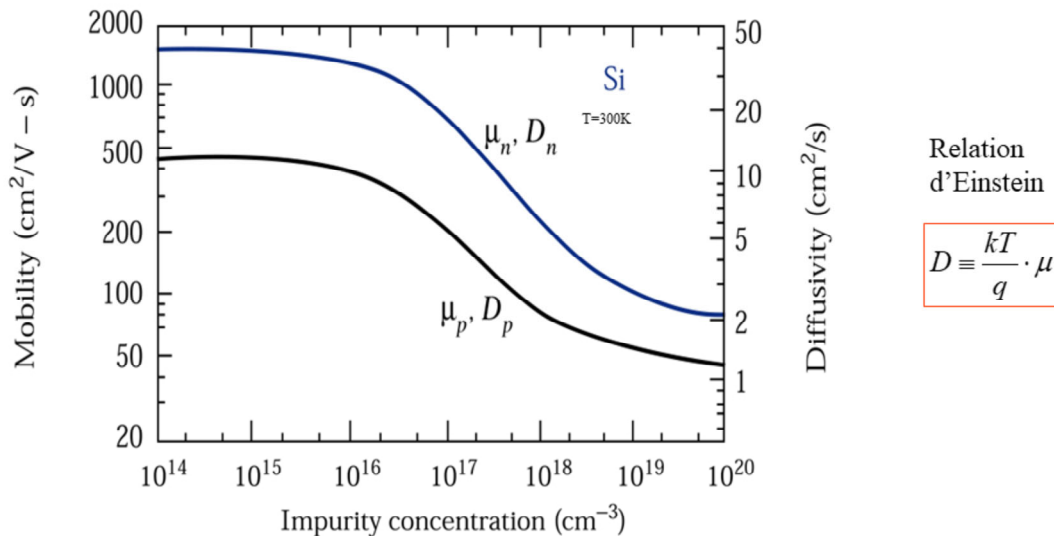
La dernière équation de la page précédente permet de relier la constante de diffusion D_n ou D_p à la vitesse thermique v_{th} et du temps moyen de parcours libre τ_c par:

$$D_{n,p} = v_{th}^2 \cdot \frac{\tau_c}{2}$$

La vitesse thermique est directement donnée par l'énergie thermique d'un système à un degré de liberté ($1/2 \cdot kT$). Le temps τ_c peut être exprimé par la mobilité μ . Nous obtenons donc les relations d'Einstein ci-dessus. La constante de diffusion est directement exprimée par la mobilité.

Finalement, le courant de diffusion des électrons libres et celui des trous peuvent être exprimés simplement par le produit de kT , de la mobilité et du gradient des porteurs.

S. M. Sze "Semiconductor Devices"



P.A. Besse, EPFL

Ch.3, p.30, "Propriétés de transport"

Composants semi-conducteurs, 2023

Les deux figures ci-dessus donnent le comportement de la mobilité dans le silicium en fonction de la température et de la concentration des impuretés (du dopage). La mobilité est linéairement proportionnelle au temps moyen de parcours libre τ_c .

Nous constatons:

- 1) Les électrons ont une masse effective plus petite. Ils ont également un temps entre collisions plus long \rightarrow leur mobilité est plus grande.
- 2) À faible dopage la phonon scattering domine, elle ne dépend pas du dopage.
- 3) L'impurity scattering réduit fortement la mobilité à fort dopage.
- 4) À basse température l'impurity scattering domine, elle diminue avec la température et la mobilité (à dopage élevé) a tendance à augmenter avec la température.

Remarque:

Comme nous le verrons ci-après, la constante de diffusion D est directement liée à la mobilité par des constantes physiques. Elle est donc également représentée sur la figure de droite avec son échelle sur le côté droit.



Courant de drift

$$\vec{j}_{drift,n} = q \mu_n n \cdot \vec{E}$$

$$\vec{j}_{drift,p} = q \mu_p p \cdot \vec{E}$$

Courant de diffusion

$$\vec{j}_{dif,n} = kT \cdot \mu_n \overrightarrow{grad}(n)$$

$$\vec{j}_{dif,p} = -kT \cdot \mu_p \overrightarrow{grad}(p)$$

Champ et potentiel électriques

$$\text{div}(\vec{E}) = \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon} q (p + N_d^+ - n - N_a^-)$$

ou

$$\Delta \phi = -\frac{1}{\epsilon_0 \epsilon} q (p + N_d^+ - n - N_a^-)$$

Ce slide résume les équations que nous avons développées dans ce chapitre.

- 1) Le champ électrique provoque un courant de drift sur chaque sorte de porteur libre: les électrons et les trous. La mobilité μ des porteurs est physiquement liée aux collisions qu'ils subissent dans le matériel.
- 2) Les gradients de concentration génèrent des courants de diffusion pour chaque sorte de porteur (électrons et trous). Les équations d'Einstein permettent d'exprimer la constante de diffusion par la mobilité.
- 3) Les zones de charges génèrent des champs électriques dans la structure selon l'équation de Maxwell. Cette équation peut être remplacée par l'équation de Poisson décrivant le potentiel électrique ϕ .

Remarque: Le potentiel électrique ϕ induit une énergie potentielle qui modifie la structure de bande:

- La différence de hauteur des bandes entre deux points correspond (en négatif) à la tension électrique entre ces deux points.
- Le gradient des bandes correspond au champ électrique local.
- La courbure des bandes correspond à la densité de charge.

Solutions pour une structure à l'équilibre:

3 inconnues: Champ électrique E, (ou potentiel électrique ϕ)
 Concentration d'électrons libres n
 Concentration de trous p

3 équations:

1

$$\text{div}(\vec{E}) = \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon} q (p + N_d^+ - n - N_a^-)$$

2

$$\vec{j}_{\text{tot}} = \vec{j}_{\text{drift},n} + \vec{j}_{\text{drift},p} + \vec{j}_{\text{dif},n} + \vec{j}_{\text{dif},p} = 0$$

3

$$n \cdot p = n_i^2$$

Pour une structure semi-conductrice à l'équilibre, le calcul des propriétés électriques contient 3 inconnues: le champ électrique E (qui peut aussi être remplacé par le potentiel électrique ϕ), ainsi que les deux concentrations de porteurs n et p.

Elles peuvent être déterminées par la résolution de trois équations:

- 1) L'équation de Maxwell permet de trouver le champ électrique (on peut aussi résoudre l'équation de Poisson et déterminer à la place le potentiel électrique ϕ , ceci est numériquement préférable).
- 2) Dans une structure à l'équilibre le courant total est nul. Nous pouvons donc obtenir une équation en additionnant les courants de drift et de diffusion des porteurs n et p. Cette condition est équivalente à dire que l'énergie de Fermi est constante dans toute la structure (voir chapitre 4: le courant total est donné par le gradient de l'énergie de Fermi).
- 3) La loi d'action de masse est valable. Elle permet d'exprimer les minoritaires en fonction des majoritaires.

Equations de base à l'équilibre

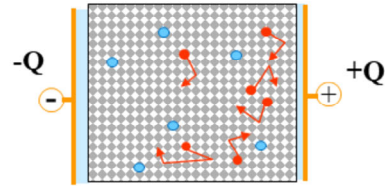
① $\text{div}(\vec{E}) = \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon} q (N_d^+ - n)$

② $\vec{j}_{\text{drift},n} + \vec{j}_{\text{dif},n} = 0$

③ $n \cdot p = n_i^2$

+ conditions aux bords

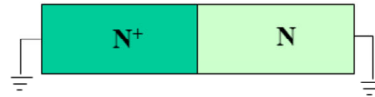
Condensateur



$E_x(\text{left}) = -\frac{|Q|}{\epsilon_0 \epsilon}$

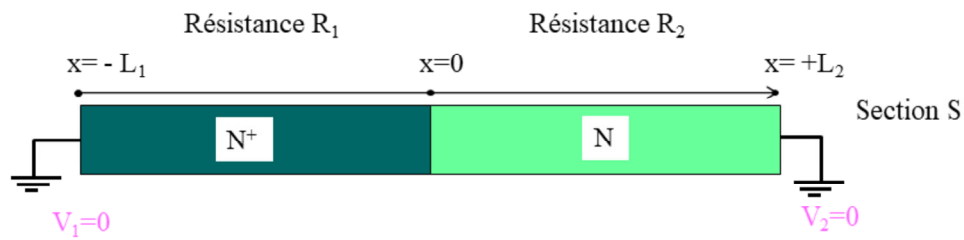
$E_x(\text{right}) = -\frac{|Q|}{\epsilon_0 \epsilon}$

Jonction N⁺N

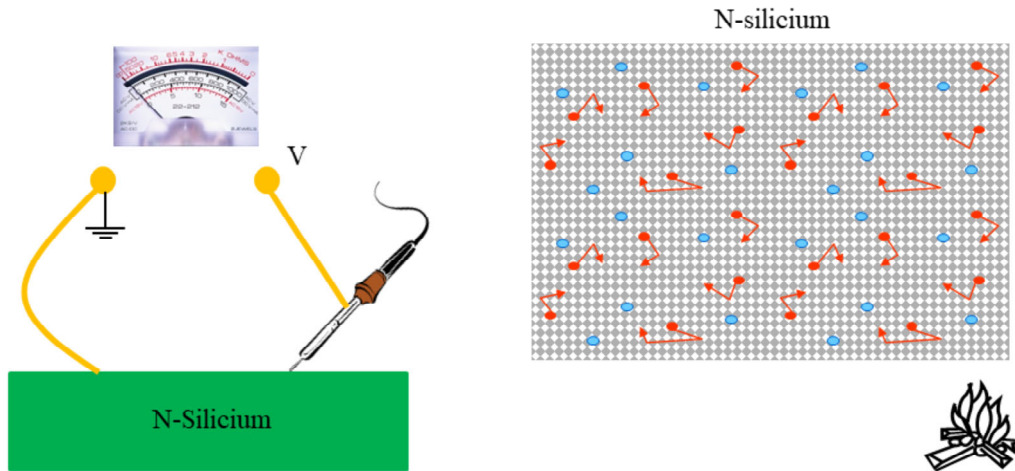


$n(\text{left}) = N^+$

$n(\text{right}) = N$



- Qu'est-ce que la zone de charge dans une jonction N^+/N à l'équilibre ?
- Quel est le champ électrique ?
- Quelles sont les deux composantes du courant dans cette structure ?
- Décrivez la structure de bande dans cette jonction.

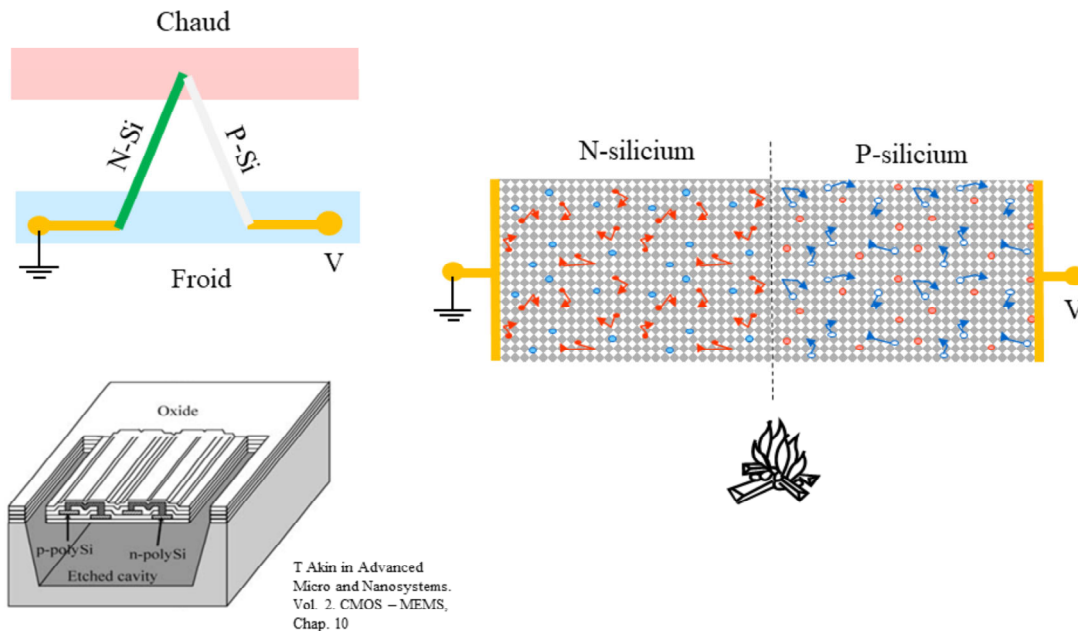


Considérons un silicium dopé N. Nous le contactons en deux points. Une pointe est froide, l'autre est simplement constituée d'un fer à souder, chauffant fortement le point de contact. Quel est le signe de la tension V mesurée sur le contact chaud ?

Modèle par analogie: Les porteurs libres se comportent comme des gens sur une piste de dance. Lorsque d'un côté un groupe « s'échauffe », il prend plus de place.

- Esquissez la densité de porteurs libres sur une structure à une dimension.
- Déduisez la densité de charges (zone d'accumulation, neutre et de déplétion).
- Esquissez le champ électrique.
- À partir des charges et du champ électrique esquissez le comportement des bandes.
- Déduisez le signe de la tension V .
- Que se passe-t-il si le wafer est du P-silicium ?

Remarque: Cette expérience est effectuée pour déterminer simplement le type N ou P d'un wafer.



P.A. Besse, EPFL

Ch.3, p.36, "Propriétés de transport"

Composants semi-conducteurs, 2023

Considérons un thermocouple composé d'un silicium dopé N et d'un silicium dopé P. La jonction est chauffée. Quel est le signe de la tension V mesurée sur le contact P ?

Modèle par analogie: Les porteurs libres se comportent comme des gens sur une piste de dance. Lorsque d'un côté un groupe « s'échauffe », il prend plus de place.

Négligez les effets à la jonction NP et ne considérez que chaque région prise séparément (une région N-Si et une région P-Si).

- Esquissez, dans chaque région, la densité de porteurs libres due à la différence de température.
- Déduisez dans chaque région la densité de charges (zone d'accumulation, neutre et de déplétion) due à ΔT .
- Esquissez le champ électrique dans chaque région.
- La tension V est reliée au champ électrique E par $E = -\text{grad}(V)$. Déduisez le signe de la tension V .

Remarque: Ce thermocouple peut être intégré en technologie CMOS en utilisant par exemple les contacts N-Poly et P-Poly. Les applications sont pour des senseurs de température ou des capteurs infrarouges (caméras de thermographie).

COMPOSANTS SEMI-CONDUCTEURS

IV) Semi-conducteur hors équilibre

P.A. Besse

EPFL

Solutions pour une structure à l'équilibre:

3 inconnues: champ électrique E, (ou potentiel électrique ϕ)
 concentration d'électrons libres n
 concentration de trous p

3 équations:

1

$$\text{div}(\vec{E}) = \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon} q (p + N_d^+ - n - N_a^-)$$

valable hors équilibre

2

$$\vec{j}_{\text{tot}} = \vec{j}_{\text{drift},n} + \vec{j}_{\text{drift},p} + \vec{j}_{\text{diff},n} + \vec{j}_{\text{diff},p} = 0$$

3

$$n \cdot p = n_i^2$$

← Pas valable hors équilibre !!!

Pour une structure semi-conductrice à l'équilibre, le calcul des propriétés électriques contient 3 inconnues: le champ électrique E (qui peut aussi être remplacé par le potentiel électrique ϕ), ainsi que les deux concentrations de porteurs n et p.

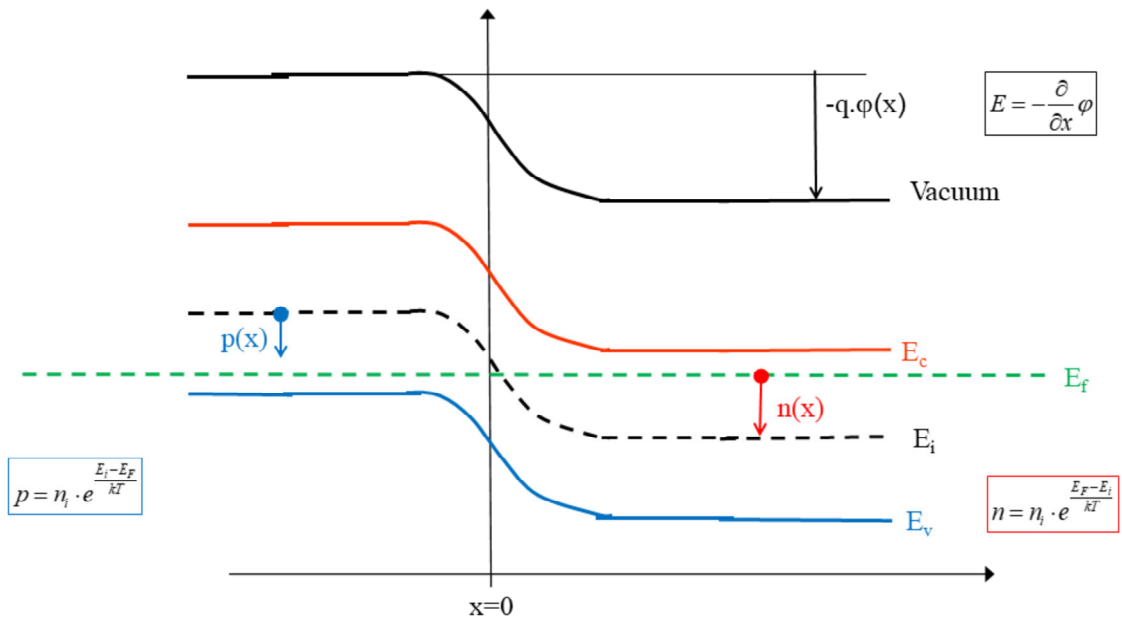
Elles peuvent être déterminées par la résolution de trois équations:

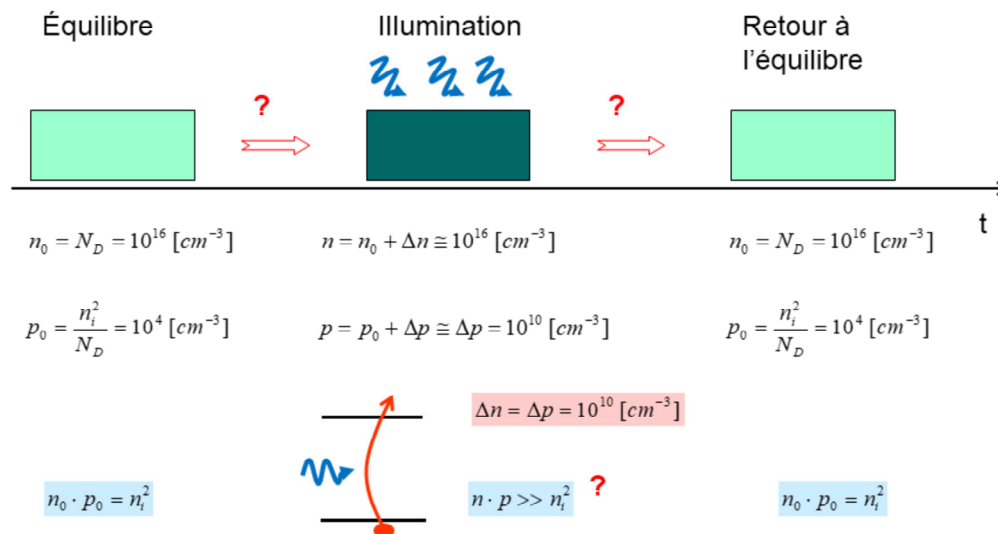
- 1) L'équation de Maxwell permet de trouver le champ électrique (on peut aussi résoudre l'équation de Poisson et déterminer à la place le potentiel électrique ϕ , ceci est numériquement préférable).
- 2) Dans une structure à l'équilibre le courant total est nul. Nous pouvons donc obtenir une équation en additionnant les courants de drift et de diffusion des porteurs n et p. Cette condition est équivalente à dire que l'énergie de Fermi est constante dans toute la structure (voir chapitre 4: le courant total est donné par le gradient de l'énergie de Fermi).
- 3) La loi d'action de masse est valable. Elle permet d'exprimer les minoritaires en fonction des majoritaires.

L'équation 1 est générale (Maxwell), elle s'applique même hors équilibre.

Les équations 2 et 3 ne sont pas valables hors équilibre → il faut chercher deux équations plus générales qui s'appliquent dans tous les cas !

A l'équilibre:
trois inconnues: E , n et p



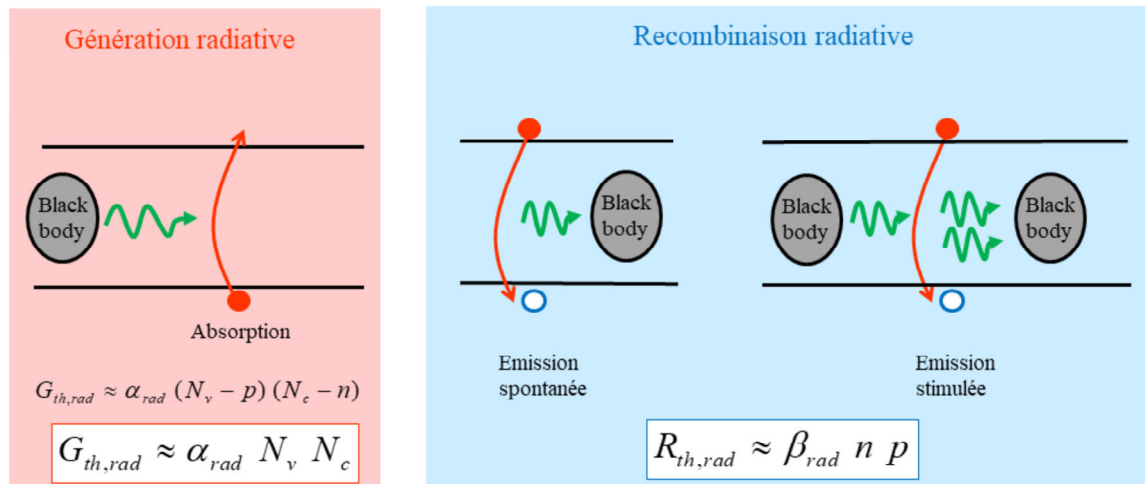


Il est facile de comprendre qu'en appliquant une tension sur un composant électronique, le courant total n'est plus nul. L'exemple le plus simple est celui d'une résistance ou d'une diode. L'équation 2 de la page précédente n'est donc pas valable de manière générale.

Voici un exemple qui illustre la non-validité de la loi d'action de masse (équation 3 de la page précédente) si on est hors équilibre. Par une illumination forte on génère autant de trous que d'électrons. Les deux valeurs n et p augmentent donc sous illumination. Leur produit n'est plus donné par n_i^2 !

Lorsque l'illumination s'arrête, la recombinaison des porteurs rétablit l'équilibre.

→ Nous devons décrire plus précisément les processus de génération et de recombinaison pour établir les équations décrivant un système hors équilibre.

« Band-to-Band », équilibre radiatifs avec le corps noir

Chaque corps émet de la lumière et est en équilibre thermique avec son environnement. On parle de «corps noir» ou de «black body». Il y a trois interactions possibles entre la matière et la lumière:

- l'absorption, qui correspond à une génération thermique. Une paire électron/trou peut être générée directement par un saut électronique de la bande de valence à la bande de conduction (une liaison de valence est rompue) en absorbant l'énergie du photon. Le taux $G_{th,rad}$ de génération est le nombre de paires générées par volume de matériel et par seconde. Il est proportionnel au nombre d'états occupés ($N_v - p$) dans la bande de valence et à celui des états libres ($N_c - n$) dans la bande de conduction.
- L'émission spontanée et l'émission stimulée correspondant à des recombinaisons thermiques. Un électron libre de la bande de conduction passe directement dans la bande de valence (il forme une liaison de valence). Il cède son énergie en émettant un photon. le taux de recombinaison $R_{th,rad}$ (nombre de paires électron/trou disparaissant par volume de matériel et par seconde) est proportionnel au nombre d'états occupés n de la bande de conduction et au nombre d'états libres p de la bande de valence.

À l'équilibre thermique:

$$U_{th,rad,0} \equiv R_{th,rad,0} - G_{th,rad,0} = \beta_{rad} n_0 p_0 - \alpha_{rad} N_v N_c = 0$$

$$\Rightarrow \alpha_{rad} N_v N_c = \beta_{rad} n_0 p_0$$

Hors équilibre thermique:

$$U_{th,rad} \equiv R_{th,rad} - G_{th,rad} = \beta_{rad} n p - \alpha_{rad} N_v N_c$$

$$U_{th,rad} = \beta_{rad} (n p - n_0 p_0)$$

$$\left[\frac{\text{nombre}}{s \cdot m^3} \right]$$

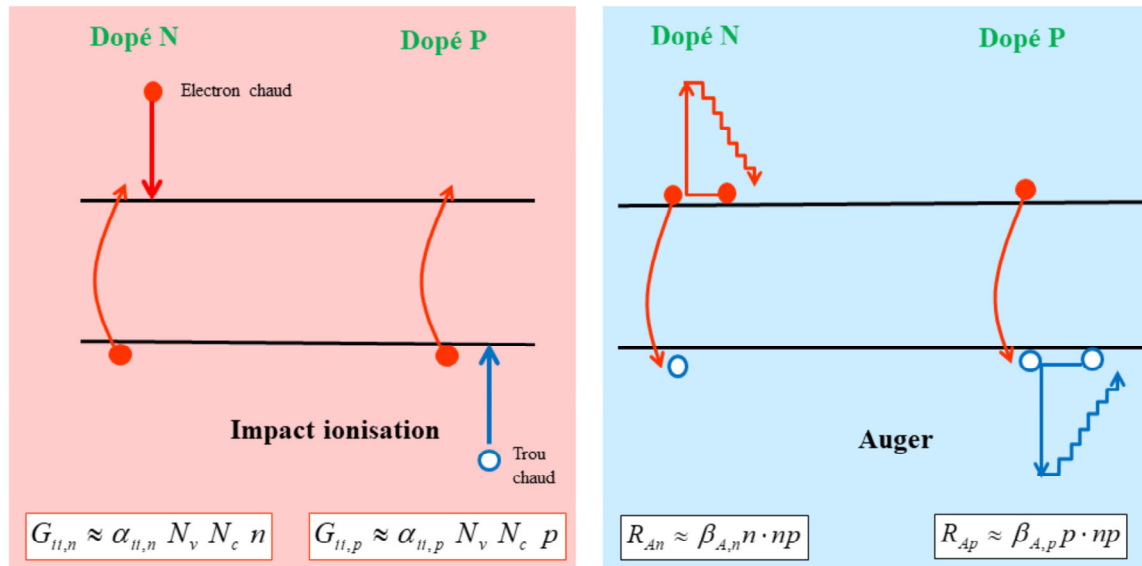
Nous pouvons définir un taux net de recombinaison U comme la différence entre la recombinaison et la génération. U est positif si la recombinaison domine, U est négatif si la génération domine.

- 1) À l'équilibre thermique: le taux net est nul.
- 2) Hors équilibre: la recombinaison, proportionnelle au produit $n \cdot p$ varie, mais la génération thermique reste donnée en première approximation par le produit $N_v \cdot N_c$ qui lui ne varie pas.

→ Le taux net de recombinaison radiatif est proportionnel au terme: $n \cdot p - n_i^2$.

À l'équilibre, la loi d'action de masse nous dit que ce terme est nul, hors équilibre la loi d'action de masse ne s'applique plus.

« Band-to-Band », effets Auger



Aux effets radiatifs peuvent s'ajouter l'impact ionisation et l'effet Auger.

Dans l'impact ionisation, l'électron prend son énergie soit à un électron chaud de la bande de conduction (effet dominant dans un semiconducteur dopé n), soit à un trou chaud de la bande de valence (effet dominant si le dopage est p).

Dans l'effet Auger, l'électron donne son énergie soit à un autre électron de la bande de conduction (effet dominant dans un semiconducteur dopé n), soit à un autre trou de la bande de valence (effet dominant si le dopage est p). L'électron ou le trou excité va alors « thermaliser » et libérer cette énergie par de nombreux chocs avec le cristal.

À l'équilibre thermique dans un semiconducteur dopé n:

$$U_{An,0} \equiv R_{An,0} - G_{An,0} = \beta_{An} n_0 n_0 p_0 - \alpha_{ii,n} N_v N_c n_0 = 0$$

$$\Rightarrow \alpha_{ii,n} N_v N_c = \beta_{An} n_0 p_0$$

Hors équilibre thermique:

$$U_{An} \equiv R_{An} - G_{An} = \beta_{An} n np - \alpha_{ii,n} N_v N_c n$$

$$U_{An} = \beta_{An} n \cdot (n p - n_0 p_0)$$

$$\left[\frac{\text{nombre}}{s \cdot m^3} \right]$$

Idem pour un dopage p:

$$U_{Ap} = \beta_{Ap} p \cdot (n p - n_0 p_0)$$

$$\left[\frac{\text{nombre}}{s \cdot m^3} \right]$$

Nous pouvons définir un taux net de recombinaison U comme la différence entre la recombinaison et la génération. U est positif si la recombinaison domine, U est négatif si la génération domine.

- 1) À l'équilibre thermique: le taux net est nul et cela permet de déterminer la constante pour l'impact ionisation.
- 2) Hors équilibre: nous introduisons la constante, déterminée à l'équilibre thermique, pour décrire la génération..

→ Le taux net de recombinaison reste proportionnel au terme: $n \cdot p - n_i^2$.

À l'équilibre, la loi d'action de masse nous dit que ce terme est nul, hors équilibre la loi d'action de masse ne s'applique plus.

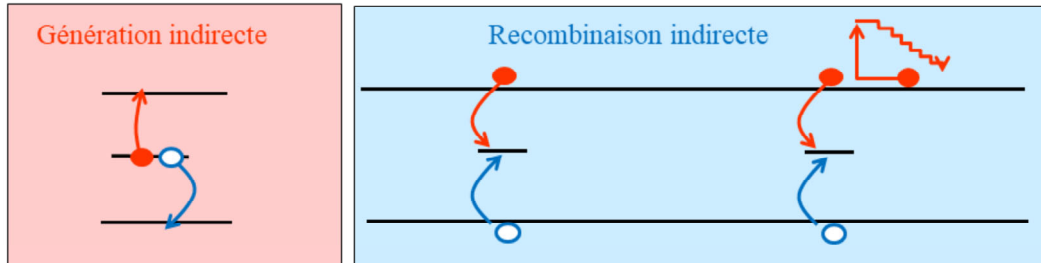
Rem:

L'équilibre thermique demande que la somme de toutes les recombinaisons compensent la somme de toutes les générations:

$$\sum_i R_i = \sum_i G_i$$

Ici nous imposons plus, le principe de "detailed balance" qui impose que l'équilibre s'établit "processus par processus".

$$R_i = G_i \quad \text{pour chaque } i$$

Effets thermiques indirects (« trap assisted »)

Pour un piège au milieu du gap,
avec des taux de capture identiques pour les électrons et les trous:

Taux net de
recombinaison par
volume

$$U_{th,i} \equiv R_{th,i} - G_{th,i} \cong \beta_i N_T \left(\frac{np - n_i^2}{n + p + 2n_i} \right)$$

Densité de traps Déséquilibre

Shockley-Read-Hall theory

Par génération ou recombinaison directe, le saut d'énergie à franchir est important. Il peut être réduit si l'électron peut faire deux sauts en utilisant des pièges (« traps ») situés dans le gap.

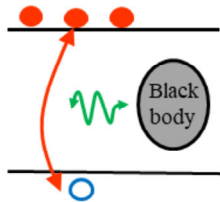
Dans ce cas le taux net de recombinaison thermique indirecte est toujours proportionnel au terme : $n \cdot p - n_i^2$. (Il est donc nul à l'équilibre.)

Très logiquement, il est aussi proportionnel à la densité de traps N_T dans le matériel.

Rem:

- La formule est une simplification de la théorie SRH (Shockley-Read-Hall) décrite dans la littérature spécialisée.
- On démontre aussi que les traps au milieu du gap sont les plus efficaces.

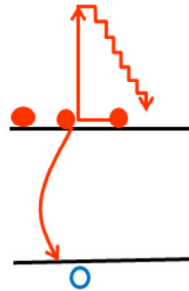
Direct «Radiatif»



$$U_{th} \cong (n p - n_0 p_0)$$

$$U_{th} \cong n_0 \cdot \Delta p \cong \frac{1}{\tau} \cdot \Delta p$$

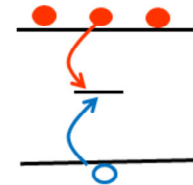
Direct «Auger»



$$U_{th} \cong n_0 \cdot (n p - n_0 p_0)$$

$$U_{th} \cong n_0^2 \cdot \Delta p \cong \frac{1}{\tau} \cdot \Delta p$$

Indirect «trap assisted»



$$U_{th} \cong N_T \cdot \frac{(n p - n_0 p_0)}{n_0}$$

$$U_{th} \cong N_T \cdot \Delta p \cong \frac{1}{\tau} \cdot \Delta p$$

$$\tau_p \cong 1/(\beta_{rad} n)$$

$$\tau_p \cong 1/(\beta_{AI} n^2)$$

$$\tau_p \cong 1/(\beta_i N_T)$$

$$U_{th} \equiv U_{th,d} + U_{th,i} \cong \frac{1}{\tau} \cdot \left(\frac{np - n_i^2}{n + p + 2n_i} \right)$$

$$\tau = \text{temps de vie des minoritaires} \cong \frac{1}{\beta_d(n + p + 2n_i) + \beta_i N_T}$$

$$\text{avec} \quad \beta_d \equiv \beta_{rad} + \beta_{An}n + \beta_{Ap}p$$

τ diminue avec une augmentation de densité: de pièges ou de majoritaires

En sommant tous les effets de génération et de recombinaison thermiques, nous obtenons la formule ci-dessus pour le taux net de recombinaison thermique total U_{th} .

Nous avons défini τ comme le temps de vie des minoritaires. Cela sera expliqué plus loin dans ce chapitre. Ce temps de vie diminue avec une augmentation de la densité de porteurs majoritaires et de pièges.

Rem:

- Lorsque l'effet radiative domine: $\beta_d = \beta_{rad}$ et le temps de vie des minoritaires est inversement proportionnel à la densité de majoritaires.

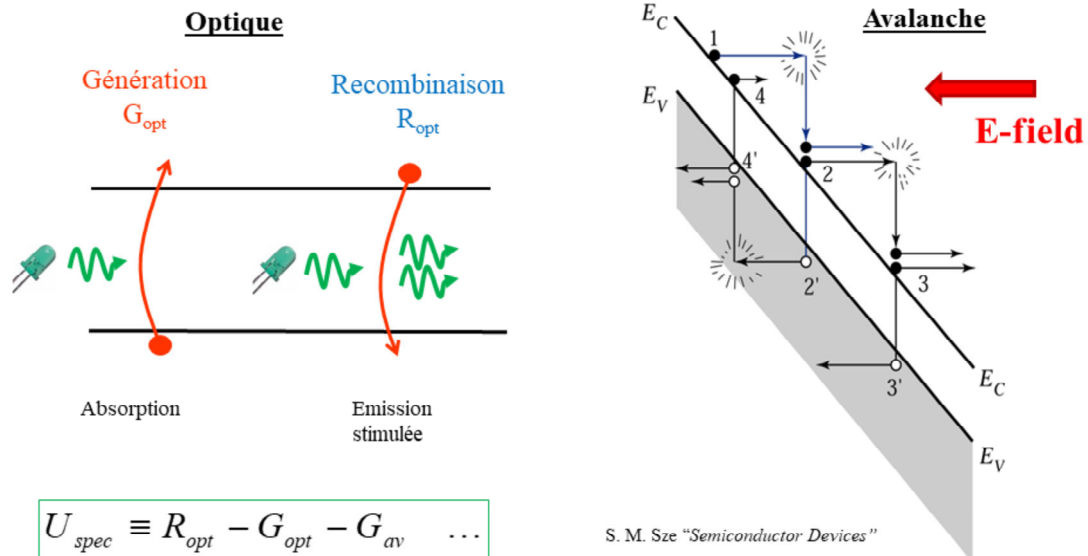
Par exemple pour un dopage n: $\tau_p \cong 1/(\beta_{rad}n)$

- Lorsque l'effet Auger domine, le temps de vie des minoritaires est inversement proportionnel au carré de la densité de majoritaires.

Par exemple pour un dopage n: $\tau_p \cong 1/(\beta_{A1}n^2)$

- Lorsque les traps dominent le temps de vie des minoritaires est inversement proportionnel à la concentration de traps:

Par exemple pour un dopage n: $\tau_p \cong 1/(\beta_i N_T)$

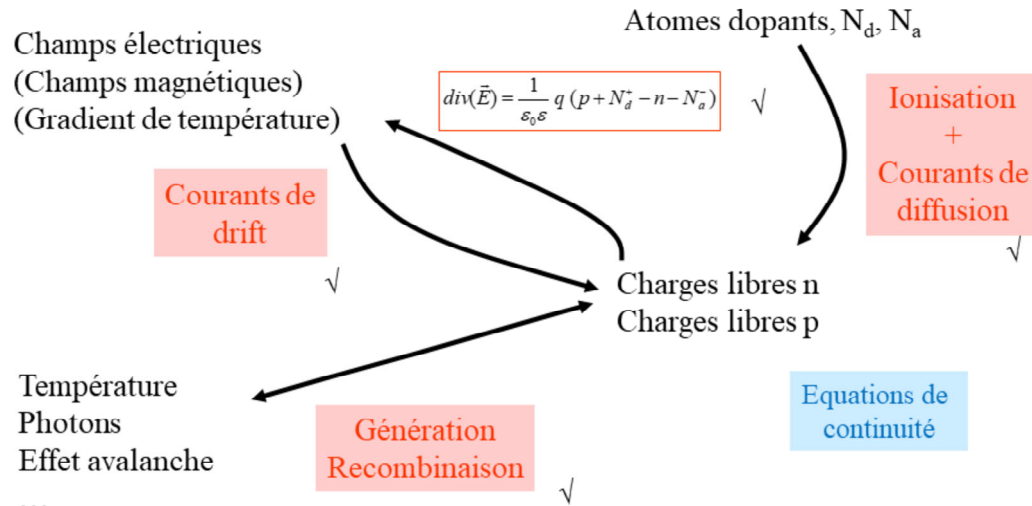


- 1) Optique: En soumettant le matériel à une illumination optique, des photons peuvent être absorbés et apporter l'énergie nécessaire pour générer une paire électron/trou. Dans le processus inverse d'émission stimulée, le photon se dédouble par recombinaison d'une paire électron/trou. Ici les processus d'absorption et d'émission stimulée sont induits par une source optique spécifique (ils sont donc portés hors équilibre thermique).
- 2) Effet avalanche (impact ionisation): Dans un fort champ électrique, les porteurs sont suffisamment accélérés pour générer des paires électron/trou par impacts ionisation. Ici cet effet est fortement renforcé (donc porté hors équilibre thermique) par la présence du champs électrique très élevé.

Tous ces phénomènes sont rassemblés dans un taux net de recombinaison spécifiques U_{spec} .

Finalement le taux net total de recombinaison est:

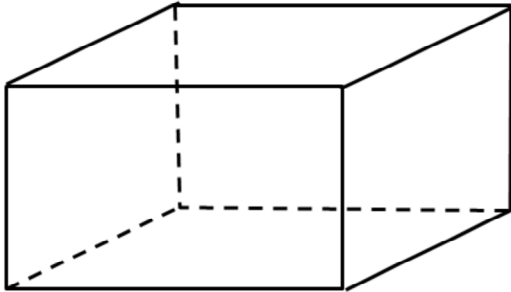
$$U = U_{th} + U_{spec} \cong \frac{1}{\tau} \cdot \left(\frac{np - n_i^2}{n + p + 2n_i} \right) + U_{spec}$$



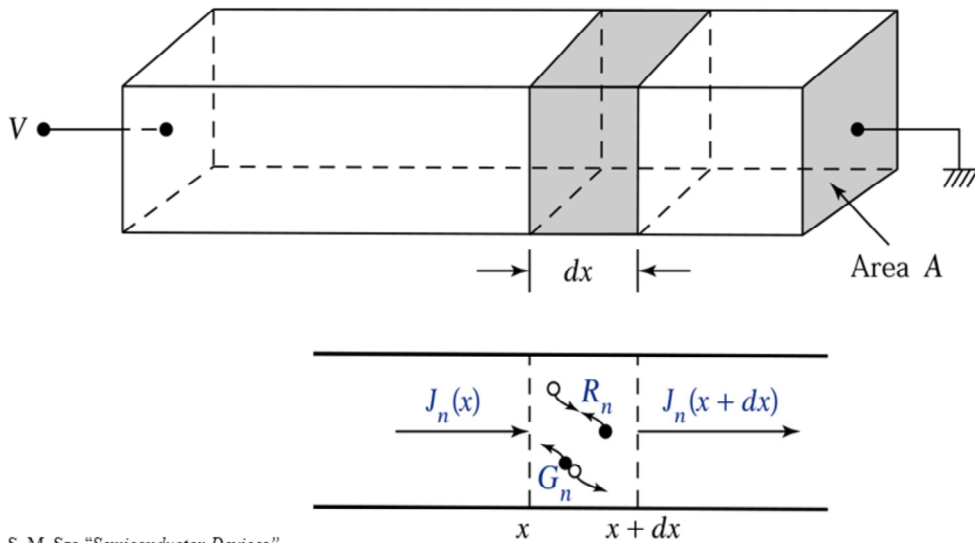
Une structure semi-conductrice à l'équilibre peut être calculée par les équations du chapitre 3. Hors équilibre la première équation reste valable. Par contre des courants totaux existent et la loi d'action de masse n'est plus valide.

Hors équilibre, nous devons introduire les équations de continuité des électrons libres et des trous.

Nous allons maintenant dériver ces deux équations.



$$\frac{\partial n}{\partial t} = \dots$$



S. M. Sze "Semiconductor Devices"

Pour dériver les équations de continuité nous utilisons un modèle 1D comme ci-dessus. L'idée est d'analyser les variations temporelles de concentration des électrons libres (respectivement des trous) dans un petit volume (en gris sur le dessin).

Le nombre d'électrons dans cette boîte varie:

- par un courant d'électrons entrant dans la boîte,
- par un courant d'électrons sortant de la boîte,
- par génération dans la boîte même,
- par recombinaison dans la boîte.

Variations de charge = génération - recombinaison - (courant OUT - IN)

$$(-q) \frac{\partial n}{\partial t} = (-q) G - (-q) R - \text{div}(\vec{j}_n)$$

La génération et la recombinaison sont identiques pour les électrons et les trous:

→

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -(U_{\text{spec}} + U_{\text{th}}) + \frac{1}{q} \text{div}(\vec{j}_n)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -(U_{\text{spec}} + U_{\text{th}}) - \frac{1}{q} \text{div}(\vec{j}_p)$$

Lois de continuité

$$\rho = q(p + N_d^+ - n - N_a^-)$$

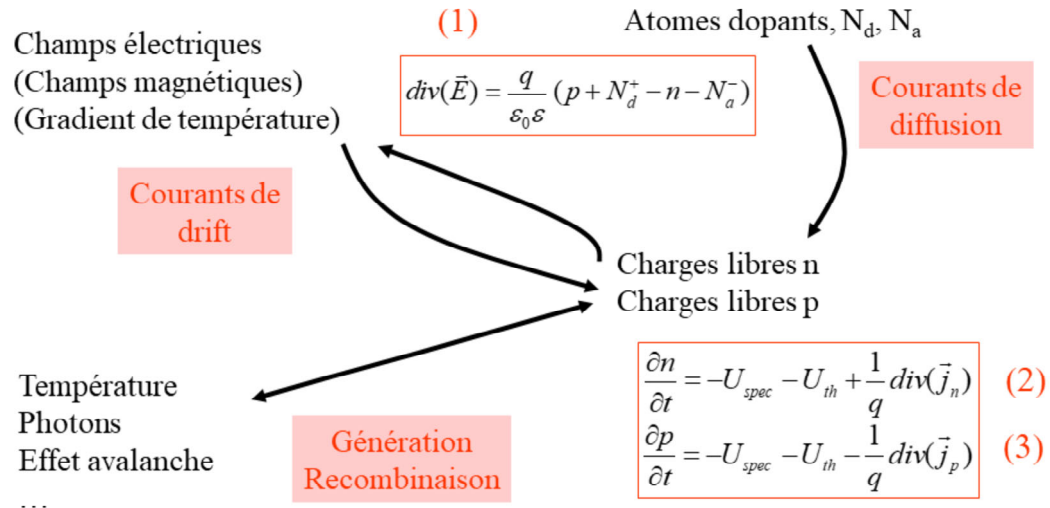
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\text{div}(\vec{j})$$

Conservation des charges

Mathématiquement, les phénomènes listés à la page précédente conduisent à la formule suivante:

Les variations de charges sont égales à la génération moins la recombinaison et moins la divergence du courant d'électrons. Cela s'applique pour les électrons libres (première équation) et pour les trous (deuxième équation).

La génération et la recombinaison donnent toujours des paires. Les deux équations contiennent donc le même taux net total de recombinaison: $U_{\text{spec}} + U_{\text{th}}$. Il est facile de vérifier mathématiquement que les deux lois de continuité respectent la conservation des charges.



Nous pouvons maintenant résumer le calcul général des propriétés électroniques d'une structure semi-conductrice hors équilibre.

Elles sont décrites par **trois inconnues**:

- le champ électrique E ,
- la densité d'électrons libres n ,
- la densité de trous p .

Ces trois inconnues nécessitent la résolution de **trois équations**:

- l'équation de Maxwell pour le champ électrique,
- l'équation de continuité pour les électrons libres,
- l'équation de continuité pour les trous.

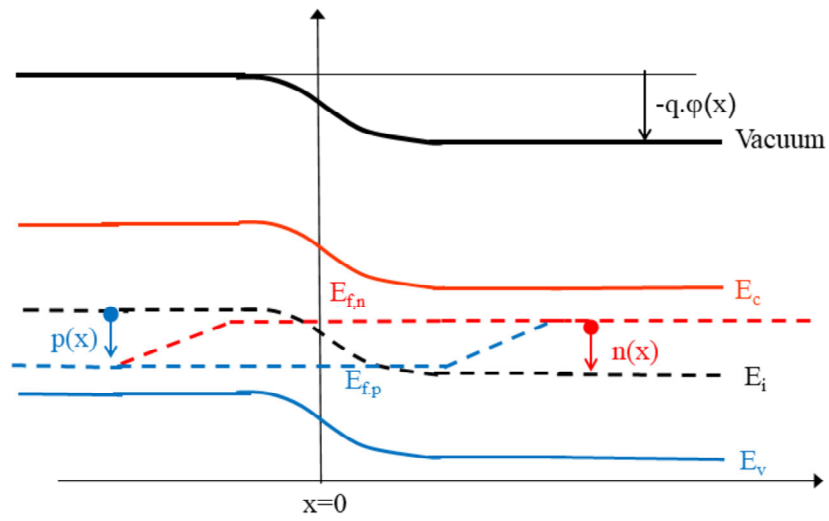
Les courants de drift: $\vec{j}_{drift,n} = q \mu_n n \cdot \vec{E}$ et $\vec{j}_{drift,p} = q \mu_p p \cdot \vec{E}$

Les courants de diffusion:

$$\vec{J}_{dif,n} = kT \cdot \mu_n \overrightarrow{grad}(n) \quad et \quad \vec{J}_{dif,p} = -kT \cdot \mu_p \overrightarrow{grad}(p)$$

Le taux net de recombinaison thermique:

$$U_{th} = \frac{1}{\tau} \left(\frac{np - n_i^2}{n + p + 2n_i} \right)$$



Paramétrisation par ϕ , E_{fn} et E_{fp} .

La distribution de Fermi ne s'applique plus de façon exacte !!
Néanmoins on paramétrise n et p par les « quasi niveaux de Fermi » $E_{F,n}$ et $E_{F,p}$:

$$n = n_i \cdot e^{(E_{F,n} - E_i) / kT}$$

$$p = n_i \cdot e^{(E_i - E_{F,p}) / kT}$$

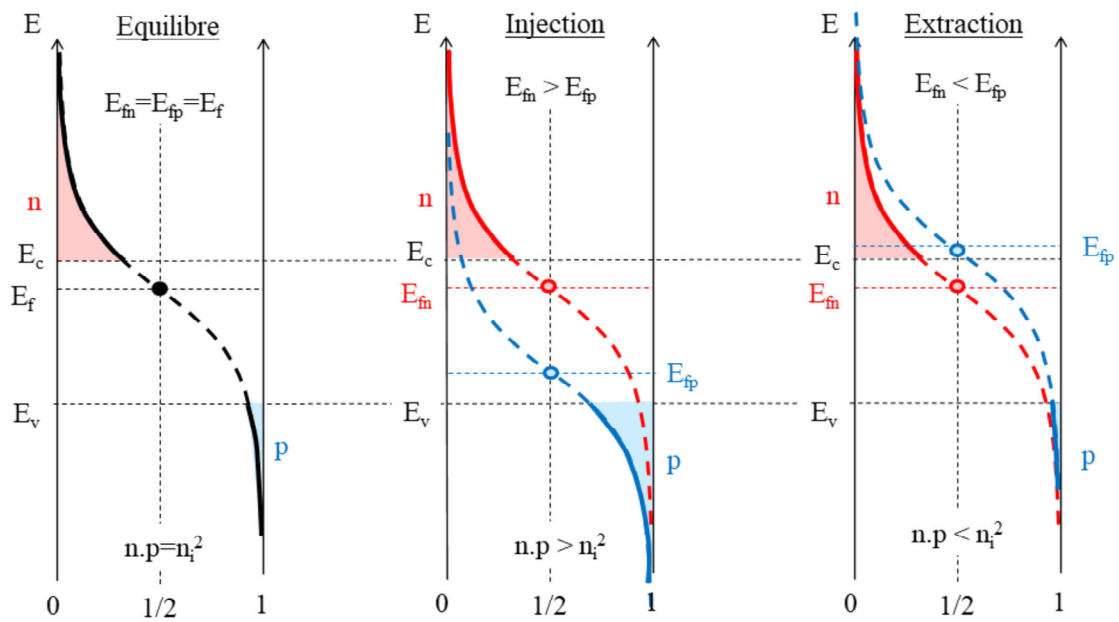
Loi d'action de masse modifiée:

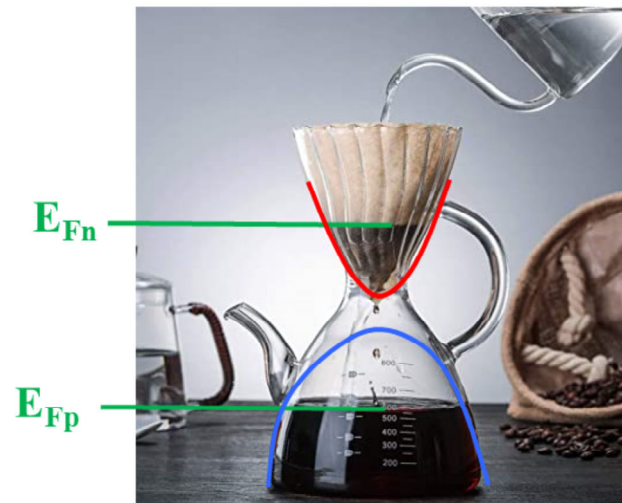
$$\Rightarrow n \cdot p = n_i^2 \cdot e^{(E_{F,n} - E_{F,p}) / kT}$$

Le champ électrique E ainsi que les concentrations de porteurs n et p varient de plusieurs ordres de grandeur sur quelques micromètres dans une structure microélectronique classique (jusqu'à plus de 15 ordres de grandeur dans une diode p/n !). Il est donc numériquement difficile de trouver ces inconnues à partir des trois équations de la page précédente.

- 1) Le champ électrique peut être remplacé par le potentiel électrique ϕ , déterminé par l'équation de Poisson (voir chapitre 3).
- 2) Les concentrations n et p peuvent être paramétrisées par une fonction exponentielle, inspirée par les résultats obtenus lorsque la structure est à l'équilibre (voir chapitre 2). Hors équilibre, deux « quasi-niveaux » de Fermi distincts sont introduits, un pour les électrons $E_{F,n}$ et un pour les trous $E_{F,p}$. Ces grandeurs ne varient que de quelques eV sur une structure typique.

La loi d'action de masse est modifiée, le produit $n \cdot p$ dépend exponentiellement de l'écart entre les quasi-niveaux de Fermi.





$$n = n_i \cdot e^{(E_{F,n} - E_i)/kT} \quad E_i = -q\varphi - q\left(\chi + \frac{E_g}{2}\right) \quad \vec{E} = -\overrightarrow{\text{grad}}\varphi$$

Equation des courants de drift et de diffusion

$$\vec{j}_n = n q \mu_n \vec{E} + kT \mu_n \overrightarrow{\text{grad}}(n)$$

⇓

$$\vec{j}_n = -nq\cancel{\mu_n \overrightarrow{\text{grad}}(\varphi)} + \cancel{kT} \mu_n \frac{n}{\cancel{kT}} \left(\overrightarrow{\text{grad}}(E_{F,n}) + q \cancel{\overrightarrow{\text{grad}}(\varphi)} \right)$$

⇓

$$\boxed{\vec{j}_n = \mu_n n \cdot \overrightarrow{\text{grad}}(E_{F,n})}$$

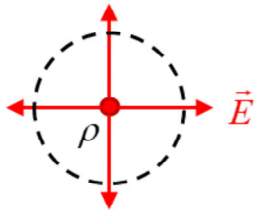
$$\boxed{\vec{j}_p = \mu_p p \cdot \overrightarrow{\text{grad}}(E_{F,p})}$$

Les quasi-niveaux de Fermi permettent de réécrire les courants d'électrons libres j_n et de trous j_p .

Pour chaque sorte de porteur (électrons ou trous), le courant est la somme du courant de drift et du courant de diffusion. Dans le courant de drift, le champ électrique E est exprimé par le gradient du potentiel électrique φ . Dans le courant de diffusion, le gradient de la concentration fait intervenir le gradient du quasi-niveau de Fermi et aussi du potentiel électrique φ .

Au final:

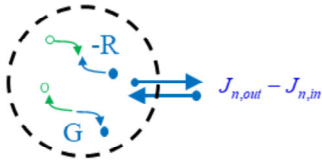
Le courant total pour une sorte de porteur est proportionnel à la mobilité, à la concentration et au gradient du quasi-niveau de Fermi de ce porteur.



3 inconnues: \vec{E} n p

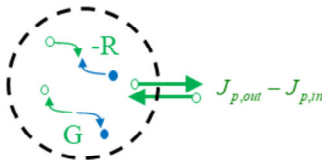
1) Equation de Maxwell:

$$\text{div}(\epsilon_0 \epsilon \cdot \vec{E}) = \rho = q \cdot (p + N_D^+ - n - N_A^-)$$



2) Equation de continuité des électrons libres

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G - R - \frac{1}{(-q)}(J_{n,out} - J_{n,in}) = G - R + \frac{1}{q} \text{div}(\vec{J}_n)$$



3) Equation de continuité des trous

$$\frac{\partial p}{\partial t} = G - R - \frac{1}{(+q)}(J_{p,out} - J_{p,in}) = G - R - \frac{1}{q} \text{div}(\vec{J}_p)$$

Un modèle général des semiconducteurs contient 3 inconnues: le champ électrique E et les concentrations de porteurs n et p . Il faut donc trouver 3 équations.

Considérons une sphère:

- 1) Les charges produisent un champ électrique radial, c'est une des équations de Maxwell
- 2) La variation temporelle de la densité d'électrons libres dans cette sphère est donnée par la génération G , moins la recombinaison R et moins la différence entre le courant d'électrons sortants et ceux entrant dans la sphère. Cette différence est mathématiquement donnée par la divergence des courants d'électrons libres. On obtient ainsi l'équation de continuité des électrons libres.
- 3) Le même raisonnement conduit à l'équation de continuité des trous. Elle contient la même génération G et recombinaison R , mais la divergence porte maintenant sur les courants de trous.

Rem:

Les effets physiques (drift, diffusion, mobilité, chocs entre particules, Auger, ...) sont «cachés» sous les valeurs des courants J_n , J_p et de G et R .

Paramétrisation:

$$\Delta\phi = -\frac{1}{\epsilon_0 \epsilon} q (p + N_d^+ - n - N_a^-) \quad (1)$$

$$\vec{E} = -\overrightarrow{\text{grad}}\phi$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -U_{\text{spec}} - U_{\text{th}} + \frac{1}{q} \text{div}(\vec{j}_n) \quad (2)$$

$$n = n_i \cdot e^{(E_{F,n} - E_i)/kT}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -U_{\text{spec}} - U_{\text{th}} - \frac{1}{q} \text{div}(\vec{j}_p) \quad (3)$$

$$p = n_i \cdot e^{(E_i - E_{F,p})/kT}$$

Les structures semi-conductrices hors équilibre sont décrites par **trois inconnues**:

- le potentiel électrique ϕ ,
- le quasi-niveau de Fermi des électrons libres $E_{F,n}$,
- le quasi-niveau de Fermi des trous $E_{F,p}$.

Ces trois inconnues nécessitent la résolution de **trois équations**:

- l'équation de Poisson pour le potentiel électrique,
- l'équation de continuité pour les électrons libres,
- l'équation de continuité pour les trous.

Les courants d'électrons: $\vec{j}_n = \mu_n n \cdot \overrightarrow{\text{grad}}(E_{F,n})$

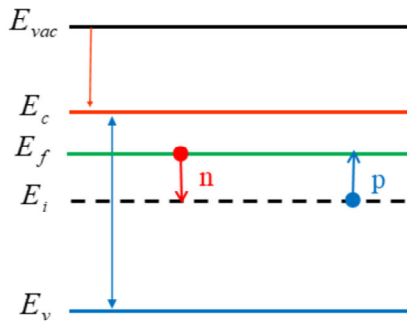
Les courants de trous: $\vec{j}_p = \mu_p p \cdot \overrightarrow{\text{grad}}(E_{F,p})$

Le taux net de recombinaison thermique: $U_{th} = \frac{1}{\tau} \left(\frac{np - n_i^2}{n + p + 2n_i} \right)$

- 1) Ils ne varient que de quelques eV sur toute la structure
- 2) A l'équilibre, ils correspondent au niveau de Fermi qui lui a une signification physique (taux de remplissage de $\frac{1}{2}$)
- 3) Leur gradient donne directement le courant total pour une sorte de porteur
- 4) Sur le schéma de bande, ils déterminent les concentrations n et p

Remarque:

Pour le calcul des schémas de bande, nous allons toujours admettre que le taux de recombinaison net est nul aux contacts sur la structure considérée. Cela signifie que les quasi-niveaux de Fermi des électrons et des trous coïncident aux contacts.



1) Poser l'énergie du vide E_{vac}

$$E_{vac} = 0$$

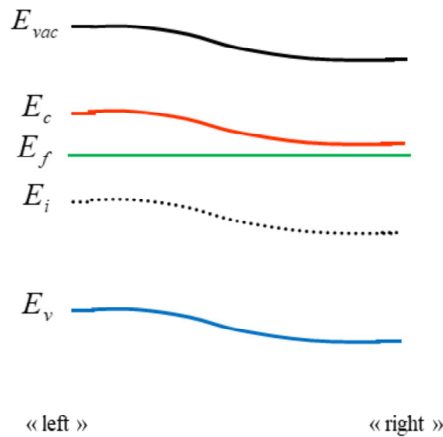
2) Dessiner les bandes à partir de l'affinité, du gap et du matériel intrinsèque

3) Déterminer l'énergie de Fermi (constante dans toute la structure)

$$n = N_D - N_A$$

$$E_F - E_i = +kT \ln(n/n_i)$$

Comme premier exemple, considérons un semi-conducteur dopé n, homogène et à l'équilibre thermique.



- 1) Au point « left »:
 - Poser $E_{vac} = 0$
 - Dessiner les bandes
 - Déterminer E_f à partir de E_i
- 2) E_f constant dans toute la structure
- 3) Au point « right »:
 - Déterminer E_i à partir de E_f
 - Dessiner les bandes
 - Tracer E_{vac}
- 4) Résoudre: $\Delta\varphi = -\frac{\rho}{\epsilon_0\epsilon}$
avec les conditions aux deux bords.
- 5) Tracer E_{vac} : $E_{vac} = -q\varphi$
- 6) Tracer les bandes en tout point depuis E_{vac}

Remarques:

- 1) En acquérant une énergie supérieure à l'énergie du vide, l'électron peut quitter le matériel (métal, semi-conducteur ou isolant).
- 2) Nous rapportons le potentiel φ à l'énergie du vide et calculons ensuite les bandes à partir des paramètres du matériel (affinité, gap, dopage). Cette façon de faire est également correcte pour des structures contenant des matériaux semi-conducteurs différents (hétérojonctions) ou des métaux (jonctions Schottky).



À l'équilibre: La tension électrique externe V est nulle
L'énergie de Fermi E_F est constante
Le potentiel interne ϕ donne la tension de built-in: $\phi = V_{bi}$

Hors équilibre: La tension externe est non-nulle
 E_F varie de $-qV$
avec de « bons » contacts: La tension externe se reporte sur le potentiel interne ϕ
 $\phi = V_{bi} + V$

Une jonction semi-conductrice (un matériel avec des dopages différents à gauche et à droite) doit être connectée à des contacts métalliques identiques (fils de cuivre par exemple) pour être mesurée. Il y a donc en tout trois jonctions CA, AB et BD, toutes différentes.

a) À l'équilibre:

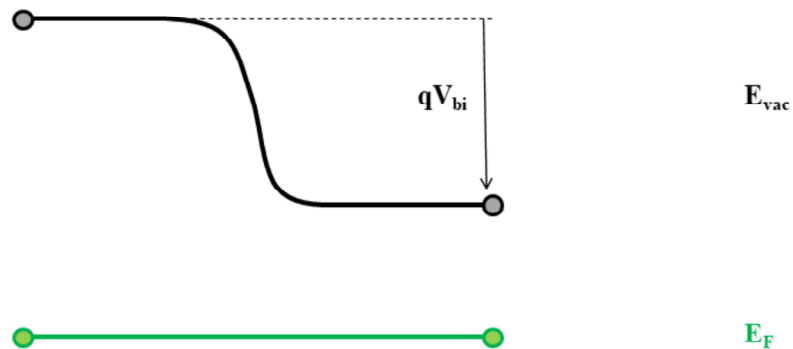
Des champs électriques internes existent, ils plient les bandes et provoquent un courant de drift exactement opposé au courant de diffusion (voir jonction N+/N, chapitre 3). Il y a donc un potentiel (tension électrique) interne appelé « potentiel de built-in » entre les points A et B.

Il y a aussi un potentiel interne dans les contacts CA et BD, de sorte que la tension électrique V externe, mesurée entre les points CD est nulle. L'énergie de Fermi est constante dans toute la structure, y compris dans les fils de contact.

b) Hors équilibre:

Une tension électrique externe V non-nulle est appliquée. Elle correspond à un saut entre les niveaux de Fermi des contacts C et D. Si les contacts sont « bons » (ohmiques et peu résistifs, voir chapitre 5), le niveau de Fermi reste constant dans les contacts. → La tension électrique externe V est directement appliquée comme un saut des niveaux de Fermi sur la jonction interne AB.

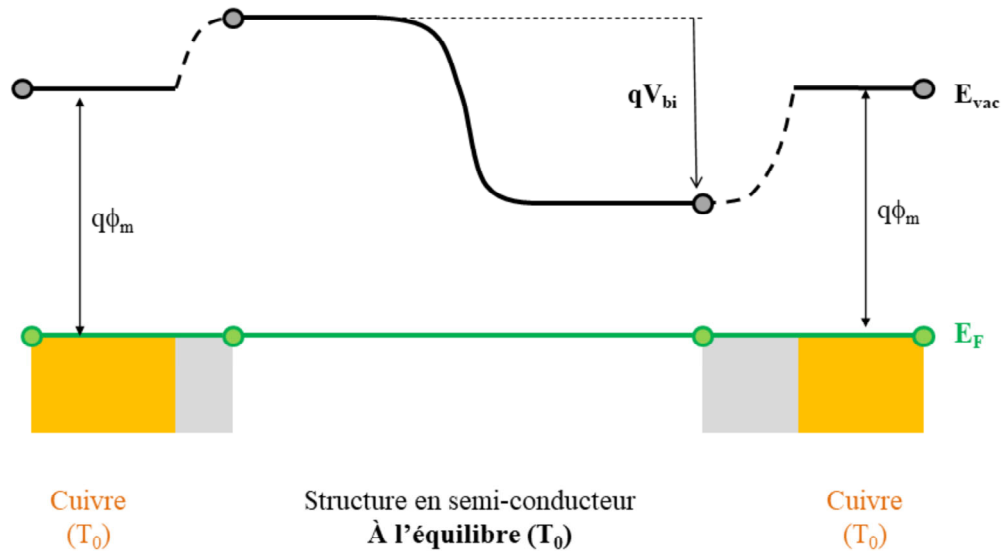
Le potentiel interne (le saut des bandes entre A et B) est maintenant la somme du potentiel de built-in et de la tension externe V .

Structure en semi-conducteur
À l'équilibre

Considérons la structure de bande simplifiée: nous ne regardons que l'énergie du vide E_{vac} et l'énergie de Fermi E_F .

Pour la structure à l'équilibre thermique, l'énergie de Fermi est horizontale, mais il y a une tension de built-in sur l'énergie du vide. Cette tension est interne mais bien réelle.

Supposons que nous voulions mesurer cette tension avec un voltmètre.

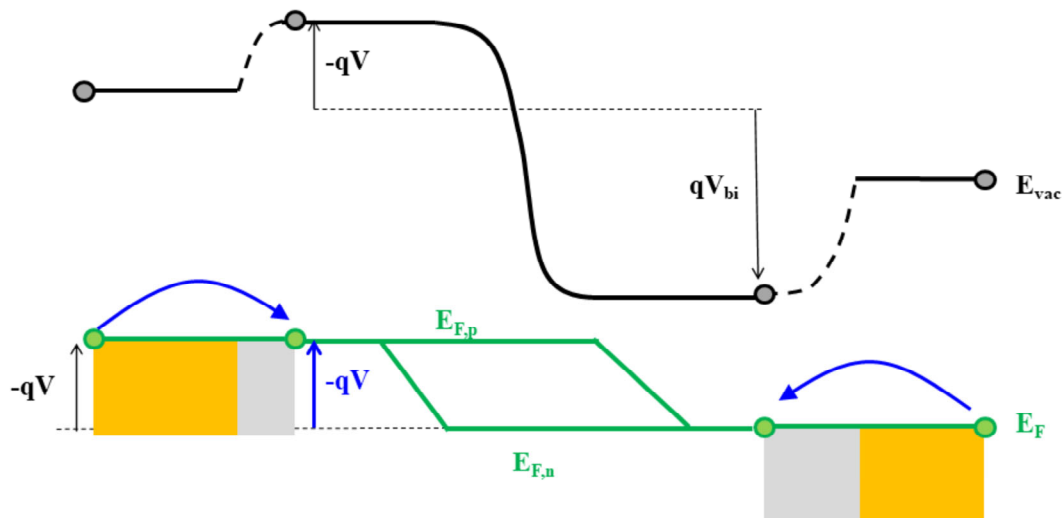


Pour mesurer avec un voltmètre nous devons ajouter deux contacts (zones grisées) avec des fils de cuivre. Cela impose deux autres tensions de built-in.

L'ensemble de la structure (les deux fils de cuivre et le semi-conducteur) est à l'équilibre thermique. L'énergie de Fermi est donc horizontale partout. L'énergie du vide est simplement déterminée par la work function $q\phi_m$. L'énergie du vide doit donc être à la même hauteur des deux côtés.

Vu de l'extérieur, il n'y a aucune tension (différence d'énergie) sur l'énergie du vide !

→ La somme des trois tensions de built-in doit être nulle !



**Avec de «bons contacts», la tension extérieure s'applique
à l'intérieur entièrement sur l'énergie de Fermi**

Avec une tension externe V (négative) appliquée sur le côté gauche, l'énergie de vide et l'énergie de Fermi sont montées de $-qV$.

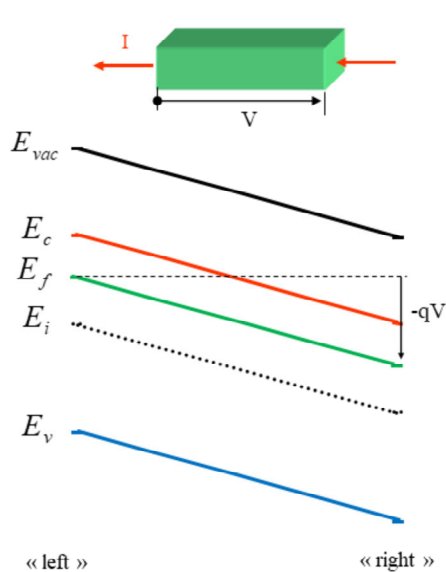
Si le contact est « bon » (il reste à définir comment le faire, voir « contacts ohmiques », chapitre 5 du cours), il n'y a pas de chute de tension sur le contact, donc toute la zone grise est également montée de $-qV$. La tension externe se reporte entièrement sur l'intérieur du semi-conducteur.

→ L'énergie de Fermi fait un saut de $-qV$.

→ L'énergie du vide fait elle un saut de $q(V_{bi}-V)$.

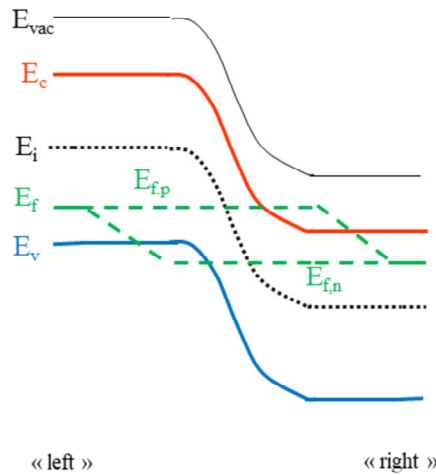
Nous pouvons maintenant résoudre les 3 équations fondamentales (équation de Poisson et les deux équations de continuité pour les électrons et les trous) et déterminer l'énergie du vide (potentiel ϕ) et les deux quasi-énergies de Fermi.

Remarque: Nous sommes hors équilibre et il y a donc en général une énergie de Fermi pour chaque porteur !



- 1) Au point « left »:
 - Poser $E_{vac} = 0$
 - Dessiner les bandes
 - Déterminer E_f à partir de E_i
- 2) $E_{F,n} = E_{F,p} = E_F$ dans toute la structure
 E_F n'est pas constant
- 3) Au point « right »:
 - E_f est donné par $-qV$
 - Dessiner les bandes
 - Tracer E_{vac}
- 4) Homogène $\rightarrow E_f$ et E_{vac} sont linéaires
- 5) Tracer les bandes en tout point depuis E_{vac}

Dans le cas d'un semi-conducteur homogène parcouru par un courant, il suffit de rapporter la tension externe sur l'énergie de Fermi et de considérer une pente homogène pour toutes les bandes dans la structure entière.



- 1) Au point « left »:
- Décrire les bandes et déterminer E_f
- 2) Au point « right »:
- Trouver E_f à partir de la tension externe V
- Dessiner les bandes et trouver E_{vac}
- 3) Résoudre $\Delta\varphi = -\frac{1}{\epsilon_0\epsilon} q (p + N_d^+ - n - N_a^-)$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -U_{spec} - U_{th} + \frac{1}{q} \text{div}(\vec{j}_n) \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -U_{spec} - U_{th} - \frac{1}{q} \text{div}(\vec{j}_p)$$

avec les conditions aux deux bords.
Les inconnues sont φ , $E_{F,n}$ et $E_{F,p}$
- 4) Tracer $E_{vac} = -q\varphi$, $E_{F,n}$ et $E_{F,p}$
- 5) Tracer les bandes en tout point depuis E_{vac}

Illustration du cas général. Interprétation de l'exemple du schéma ci-dessus:

- 1) L'écart entre $E_{F,n}$ et E_i nous donne la concentration n dans toute la structure.
- 2) L'écart entre E_i et $E_{F,p}$ nous donne la concentration p dans toute la structure.
- 3) À gauche, la position de l'énergie de Fermi, entre E_i et E_v , indique un dopage P.
- 4) À droite, l'énergie de Fermi, entre E_c et E_i , indique un dopage N.
- 5) E_F est plus basse à droite qu'à gauche. Nous avons donc une jonction P/N avec une tension externe positive appliquée sur le N (jonction bloquante).
- 6) L'énergie du vide a un gradient négatif au centre de la structure, il y a donc un champ électrique négatif à la jonction, avec un extrémum au centre.
- 7) La courbure de l'énergie du vide est négative à gauche et positive à droite. Il y a une zone de charge négative à gauche et positive à droite de la jonction.
- 8) Au centre la structure est hors équilibre car les quasi-niveaux de Fermi sont différents.
 $E_{F,n} < E_{F,p} \rightarrow n \cdot p < n_i^2$ (loi d'action de masse modifiée), donc le taux net de recombinaison thermique U_{th} est négatif. Il y a génération nette d'électrons/trous au centre de la structure. Ces porteurs doivent être extraits du centre de la structure. Les quasi-niveaux de Fermi ont un gradient négatif, les courants vont donc de droite à gauche: \rightarrow les trous sortent à gauche, les électrons à droite.

Approximation de faible injection:

« la concentration des majoritaires hors équilibre est la même qu'à l'équilibre »

Matériel de type N, à faible injection → Minoritaires p_n

Majoritaires: $n \cong n_0$

$$U_{th} \cong \frac{1}{\tau} \cdot \left(\frac{np - n_i^2}{n + p + 2n_i} \right) \cong \frac{\Delta p_n}{\tau}$$

Matériel de type P, à faible injection → Minoritaires n_p

Majoritaires: $p \cong p_0$

$$U_{th} \cong \frac{1}{\tau} \cdot \left(\frac{np - n_i^2}{n + p + 2n_i} \right) \cong \frac{\Delta n_p}{\tau}$$

Dans les zones neutres de la plupart des structures microélectroniques, l'approximation de faible injection est applicable. On peut considérer que la variation de concentration des majoritaires est négligeable par rapport à cette concentration à l'équilibre.

→ **La concentration de majoritaires dans les zones neutres reste égale à la concentration des majoritaires à l'équilibre.**

Le taux net de recombinaison thermique U_{th} peut alors s'exprimer par les équations ci-dessus. Il est approximé par la variation de concentration des minoritaires Δp_n ou Δn_p divisé par le temps de vie τ des minoritaires.

Remarque:

Dans les zones neutres la variation de concentration des minoritaires est égale à celle des majoritaires (pour maintenir la neutralité). Bien que négligeable par rapport aux majoritaires, cette valeur est importante par rapport aux minoritaires.

$$n_n = n_0$$

$$\vec{j}_{drift,p} = q\mu_p \cdot p_n \cdot \vec{E}$$

$$\vec{j}_{dif,p} = -qD_p \cdot \vec{\nabla} p_n$$

$$\frac{\partial p_n}{\partial t} = -U_{spec} - U_{th} - \frac{1}{q} \text{div}(\vec{j}_p)$$

$$\frac{\partial p_n}{\partial t} = -U_{spec} - \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_p} - \mu_p p_n \text{div}(\vec{E}) - \mu_p \vec{E} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}(p_n) + D_p \cdot \nabla^2 p_n$$

Matériel de type N, à faible injectionL'équation de continuité pour la concentration des minoritaires p_n devient:

$$\frac{\partial p_n}{\partial t} = -U_{spec} - \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_p} - \mu_p p_n \operatorname{div}(\vec{E}) - \mu_p \vec{E} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}(p_n) + D_p \cdot \nabla^2 p_n$$

Matériel de type P, à faible injectionL'équation de continuité pour la concentration des minoritaires n_p devient:

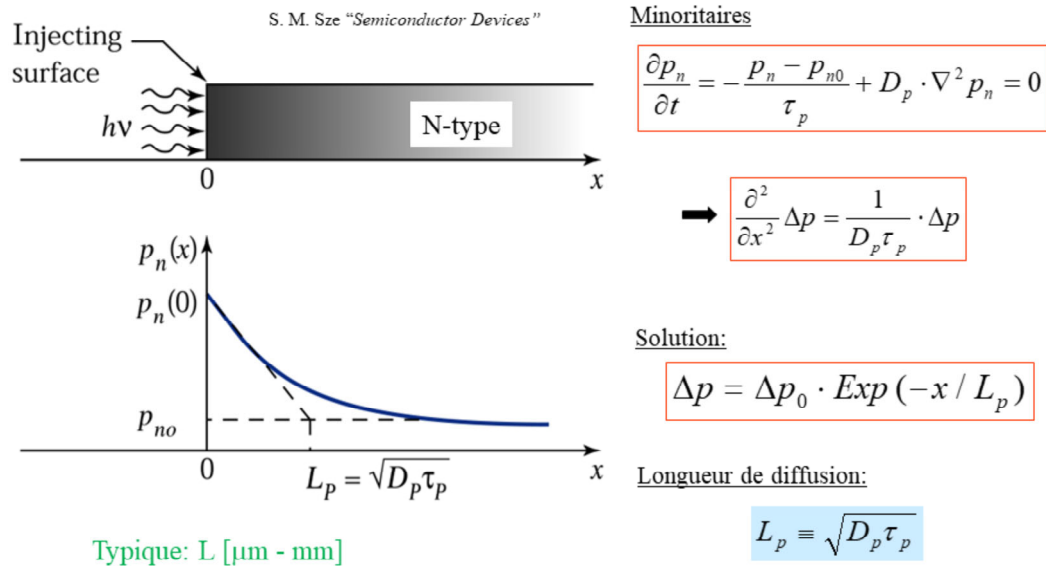
$$\frac{\partial n_p}{\partial t} = -U_{spec} - \frac{n_p - n_{p0}}{\tau_n} + \mu_n n_p \operatorname{div}(\vec{E}) + \mu_n \vec{E} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}(n_p) + D_n \cdot \nabla^2 n_p$$

Avec l'approximation de faible injection, la concentration des majoritaires est connue. Le calcul des concentrations ne contient plus que 2 inconnues: le champ E et la concentration des minoritaires.

→ L'équation de continuité pour les minoritaires est suffisante.

Les formes ci-dessus sont obtenues en introduisant le taux net de recombinaison thermique en faible injection et les expressions des courants de drift et de diffusion dans l'équation de continuité pour les minoritaires.

Nous allons maintenant utiliser et résoudre cette équation dans différents cas typiques.



Un semiconducteur (par exemple de type N) homogène est illuminé optiquement au point $x=0$. Il y a génération de paires électron/trou en $x=0$.

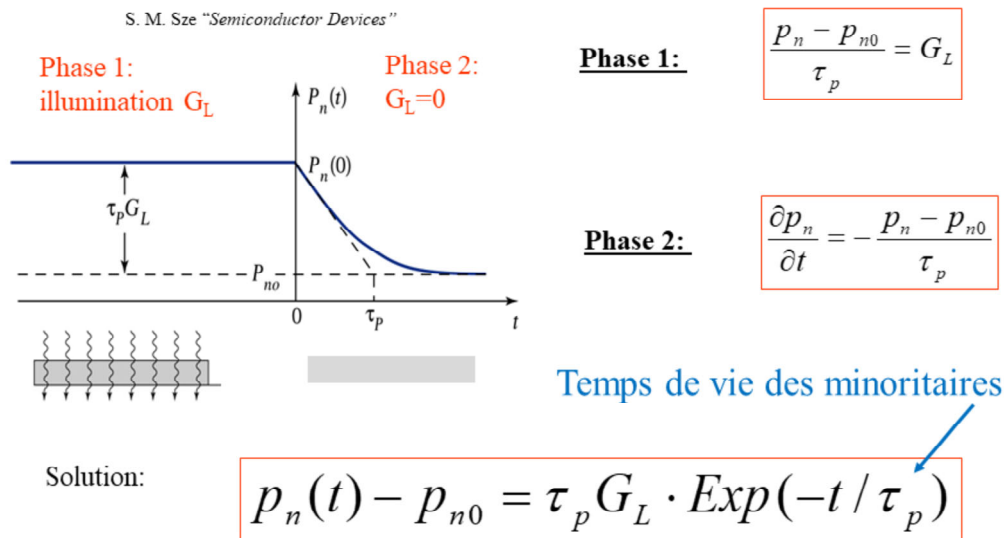
En $x=0$, la concentration des majoritaires est approximée par sa valeur à l'équilibre (approximation de faible injection). Les minoritaires deviennent $p_n(0)$.

Nous recherchons la distribution à l'état stationnaire ($\delta/\delta t=0$) des minoritaires dans la direction x . Pour cela nous écrivons l'équation de continuité des minoritaires en faible injection. Il n'y a pas de champ électrique dans cette structure.

→ Nous devons résoudre l'équation:
$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Delta p = \frac{1}{D_p \tau_p} \cdot \Delta p$$

La solution, pour la concentration des minoritaires, est une distribution exponentielle décroissante avec une « longueur de diffusion » donnée par la racine carrée du temps de vie des minoritaires et de leur constante de diffusion. Typiquement la longueur de diffusion est de quelques micromètres jusqu'au millimètre.

Remarque: Cet effet de diffusion des minoritaires va se retrouver dans les diodes p/n. Des deux côtés de la zone de déplétion, des minoritaires sont injectés ou extraits suivant la polarisation de la jonction (voir chapitre 6).



Cette expérience se déroule dans le temps en deux phases.

- 1) Illumination: Dans cette phase ($t < 0$), le semi-conducteur est illuminé avec un taux de génération optique G_L . Avec l'approximation de faible injection, l'équation de continuité des minoritaires, en état stationnaire, sans champ électrique ni gradient de concentration, devient:

$$\frac{p_n - p_{n0}}{\tau_p} = G_L$$

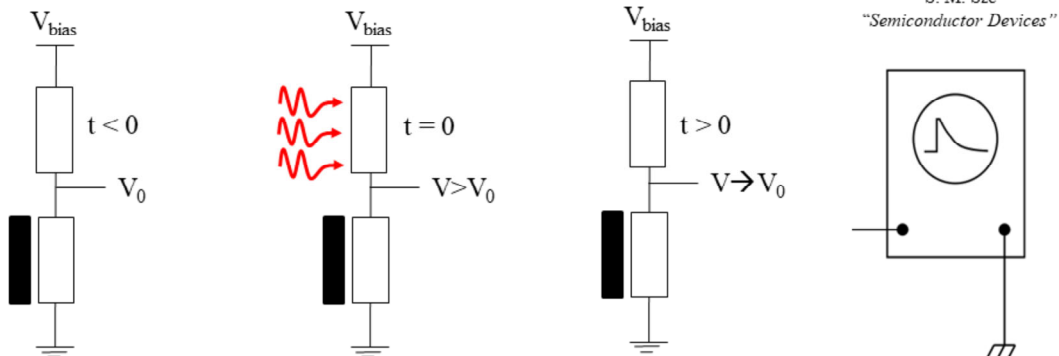
Cela permet de déterminer la concentration en $t=0$: $p_n(0) - p_{n0} = \tau_p \cdot G_L$

- 2) Retour à l'équilibre: Cette phase n'est pas stationnaire, c'est un « transient ». Avec l'approximation de faible injection, l'équation de continuité des minoritaires, sans illumination, sans champ électrique ni gradient de concentration, devient:

$$\frac{\partial p_n}{\partial t} = -\frac{p_n - p_{n0}}{\tau_p}$$

La solution est une fonction exponentielle décroissante avec un temps de retour à l'équilibre donné par le temps de vie des minoritaires τ_p .

Photoconducteur type N



Résistance:

$$R = \frac{1}{nq\mu_n} \frac{L}{S}$$

Neutralité:

$$\Delta n = \Delta p_n$$

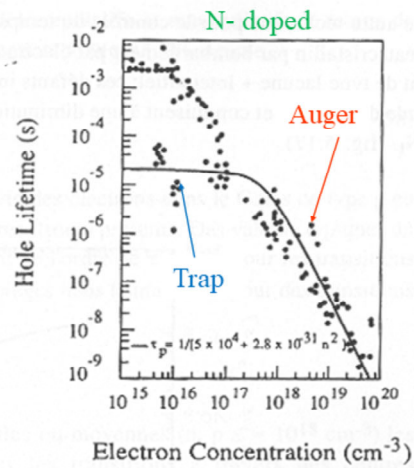
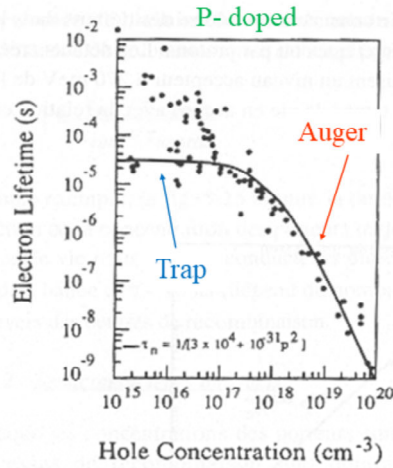
\Rightarrow

$$\frac{\Delta R}{R_0} = -\Delta p_n \cdot \frac{1}{n_0} = -\frac{\tau_p}{n_0} \cdot \text{Exp}(-t/\tau_p) \cdot G_L$$

Le temps de vie des porteurs minoritaires peut être déterminé par une mesure de photoconduction. La variation relative de résistance d'un semi-conducteur dépend de la variation relative de la concentration des majoritaires. Comme le matériel reste neutre, la variation des majoritaires est égale à la variation des minoritaires, qui elle peut être calculée par la formule finale de la page précédente.

→ La résistance du photoconducteur suit une courbe exponentielle. Le temps de vie des minoritaires est déterminé par le retour à l'équilibre lorsque l'illumination est stoppée.

Silicium: Semi-conducteur à bande indirecte



Trap :

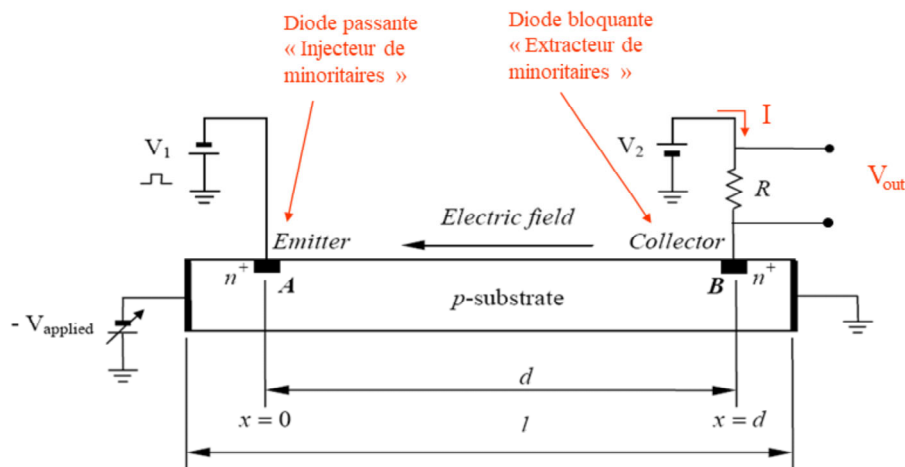
$$\tau \approx \frac{1}{N_T}$$

Auger :

$$\tau \approx \frac{1}{n^2}$$

Kittel: « introduction to solid state physics »

Pour le silicium (bande indirecte), la recombinaison bande-à-bande est faible car il faut une interaction avec les phonons (vibration du réseau). L'effet Auger devient dominant.



Expérience originale: Haynes, Shockley, Phys. Rev. 75, 691 (1949).

Adrian Seet,
Uni Queensland 1998

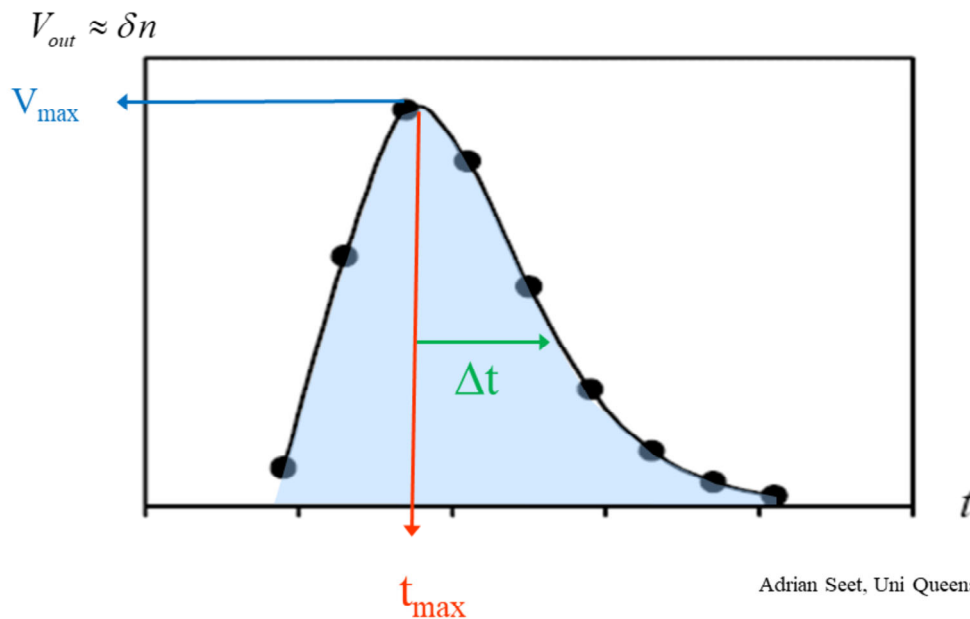
L'expérience de Haynes-Shockley est très instructive. Un semi-conducteur (ici dopé p) est mis sous tension ($V_{\text{applied}} < 0$) de façon à transporter les électrons de gauche à droite. Au temps $t=0$, des porteurs libres minoritaires (ici des électrons) sont injectés au point A. Cela peut se faire par exemple par une impulsion laser de très courte durée ou par une impulsion électrique sur une diode p/n en mode directe (voir chapitre 6). Au point B, un « collecteur » est implémenté (par exemple par une diode p/n en mode inverse, voir chapitre 6). Ce collecteur extrait les minoritaires lorsqu'ils atteignent le point B, ils produisent alors un courant I et une tension V_{out} .

Effets physiques:

- Un courant de drift (dû au champ électrique E provoqué par le tension V_{applied}) conduit les minoritaires vers le collecteur. Le temps moyen de transport de A jusqu'à B dépend de leur mobilité.
- À l'émetteur, les minoritaires ont la forme d'un pulse bien défini dans le temps. Les collisions aléatoires et donc la diffusion des porteurs minoritaires lors de leur propagation élargit ce pulse.
- Durant leur propagation, certains minoritaires disparaissent par recombinaison avec un majoritaire.

Remarque: Le champ électrique E dans le semi-conducteur est donné par:

$$E = V_{\text{applied}} / l$$



Adrian Seet, Uni Queensland 1998

De nouveau, l'approximation de faible injection peut être introduite. L'équation de continuité des minoritaires permet de calculer le profil des minoritaires le long du semi-conducteur à des temps différents (figure 1) ainsi que la tension récoltée à la sortie (figure 2).

- 1) Sur cette tension V_{out} nous pouvons déterminer 3 valeurs:
 - le voltage maximum V_{max} ,
 - le temps d'arrivée correspondant t_{max} ,
 - la largeur du pulse Δt .
- 2) La solution de l'équation de continuité contient elle aussi trois paramètres:
 - la mobilité,
 - la constante de diffusion,
 - le temps de vie des minoritaires.

Caractéristiques des minoritaires: t_{\max} 

$$\text{Drift (Mobilité)} \quad \mu_n \cong \frac{d}{t_{\max} \cdot E}$$

 Δt 

$$\text{Diffusion} \quad D_n \cong \frac{\Delta t^2 \cdot (d/t_{\max})^2}{4 (t_{\max} + \Delta t)}$$

 V_{\max} 

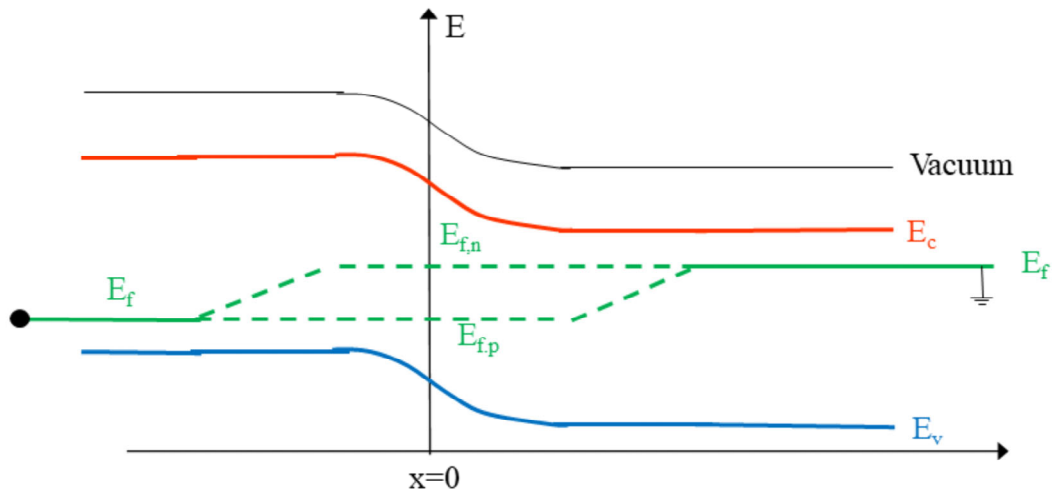
ou intégrale de la courbe

$$\text{Recombinaison} \quad \tau_n \cong \frac{t_{\max,1} - t_{\max,2}}{\ln \left(\sqrt{\frac{t_{\max,2}}{t_{\max,1}}} \cdot \frac{V_{\max,2}}{V_{\max,1}} \right)}$$

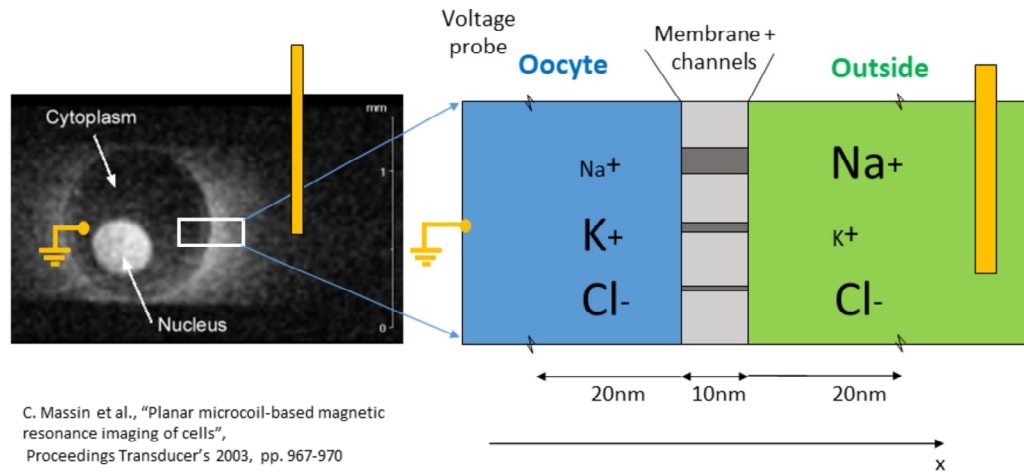
Les formules ci-dessus permettent de relier la mobilité, la constante de diffusion et le temps de vie des minoritaires aux grandeurs mesurées sur V_{out} dans l'expérience de Haynes-Shockley.

Remarque: Pour la recombinaison, il est impossible de récolter tous les minoritaires arrivant sur le collecteur. L'efficacité du collecteur est inconnue. Pour déterminer le temps de vie des minoritaires, il faut donc répéter l'expérience avec deux champs électriques $E_1 < E_2$. Le temps de transport $t_{\max,2}$ (à haut champ) sera plus court que le temps $t_{\max,1}$ (à bas champ). Les effets de recombinaison seront plus importants pour un long temps de transit.

$$\rightarrow V_{\max,1} < V_{\max,2}$$



Interprétez le schéma de bandes ci-dessus.





Questions de réflexion :

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 ».
1.3	Qu'appelle t'on un semi-conducteur à gap direct ou indirect ? Qu'est-ce qu'un phonon ? Quand et pourquoi l'absorption optique requière-t-elle un phonon ?
1.4	Différenciez un métal, un semi-conducteur et un isolant en utilisez les concepts de bandes et d'énergie de Fermi.
1.5	A l'aide du schéma d'énergie, expliquez l'absorption optique dans un gaz et dans un semiconducteur monocristallin.
1.6	Décrivez et expliquez des expériences qui nécessitent une représentation « en particule » de l'électron ou de la lumière. Faites de même pour des expériences qui impliquent une représentation « ondulatoire » de l'électron ou de la lumière. Comment passer d'une représentation à l'autre ?



Questions de réflexion :

2.1	Expliquez le concept de « trous » et de paires « électron-trou » à partir d'une représentation spatiale ainsi que sur le schéma de bande. Quelles caractéristiques des porteurs peut-on géométriquement déduire du schéma de bandes ?
2.2	Esquissez le taux d'occupation des électrons et des trous dans un semiconducteur ? Que représente l' « énergie de Fermi » ?
2.3	Reliez les concentrations n et p de porteurs libres à la densité d'état et à l'énergie de Fermi dans un semi-conducteur à l'équilibre. Discutez l'influence de la concentration de donneurs et d'accepteurs sur ces concentrations n et p .
2.4	Posez la condition de neutralité pour un semi-conducteur extrinsèque à l'équilibre. Expliquez le graphique de Shockley pour déterminer l'énergie de Fermi dans ce matériel.
2.5	Pour un semi-conducteur à l'équilibre, esquissez la dépendance en température de la concentration de majoritaires.
2.6	Pour le silicium à température ambiante, reliez les concentrations n et p de porteurs libres avec le dopage. Qu'appelle-t-on « loi d'action de masse » ?



Questions de réflexion :

3.1	Expliquez qualitativement l'état d'équilibre d'un semi-conducteur dopé n, placé dans le champ électrique produit par les deux plaques d'un condensateur.
3.2	Quelles sont les deux sortes de courants qui peuvent apparaître dans un semiconducteur à température homogène ?
3.3	Quels effets limitent la vitesse de drift d'un porteur libre dans un semi-conducteur homogène sous tension ? Expliquez les notions de mobilité, de conductivité et de résistivité.
3.4	Discutez la mobilité des porteurs en fonction du dopage et de la température.
3.5	Discutez le set d'équations (3 équations) permettant de calculer les concentrations n et p de porteurs libres dans un semiconducteur à l'équilibre thermique.
3.6	Qu'est-ce que la zone de charge dans une jonction N^+ / N à l'équilibre ? Quelles sont les deux composantes du courant dans cette structure ?



Questions de réflexion :

4.1	Décrivez les phénomènes de recombinaison et de génération de porteurs libres. Comment l'équation de continuité décrit-elle la variation temporelle de porteurs libres ?
4.2	Reliez le concept de « quasi-niveaux de Fermi » aux concentrations n et p de porteurs libres. Quelle est la loi d'action de masse dans un semi-conducteur hors équilibre en état stationnaire ?
4.3	Quelles caractéristiques peut-on géométriquement déduire d'un schéma de bande dans une structure inhomogène (jonction p/n par exemple) ? Qu'indiquent les « quasi-niveaux de Fermi » ?
4.4	Pourquoi distingue-t-on le potentiel électrique interne du potentiel électrique externe ?
4.5	Expliquez les concepts de longueur de diffusion et de temps de vie des porteurs libres.
4.6	Décrivez l'expérience de Haynes-Shockley. Pourquoi utilise-t-on des porteurs minoritaires dans cette expérience ?



Table pour le **silicium**

Grandeur	Electrons/ Bande de conduction/ Silicium N	Trous/ Bande de valence/ Silicium P
Masses effectives	$m_l^* = 0.98 \cdot m_e$ $m_t^* = 0.19 \cdot m_e$	$m_{hh}^* = 0.49 \cdot m_e$ $m_{lh}^* = 0.16 \cdot m_e$
Masse Density of States	$m_{dos,n}^* = 6^{2/3} \cdot (m_l^* \cdot m_t^* \cdot m_t^*)^{1/3}$ $m_{dos,n}^* = 1.08 \cdot m_e$	$m_{dos,p}^* = (m_{hh}^{*3/2} + m_{lh}^{*3/2})^{2/3}$ $m_{dos,p}^* = 0.55 \cdot m_e$
Masse de conduction	$\frac{1}{m_{\sigma,n}^*} = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{m_l^*} + \frac{2}{m_t^*} \right)$ $m_{\sigma,n}^* = 0.26 \cdot m_e$	$\frac{1}{m_{\sigma,p}^*} = \frac{\sqrt{m_{hh}^*} + \sqrt{m_{lh}^*}}{m_{hh}^{*3/2} + m_{lh}^{*3/2}}$ $m_{\sigma,p}^* = 0.37 \cdot m_e$
Energie du gap	$E_g \cong 1.1$ [eV] gap indirect avec 6 vallées de conduction en [100]	
Affinité	$\chi \cong 4.05$ [eV]	
Densité d'états effective	$N_c = \frac{1}{\sqrt{2}\hbar^3} \left(\frac{kT}{\pi} m_{dos,n}^* \right)^{3/2}$ $N_c [300K] \cong 2.8 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$	$N_v = \frac{1}{\sqrt{2}\hbar^3} \left(\frac{kT}{\pi} m_{dos,p}^* \right)^{3/2}$ $N_v [300K] \cong 10^{19} \text{ cm}^{-3}$
Densité d'état intrinsèque	$n_i = \sqrt{N_c \cdot N_v} \cdot e^{-E_g/2kT}$ $n_i [300K] \cong 10^{10} \text{ cm}^{-3}$	
Const. diélectrique relative	$\epsilon_s = 11.9$	
Densité des majoritaires en ionisation complète	$n_n \cong N_D$	$p_p \cong N_A$
Densité des minoritaires à l'équilibre	$p_n \cong n_i^2 / N_D$	$n_p \cong n_i^2 / N_A$
Mobilité à faible dopage	$\mu_n \cong 1500$ [cm ² /V·s]	$\mu_p \cong 450$ [cm ² /V·s]
Constante de diffusion (à faible dopage)	$D_n = \frac{kT}{q} \mu_n$ $D_n \cong 39$ [cm ² /s]	$D_p = \frac{kT}{q} \mu_p$ $D_p \cong 12$ [cm ² /s]
Temps de vie des minoritaires	$\tau_n \in [ns, ..., ms]$	$\tau_p \in [ns, ..., ms]$
Longueur de diffusion des minoritaires	$L_n = \sqrt{D_n \tau_n}$	$L_p = \sqrt{D_p \tau_p}$

Vert = valeur pour le silicium, rouge = valeur pour les électrons, bleu = valeur pour les trous

$$m_e = 0.911 \cdot 10^{-30} [\text{Kg}],$$

$$k = 1.38 \cdot 10^{-23} [\text{J/K}],$$

$$q = 1.602 \cdot 10^{-19} [\text{A.s}],$$

$$\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34} [\text{J} \cdot \text{s}],$$

$$kT [300^\circ \text{K}] \cong 25.8 [\text{meV}],$$

$$\epsilon_0 = 8.86 \cdot 10^{-12} [\text{A} \cdot \text{s} / \text{V} \cdot \text{m}].$$